

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

**Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique**

جامعة أبي بكر بلقايد - تلمسان

Université Aboubakr Belkaïd – Tlemcen –

Faculté de TECHNOLOGIE



**THESE**

Présentée pour l'obtention du grade de **DOCTORAT 3<sup>ème</sup> Cycle**

**En : Electronique**

**Spécialité : Instrumentation Electronique**

**Par : BELAID Asma**

**Sujet**

**Simulation et optimisation d'une diode électroluminescente B(Ga,Al)N/GaN émettant dans l'ultraviolet**

Soutenue publiquement, le / /2020, devant le jury composé de :

<b>Mr. AMARA Sofiane</b>	Professeur	Univ. Tlemcen	Président
<b>Mr. HAMDOUNE Abdelkader</b>	Professeur	Univ. Tlemcen	Directeur de thèse
<b>Mr. OUAHRANI Tarik</b>	Professeur	ESSA. Tlemcen	Examineur 1
<b>Mme. OULD ABBES Amaria</b>	Professeur	Univ. Tlemcen	Examineur 2
<b>Mr. KERAI Salim</b>	MCA	Univ. Tlemcen	Examineur 3

NB : les membres du jury doivent être classés conformément au P.V d'autorisation de soutenance

## ***Remerciement***

*Je remercie très sincèrement le directeur de cette thèse Monsieur Abdelkader HAMDOUNE professeur à l'université Abou-Bekr Belkaid Tlemcen de m'avoir dirigée et m'aidée tout au long de ce travail. Je lui exprime mes vifs remerciements pour l'aide constante durant la préparation de ce travail. Je tiens à lui exprimer toute ma sympathie pour les nombreuses discussions toujours fructueuses que nous avons eues.*

*Je tiens à exprimer ma gratitude aux membres du jury qui ont bien voulu examiner ce travail.*

- ✓ *Monsieur AMARA Sofiane professeur à l'université Abou-Bekr Belkaid Tlemcen.*
- ✓ *Monsieur OUAHRANI Tarik professeur à l'école supérieure des sciences appliquées.*
- ✓ *Madame OULD ABES Amaria professeur à l'université Abou-Bekr Belkaid Tlemcen.*
- ✓ *Monsieur KERAI Salim maitre de conférences à l'université Abou-Bekr Belkaid Tlemcen.*

## ***Dédicace***

*Je dédie ce travail*

*A mon très cher PAPA, tu as toujours été à mes côtés pour me soutenir et m'encourager. Tes conseils ont toujours guidé mes pas vers la réussite. Je te dois ce que je suis aujourd'hui et ce que je serai demain que Dieu le tout puissant te préserve.*

*A ma très chère MAMAN ma source de mes joies, tu m'as comblée avec ta tendresse et affection tout au long de mon parcours. Tu n'as cessé de me soutenir et de m'encourager, tu as toujours été présente à mes côtés.*

*A mon mari OUSSAMA pour ses encouragements et sa patience durant la période de mes études.*

*A mon cher petit frère YUCEF*

*A mes chères sœurs SETTI YASMINE, KHADIDJA et son mari ABDESSAMED*

*A mon adorable neveu NAZIM*

*A mes amis*

*A toute la famille*

# **Sommaire**

Sommaire .....	I
Liste des figures .....	VI
Liste des tableaux .....	XII
Liste des abréviations .....	XIII
<b>Introduction générale</b> .....	1
<b>Chapitre 1 : Composés III-N</b>	
1.1 Présentation des composés III-V.....	3
1.2 Nitrure de gallium GaN .....	5
1.2.1 Généralités .....	5
1.2.2 Propriétés structurales .....	5
1.2.2.1 Structure wurtzite .....	5
1.2.2.2 Structure blende de zinc .....	6
1.2.3 Structures de bandes, propriétés optiques et électroniques .....	7
1.2.3.1 Zones de Brillouin .....	7
1.2.3.2 Structures de bandes .....	7
1.2.3.3 Propriétés optiques .....	9
1.2.4 Propriétés de transport électrique .....	11
1.2.5 Polarisation spontanée et piézoélectrique .....	12
1.2.6 Propriétés thermiques .....	13
1.2.6.1 Conductivité thermique .....	13
1.2.6.2 Chaleur spécifique .....	13
1.2.6.3 Température de Debye .....	14
1.2.7 Ionisation par impact .....	14
1.2.8 Techniques de croissance du GaN .....	15
1.2.8.1 Technique MOCVD .....	15
1.2.8.2 Technique MBE .....	15
1.3 Nitrure de bore BN .....	15
1.3.1 Propriétés des nanotubes de nitrure de bore .....	16
1.3.1.1 Propriétés structurales .....	16
1.3.1.2 Nitrure de bore hexagonal (h-BN), rhomboédrique (r-BN) et turbostratique (t-BN). .....	17
1.3.1.3 Nitrure de bore cubique (c-BN) et nitrure de bore wurtzite (w-BN).....	18
1.3.2 Propriétés électroniques et optiques .....	18

1.3.3 Propriétés mécaniques .....	19
1.3.4 Propriétés chimiques .....	19
1.4 Nitrure d'aluminium AlN .....	20
1.4.1 Propriétés .....	20
1.4.1.1 Propriétés structurales .....	20
1.4.1.2 Autres propriétés et domaines d'applications .....	21
1.5 Nitrure d'aluminium de gallium AlGaN .....	22
1.5.1 Propriétés du ternaire $Al_xGa_{1-x}N$ .....	22
1.5.1.1 Variation du gap d'AlGaN, en fonction de la fraction de mole x (Al).....	22
1.5.2 Dopage .....	24
1.5.2.1 Dopage de type n .....	24
1.5.2.2 Dopage de type p .....	24
1.6 Alliage BGaN : Propriétés électroniques, optiques et structurales .....	25
1.7 Conclusion .....	27
Références .....	28

## **Chapitre 2 : Luminescence des semiconducteurs et diodes électroluminescentes**

2.1 Introduction .....	34
2.2 Historique .....	34
2.3 Electroluminescence .....	35
2.4 Caractérisation de la luminescence dans les S-C .....	35
2.5 Etude des diodes électroluminescentes .....	37
2.5.1 LED de faible puissance .....	37
2.5.2 LED de forte puissance .....	38
2.5.3 Fonctionnement d'une diode électroluminescente .....	38
2.5.4 Elaboration des LED .....	39
2.5.5 LED de couleurs .....	40
2.5.6 LED UV .....	40
2.5.7 Différents types de LED .....	41
2.5.7.1 LED à homojonction .....	41
2.5.7.2 LED à simple hétérostructure (SH) .....	41
2.5.7.3 LED à double hétérostructure (DH) .....	42
2.5.7.4 LED à simple puits quantique (SQW) .....	43

2.5.7.5 LED à multiples puits quantiques (MQW) .....	44
2.5.7.6 LED élaborée sur substrat SiC .....	45
2.5.7.7 LED blanches .....	46
2.6 Propriétés des diodes électroluminescentes .....	48
2.6.1 Propriétés physiques .....	48
2.6.2 Propriétés électriques .....	49
2.6.3 Recombinaisons radiatives .....	49
2.6.3.1 Recombinaisons bande à bande .....	50
2.6.3.2 Recombinaisons par excitons libres .....	50
2.6.3.3 Emission spontanée .....	51
2.6.3.4 Emission stimulée .....	51
2.6.4 Recombinaisons non radiatives .....	52
2.6.4.1 Recombinaison de type Shockley-Read -Hall (SRH) .....	52
2.6.4.2 Recombinaisons Auger .....	53
2.6.4.2.1 Premier mécanisme .....	53
2.6.4.2.2 Deuxième mécanisme .....	53
2.5 Rendements .....	54
2.5.1 Rendement quantique interne .....	54
2.5.2 Rendement global .....	54
2.6 Couleur de la lumière émise .....	55
2.7 Applications des LED .....	56
2.8 Avantages et inconvénients .....	57
2.8.1 Avantages .....	57
2.8.2 Inconvénients .....	57
2.9 Conclusion .....	57
Références .....	58

### **Chapitre 3 : Résultats et discussion**

3.1 Introduction .....	60
3.2 Présentation du logiciel SILVACO .....	60
3.3 Fonctionnement du simulateur TCAD-SILVACO .....	60
3.3.1 Equations de base utilisées .....	60
3.3.1.1 Equation de Poisson .....	60

---

3.3.1.2 Equations de continuité .....	61
3.3.2 Modules et modèles utilisés .....	61
3.3.2.1 Module ATLAS .....	61
3.3.2.2 Module DECKBUILD .....	62
3.3.2.3 TONYPLOT .....	63
3.3.2.4 Modèles physiques .....	63
3.3.2.4.1 Modèles de recombinaison .....	63
3.3.2.4.2 Modèles de porteurs statistiques .....	64
3.3.2.4.3 Modèles de la mobilité des porteurs de charge .....	64
3.3.2.4.4 Méthodes numériques .....	64
3.4 Résultats de la simulation .....	64
3.4.1 Comparaison de LEDs UV à puits quantique GaN et B GaN .....	64
3.4.1.1 Spécification des deux structures .....	64
3.4.1.2 Spécification du maillage .....	65
3.4.1.3 Paramètres, modèles et méthodes numériques de calcul .....	66
3.4.1.4 Diagrammes de bande .....	67
3.4.1.5 Caractéristique I-V .....	71
3.4.1.6 Emission spontanée, densité spectrale de puissance et puissance émise .....	72
3.4.1.7 Densité de flux spectrale .....	76
3.4.1.8 Gain (TE) .....	78
3.4.1.9 Rendement quantique externe .....	79
3.4.1.10 Effet de la polarisation sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale .....	80
3.4.1.11 Effet de la température .....	84
3.4.1.11.1 Effet de la température sur le courant .....	85
3.4.1.11.2 Effet de la température sur la puissance émise .....	86
3.4.1.11.3 Effet de la température sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité spectrale de flux .....	87
3.4.1.12 Effet du dopage .....	91
3.4.1.12.1 Effet du dopage de la couche p-AlGaN .....	92
3.4.1.12.2 Effet du dopage de la couche n-AlGaN .....	98
3.4.2 Effets de la teneur en bore dans B GaN et des paramètres .....	105
3.4.2.1 Spécification de la structure étudiée .....	105



3.4.2.2 Digrammes de bandes .....	106
3.4.2.3 Effet de l'épaisseur de la couche active .....	108
3.4.2.3.1 Caractéristique I-V .....	108
3.4.2.3.2 Puissance émise .....	109
3.4.2.3.3 Densité spectrale de puissance .....	110
3.4.2.4 Effet de la concentration en bore de la couche active .....	111
3.4.2.4.1 Caractéristique I-V .....	111
3.4.2.4.2 Puissance émise .....	112
3.4.2.4.3 Densité spectrale de puissance, émission spontanée et densité de flux spectrale.	113
3.4.2.5 Effet de la polarisation sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale .....	116
3.4.2.6 Effet de la température sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale .....	118
3.4.2.7 Effet des dopages p et n des couches AlGaN .....	120
3.4.2.7.1 Effet du dopage de la couche p-AlGaN .....	120
3.4.2.7.1.1 Effet sur la caractéristique I-V et la puissance émise .....	121
3.4.2.7.1.2 Effet sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale .....	122
3.4.2.7.2 Effet du dopage de la couche n-AlGaN .....	124
3.4.2.7.2.1 Effet sur la caractéristique I-V et la puissance émise .....	125
3.4.2.7.2.2 Effet sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale .....	126
3.5 Conclusion .....	128
Références .....	129
<b>Conclusion générale et perspectives .....</b>	<b>130</b>

## **Liste des figures**

Figure 1.1 : Energie de bande interdite en fonction des paramètres de maille des semi-conducteurs III–V (En blanc : les composés III-N) .....	5
Figure 1.2 : Structure cristalline du GaN hexagonal (wurtzite).....	6
Figure 1.3 : Structure cristalline du GaN cubique (blende de zinc).....	6
Figure 1.4 : les Zones de Brillouin de GaN de type (a) wurtzite et (b) zinc-blende.....	7
Figure 1.5 : Structures de bandes de GaN de type (a) wurtzite et (b) blende de zinc selon L. Susuki et al .....	8
Figure 1.6 : Structure de bandes du GaN en phase wurtzite au voisinage de $k = 0$ .....	9
Figure 1.7 : Mobilité de Hall en fonction de la concentration en électrons à 300 K pour un certain nombre d'échantillons réalisés par MOVPE et MBE. selon D. K. Gaskil et al .....	11
Figure 1.8 : Polarisation spontanée .....	12
Figure 1.9 : Charges en surface du GaN hexagonal .....	12
Figure 1.10 : Phénomène d'ionisation par impact .....	14
Figure 1.11 : Diagramme de phase du nitrure de bore .....	16
Figure 1.12 : Illustration des structures cristallines de (c-BN) et (h-BN) et (w-BN).....	17
Figure 1.13 : Illustration des structures cristallines de (r-BN) et (t-BN).....	17
Figure 1.14 : Structures cristallines du nitrure d'aluminium (a) wurtzite, (b) zinc blende.....	21
Figure 1.15 : Variation du gap dans $Al_xGa_{1-x}N$ , en fonction de la fraction molaire d'Al.....	23
Figure 1.16 : (a) : Variation du gap de l'alliage $Al_xGa_{1-x}N$ cubique en fonction de la concentration en aluminium, (b) : même variation calculée pour la phase hexagonale des alliages avec et sans contraintes.....	24
Figure 1.17 : Diagramme du gap des composés (B, Al, Ga, In)-N en fonction de leurs paramètres de maille .....	26
Figure 1.18 : Caractérisation électrique de 600 nm de B GaN déposé sur substrat AlN : résistivité en fonction de la fraction molaire du bore .....	27
Figure 2.1 : Première LED réalisée (Holonyak & Bevacqua 1962) et photographie de Nick Holonyak Jr.....	34
Figure 2.2 : Emission de photons et taux de radiation par luminescence dans un SC .....	37
Figure 2.3 : Schéma d'une LED de faible puissance.....	37
Figure 2.4 : Schéma d'une LED de forte puissance .....	38
Figure 2.5 : Structure d'une LED .....	39

Figure 2.6 : Schéma de diodes électroluminescentes : jonctions p-n de h-GaN élaboré par EJM au CRHEA (Valbonne).....	39
Figure 2.7 : Schéma de diodes électroluminescentes : jonctions p-n de c-GaN élaboré par EJM au CEA Grenoble.....	40
Figure 2.8 : Schéma de principe d'une LED à homojonction .....	41
Figure 2.9 : Structure de LED (SH) selon M. Koike .....	42
Figure 2.10 : Schéma de principe d'une LED à hétérojonction .....	42
Figure 2.11 : Structure d'une DH selon S. Nakamura .....	43
Figure 2.12 : Structure de LED InGaN (SQW), selon S. Nakamura .....	44
Figure 2.13 : Structure de LED InGaN (MQW), selon M. Koike .....	44
Figure 2.14 : Structure de LEDs : (a) SiC/GaN avec une couche tampon isolante, (b) SiC/GaN avec une couche tampon conductrice AlGaIn selon G. E. Bulman et al .....	45
Figure 2.15 : Méthode des trois couleurs .....	46
Figure 2.16 : Méthode LED bleue + phosphore jaune .....	46
Figure 2.17 : LED ultraviolet multi phosphore .....	47
Figure 2.18 : Structure de bande d'un semiconducteur à gap direct et indirect .....	48
Figure 2.19 : Caractéristique courant-tension d'une LED .....	49
Figure 2.20 : Emission spontanée .....	51
Figure 2.21 : Emission stimulée dans un SC à gap direct .....	52
Figure 2.22 : Les types de recombinaisons non radiatives : a-recombinaison Auger, b-recombinaison de type Hall Shockley Read .....	52
Figure 2.23 : Recombinaison par phonons .....	53
Figure 2.24 : Recombinaisons Auger dans une jonction p-n polarisée .....	54
Figure 3.1 : Modules utilisés dans la simulation par TCAD SILVACO .....	62
Figure 3.2 : Groupes de commandes d'ATLAS avec leurs instructions .....	63
Figure 3.3 : Coupes schématiques des deux LED simulées .....	65
Figure 3.4 : Maillage de la structure .....	66
Figure 3.5 (a) : Diagramme de bande d'énergie pour GaN-LED .....	67
Figure 3.5 (b) : Diagramme de bande d'énergie pour B GaN-LED .....	67
Figure 3.6 : Concentration des électrons dans GaN-LED .....	69
Figure 3.7 : Concentration des trous dans GaN-LED .....	69

Figure 3.8 : Champ électrique dans GaN-LED .....	70
Figure 3.9 : Concentration des électrons dans BGaN-LED .....	70
Figure 3.10 : Concentration des trous dans BGaN-LED .....	71
Figure 3.11 : Champ électrique dans BGaN-LED .....	71
Figure 3.12 : Courant en fonction de la tension pour GaN-LED et BGaN-LED .....	72
Figure 3.13 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie pour GaN-LED et BGaN-LED .....	73
Figure 3.14 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie pour GaN-LED et BGaN-LED .....	74
Figure 3.15 : La puissance émise en fonction du courant pour GaN-LED et BGaN-LED .....	74
Figure 3.16 : La densité de flux spectrale en fonction de l'énergie pour GaN-LED et BGaN-LED .....	77
Figure 3.17 : Gain TE pour GaN-LED et BGaN-LED .....	79
Figure 3.18 : Rendement quantique externe pour GaN-LED et BGaN-LED .....	80
Figure 3.19 : La densité spectrale en fonction de l'énergie à différentes tensions pour GaN-LED et BGaN-LED .....	82
Figure 3.20 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différentes tensions pour GaN-LED et BGaN-LED .....	83
Figure 3.21 : La densité de flux spectrale en fonction de l'énergie à différentes tensions pour GaN-LED et BGaN-LED .....	84
Figure 3.22 : Le courant en fonction de la tension à différentes températures pour GaN-LED et BGaN-LED .....	86
Figure 3.23 : La puissance émise en fonction du courant à différentes températures pour GaN-LED et BGaN-LED .....	87
Figure 3.24 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie à différentes températures pour GaN-LED et BGaN-LED .....	89
Figure 3.25 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différentes températures pour GaN-LED et BGaN-LED .....	90
Figure 3.26 : La densité spectrale de flux en fonction de l'énergie à différentes températures pour GaN-LED et BGaN-LED .....	91
.....	
Figure 3.27 : Le courant en fonction de la tension à différents dopages de la couche p AlGaIn pour GaN-LED .....	93
Figure 3.28 : La puissance émise en fonction du courant à différents dopages de la couche p	

AlGaN pour GaN-LED .....	93
Figure 3.29 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche p AlGaN pour GaN-LED .....	94
Figure 3.30 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche p AlGaN pour GaN LED .....	95
Figure 3.31 : La densité spectrale de flux en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche p AlGaN pour GaN-LED .....	95
Figure 3.32 : Le courant en fonction de la tension à différents dopages de la couche p AlGaN pour B GaN-LED .....	96
Figure 3.33 : La puissance émise en fonction du courant à différents dopages de la couche p AlGaN pour B GaN-LED .....	96
Figure 3.34 : La densité spectrale en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche p AlGaN pour B GaN-LED .....	97
Figure 3.35 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche p AlGaN pour B GaN-LED .....	98
Figure 3.36 : La densité spectrale de flux en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche p AlGaN pour B GaN-LED .....	98
Figure 3.37 : Le courant en fonction de la tension à différents dopages de la couche n AlGaN pour GaN-LED .....	99
Figure 3.38 : La puissance émise en fonction du courant à différents dopages de la couche n AlGaN pour GaN-LED .....	100
Figure 3.39 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche n AlGaN pour GaN-LED .....	101
Figure 3.40 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche n AlGaN pour GaN-LED .....	101
Figure 3.41 : La densité spectrale de flux en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche n AlGaN pour GaN-LED .....	102
Figure 3.42 : le courant en fonction de la tension à différents dopages de la couche n AlGaN pour B GaN-LED .....	102
Figure 3.43 : La puissance émise en fonction de courant à différents dopages de la couche n AlGaN pour B GaN-LED .....	103
Figure 3.44 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie à différents dopages de	

la couche n AlGaN pour BGaN-LED .....	104
Figure 3.45 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche n AlGaN pour BGaN-LED .....	104
Figure 3.46 : La densité spectrale de flux en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche n AlGaN pour BGaN-LED .....	105
Figure 3.47 : Coupe schématique de la LED étudiée .....	106
Figure 3.48 : Diagramme de bande d'énergie (bande de conduction) pour différentes épaisseurs de BGaN .....	107
Figure 3.49 : Diagramme de bande d'énergie (bande de valence) pour différentes épaisseurs de BGaN .....	107
Figure 3.50 : Diagramme de bande d'énergie (bande de conduction) pour différentes concentrations de bore .....	108
Figure 3.51 : Diagramme de bande d'énergie (bande de valence) pour différentes concentrations de bore .....	108
Figure 3.52 : Le courant en fonction de la tension pour différentes épaisseurs de la couche active BGaN .....	109
Figure 3.53 : La puissance en fonction du courant pour différentes épaisseurs de la couche active BGaN .....	110
Figure 3.54 : la densité spectrale en fonction de l'énergie pour différentes épaisseurs de la couche active BGaN .....	111
Figure 3.55 (a) : Le courant en fonction de la tension pour différentes concentrations du bore.	112
Figure 3.55 : (b) Une section de zoom du courant .....	112
Figure 3.56 : La puissance en fonction du courant pour différentes concentrations du bore .....	113
Figure 3.57 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie pour différentes concentrations du bore .....	114
Figure 3.58 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie pour différentes concentrations du bore .....	114
Figure 3.59 : La densité de flux spectrale en fonction de l'énergie pour différentes concentrations du bore .....	115
Figure 3.60 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie à différentes tensions ...	117
Figure 3.61 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différentes tensions .....	117
Figure 3.62 : La densité de flux spectrale en fonction de l'énergie à différentes tensions .....	118

---

Figure 3.63 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie à différentes températures .....	119
Figure 3.64 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différentes températures .....	120
Figure 3.65 : La densité de flux spectrale en fonction de l'énergie à différentes températures ....	120
Figure 3.66 : Courant en fonction de la tension pour différents dopages de la couche p-AlGaN .....	121
Figure 3.67 : Puissance en fonction de courant pour différents dopages de la couche p-AlGaN .....	122
Figure 3.68 : Densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie pour différents dopages de la couche p-AlGaN .....	123
Figure 3.69 : Emission spontanée en fonction de l'énergie pour différents dopages de la couche p-AlGaN .....	123
Figure 3.70 : Densité de flux spectrale en fonction de l'énergie pour différents dopages de la couche p-AlGaN .....	124
Figure 3.71 : Courant en fonction de la tension pour différents dopages de la couche n-AlGaN .....	125
Figure 3.72 : Puissance émise en fonction du courant pour différents dopages de la couche n-AlGaN .....	126
Figure 3.73 : Densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie pour différents dopages de la couche n-AlGaN.	127
Figure 3.74 : Emission spontanée en fonction de l'énergie pour différents dopages de la couche n-AlGaN .....	127
Figure 3.75 : Densité de flux spectrale en fonction de l'énergie pour différents dopages de n-AlGaN .....	128



# **Liste des tableaux**

---

Tableau 1.1: Les principaux éléments des groupes III, IV et V, qui constituent les semi-conducteurs .....	3
Tableau 1.2 : Principaux paramètres physiques de semi-conducteurs .....	4
Tableau 1.3 : Paramètres de maille des trois nitrures .....	4
Tableau 1.4 : Valeur de l'indice de réfraction du GaN dans le visible et l'IR .....	10
Tableau 1.5 : Paramètres de maille des structures cristallines de BN .....	17
Tableau 1.6 : Propriétés d'AlN .....	22
Tableau 2.1 : Avantages et inconvénients des différentes méthodes d'obtention de la lumière blanche .....	48
Tableau 2.2 : Différents SC, leurs longueurs d'onde et leurs couleurs émises .....	56
Tableau 3.1 : Emission spontanée pour GaN-LED et B GaN-LED .....	75
Tableau 3.2 : Densité spectrale de puissance pour GaN-LED et B GaN-LED .....	75
Tableau 3.3 : Densité de flux spectrale pour GaN-LED et B GaN-LED.....	78
Tableau 3.4 : Energie de gap de $B_xGa_{1-x}N$ pour différentes concentrations du bore .....	106
.....	
Tableau 3.5 : La densité spectrale de puissance .....	115
Tableau 3.6 : L'émission spontanée .....	115
Tableau 3.7 : La densité de flux spectrale .....	115

# **Liste des abréviations**

Ga : Gallium

Al : Aluminium

In : Indium

B : Bore

N : Nitrure

GaN : Nitrure de Gallium

AlN : Nitrure d'Aluminium

InN : Nitrure d'Indium

BN : Nitrure de Bore

AlGaN : Nitrure d'Aluminium de Gallium

InGaN : Nitrure d'Indium de Gallium

BGaN : Nitrure de Bore de Gallium

Mg : magnésium

Si : Silicium

Ge : Germanium

LED : Diode Electroluminescente

SQW : simple puits quantique

MQW : multiples puits quantiques

SH : simple hétérostructure

DH : double hétérostructure

UV : Ultraviolet

IR : Infrarouge

E<sub>g</sub> : Energie du gap

SILVACO: Silicon VALley Corporation

EPVH : phase vapeur aux hydrures

T : Température

$\lambda$  : Longueur d'onde

E : champ électrique

MOCVD : Epitaxie en Phase Vapeur aux Organo-Métalliques (Metal Organic Chemical Vapor Deposition)

MBE : Molecular Beam Epitaxy

b : Paramètre de courbure (Bowling parameter)

I : Courant ; V : Tension

# **INTRODUCTION GENERALE**

## **Introduction générale**

Depuis 1990, on a vu l'apparition des premières LED bleues réalisées à base de nitrure gallium (GaN). Le remplacement des sources lumineuses par des dispositifs de type LED blanches permettrait d'économiser 50% des dépenses électriques liées à l'éclairage, mais aussi d'éviter l'émission d'environ 250 millions de tonnes de CO<sub>2</sub> par an. En plus, une LED au GaN peut éclairer 100.000 heures (environ 60 ans). Les diodes à base de semi-conducteurs III-V, émettant dans la gamme infrarouge et dans la gamme visible allant du rouge au vert, présentent un marché important dans plusieurs applications : les flashes d'appareils photos, les téléphones portables, les torches, l'éclairage de l'habitacle automobile, la signalisation, l'affichage avec les écrans couleur qui exige des LED bleues ( $\lambda=480$  nm) et vertes ( $\lambda=510$  nm) de haute brillance, ou encore les sources de lumière blanche avec en particulier l'éclairage public.

Depuis plusieurs années, il existe des diodes électroluminescentes à base de nitrures émettant dans l'ultraviolet. Pour aller plus loin dans l'ultraviolet, il est nécessaire d'utiliser des puits quantiques de nitrure de gallium (GaN) ou nitrure d'aluminium de gallium (AlGaN) ; mais la réalisation de telles diodes dépend de la maîtrise du dopage de ces matériaux.

Plusieurs chercheurs ont fabriqué des diodes électroluminescentes émettant vers 275-285 nm : ils ont utilisé AlGaN comme puits quantique avec une concentration en aluminium très élevée, récemment des diodes électroluminescentes à base d'AlGaN émettant à 265 nm et à 250 nm ont été réalisées.

Dans notre thèse, nous allons incorporer le nitrure de bore (BN) dans le nitrure de gallium (GaN) pour former l'alliage B<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N dans le but de simuler et optimiser une diode électroluminescente ultraviolette à base de B(Ga,Al)N/GaN qui est une récente filière d'hétérostructures. Nous essayons de modéliser cette diode ; cette modélisation s'appuiera sur l'étude des propriétés physiques et optiques des matériaux utilisés et devra conduire à la conception de structure performante.

Notre thèse comporte trois chapitres :

- ✓ Le premier chapitre est une description des différentes propriétés des composés binaires et ternaires tels que le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium, le nitrure d'aluminium de gallium (AlGaN) et le nitrure de gallium de bore (B<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N).
- ✓ Dans le deuxième chapitre nous étudions les différents types des diodes électroluminescentes, leurs caractéristiques, leurs structures et leurs principes de fonctionnement, ainsi que leurs propriétés physico-optiques.

- ✓ Le troisième chapitre est consacré à la simulation de notre structure, où nous présentons les résultats obtenus par logiciel de simulation SILVACO avec interprétation. le travail effectué est représenté en deux parties.

Dans la première partie, nous simulons une diode électroluminescente ultraviolette à puits quantiques AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> et AlGa<sub>N</sub>/BGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub>, à l'aide du simulateur TCAD Silvaco, dans le but de faire une comparaison entre les deux structures. La première structure a un puits quantique Ga<sub>N</sub> pris entre deux couches, n-AlGa<sub>N</sub> et p-AlGa<sub>N</sub>. La seconde a un puits quantique BGa<sub>N</sub> au lieu de Ga<sub>N</sub>.

Dans la deuxième partie nous étudions l'impact de la concentration de bore dans l'alliage BGa<sub>N</sub> de la couche active d'une LED UV AlGa<sub>N</sub>/BGa<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> et de l'épaisseur de BGa<sub>N</sub>, sur les caractéristiques électriques et optiques.

Dans les deux parties, nous étudions également l'influence de la polarisation, de la température et des dopages p et n des couches AlGa<sub>N</sub> sur les caractéristiques électriques et optiques.

Enfin, nous terminons notre thèse par une conclusion générale et des perspectives.

# **Chapitre 1**

## **Composés III-N**



Dans ce chapitre ; nous allons présenter les semiconducteurs III-V, d'une manière générale ; puis nous abordons les propriétés des matériaux binaires et ternaires tels que le nitrure de gallium GaN, le nitrure d'aluminium AlN, le nitrure de bore BN, et leurs alliages tels que le nitrure d'aluminium de gallium AlGaN et le nitrure de bore de gallium BGaN.

### 1.1 Présentation des composés III-V

Les nitrures d'éléments III-N ont été synthétisés et étudiés depuis 1932 [1,2]. Ils ont prouvé leur importance en électronique et en optoélectronique dans les domaines spectraux qui couvrent tout le spectre visible et ultraviolet comme les diodes laser visibles [3,4], les diodes électroluminescentes [5,6], et les cellules photovoltaïques [7,8], du fait de leurs exceptionnelles propriétés électroniques, physiques et optiques ; ainsi pour les applications en électronique de puissance, haute température et haute fréquence tels que les transistors bipolaires, les transistors à effet de champ, y compris les transistors à haute mobilité électronique [9].

Les semiconducteurs III-V sont constitués d'éléments des colonnes III et V du tableau périodique de Mendeleïev. Les énergies de leurs bandes interdites sont inférieures à  $100 k_B T$ . Le tableau 1.1 représente les principaux éléments III, IV et V qui forment les semi-conducteurs. Les chiffres en haut et en bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique, respectivement.

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

Tableau 1.1 : Les principaux éléments des groupes III, IV et V, qui constituent les semi-conducteurs.

Dans le tableau 1.2, nous classifions quelques paramètres essentiels des principaux composés binaires III-V, à 300 K [10,11].

Composés III-V	GaN	InN	SiC	Si	InP	BN
Bande interdite $E_G$ (eV)	3.4	0.7	3.2	1.1	1.3	5.5
Vitesse de saturation ( $\times 10^7$ cm/s)	2.5	1.8	2	1	1	--
Mobilité ( $\text{cm}^2/\text{V.s}$ )	1000	3.6	650	1500	5400	200
Permittivité relative ( $\epsilon$ )	9.5	15.3	10	11.8	12.5	6.85
Conductivité thermique (W/cm.K)	1.5	0.45	4.2	1.5	0.7	6

Tableau 1.2 : Principaux paramètres physiques de semi-conducteurs.

Pour les trois nitrures GaN, AlN, InN, nous préférons donner les paramètres de maille à part, dans le tableau 1.3. Nous répertorions les paramètres dans la phase cubique et la phase hexagonale. Pour la phase cubique nous donnons les plus communes.

	GaN	AlN	InN	Références
Phase cubique (ZB)	a= 4.50 Å a= 4.53 Å a=4.452 Å	a= 4.38 Å a=4.3996 Å a= 4.34 Å	a= 4.98 Å / a=4.981 Å	[Strite'1991; Xu'2000 ; Meyer'2003] [Powell'1993 ; Okumura'1998] [Pugh'1991]
Phase hexagonale (WZ)	a=3.189 Å c=5.185 Å	a= 3.112 Å c= 4.982 Å	a=3.548 Å c=5.760 Å	[Strite'1992]

Tableau 1.3 : Paramètres de maille des trois nitrures.

Le groupe III-Nitrures sont des semi-conducteurs à large bande interdite variant de 0.67 eV (pour InN) à 6.2 eV (pour AlN), correspondant à la gamme de longueur d'onde de 200 nm à 1850 nm environ. Cette gamme couvre un spectre optique allant de l'infrarouge à l'ultraviolet (UV). La figure 1.1 représente la variation de la bande interdite en fonction du paramètre de maille.

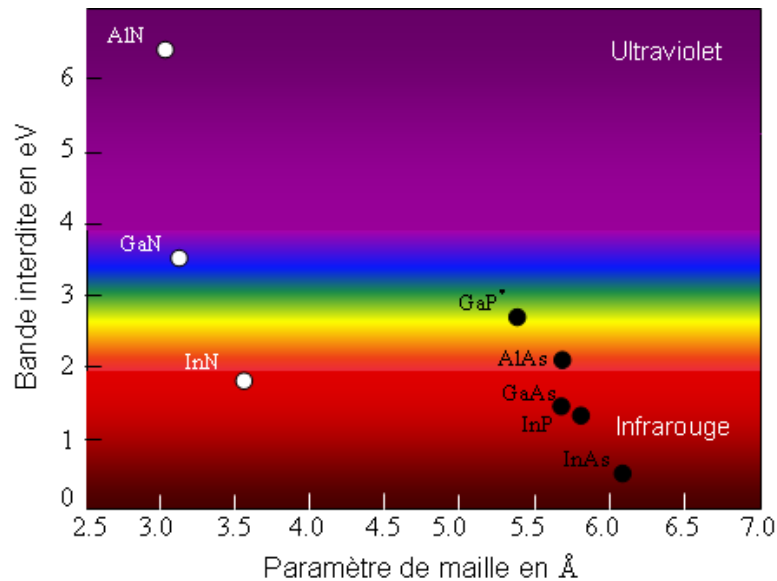


Figure 1.1 : Énergie de bande interdite en fonction des paramètres de maille des semi-conducteurs III-V (En blanc : les composés III-N) [12].

## 1.2 Nitrure de gallium GaN

### 1.2.1 Généralités

Le premier dépôt de nitrure de gallium (GaN) a été développé en 1969 par épitaxie en phase vapeur aux hydrures (EPVH) (hybride vapor phase epitaxy HVPE) [13]. GaN est un semi-conducteur à large gap direct (3.4 eV) ; il est très utilisé pour des applications électroniques et optoélectroniques, allié avec d'autres composés III-V, pour réaliser divers dispositifs. Il admet une grande stabilité chimique et thermique, de très bonnes propriétés mécaniques, et des propriétés physiques très intéressantes pour opérer en haute température, haute puissance et haute fréquence.

### 1.2.2 Propriétés structurales

Le nitrure de gallium se présente sous deux formes cristallines : la structure hexagonale ou wurtzite (h-GaN), et la structure cubique (blende de zinc : c-GaN) [14]. Celle de type wurtzite est la plus stable thermodynamiquement [15].

#### 1.2.2.1 Structure wurtzite

Dans la structure de type wurtzite (figure 1.2), les atomes d'azote forment un empilement hexagonal compact et les atomes de gallium occupent la moitié des sites tétraédriques. Elle est plus stable que la phase cubique en termes d'énergie de formation. Elle est constituée de deux réseaux hexagonaux, l'un avec les atomes de gallium et l'autre avec les

atomes d'azote, interpénétrés et décalés entre eux suivant l'axe  $c$  de  $5/8^{\text{ème}}$  de la maille élémentaire. La structure wurtzite possède deux paramètres principaux, le paramètre de maille latéral  $a_0 = 3.189 \text{ \AA}$  et le paramètre de maille vertical  $c_0 = 5.185 \text{ \AA}$ .

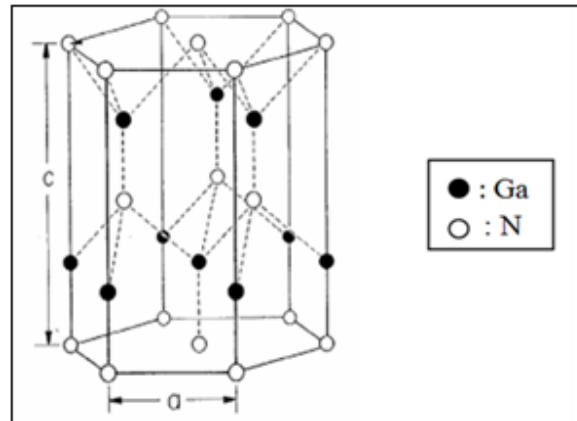


Figure 1.2 : Structure cristalline du GaN hexagonal (wurtzite).

### 1.2.2.2 Structure blende de zinc

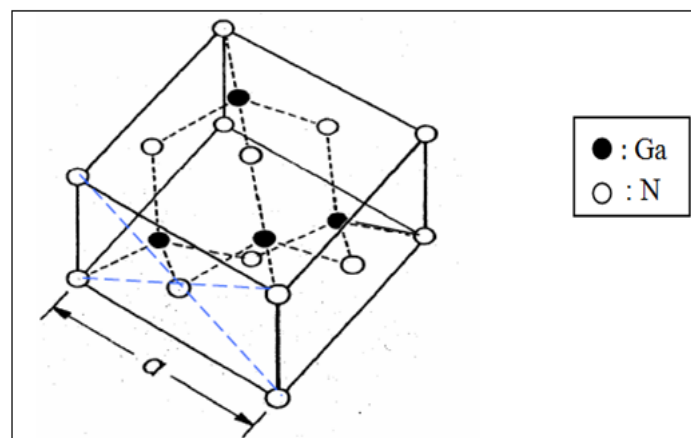


Figure 1.3 : Structure cristalline du GaN cubique (blende de zinc).

La structure blende de zinc est formée de deux sous réseaux cubiques à faces centrées comprenant chacun un type d'atome décalé d'un quart par rapport à la diagonale de la maille. Les atomes d'azote forment un empilement cubique faces centrées dans lequel les atomes de gallium occupent la moitié des sites tétraédriques. Cette structure est thermodynamiquement instable et moins exploitée par rapport à l'autre type, la valeur de sa maille élémentaire est  $a_0 = 4.511 \text{ \AA}$  à 300 K [14].

### 1.2.3 Structures de bandes, propriétés optiques et électroniques

Les propriétés optiques et électroniques de GaN sont gouvernées par la structure de bandes électroniques autour du haut de la bande de valence et du bas de la bande de conduction. Les deux polytypes de GaN présentent, comme la plupart des matériaux III-V, une bande interdite directe au point  $\Gamma$ , centre de la première zone de Brillouin ( $k = 0$ ).

#### 1.2.3.1 Zones de Brillouin

Pour un cristal périodique, les paramètres internes (par exemple la densité d'électrons) ont la périodicité du réseau ; la première zone de Brillouin définit le réseau direct. Dans l'espace direct, les grandeurs physiques sont périodiques ; pour les connaître dans tout le cristal, il suffit de les reconnaître dans la maille élémentaire du réseau.

Ceci est valable pour l'espace réciproque, il suffit de les avoir dans la première zone de Brillouin [16].

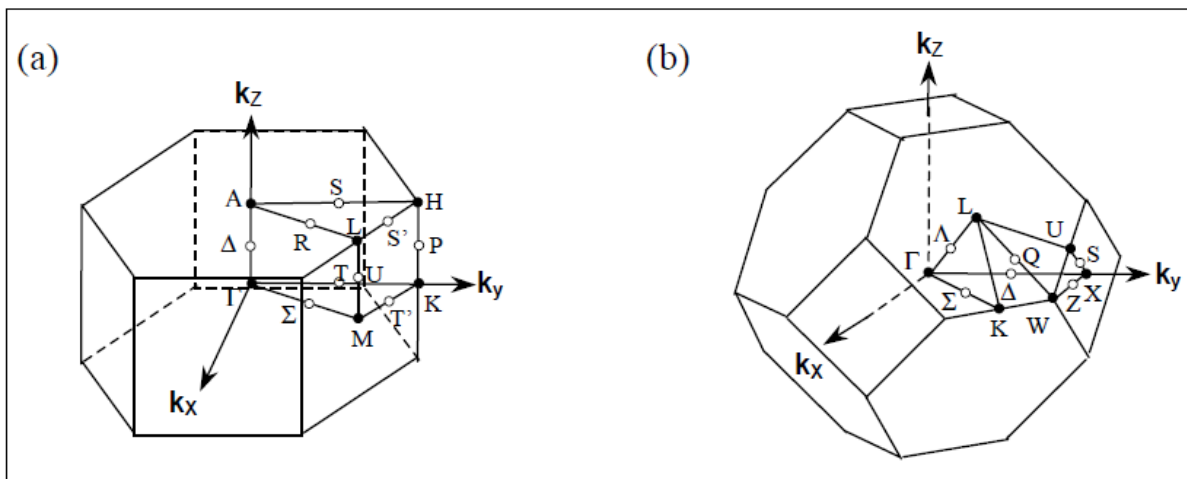


Figure 1.4 : les Zones de Brillouin de GaN de type (a) wurtzite et (b) zinc-blende [17].

#### 1.2.3.2 Structures de bandes

A l'aide de la méthode FLAPW (Full Potential Linearized Augmented Plan Wave), la plus adaptée en raison de la localisation des densités de charge des bandes de valence, les structures de bandes ont été obtenues en tenant compte de l'interaction spin-orbite [17]. Cette méthode de calcul quantique ab-initio est basée sur la méthode de la fonctionnelle de densité, dans l'approximation de la densité locale. Dans cette dernière, la résolution de l'équation de Schrödinger  $H\Psi = E\Psi$  se fait à l'aide d'une fonction d'onde  $\Psi$  exacte, d'un Hamiltonien  $H$  approché et d'un système collectif d'électrons. FLAPW (ou FPLAPW) qualifie le type de potentiel utilisé ; son principal défaut est de sous-évaluer la valeur du gap d'énergie, elle

donnerait une valeur de 1.9 eV (0.13Ry) seulement. La figure 1.5 donne les structures de bandes électroniques de GaN de structure wurtzite et (b) blende de zinc.

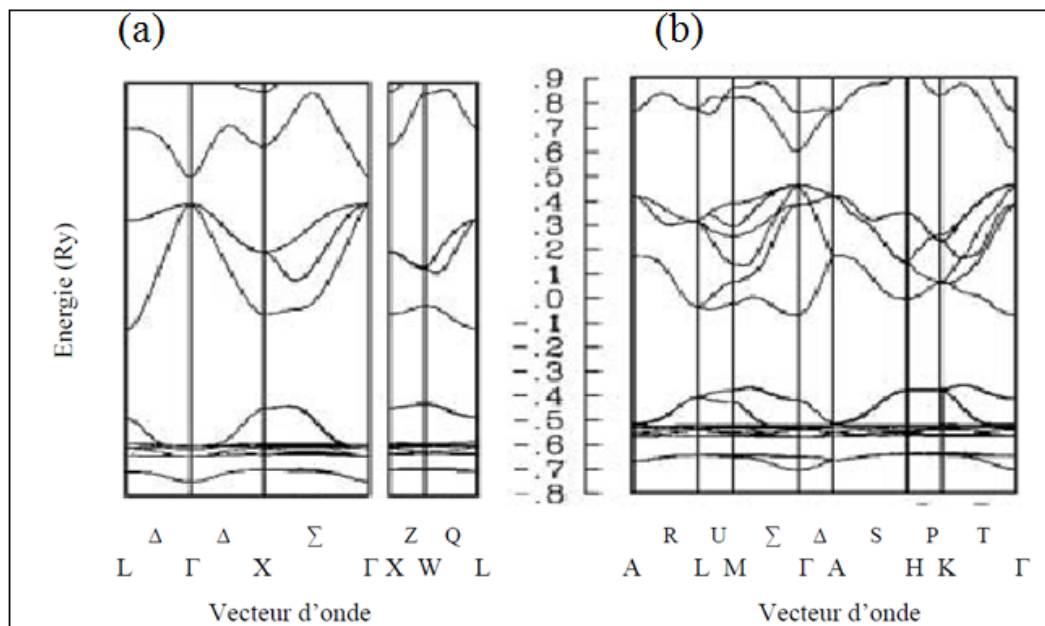


Figure 1.5 : Structures de bandes de GaN de type (a) wurtzite et (b) blende de zinc selon L. Susuki et al. [17].

Au voisinage du point  $\Gamma$ , la bande de conduction (de symétrie  $\Gamma_7$ ) est unique, alors que la bande de valence est constituée de trois bandes A, B et C, qui sont aussi appelées par analogie avec les semi-conducteurs cubiques respectivement hh (trous lourds), lh (trous légers) et ch (trous spin-orbite), de symétrie  $\Gamma_9$ ,  $\Gamma_7$  et  $\Gamma_7$ , respectivement. A cause de la moindre symétrie du réseau hexagonal comparée à celle du réseau cubique, mais aussi de l'interaction spin-orbite, la dégénérescence des bandes de valence est levée par le champ cristallin. La structure de bandes au voisinage du point  $\Gamma$  est représentée sur la figure 1.6.

Les levées de dégénérescence dues au champ cristallin ( $\Delta_{cr}$ ) et au couplage spin-orbite ( $\Delta_{so}$ ) sont dans GaN de  $\sim 10$  meV et  $\sim 17$  meV, respectivement [18].

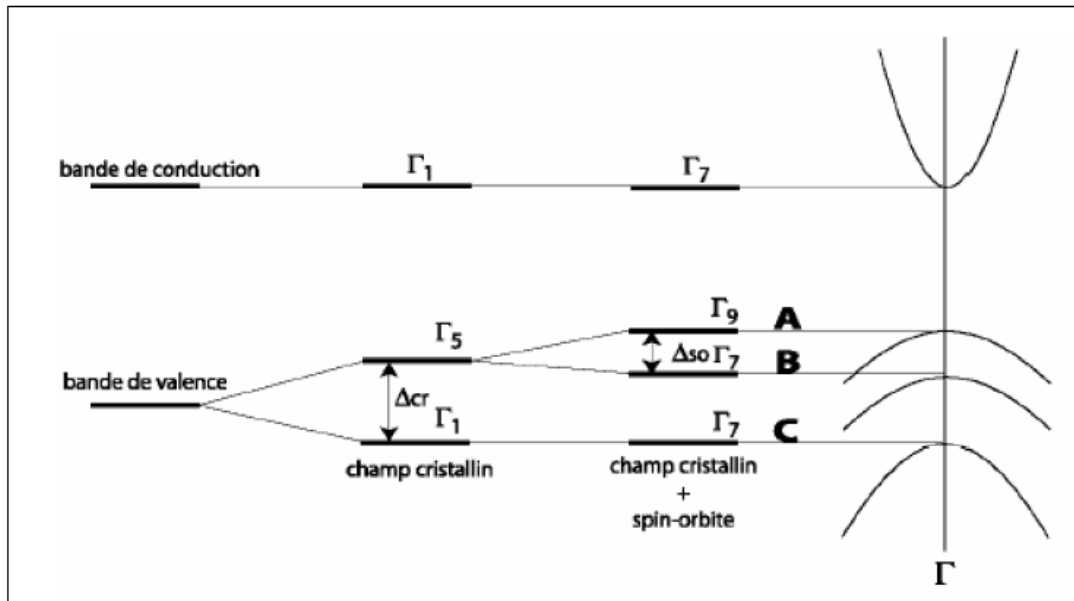


Figure 1.6 : Structure de bandes du GaN en phase wurtzite au voisinage de  $k = 0$  [19].

### 1.2.3.3 Propriétés optiques

Les propriétés optiques d'un semi-conducteur ont une importance essentielle en raison d'un immense éventail d'informations utiles pouvant être obtenues quand on veut comprendre les propriétés des semi-conducteurs, spécialement les matériaux à bande interdite directe pour les applications optoélectroniques.

Les propriétés optiques des semi-conducteurs, résultent des transitions électroniques entre les niveaux de la bande de conduction et la bande de valence qui forment la bande interdite ; cette dernière peut être directe ou indirecte.

Par des mesures de transmission optique, la valeur du gap de nitrure de gallium a été estimée à 3.4 eV (365 nm), à température ambiante [20]. Son évolution est approchée en fonction de la température  $T$ , par l'expression de Varshni [21] :

$$E_g(T) = E_g(0K) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (1.1)$$

En 1960, la caractérisation des propriétés diélectriques de h-GaN a été développée.

Des mesures de l'indice de réfraction ( $\tilde{n} = n + ik$ ) ont été réalisées en dessous du bord de bande du nitrure non dopé [22].

La partie imaginaire de la fonction diélectrique ( $k$ ) dans le visible et l'infrarouge (370 - 2000 nm) est ignorée.

Indice de réfraction	Mesure de la longueur d'onde
2.5	IR
2.397	516.1 nm
2.1 - 2.5	-
2.53	IR
2.42 à 2.48	479 à 956 nm
2.03	777 nm
2.1 à 2.4	800 à 2000 nm
2.25 à 2.65	500 nm
2.41	532 nm
2.79	365 nm

Tableau 1.4 : Valeur de l'indice de réfraction du GaN dans le visible et l'IR [23].

Pour calculer l'indice de réfraction des photons du bord de la bande du GaN, on peut utiliser la méthode de l'ellipsométrie spectroscopique (longueur d'onde incidente entre 250 et 600 nm).

L'indice de réfraction varie de 2.1 (à une épaisseur de 1900 nm) à 2.5 (à une épaisseur de 480 nm), pour un film cristallin de GaN de bonne qualité [24].

La constante diélectrique statique a été mesurée par la réflectivité optique ; elle est de 8.9 donnée par Matsubara and Takagi ; et de 9.5 donnée par Barker and Ilegems [25].

Le coefficient d'absorption a lui aussi, fait l'objet de nombreuses études. Le carré de sa valeur est linéaire avec l'énergie des photons au dessous de l'énergie du gap :

$$\alpha^2 = (\alpha_0)^2 \times (E - E_g). \quad (1.2)$$

avec :  $\alpha_0 = 1.08 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$

Ceci confirme le fait que le gap de GaN est direct [45]. Les mesures du coefficient d'absorption de GaN de type wurtzite, au gap excitonique, donnent des valeurs variant de  $3 \times 10^{-4}$  à  $1.5 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$  [41]. En outre, il faut signaler que les mesures de la réflectivité, dans le visible et l'ultraviolet, sont sensibles aux transitions excitoniques et inter-bandes [24].



### 1.2.4 Propriétés de transport électrique

Les propriétés de transport électrique dépendent principalement des structures du minimum absolu de la bande de conduction et du plus haut de la bande de valence.

Le transport électrique est spécifié par la concentration en porteurs libres et la mobilité  $\mu$  par effet hall telles que :  $\mu = R/\rho$ , avec R le coefficient de Hall et  $\rho$  la résistivité.

Le nitrure de gallium GaN non dopé intentionnellement (n.i.d.) est de type n, avec au mieux une concentration d'électrons de  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et une mobilité de  $900 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . Dans le cas de monocristaux usuellement synthétisés sous haute température et haute pression d'azote, la concentration d'électrons est de  $10^{18}$  à  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , et la mobilité de  $60$  à  $100 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ .

Le dopage de type n du nitrure de gallium GaN est le plus souvent réalisé avec le silicium ou le germanium. En effet, leurs concentrations sont plus facilement contrôlables que celle de l'oxygène [26].

La mobilité en fonction de la concentration d'électrons à 300 K, est illustrée par la figure 1.7, pour des échantillons synthétisés par divers auteurs [26]. On remarque que lorsque la concentration en électrons augmente la mobilité diminue régulièrement.

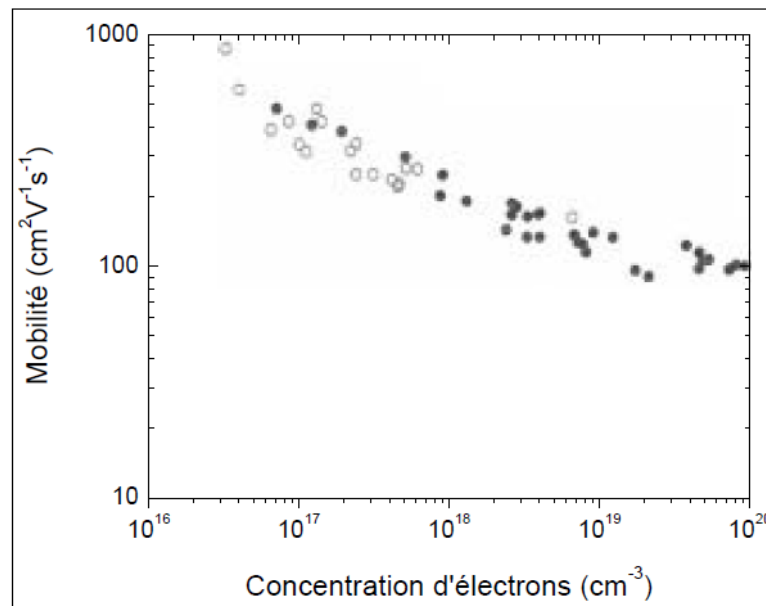


Figure 1.7 : Mobilité de Hall en fonction de la concentration en électrons à 300 K pour un certain nombre d'échantillons réalisés par MOVPE et MBE, selon D. K. Gaskil et al. [26].

(○: GaN dopé inintentionnellement ; ●: GaN dopé avec Si ou Ge).

Le dopage p de GaN est beaucoup plus difficile à réaliser, il est moins développé que le dopage de type n ; comme cela est souvent le cas dans les matériaux à large gap.

1.2.5 Polarisation spontanée et piézoélectrique

Dans une structure cristalline d'un matériau de nitrure de gallium (GaN) de type wurtzite, les électrons logés dans la bande de valence sont fortement attirés par l'azote que par le gallium, ceci est dû à sa forte électronégativité.

L'altération de la forme de sa structure tétraédrique et la variation du rapport des paramètres caractérisant les mailles (c/a) qui devient plus faible, sont causées par cette attraction. Donc la non coïncidence des barycentres des charges positives et négatives a pour effet une polarisation dite spontanée. La figure 1.8 montre que sur quatre atomes d'azote qui entourent l'atome de gallium, il y a trois qui se trouvent dans le même plan cristallographique, par contre le quatrième se trouve sur l'axe "c".

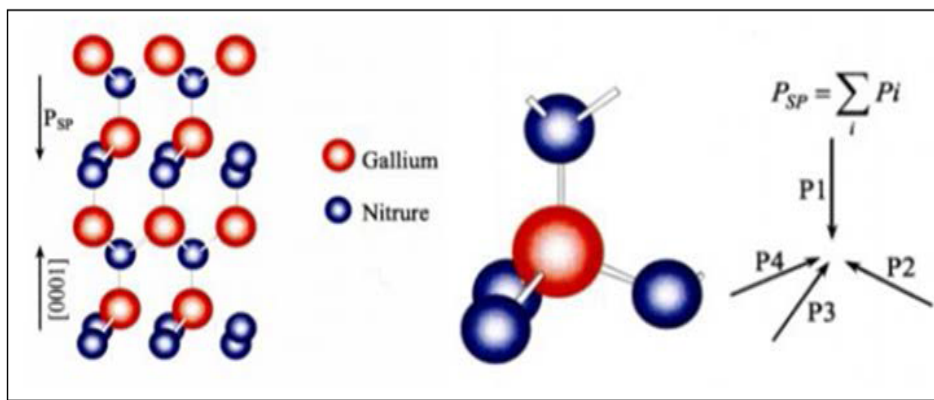


Figure 1.8 : Polarisation spontanée.

La création de la polarisation macroscopique spontanée sans aucune contrainte extérieure peut être due à la somme vectorielle des moments dipolaires créés entre les atomes d'azote et de gallium. La somme de ces moments va créer un moment dipolaire parallèle à l'axe "c".

De même on peut dire que la polarisation spontanée dans GaN wurtzite va permettre la création de dipôles électriques qui se disposent sous une forme successive en créant un champ électrique (voir figure 1.9).

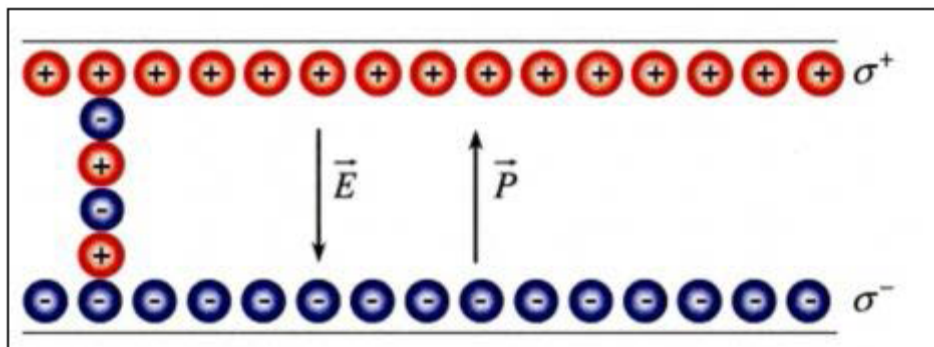


Figure 1.9 : Charges en surface du GaN hexagonal.

Généralement un matériau est dit piézoélectrique pour deux raisons :

- Lorsqu'on lui fait subir des contraintes mécaniques, des charges électriques fixes apparaissent dans son volume, alors on dit qu'il y a un effet piézoélectrique direct.
- Contrairement s'il y a présence d'un champ électrique, le matériau va subir une déformation macroscopique ; il s'agit alors d'un effet piézoélectrique indirect.

Pour les deux cas, les grandeurs électriques et mécaniques sont proportionnelles entre elles [27].

Le nitrure de gallium GaN est dit piézoélectrique car lorsque sa structure cristalline est soumise à une contrainte mécanique ou à une excitation extérieure, il y a tout d'abord un changement de position des atomes, qui se traduit par une variation de distance interatomique et donc une modification des moments dipolaires. Tout ceci va se traduire par une création d'une polarisation suivant l'axe "c" appelée piézoélectrique car sa valeur varie en fonction de la contrainte exercée.

La polarisation piézoélectrique peut être exprimée en fonction des coefficients piézoélectriques  $e_{ij}$  et des constantes élastiques  $c_{ij}$  suivant la relation (1.1) [28].

$$P_{PZ} = 2 \frac{a-a_0}{a_0} \times (e_{31} - e_{33} \times \frac{c_{13}}{c_{33}}) \quad (1.3)$$

### 1.2.6 Propriétés thermiques

La conductivité thermique, la chaleur spécifique et la température de Debye sont les principales grandeurs physiques qui déterminent les propriétés thermiques du GaN.

#### 1.2.6.1 Conductivité thermique

La conductivité thermique est la propriété cinétique qui est déterminée par les contributions des degrés de liberté électronique : de vibration et de rotation. Elle traduit la capacité d'un matériau à évacuer la chaleur provenant de la puissance dissipée lors du fonctionnement du composant.

En l'absence d'une bonne conductivité thermique, on a une chute de la mobilité des électrons et une diminution des performances grâce à la dissipation de la puissance qui provoque une augmentation de la température du composant.

#### 1.2.6.2 Chaleur spécifique

L'augmentation de la température dans les semiconducteurs entraîne une augmentation du nombre de phonons. La chaleur spécifique est le paramètre physique qui

relie les variations de la température du réseau au nombre de phonons présents dans le semi-conducteur, sa valeur peut être calculée à partir de la relation de Debye [28] :

$$C_p = \left( \frac{12\pi^4 R}{5} \right) \times (T/T_D)^3 \times c \quad (1.4)$$

Avec  $R = 8.344 \text{ J/mol.K}$  et  $T_D$  : la température de Debye.

### 1.2.6.3 Température de Debye

La température de Debye  $T_D$  définit la valeur maximale des énergies de vibrations. Cette grandeur physique peut être déterminée à partir de la chaleur spécifique et des coefficients élastiques [29, 30]. Les valeurs obtenues sont respectivement 700 K et 650 K.

### 1.2.7 Ionisation par impact

Lorsqu'il y a présence de champs électriques intenses dans un matériau, il apparaît un phénomène appelé ionisation par impact. Pour chaque électron créé dans la bande de conduction, un trou correspondant est également créé dans la bande de valence.

Dans un matériau et sous l'effet du champ électrique existant, un électron peut toujours recevoir de l'énergie cinétique et la transmet au cristal par le fait d'effectuer de nombreux chocs avec les phonons du réseau. La dissipation de l'énergie potentielle perdue par les électrons n'est assurée que par ce phénomène. Si le champ électrique est toujours intense, la rupture d'une liaison et la création d'une paire électron-trou dans un atome sont dues à la présence de l'énergie acquise par certains électrons. Cela signifie que plus de porteurs libres sont générés. Si le taux de génération de porteurs libres est élevé, un phénomène d'avalanche se produit. La figure 1.10 illustre ce phénomène.

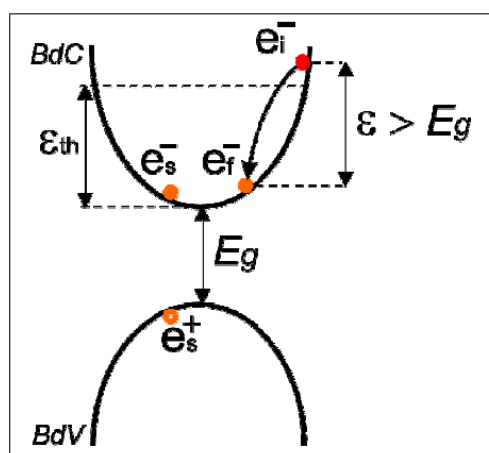


Figure 1.10 : Phénomène d'ionisation par impact ( $e_i^-$  : électron à l'état initial,  $e_f^-$  : électron à l'état final,  $e_s^-$  : électron secondaire créé,  $e_s^+$  : trou secondaire créé).

### 1.2.8 Techniques de croissance du GaN

L'Épitaxie en Phase Vapeur aux Organo-Métalliques (MOCVD) et l'Épitaxie par Jet Moléculaire (MBE) sont les procédés les plus appropriés pour la croissance des matériaux à grand gap. Pour éviter le désaccord de mailles entre le substrat et la couche épitaxiée, la préparation des couches minces est indispensable lors de la fabrication des dispositifs électroniques à partir des matériaux nitrurés.

#### 1.2.8.1 Technique MOCVD

Le procédé MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) est une technique très utilisée dans le domaine industriel et plus particulièrement pour la production des dispositifs optoélectroniques et électroniques à semi-conducteurs (composés III-V). Elle consiste à traiter un dépôt en phase vapeur par procédé chimique organométallique des nitrures de gallium. Le substrat est chauffé à haute température (de l'ordre 1000 °C) sous flux par exemple d'ammoniac. Il se produit alors une nitruration du substrat qui permet une nucléation d'une couche tampon, qui va être déposée à une température plus basse (environ 500 °C) puis elle cristallise avant l'épitaxie d'une couche épaisse de GaN. Enfin la MOCVD est une méthode de croissance qui permet de réaliser des dispositifs très performants [31,32].

#### 1.2.8.2 Technique MBE

La méthode MBE (en anglais Molecular Beam Epitaxy) est une méthode de croissance sur un substrat chauffé, évaporé sous ultra-vide (UHV, ultra high vacuum) en utilisant des sources élémentaires. Dans le cas du GaN, on utilise une source solide pour le gallium et une source gazeuse pour l'azote. Le gaz utilisé peut être le NH<sub>3</sub> ou le NH<sub>2</sub>.

La MBE est une technique de croissance à température basse ayant une vitesse de croissance lente (<1 μm/h) [31,32].

### 1.3 Nitrure de bore BN

En 1842, Bolmain réalise la première synthèse du nitrure de bore (nitrure de bore hexagonal). Il existe sous différentes formes cristallographiques. Le nitrure de bore (BN) est une céramique non oxyde qui n'existe pas à l'état naturel.

Récemment, le nitrure de bore (BN) a été introduit dans les composants électroniques et optoélectroniques. Il présente certains avantages tels que la conductivité électrique, les résistances mécaniques et électriques élevées, la stabilité chimique et la transparence optique dans une large bande spectrale. Bien que BN n'apparaisse pas naturellement dans la structure

wurtzite, il est possible de combiner BN avec AlN ou GaN afin d'obtenir des intervalles de bande plus larges dans cette structure [33].

Le nitrure de bore (BN) est un composé III-V. Contrairement aux autres nitrures (composés III-N), sa structure la plus stable et la plus étudiée est la phase wurtzite [34].

Le BN présente certains intérêts, en particulier pour ses structures hexagonales (h-BN) [36, 41], rhomboédriques (r-BN) [35,36] et turbostratiques (t-BN) [37, 38]. Il peut se produire dans plusieurs polymorphes, notamment la structure zinc blende cubique (c-BN) [36, 38, 39]. Dans sa structure cubique [40], (c-BN) a une bande interdite de 6.4 eV [38]. La phase cubique est stable à haute température, la phase hexagonale est la phase stable à pression atmosphérique (voir figure 1.11). Les deux autres phases sont métastables à haute pression.

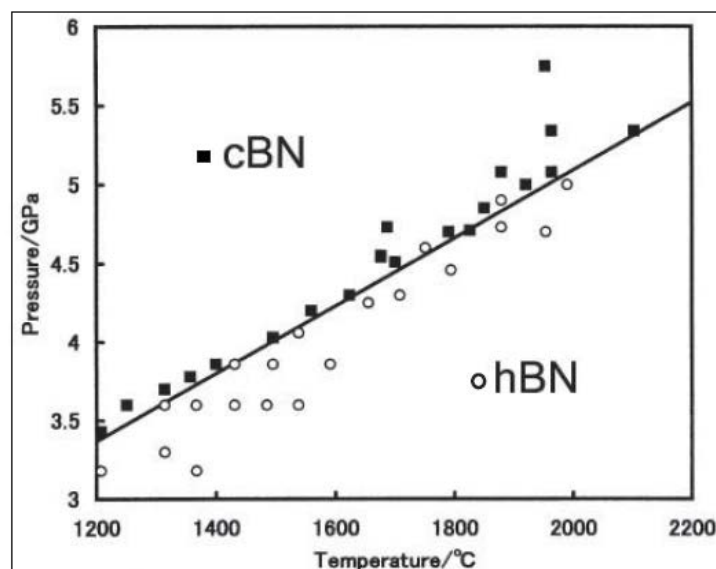


Figure 1.11 : Diagramme de phase du nitrure de bore [42].

### 1.3.1 Propriétés des nanotubes de nitrure de bore

#### 1.3.1.1 Propriétés structurales

Les figures 1.12 et 1.13 représentent les différentes principales structures cristallines du nitrure de bore : cubique (c-BN), hexagonale (h-BN), wurtzite (w-BN), rhomboédrique (r-BN) et turbostratique (t-BN).

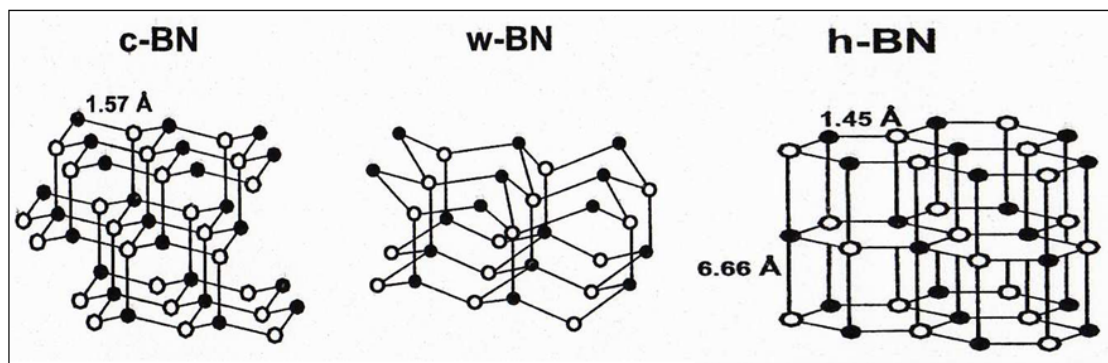


Figure 1.12 : Illustration des structures cristallines de (c-BN) et (h-BN) et (w-BN).

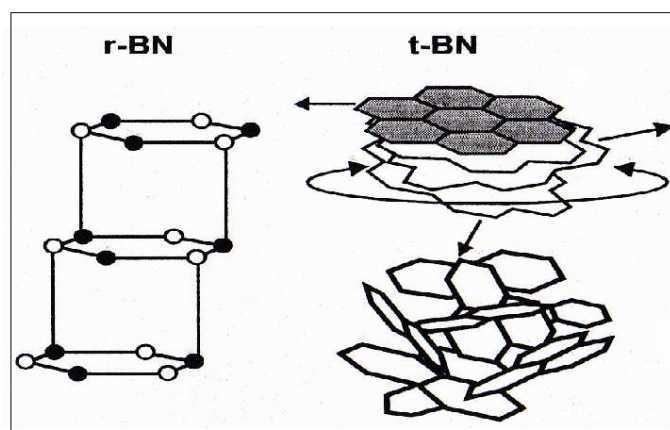


Figure 1.13 : Illustration des structures cristallines de (r-BN) et (t-BN).

Données cristallographiques	BN cubique	BN wurtzite	BN hexagonal
Paramètres de maille	$a = 3.67 \text{ \AA}$	$a = 2.536 \text{ \AA}$ $c = 4.199 \text{ \AA}$	$a = 2.504 \text{ \AA}$ $c = 6.661 \text{ \AA}$
Distance B-N	$1.57 \text{ \AA}$	$1.555 \text{ \AA}$	$1.446 \text{ \AA}$
Densité	$3.49 \text{ g.cm}^{-3}$	$2.34 \text{ g.cm}^{-3}$	

Tableau 1.5 : Paramètres de maille des structures cristallines de BN.

### 1.3.1.2 Nitrure de bore hexagonal (h-BN), rhomboédrique (r-BN) et turbostratique (t-BN)

#### a) Structures

Ces trois composés présentent une structure similaire à celle du graphite. Pour le nitrure de bore hexagonale (h-BN), elle est formée par un empilement de feuillets d'hexagones qui se superposent selon une forme alternée d'un plan à l'autre, de manière à présenter une séquence de couches BN. Dans la phase rhomboédrique (r-BN), il y a une

séquence de couches atomiques ABC ABC. Par contre pour la phase turbostatique (t-BN), les couches atomiques ne sont pas alignées suivant l'axe c [43], elles sont disposées en parallèles.

### b) Propriétés

Comme les feuillets d'hexagones sont formés de liaisons covalentes de distance 1.45 Å (hybridation  $sp^2$ ) dont la force de la liaison est assez forte.

Par leurs propriétés électroniques, vibrationnelles et optiques, ces matériaux sont très utilisés dans le domaine industriel, avec une grande importance. Ils sont utilisés comme isolants électriques. Pour le h-BN par exemple, il présente une bonne résistance thermique dans une gamme de température allant de 25 à 2000 °C.

De même il se caractérise par une grande stabilité devant les acides minéraux et les solvants organiques. En optique (infrarouge par exemple) il est peu transparent.

### 1.3.1.3 Nitrure de bore cubique (c-BN) et nitrure de bore wurtzite (w-BN)

#### a) Structures

Ces deux composés présentent une structure très proche à celle du h-BN. L'empilement des plans est du type AB AB pour le w-BN, car les liaisons BN ont une hybridation  $sp^3$ . De même le c-BN a une structure (de type ABC ABC) dont les liaisons BN sont très courtes [44], les atomes de bore et d'azote qui se lient entre eux forment des tétraèdres.

#### b) Propriétés

Par l'absence de liaisons  $\pi$  (liaisons courtes), les deux matériaux trouvent une grande importance pour des applications en microélectronique et en mécanique. Ayant une très bonne conductivité thermique et une grande résistivité électrique [45], le c-BN est utilisé comme matériau abrasif après le diamant, c'est un matériau très dur.

La phase de type wurtzite (w-BN) s'obtient par une déformation de la structure cubique, la synthèse de ce matériau se réalise à haute pression, il a un avantage important par rapport au diamant : température d'oxydation vers 1300 °C.

### 1.3.2 Propriétés électroniques et optiques

Le nitrure de bore a une valeur de bande interdite égale à 5.5 eV pour des tubes de diamètre supérieur à 1 nm, cette valeur a été trouvée par les chercheurs Blase et Coll [46] se



basant sur des calculs de structure électronique. Aussi, ils ont montré que cette valeur est indépendante du nombre de feuillets des tubes et de l'hélicité.

En 2004, Cumings et Zettl [47] ont montré expérimentalement que les nanotubes bifeuillets ne montrent pas de grande résistance pour des tensions inférieures à 10 V, et ils sont de bons diélectriques (contrairement au nanotube de carbone).

D'autres chercheurs [48] ont réalisé des analyses en STM et STS (microscopie et spectroscopie à effet tunnel), et ils ont trouvé des valeurs de gap de 4.5 à 4.8 eV pour des nanotubes multifeuillets de grand diamètre ; et pour des nanotubes bifeuillets, ils ont fourni des valeurs de 3.8 à 8.7 eV. Ces analyses sont difficiles grâce à l'existence d'un fort effet Starck (modification du gap en présence d'un champ électrique transverse) [49,50] et l'importance des impuretés au sein des échantillons.

D'autre part on peut dire que les nanotubes du nitrure de bore sont des semiconducteurs à grand gap (5.5 à 6 eV), car les études faites sur ce matériau ont prouvé que la luminescence associée au gap est de nature excitonique [51].

### 1.3.3 Propriétés mécaniques

Expérimentalement, les propriétés mécaniques du matériau hBN ont été étudiées par Chopra et Zettl vers les années 1998 [52] ; ce composé se distingue par des qualités mécaniques assez remarquables, la résistance au cisaillement et à la compression est très élevée, de même il est très résistant à la traction [53].

Les mesures sur des nanotubes bifeuillets du nitrure de bore ont montré que le module d'Young est égal à  $1.22 \pm 0.24$  TPa, il est bien supérieur à celui du hBN. D'un autre côté, Hernandez et ses collaborateurs [54] ont montré qu'en appliquant la méthode des liaisons fortes, le module d'Young des nanotubes de nitrure de bore a une valeur comprise entre 0.837 et 0.912 TPa.

Dans l'idée de renforcer le composite vitreux d'aluminosilicate de baryum et de calcium nommé G18 [55,56], la NASA a utilisé les nanotubes du nitrure de bore. Après renforcement avec un pourcentage de l'ordre de 4% en masse de nanotubes du nitrure de bore multifeuillets, les chercheurs de la NASA ont remarqué que la force du composite s'améliore de 90 % et sa résistance au cisaillement de 35 % par rapport au composite non renforcé.

### 1.3.4 Propriétés chimiques

Comme le bore et l'azote sont plus réactifs que le carbone, les nanotubes du nitrure de bore sont plus utilisés pour les réactions chimiques que les nanotubes de carbone.

Cette caractérisation est très intéressante par exemple pour certaines fonctions réactives, telles que les chaînes pendantes qui sont présentes à la surface des tubes.

Un autre avantage pour les nanotubes du nitrure de bore par rapport aux autres composés peut être remarqué, car ils sont résistants à l'oxydation [57]. Ceci laisse à préférer les nanotubes du nitrure de bore que les nanotubes de carbone pour le renforcement des matériaux. Pour une température élevée (de l'ordre de 800 °C) et sous air, leurs caractéristiques ne fluctuent pas ; ils sont stables, par contre les nanotubes de carbone s'oxydent à une température de 400 °C.

## 1.4 Nitrure d'aluminium AlN

Le nitrure d'aluminium (AlN) est un semi-conducteur à large bande interdite (6.2 eV à 300 K) [58], il émet dans l'ultraviolet. L'AlN est un matériau ayant des propriétés intéressantes : une excellente conductivité thermique, une température de fusion élevée et une bonne stabilité à haute température. Il peut être utilisé pour des applications optoélectroniques (élaboration des diodes électroluminescentes).

L'AlN polycristallin est obtenu par frittage, et de façon plus marginale par des méthodes (dont la HTCVD) permettant d'obtenir directement des dépôts pour des applications de protection contre la corrosion ou l'abrasion. Il est également utilisé comme barrière de diffusion.

Le procédé HTCVD (High Temperature Chemical Vapor Deposition), spécialité d'ACERDE, est une alternative qui permet la croissance de monocristaux de très bonne qualité. L'ACERDE élabore par HTCVD des couches monocristallines d'AlN sur des substrats de 2 pouces en saphir ou SiC. Le développement de couches d'une centaine de microns est en cours. L'ACERDE a pour objectif de fournir dans les années à venir des substrats "autoportants" d'AlN monocristallin.

### 1.4.1 Propriétés

#### 1.4.1.1 Propriétés structurales

Le nitrure d'aluminium se rencontre sous deux structures cristallographiques (figure 1.14).

Hexagonale : thermodynamiquement stable, elle est de type wurtzite ayant des paramètres de maille  $a = 3.1114 \text{ \AA}$  et  $c = 4.9792 \text{ \AA}$ .

Cubique : métastable, elle est de type zinc blende ayant un paramètre de maille  $a = 4.0450 \text{ \AA}$ .

La structure cubique possède des propriétés relativement intéressantes : une moins grande diffusion de phonons, une conductivité thermique ainsi qu'une vitesse de propagation

des ondes acoustiques plus élevées que celles de la structure wurtzite, grâce à son degré de symétrie plus élevé.

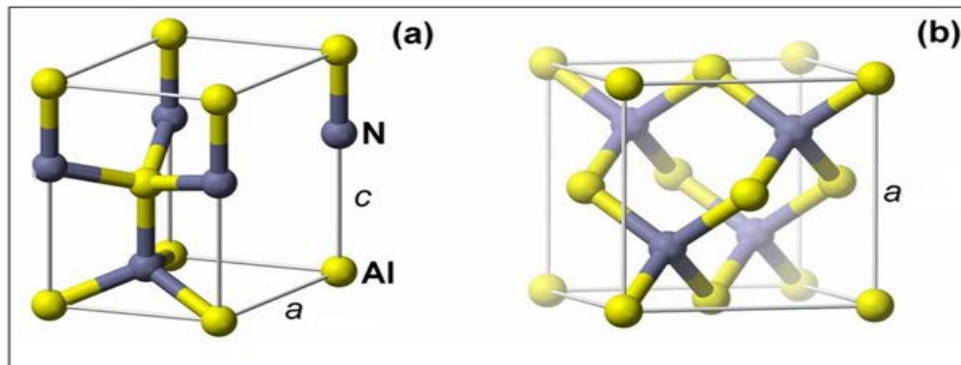


Figure 1.14 : Structures cristallines du nitrure d'aluminium (a) wurtzite, (b) zinc blende.

#### 1.4.1.2 Autres propriétés et domaines d'applications

Le nitrure d'aluminium est une céramique très utilisée dans plusieurs applications ; en optique grâce à ses propriétés intrinsèques, il est le substrat idéal pour l'élaboration de diodes ultraviolettes (la purification de l'eau) puisqu'il possède une énergie de bande interdite élevée (5 à 6.2 eV [59, 60, 61]). Il est utilisé aussi en électronique de puissance pour la fabrication de transistors hyperfréquence de puissance.

AlN est aussi utilisé pour ses propriétés piézoélectriques :

- Son module d'Young est élevé.
- Un coefficient piézoélectrique  $d_{33}$  (entre 5 et 7 p m.V<sup>-1</sup> [62, 63, 64]).
- Un coefficient de couplage électromécanique de 6 à 7 %.
- Il présente de hautes vitesses d'ondes acoustiques de l'ordre de 10400 m/s

Quelques propriétés du nitrure d'aluminium sont illustrées dans le tableau 1.6.

Bande interdite (eV)	6.2
Champ de claquage (MV/cm)	8.4
Vitesse de saturation ( $\times 10^7$ cm/s)	2.1
Mobilité des trous ( $\text{cm}^2/\text{V.s}$ )	10
Mobilité des électrons ( $\text{cm}^2/\text{V.s}$ )	400
Permittivité relative ( $\epsilon_r$ )	9.14
Conductivité thermique (W/cm.K)	2
Masse volumique ( $\text{g/cm}^3$ )	3.26
Poids moléculaire (g/mole)	41
Température maximale d'utilisation sous air ( $^\circ\text{C}$ )	1000-1800
Point de fusion ( $^\circ\text{C}$ )	2200
Module d'Young (GPa)	318

Tableau 1.6 : Propriétés d'AlN [65].

## 1.5 Nitrure d'aluminium de gallium AlGaN

Le nitrure d'aluminium de gallium est un matériau semi-conducteur d'alliage de nitrure d'aluminium et de nitrure de gallium. Son gap direct le rend utile pour des applications en optoélectronique (la fabrication des diodes électroluminescentes dans les régions du bleu à l'ultraviolet, les photodétecteurs UV... etc).

### 1.5.1 Propriétés du ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

En 1976, la première solution solide GaN-AlN a été synthétisée par plusieurs chercheurs [66]. En 1978 [67] Baranov a pu obtenir l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  avec 45% de concentration d'aluminium. Des mesures par rayons X et d'autres ont montré que tous les échantillons sont de conductivité de type n.

#### 1.5.1.1 Variation du gap d'AlGaN, en fonction de la fraction de mole x (Al)

Le gap de l'AlGaN augmente avec la fraction molaire Al, selon la relation (1.5).

$$E_g(x) = xE_g(\text{AlN}) + (1-x)E_g(\text{GaN}) - bx(1-x) \quad (1.5)$$

En remplaçant  $E_g(\text{AlN})$  et  $E_g(\text{GaN})$  par leurs valeurs à une température ambiante (300 K), avec un paramètre de courbure  $b = 1$ , dans la relation (1.5), nous trouvons les équations suivantes [68] qui donnent le gap du  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  en fonction de x :

$$Eg1(x) = x^2 - 1.64x + 3.3 \text{ eV (cubique)} \quad (1.6)$$

$$Eg2(x) = x^2 + 1.98x + 3.43 \text{ eV (hexagonal)} \quad (1.7)$$

Quand le taux d'aluminium augmente, l'énergie du gap augmente, et le sommet de la bande de valence au point  $\Gamma$ , se déplace vers le bas.

La figure 1.15 représente la variation du gap d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  en fonction de la fraction molaire d'Al.

La figure 1.16, représente la variation des énergies des vallées  $\Gamma$  et X en fonction de x (a), et la variation de l'énergie de gap en fonction de x avec et sans contraintes (b).

La figure 1.16 montre que pour le gap direct, il y a une variation linéaire par rapport à la composition ; tandis que pour le gap indirect, il y a une variation non linéaire. Les deux courbes se croisent pour une composition de 57% d'aluminium.

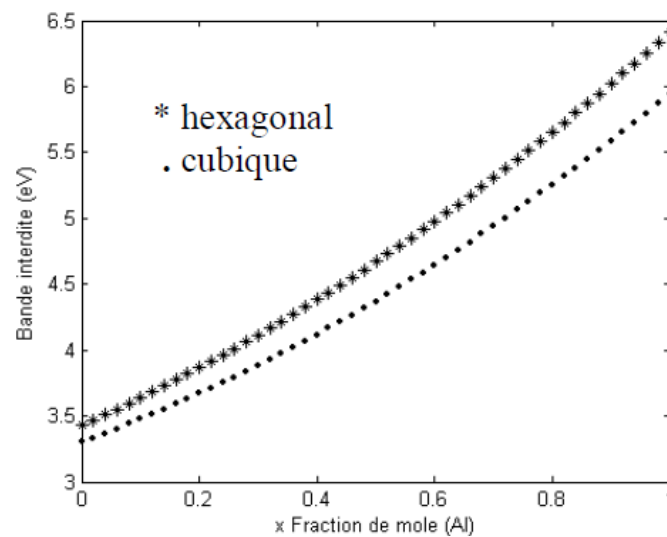


Figure 1.15 : Variation du gap dans  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , en fonction de la fraction molaire d'Al [68].

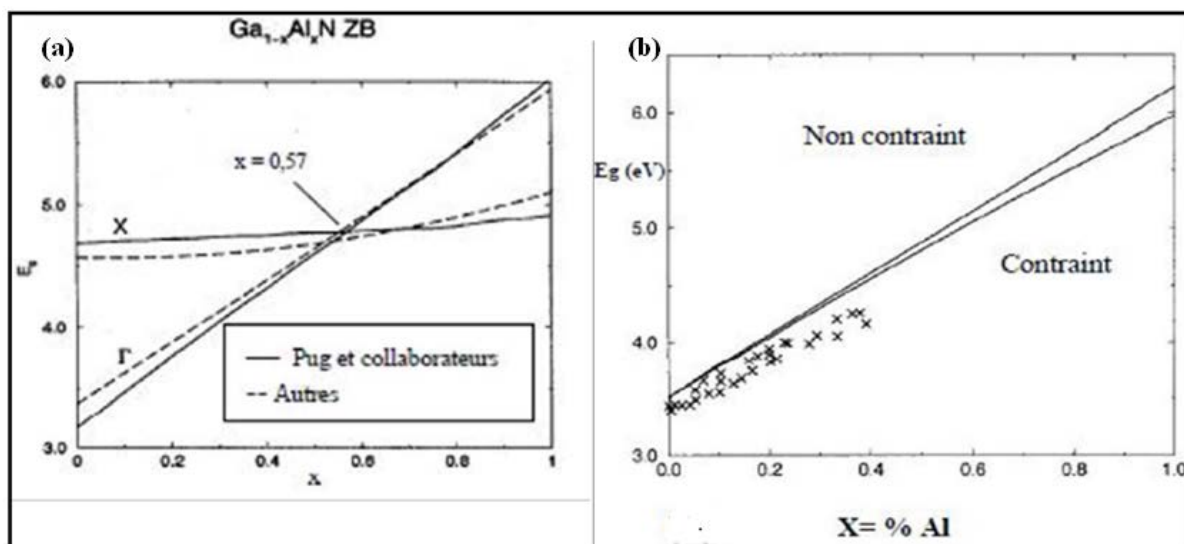


Figure 1.16 : (a) : Variation du gap de l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  cubique en fonction de la concentration en aluminium [69], (b) : même variation calculée pour la phase hexagonale des alliages avec et sans contraintes [70].

## 1.5.2 Dopage

### 1.5.2.1 Dopage de type n

Plusieurs éléments peuvent être utilisés pour le dopage de type n mais le plus courant est le silicium. Dans GaN, les atomes de Si se logent principalement sur les sites du Ga, car Si a un rayon de covalence plus proche de celui de Ga que de celui de N [71, 72].

L'effet de localisation des porteurs augmente avec la concentration en aluminium dans l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  non dopé ; et au-delà de 50%, l'alliage n'est plus semi-conducteur mais isolant. Lorsqu'on dope avec du silicium, cet alliage à forte teneur en aluminium, on constate une forte augmentation de la conductivité type n à partir d'une concentration de Si dépassant  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . On sait à l'heure actuelle doper n les alliages  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  pour toutes les teneurs en aluminium, y compris 100% (AlN). Il est toutefois important de noter qu'il existe une limite supérieure dans le dopage de type n par le silicium. Si la concentration atomique de ce dernier dépasse  $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , un phénomène d'auto-compensation se produit, et AlN devient à nouveau résistif.

### 1.5.2.2 Dopage de type p

Le dopage de type p des nitrures est particulièrement complexe [71]. Différents éléments ont été étudiés (Be, Li, Ca, K, Zn et Na) mais le seul efficace semble être le magnésium (Mg) du fait de sa plus grande solubilité dans le nitrure de gallium GaN. Le grand

problème du Mg est son énergie d'activation élevée, et qui augmente encore avec la concentration en aluminium. Ainsi à la température ambiante, seulement quelques pourcents d'atomes de Mg sont ionisés. Pour une concentration typique de  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , la concentration des trous est de l'ordre de quelques  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$  [73]. Par ailleurs ; les atomes de Mg ont tendance à s'accumuler sur les cœurs des dislocations, ce qui laisse autour de celles-ci des régions appauvries en Mg dont les propriétés électriques sont altérées. La qualité cristalline du matériau dopé est également dégradée, car Mg facilite l'apparition de défauts structuraux (inclusions, domaines d'inversion). L'hydrogène souvent présent pendant la croissance, joue un rôle important lors du dopage au Mg.

Dans le cas de la croissance par dépôt en phase vapeur avec la technique organométallique (MOCVD), les atomes de Mg doivent être activés par irradiation électronique ou par recuit thermique sous  $\text{N}_2$  pour dissocier les complexes Mg-H ; et dans le cas de la croissance par épitaxie par jets moléculaires (MBE), la présence d'atomes d'hydrogène catalyse l'incorporation du Mg, sans que l'hydrogène soit lui-même incorporé.

### 1.6 Alliage BGaN : Propriétés électroniques, optiques et structurales

Dernièrement le nitrure de bore (BN) a été introduit dans les composants électroniques et optoélectroniques ; il est très promoteur pour les solutions futures. Certaines de ses propriétés présentent des avantages tels que la conductivité électrique, les résistances mécaniques et électroniques élevées... etc. le BN peut servir d'extension naturelle de la famille des nitrures III tels que GaN [74], à faible concentration en bore, pour obtenir l'alliage BGaN [75].

Jusqu'à maintenant l'alliage BGaN est un nouveau matériau, Polyakov et autres [76, 77] ont montré expérimentalement que la plus haute solubilité du bore dans le nitrure de gallium GaN développé à  $1000 \text{ }^\circ\text{C}$  est de 1 %. Wei et autres [80] ont rapporté un alliage BGaN sur AlN/SiC en incorporant une fraction molaire plus élevée, soit 1.5 % de bore. Récemment, Ougazzaden et son équipe [81] ont réussi à incorporer 5% de bore pour les multicouches minces de BGaN /GaN.

Les énergies de la bande interdite des composés binaires, ternaires et quaternaires (B, Al, Ga, In)-N et leurs paramètres de maille sont illustrés par la figure 1.17.

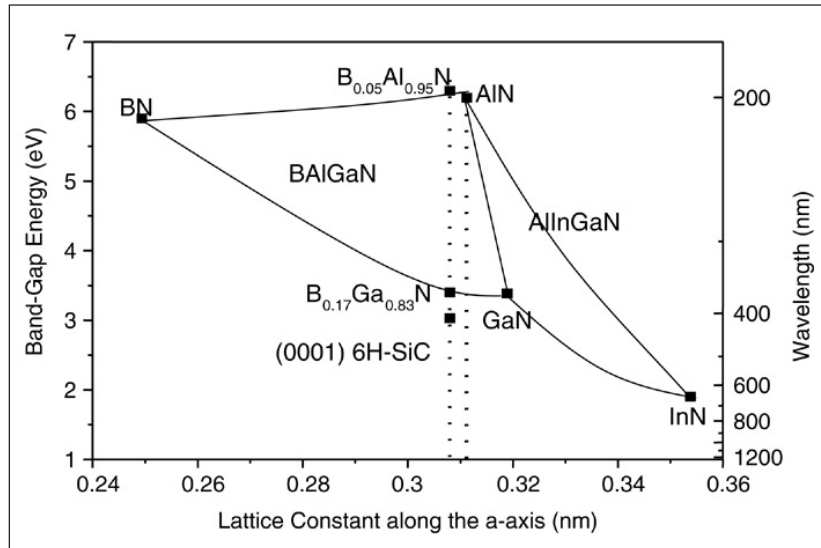


Figure 1.17 : Diagramme du gap des composés (B, Al, Ga, In)-N en fonction de leurs paramètres de maille.

Les propriétés électriques et structurales de B GaN sont étudiées par plusieurs chercheurs ; l'équipe de Ougazzaden montre qu'il est possible d'intégrer jusqu'à 5% de bore dans GaN [81], puis l'équipe de Baghdadli [82] montre que la résistivité électrique est liée à l'incorporation du bore dans le B GaN alors que la mobilité augmente jusqu'à 290 cm/V.s avec une teneur de bore plus élevée (jusqu'à 1.75%). Autrement dit, une couche de B GaN peut être très résistive avec quelques pourcents de bore, pour la réalisation de plusieurs dispositifs. Etant donné que la qualité cristalline du B GaN est très bonne, donc la résistivité s'améliore et influe sur la mobilité des porteurs [83].

La figure 1.18 interprète la variation de la résistivité du B GaN en fonction de la fraction molaire du bore [82].

Le gap de B GaN varie en fonction du paramètre de courbure (en anglais bowing parameter)  $C = 9.2 \pm 0.5$  eV d'après l'équipe de Ougazzaden et la loi de VEGARD, l'énergie de bande interdite de B GaN en fonction de la fraction molaire (x) s'écrit :

$$E_g(x) = xE_g(\text{BN}) + (1-x)E_g(\text{GaN}) - Cx(1-x) \tag{1.8}$$



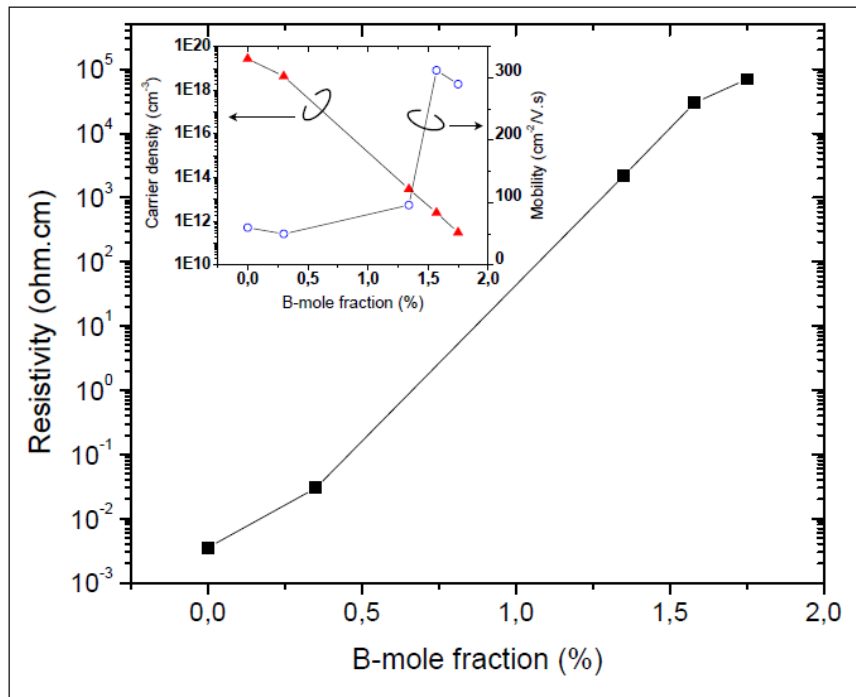


Figure 1.18 : Caractérisation électrique de 600 nm de BGaN déposé sur substrat AlN : résistivité en fonction de la fraction molaire du bore. L'encart montre la densité et la mobilité des porteurs en fonction de la fraction molaire de bore [82].

## 1.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les différentes propriétés des composés binaires tels que le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN) et le nitrure de bore (BN), et des composés ternaires tels que le nitrure de d'aluminium de gallium (AlGaN) et le nitrure de bore de gallium (BGaN).

**Références**

- [1] Johnson W.C., Parsons J.B., Crew M.C., *J. Phys. Chem.* 234 (1932) 2651.
- [2] Bachir-Dahmani Nadia, Etude des composés ternaires à base de nitrures, en utilisant la méthode de simulation de Monte Carlo. Université Abou-Bekr Belkaid–Tlemcen, faculté des sciences, 2010.
- [3] K. Nagata, K. Takeda, Y. Oshimura, K. Takehara, H. Aoshima, S. Ito, M. Iwaya, T. Takeuchi, S. Kamiyama, I. Akasaki, H. Amano, H. Yoshida, M. Kuwabara, Y. Yamashita, and H. Kan, *Phys. Status Solidi C* 8, 2384 (2011).
- [4] H. Yoshida, Y. Yamashita, M. Kuwabara, and H. Kan, *Appl. Phys. Lett.* 93, 241106 (2008).
- [5] C. Pernot, S. Fukahori, T. Inazu, T. Fujita, M. Kim, Y. Nagasawa, A. Hirano, M. Ippommatsu, M. Iwaya, S. Kamiyama, I. Akasaki, and H. Amano, *Phys. Status Solidi A* 208, 1594 (2011).
- [6] H. Hirayama, S. Fujikawa, N. Noguchi, J. Norimatsu, T. Takano, K. Tsubaki, and N. Kamata, *Phys. Status Solidi A* 206, 1176 (2009).
- [7] Z. G. Shao, D. J. Chen, H. Lu, R. Zhang, D. P. Cao, W. J. Luo, Y. D. Zheng, L. Li, and Z. H. Li, *IEEE Electron Device Lett.* 35, 372, (2014).
- [8] L. H. Yang, K. R. Lai, B. H. Zhang, X. L. Fu, J. J. Wang, and W. Wei, *Phys. Status Solidi A* 212, 698 (2015).
- [9] R. J. Kaplar, A. A. Allerman, A. M. Armstrong, M. H. Crawford, J. R. Dickerson, A. J. Fischer, A. G. Baca, and E. A. Douglas, *ECS J. Solid State Sci. Technol.* 6, Q3061 (2017).
- [10] T.P. Chow, V. Khemka, J. Fedison, N. Ramungul, K. Matocha, Y. Tang, R.J. Gutmann, "SiC and GaN bipolar power devices," *Solid-State Electronics*, vol. 44, no. 2, pp. 227-301, 2000.
- [11] R.J. Trew, "SiC and GaN transistors - is there one winner for microwave power applications," *Proceedings of the IEEE*, vol. 90, no. 6, pp. 1032 - 1047, June 2002.
- [12] B. Arnaudov, T. Paskova, P.P. Paskov, B. Magnusson, E. Valcheva, B. Monemar, H. Lu, W.J. Schaff, H.A. Amano and I. Akasaki, *Physical. B.* 69 (2004).
- [13] H. P. Maruska, "The preparation and properties of vapor-deposited single-crystal-line GaN," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 15, no. 10, p. 327, 1969.
- [14] A. Denis "Elaboration cristallogénèse et caractérisations physico-chimiques des nitrures des éléments de la colonne III-a et en particulier le GaN". Thèse de doctorat, université Bordeaux, 2003.

- [15] I. AKASAKI and H. AMANO, Properties of group III nitride, J. EDGAR, Publication INSPEC, Data review series n°11, p3-6 1994.
- [16] N. Bachir «Application de la méthode de Monte Carlo à l'étude du phénomène de transport dans GaN», Magister à l'URMER, Tlemcen (2004).
- [17] M. SUZUKI and T. UENOYAMA, Group III nitride semiconductor compounds – physics and applications, B. GIL, Oxford Science Publication, p307-342, 1998
- [18] I. Vurgaftman, J. R. Meyer; “Band parameters for nitrogen-containing semiconductors”; J. Appl. Phys. 94, 3675 (2003).
- [19] Bernard Gil, Group III nitride semiconductor compounds, Ed. Oxford Science Publication, (1998).
- [20] M. Leroux and B. Gil «Band edge and optical function of GaN», Publication INSPEC, Data review series n°23 (1997), p. 45-51.
- [21] C.H. Su, W. Palosz, S. Zhu, S. L. Lehoczky, I. Grzegory, P. Perlin and T. Susuki «Energy gap in GaN bulk crystal between 293 and 1237K», J. Cryst. Growth, Vol. 235 (2002), p. 111-114.
- [22] H. Amano, N. Watanabe, N. Koide, I. Akasaki, « Jpn. J. Appl. Phys. (Japan) vol.32 p.L1000-L1002 », (1993)
- [23] J.A. Miragliotta «Optical function of GaN», Properties of group III nitride, J. EDGAR, Publication INSPEC, Data review series n°11 p. 190-194, (1994).
- [24] S. Strite and H. Morkoç «GaN, AlN, and InN: A review», J. Vac. Sci. Technol. B, University of Illinois vol. 10 (2000), p. 1237-1266.
- [25] D. K. GASKIL, L. B. ROWLAND and K. DOVERSPIKE, Properties of group III nitride, J. EDGAR, Publication INSPEC, Data review series n°11, p101-116, 1994
- [26] Stéphane Vittoz. Modélisation et caractérisation de capteurs mécaniques intégrés à base d'hétérostructures AlGaIn/GaN pour les environnements hostiles. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. Université de Grenoble, 2011. Français. <tel-00837976>
- [27] B. Benbakhti, «Analyses physique et thermique de transistors à effet de champ de la filière GaN optimisation de structures pour l'amplification de puissance hyperfréquence ». Thèse de doctorat, Université de Lille, 2006.
- [28] P. Polian, M. Grimsditch and I. Grzegory «Elastic constants of gallium nitride», J. Appl. Phys. N°6, Vol. 79 (1996), p. 3343-3344.

- [29] Annaïg Denis «Elaboration, cristallogenèse et caractérisations physico-chimiques des nitrures des éléments de la colonne IIIA et en particulier de GaN», Université Bordeaux I, (octobre 2003).
- [30] Abdelmoumene M. « Etude et modélisation d'un transistor HEMT AlGaIn/GaN ». Mémoire de magister, Université Abou-Bakr Belkaïd-Tlemcen, 2012.
- [31] N. Vellas, "Etudes expérimentales de transistors HFET de la filière Nitrure de Gallium pour des applications de puissance hyperfréquences," Thèse de doctorat, Université de Lille1, 2003.
- [32] R. Aubry, "Etude des aspects électrothermiques de la filière HEMT AlGaIn/GaN pour application de puissance hyperfréquence," Thèse de doctorat, Université de Lille1, 2004.
- [33] C. E. Dreyer, J. L. Lyons, A. Janotti, C. G. Van de Walle, *Appl. Phys. Express* 2014, 7, 031001.
- [34] Bernard Gil. Group III nitride semiconductors compounds, physics and applications. Oxford Science Publications, 1998.
- [35] A Herold, B Marzluf, P. Perio, C. R. Hebd, *Inorganic Reactions and Methods, Formation of Ceramics Seances Acad* 1958, Sci 246, 1866.
- [36] R. Wentorf Jr. Synthesis of the Cubic Form of Boron Nitride *J. Chem. Phys.* 1961, 34, 809.
- [37] J Thomas, N E Weston, T. O'connor, Turbostratic' Boron Nitride, Thermal Transformation to Ordered-layer-lattice Boron Nitride *Journal of the American Chemical Society* 1962, 84, 4619.
- [38] J. Y. Tsao, S. Chowdhury, M. A. Hollis et al. Ultrawide-Bandgap Semiconductors: Research Opportunities and Challenges, *J Adv. Electron. Mater.* 2018, vol.4, pp. 1600501(49).
- [39] R. Wentorf Jr, Cubic Form of Boron Nitride *J. Chem. Phys.* 1957, 26, 956.
- [40] X. Zhang, *Thin Solid Films Electronic And Photonic Applications*, 2013, 544, 2.
- [41] R S Pease, An X-ray Study of Boron Nitride *Acta Crystallogr.* 1952, 5, 356.
- [42] O. Fukunaga. The equilibrium phase boundary between hexagonal and cubic boron nitride. *Diamond Relat. Mater.*, 9 :7, 2000.
- [43] Gmelin, *Handbuch der anorganischen Chemie, Band 13, Borverbindungen*, Springer, Berlin Heidelberg, New York 1997.
- [44] T. Taniguchi, S. Yamoka. Spontaneous nucleation of cubic boron nitride single crystal by temperature gradient method under high pressure. *J. Cryst. Growth*, 222:549, 2001.
- [45] H. Saitoh, W.A. Yarbough, *Diamond Relat. Mater.* 1 (1992) 137.

- [46] Blase X., Rubio A., Louie S.G. « Stability and band-gap constancy of boron nitride nanotubes ». *Europhys. Lett.* 1994, 28, 335.
- [47] Cumings J., Zettl A. « Field emission and current-voltage properties of boron nitride nanotubes ». *Solid Stat. Comm.* 2004, 129, 661.
- [48] Czerw R., Webster S., Carroll D.L., Vieira S.M.C., Birkett P.R., Rego C.A. « Tunneling microscopy and spectroscopy of multiwalled boron nitride nanotubes ». *Appl. Phys. Lett.* 2003, 83(8), 1617.
- [49] Khoo K.H., Mazzoni M.S.C., Louie S.G. « Tuning the electronic properties of boron nitride nanotubes with transverse electric fields: A giant dc Stark effect ». *Phys. Rev. B* 2004, 69, 201401.
- [50] Ishigami M., Sau J.D., Aloni S., Cohen M.L., Zettl A. « Observation of the giant Stark effect in boron-nitride nanotubes » *Phys. Rev. Lett.* 2005, 94, 056804.
- [51] Jaffrennou P., Donatini F., Barjon J., Lauret J.S., Maguer A., Attal-Tretout B., Ducastelle F., Loiseau A. « Cathodoluminescence imaging and spectroscopy on a single multiwall boron nitride nanotube ». *Chem. Phys. Lett.* 2007, 442, 4-6, 372.
- [52] Chopra N., Zettl A. « Measurement of the elastic modulus of a multi-wall boron nitride nanotube ». *Solid Stat. Comm.* 1998, 105(5), 297.
- [53] Paine R.T., Narula C.K. « Synthetic routes to BN ». *Chem. Rev.* 1990, 90, 73.
- [54] Hernandez E., Goze C., Bernier P., Rubio A. « Elastic properties of C and B<sub>x</sub>C<sub>y</sub>N<sub>z</sub> composite ». *Phys. Rev. Lett.* 1998, 80, 4502.
- [55] Choi S.R., Bansal N.T., Garg A. « Mechanical and Microstructural Characterization of Boron Nitride Nanotubes-Reinforced SOFC Seal Glass Composite ». *Ceram. Eng. Sci. Proc.* 2007, 26.
- [56] Bansal N.P., Hurst J.B., Choi S.R. « Boron-nitride reinforced glass composites » NASA/TM 2005, 213874.
- [57] Chen Y., Zou J., Campbell S.J., Le Caer G. « Boron nitride nanotubes: pronounced resistance to oxidation ». *Appl. Phys. Lett.* 2004, 84(13), 2430.
- [58] Yim W.M., Stofko E.J., Zanzucchi P.J., Pankove J.I., Etnenberg M., Gilbert S.L., *J. Appl. Phys.* 44, (1973) 292.
- [59] S. Loughin R.H. French, W.Y. Ching, Y.N. Xu, G.A. Slack, *Appl. Phys. Lett.* vol. 63 n°9 (1993) 1182.
- [60] M. Strassburg, J. Senawiratne, N. Dietz, U. Haboeck A. Hoffmann, V. Noveski, R. Dalmau, R. Schlessler, Z. Sitar, *J. Appl. Phys.* vol. 96 n°10 (2004), 5870.

- [61] R.D. Vispute, J. Narayan, J.D. Budai, *Thin Solid Films* 299 (1997) 94.
- [62] K.Tsubouchi, K. Sugai, N. Mikoshiba, *Proceedings of the IEEE Ultrasonics Symposium*(IEEE, New York, 1982) 340.
- [63] T. Kamiya, *Jpn J. Appl. Phys.* vol. 35 n°8 (1996) 4421.
- [64] C.M. Lueng, H.L.W. Chan, C. Surya, C.L. Choy, *J. Appl. Phys.* vol. 88 n°9 (2000) 5360.
- [65] Vurgaftman and J. R. Meyer, “Band parameters for nitrogen-containing semiconductors,” *Journal of Applied Physics*, vol. 94, no. 6, p. 3675, 2003.
- [66] M D. Lyutaya and T.S. BArtnitskaya, *Inorg. Mater.* 9, 1052 (1973).
- [67] B. Burgov, L.Daweritz, V. B. Gutan, G. Jungk, H.Neuman and H.Raidt, *Phys. Status Solidi AZ* 49, 629 (1978).
- [68] Hamdoune AEK. « Elaboration du nitrure de gallium ; Etude de ses propriétés et Applications ». Thèse de doctorat, Université de Tlemcen, 2006.
- [69] Martinez Guerrero, Esteban Elaboration en épitaxie par jets moléculaires des nitrures d'éléments III en phase cubique, Institut nationale des sciences appliquées Lyon, 2002.
- [70] Stéphanie Anceau, Etude des propriétés physiques des puits quantiques d'alliages quaternaires (Al,Ga,In)N pour la conception d'émetteurs ultraviolets, thèse de doctorat, Université Montpellier , 2004.
- [71] Fabrice Enjalbert, Etude des hétérostructures semi-conductrices III-nitrures et application au laser UV pompé par cathode à micropointes, thèse de Doctorat, de Université Joseph Fourier – Grenoble 1, 2004.
- [72] K. H. Ploog, O. Brandt, Doping of group III nitrides, *J. Vac. Sci. Technol. A* 16, 1609 (1998).
- [73] J. K. Sheu, G. C. Chi, The doping process and dopant characteristics of GaN, *J. Phys.: Condens. Matter* 14, R657 (2002).
- [74] B. P. Gunning, M. W. Moseley, D. D. Koleske, A. A. Allerman, S. R. Lee, *J. Cryst. Growth*, 2017, 464, 190.
- [75] R. Wentorf Jr. Synthesis of the Cubic Form of Boron Nitride *J. Chem. Phys.* 1961, 34, 809.
- [76] C.H. Wei, J.H. Edgar, *J. Crystal Growth* 217 (2000) 109.
- [77] K. Teles, J. Furthmu' ller, L.M.R. Scofaro, A. Tabata, J.R. Leite, F. Bechsedt, T. Frey, D.J. As, K. Lischka, *Physica E* 13 (2002) 1086.
- [78] C.H. Wei, Z.Y. Xie, J.H. Edgar, K.C. Zeng, J.Y. Lin, H.X. Jiang, C. Ignatiev, J. Chaudhuri, D.N. Braski, *MRS Int. J. Nitride Semicond. Res.* 4S1 (1999) G 3.79.

- [79] A. Ougazzaden, S. Gautier, C. Sartel, N. Maloufi, J. Martin, F. Jomard, J. Crystal Growth 298 (2007) 316.
- [80] T. Baghdadli et al. Electrical and structural characterizations of B GaN thin films by metal-organic vapor phase epitaxy. Phys. Status Sol. C, 6:S1029, 2009.
- [81] DESIGN AND FABRICATION OF BORON CONTAINING III-NITRIDES BASED HIGH ELECTRON MOBILITY TRANSISTORS, thèse de Ravindran, Vinod. Institut de technologie, Georgia, 2013.

## **Chapitre 2**

# **Luminescence des semiconducteurs et diodes électroluminescentes**



## 2.1 Introduction

Les LED à base de GaN sont de plus en plus utilisées depuis les années 90 dans plusieurs domaines, aujourd'hui elles font leur percée sur le marché de l'éclairage domestique et professionnel grâce à leurs performances. Le but de ce chapitre est de connaître les types et les caractéristiques des diodes électroluminescentes, leurs structures et leurs principes de fonctionnement, ainsi que leurs propriétés physico-optiques.

## 2.2 Historique

La première émission de lumière par un semi-conducteur est découverte en 1907 par Henery Joseph Round ; en 1929, le premier brevet sur ce phénomène est déposé par Russe Oleg Vladimirovich Losev. En 1954, plusieurs chercheurs s'intéressent aux jonctions utilisant les matériaux des groupes III-V ; une année après, en 1955, Rubin Braustein découvre l'émission infrarouge de l'arséniure de gallium (GaAs) et d'autres types de semiconducteurs. En 1961 [1], Robert Biard et Gary Pittman découvrent que l'arséniure de gallium (GaAs) émet de la lumière infrarouge lorsqu'un courant électrique est appliqué au semiconducteur [2].

En 1962, la première diode électroluminescente rouge d'alliage (GaAs et GaP) est développée par Nick Holonyak et S.F Bevacqua. Dans les années 1971-1972, les LED sont produites dans de nouvelles couleurs : vert, jaune, ... etc ; et leurs efficacités continuent à s'améliorer.

En 1990, des recherches dans la technologie des semiconducteurs permettent la création de la LED bleue par le japonais Shuji Nakamura [3] ; un peu plus tard, il conçoit une LED blanche. Cette innovation commence à être compétitive dans le domaine de l'éclairage.

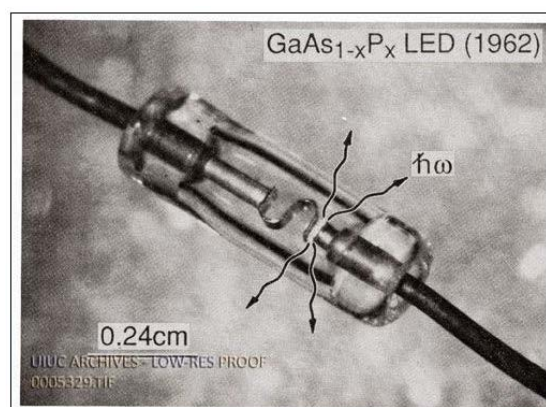


Figure 2.1 : Première LED réalisée (Holonyak & Bevacqua 1962) et photographie de Nick Holonyak Jr.

### 2.3 Electroluminescence

L'électroluminescence est l'illumination d'un matériau sous application d'une tension externe (champ électrique) ou d'un courant injecté ; ce phénomène est le résultat d'une recombinaison radiative. Dans les semiconducteurs à gap direct, les électrons et les trous excédentaires se recombinent et libèrent leur énergie sous forme de photons ; ceci se traduit par une émission de lumière [4].

### 2.4 Caractérisation de la luminescence dans les S-C [5]

Pour la luminescence d'un semiconducteur, le degré d'excitation est faible. Le taux total de génération de photons  $R_{tot}$  est exprimé en fonction du facteur  $m$  :

$$R_{tot} \equiv \frac{dn_{ph}}{dt} = R_{st}(\omega) - R_a(\omega) + R_{sp}(\omega) \quad (2.1)$$

$$R_{st} = Bn_{\omega}f_c(1 - f_v)\rho_t(\omega)$$

$$R_a = Bn_{\omega}f_v(1 - f_c)\rho_t(\omega)$$

$$R_{sp} = Bf_c(1 - f_v)\rho_t(\omega)$$

Taux de radiation cohérente :  $R_{coh} \equiv R_{st} - R_a$

$$R_{coh} = Bn_{\omega}f_c(1 - f_v)\rho_t(\omega) - Bn_{\omega}f_v(1 - f_c)\rho_t(\omega) = Bn_{\omega}(f_c - f_v)\rho_t(\omega) = -\alpha \cdot n_{\omega} \cdot v \quad (2.2)$$

$$R_{tot} = R_{coh} + R_{sp} = R_{coh}\left(1 + \frac{R_{sp}}{R_{coh}}\right)$$

$$\frac{R_{sp}}{R_{coh}} = \frac{Bf_c(1 - f_v)\rho_t(\omega)}{Bn_{\omega}(f_c - f_v)\rho_t(\omega)} = \frac{f_c(1 - f_v)}{n_{\omega}(f_c - f_v)} = \frac{m}{n_{\omega}}$$

$$\Rightarrow R_{tot} = -\alpha \cdot n_{\omega} \cdot v \left(1 + \frac{m}{n_{\omega}}\right)$$

$$R_{tot} = -\alpha v(n_{\omega} + m)$$

$$\text{Où } m = \frac{1}{1 - e^{(E_g - \Delta E_f)/KT}}$$

$$n_{\omega} = \frac{1}{e^{h\omega/kt} - 1}$$

$$\Rightarrow R_{tot} = \alpha v \left( \frac{1}{e^{(E_g - \Delta E_f)/KT} - 1} - n_{\omega} \right)$$

On peut étudier les caractéristiques spectrales de la luminescence dans les S-C par cette expression. Il suffit de faire apparaître la fréquence  $\omega$  dans les grandeurs où elle intervient telles que le coefficient d'absorption  $\alpha$ , en particulier.

Le coefficient d'absorption  $\alpha$ , représente le nombre possible de transitions qui peuvent avoir lieu entre les bandes à une fréquence donnée  $\omega$ .

Le facteur de Boltzmann représente le fait que les états pouvant donner lieu à ces transitions sont occupé par des électrons thermalisés en quasi équilibre (il caractérise la thermalisation).

Spectre de luminescence dans les S-C :

$$R_{tot}(\hbar\omega) = \alpha(\hbar\omega)v\left(\frac{1}{e^{(\hbar\omega - \Delta E_f)/KT} - 1} - n_\omega\right) \quad (2.3)$$

$\alpha(\hbar\omega)$  : Spectre d'absorption.

$V$  : Vitesse d'électrons dans les semiconducteurs.

- Un semiconducteur à l'équilibre ( $\Delta E_f = 0$ ) :  $n_\omega$  est donné par la distribution de Bose-Einstein. Le taux de génération de photons est nul : en l'absence d'excitation, le semiconducteur n'émet pas de lumière.

À l'équilibre thermique :

$$\Delta E_f = 0 \text{ et } n_\omega = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} \quad (2.4)$$

$$\Rightarrow R_{tot}(\hbar\omega) = 0$$

- Un semiconducteur faiblement excité si  $\Delta E_f$  est plus faible que le gap (loin de la condition d'inversion de population). Supposons que la distribution spectrale de photons est toujours proche de celle à l'équilibre et on l'assimilera à la distribution de Bose-Einstein. De même ; l'énergie du gap dans le semiconducteur est supérieure de deux ordres de grandeur à l'énergie thermique. Donc on peut négliger l'unité par rapport au facteur  $[\exp(\hbar\omega/k_B T)]$  et on obtient alors une expression simple du taux de radiation par luminescence dans les semiconducteurs.

$$e^{\frac{\hbar\omega - \Delta E_f}{KT}} \gg 1 \text{ et } e^{\frac{\hbar\omega}{KT}} \gg 1$$

$$R_{tot}(\hbar\omega) = \alpha(\hbar\omega)V\left[e^{-\frac{\hbar\omega}{KT}} \times e^{\frac{\Delta E_f}{KT}} - e^{-\frac{\hbar\omega}{KT}}\right] \quad (2.5)$$

$$R_{tot}(\hbar\omega) = \alpha(\hbar\omega) \times V \times e^{-\frac{\hbar\omega}{KT}} \left[e^{\frac{\Delta E_f}{KT}} - 1\right]$$

$\alpha(\hbar\omega)$  : Spectre d'absorption

$e^{-\frac{\hbar\omega}{KT}}$  : Thermalisation

$e^{\frac{\Delta E_f}{KT}}$  : Degré d'excitation

Le spectre de luminescence est donné par le spectre d'absorption multiplié par le facteur de Boltzmann  $\exp(-\hbar\omega/k_B T)$ .

Le spectre de luminescence (courbe verte en trait continu) est illustré dans la figure 2.2. Il présente un seuil à l'énergie du gap et une décroissance exponentielle dépendante de la température.

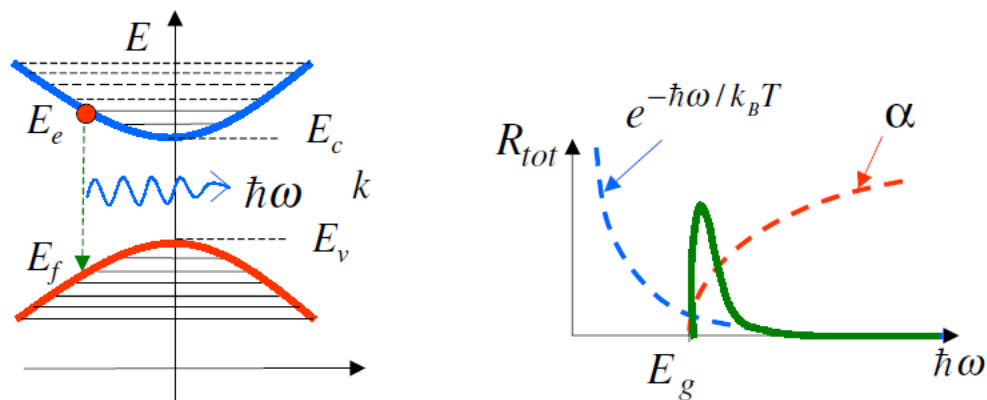


Figure 2.2 : Emission de photons et taux de radiation par luminescence dans un SC.

## 2.5 Etude des diodes électroluminescentes

### 2.5.1 LED de faible puissance

Depuis 1970, les LEDs de faible puissance sont présentes dans notre quotidien. Elles jouent le rôle de voyants lumineux sur divers appareils. Elles ne sont pas élaborées pour les flux lumineux sur divers appareils. Elles ne sont pas élaborées pour les puissances élevées et les flux lumineux pour les applications d'éclairage. La figure 2.3 représente le schéma d'une LED de faible puissance [6].

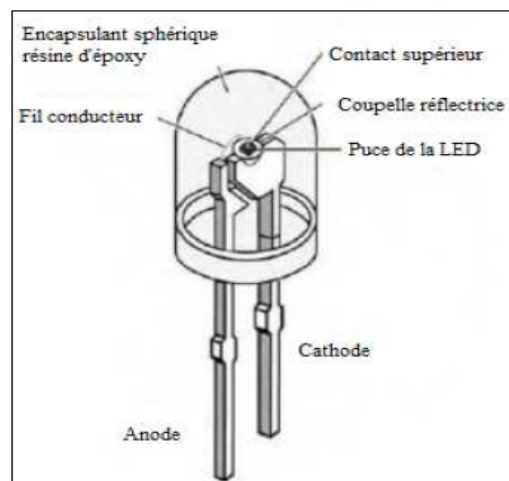


Figure 2.3 : Schéma d'une LED de faible puissance [6].

### 2.5.2 LED de forte puissance

Les applications actuelles des LEDs de forte puissance sont très répandues car elles trouvent un vaste domaine d'utilisation ; par exemple pour l'éclairage, on utilise des lampes à plusieurs LED de forte puissance.

Le principe de base de ces LEDs est pratiquement identique à celui des LEDs à faible puissance, la seule différence reste au niveau de la puce (prévoir un système pour évacuer la chaleur).

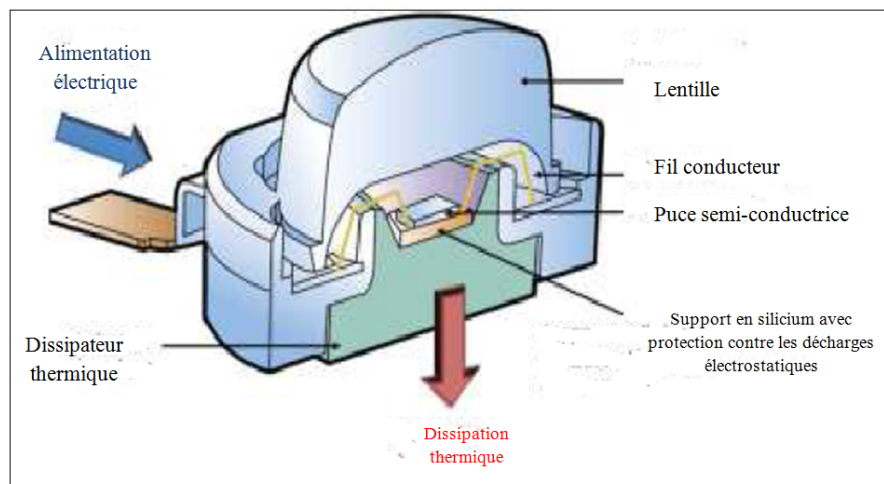


Figure 2.4 : Schéma d'une LED de forte puissance [7].

### 2.5.3 Fonctionnement d'une diode électroluminescente

Une diode électroluminescente (LED) est une diode à jonction PN ; des électrons sont injectés du côté (p), et des trous sont injectés du côté (n). Les porteurs minoritaires de chaque zone diffusent et se recombinent par transitions radiatives. Leur densité diminue donc en s'éloignant de la région de charge d'espace.

Les longueurs de diffusion  $L_n$  et  $L_p$  sont données en fonction des coefficients de diffusion  $D_n$  et  $D_p$  qui dépendent eux-mêmes des mobilités  $\mu_n$  et  $\mu_p$  des porteurs. Comme la mobilité des électrons est significativement plus grande que la mobilité des trous, la longueur de diffusion des électrons  $L_n$  dans la zone (p) est plus grande que la longueur de diffusion des trous  $L_p$  du côté (n).  $L_n$  est de l'ordre de quelques microns ; c'est alors du côté (p) que la zone sur laquelle les photons seront émis, et elle est la plus large. C'est la raison pour laquelle les DEL sont fabriquées avec la zone (p) proche de la surface émettrice. La structure de la diode électroluminescente est illustrée sur la figure 2.5.

$$L_n = \sqrt{D_n \tau_n} \tag{2.6}$$

$$L_p = \sqrt{D_p \tau_p} \tag{2.7}$$

$$D = \mu \frac{k_B T}{e} \text{ (la relation d'Einstein)} \tag{2.8}$$

$\mu_n \approx 20\mu_p, L_n = \text{qqques } \mu\text{m}$

Où  $D_n$  : Coefficient de diffusion des électrons.

$D_p$  : Coefficient de diffusion des trous

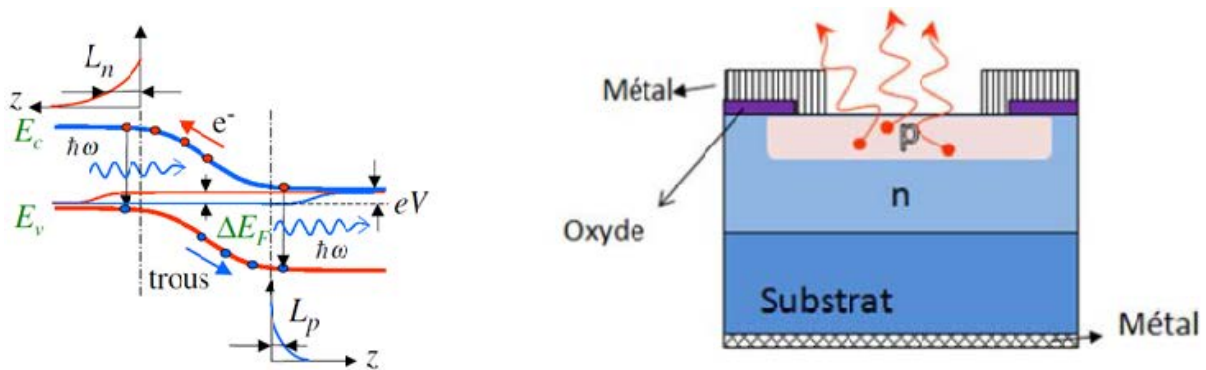


Figure 2.5 : Structure d'une LED.

### 2.5.4 Elaboration des LED

D'une manière générale ; on dépose une couche tampon sur le substrat, puis on dépose la couche active de GaN qui sera non intentionnellement dopée n. On dope alors cette dernière couche type p, avec un contrôle de la profondeur dopée. On obtient ainsi, une jonction p-n qui forme une diode électroluminescente.

Les figures 2.6 et 2.7 représentent deux exemples de LED, sur h-GaN et sur c-GaN (avec une coupe transversale à gauche et une vue de dessus à droite).

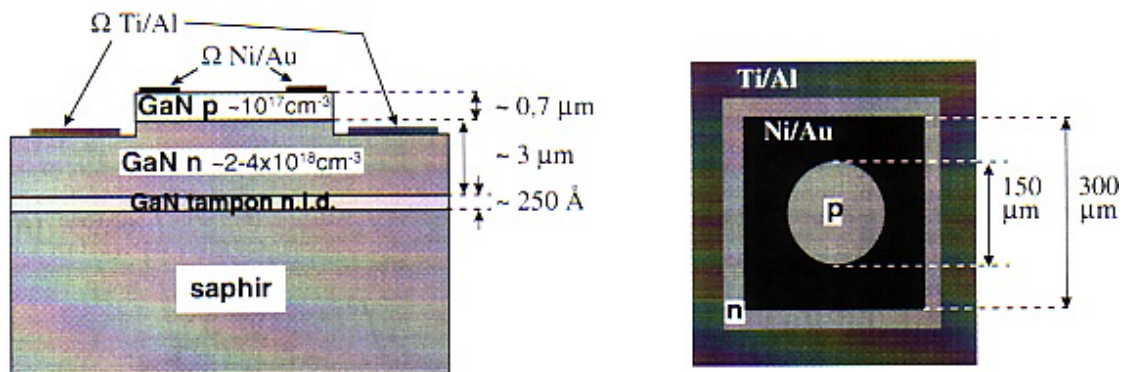


Figure 2.6 : Schéma de diodes électroluminescentes : jonctions p-n de h-GaN élaboré par EJM au CRHEA (Valbonne) [8].

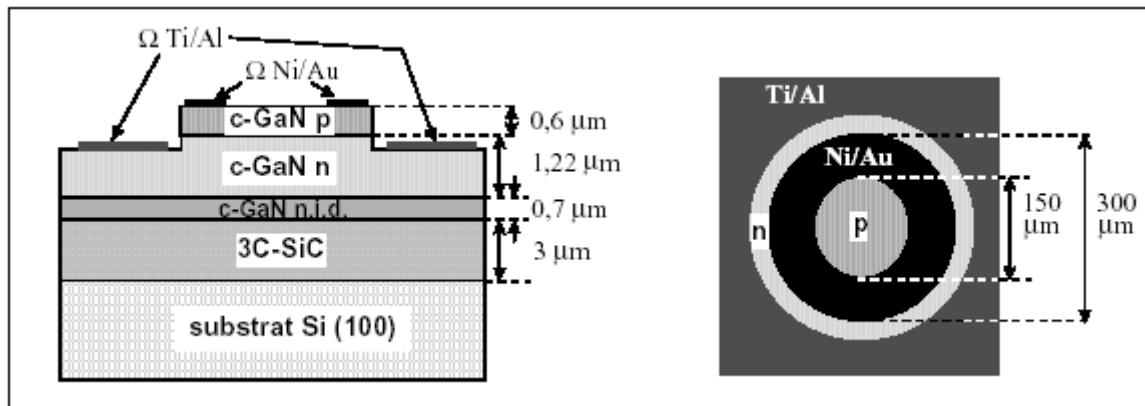


Figure 2.7 : Schéma de diodes électroluminescentes : jonctions p-n de c-GaN élaboré par EJM au CEA Grenoble [9].

### 2.5.5 LED de couleurs [10]

Depuis plusieurs années, les LED rouges à base d'alliage GaAlAs sont commercialisées avec une efficacité lumineuse de 20-30 lm.W<sup>-1</sup>.

Les LED vertes à base d'alliage AlInGaP sont aussi fabriquées, mais elles émettent dans le vert jaunâtre ( $\lambda = 564$  nm) au lieu du vert ( $\lambda = 510$  nm), elles possèdent un faible rendement quantique externe et une faible intensité.

Dans les années 90, les LED bleues à base de SiC sont commercialisées avec une brillance maximum de 0.02 Cd.

Pour avoir de la lumière blanche il faut assembler trois LED (rouge, verte, bleue) ou bien assembler une LED bleue ou une LED UV avec un matériau qui émet des photons d'énergie inférieure quand il est excité.

### 2.5.6 LED UV

L'ultraviolet couvre une large gamme spectrale qui s'étend depuis la limite du visible (400 nm) jusqu'à la frontière des rayons X de basse longueur d'onde (10 nm). Le spectre est divisé en quatre régions :

- UV A : pour les longueurs d'onde comprises entre 400 et 320 nm (de 3.1 à 3.87 eV)
- UV B : pour les longueurs d'onde comprises entre 320 et 280 nm (de 3.87 à 4.43 eV)
- UV C : pour les longueurs d'onde comprises entre 280 et 200 nm (de 4.43 à 6.20 eV)
- Ultraviolet lointain : pour les longueurs d'onde comprises entre 200 et 10 nm (de 6.2 à 12.4 eV).

Les diodes électroluminescentes à base de nitrures émettant dans l'ultraviolet existent depuis des années. Il est nécessaire d'utiliser Al(GaN) dans le puits quantique pour aller plus loin

dans l'ultraviolet. Aussi la réalisation de telles diodes dépend de la maîtrise du dopage des matériaux avec toutes les difficultés qu'il comporte. Quelques chercheurs ont réussi à fabriquer des diodes électroluminescentes émettant vers 275-285 nm utilisant AlGaIn comme puits quantique avec une concentration d'aluminium très élevée, ou un puits quantique de matériau quaternaire comme (Al, Ga, In)N dans une barrière AlGaIn. Récemment des diodes électroluminescentes à base d'AlGaIn émettant à 250 nm et à 265 nm ont été réalisées.

## 2.5.7 Différents types de LED

### 2.5.7.1 LED à homojonction

Les homojonctions sont constituées d'un même matériau mais de dopage différent pour former une jonction PN. On peut rappeler qu'un semiconducteur de type (p) est fabriqué en dopant un semiconducteur intrinsèque avec des impuretés de types accepteurs ; tandis qu'un type (n) est fabriqué en dopant avec des impuretés de types donneuses.

La recombinaison des porteurs est prépondérante dans la zone p : les trous ont une mobilité très inférieure à celle des électrons et se traduit par la présence d'un plus grand nombre d'électrons (porteurs minoritaires) dans la zone p que de trous (porteurs minoritaires) dans la zone n. La luminescence est donc plus importante du côté p, c'est la raison pour laquelle les LEDs sont fabriquées avec la zone p proche de la surface émettrice.

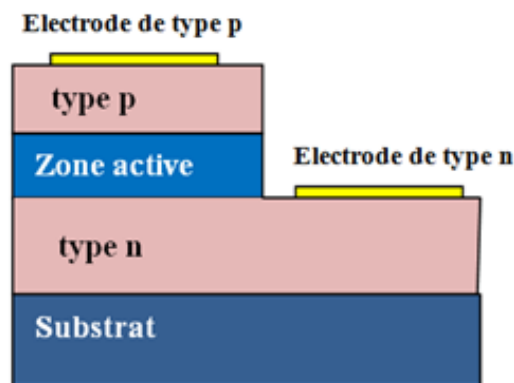


Figure 2.8 : Schéma de principe d'une LED à homojonction.

### 2.5.7.2 LED à simple hétérostructure (SH) [11,12]

Les chercheurs Koike et al. de la société "Toyoda Gosei" réalisent les premières LED bleues à simple hétérostructure (SH) (figure 2.9), dont la couche active est composée de GaN. Une jonction p-n simple serait constituée de couches de GaN (n-GaN et p-GaN).



Le GaN est incorporé comme dopant accepteur ; il est donc nécessaire de codoper 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 AlGaN dopée p, permet d'améliorer l'intensité lumineuse de 50m Cd à 0.5 Cd, en augmentant l'hétéro-barrière pour les électrons injectés.

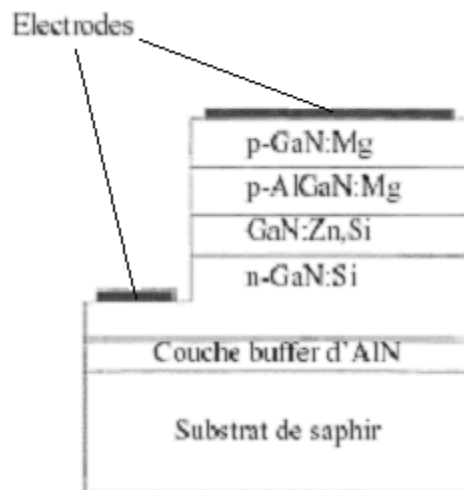


Figure 2.9 [10] : Structure de LED (SH) selon M. Koike.

### 2.5.7.3 LED à double hétérostructure (DH) [11]

L'hétérojonction c'est la juxtaposition de deux semiconducteurs de gaps différents. Dans le cas d'une hétérostructure simple (SH), une discontinuité de bande de conduction est appliquée à l'interface entre les deux matériaux. Les niveaux de Fermi s'alignent quand il y a contact entre les deux matériaux, ce qui permet la création d'une courbure des bandes de conduction et de valence ; cette courbure forme le puits de potentiel.

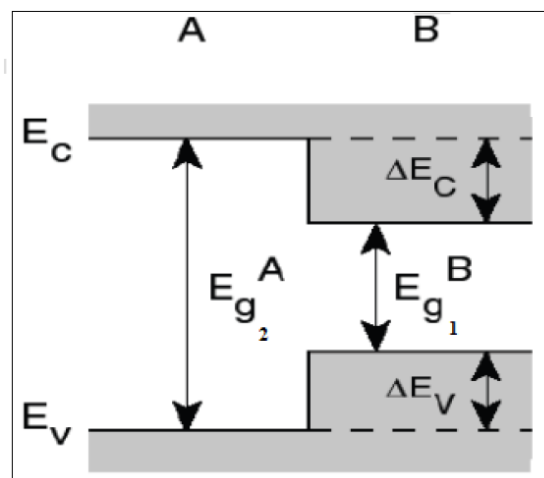


Figure 2.10 : Schéma de principe d'une LED à hétérojonction.

Les LED à double hétérostructures ont été réalisées par M. Koike et al. pour la firme "Toyota Gosei" dans le but d'améliorer les performances.

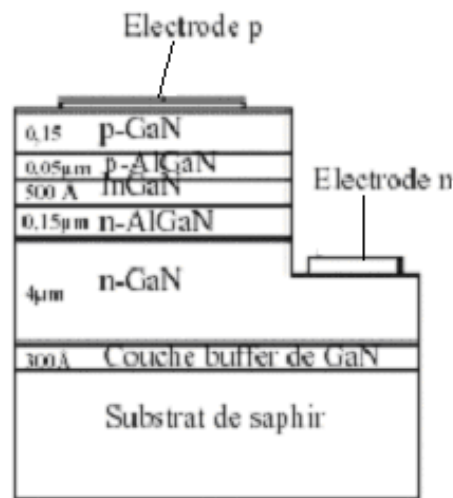


Figure 2.11 : Structure d'une DH selon S. Nakamura [10].

#### 2.5.7.4 LED à simple puits quantique (SQW)

Pour une couche active d'un matériau du type InGaN, le nombre des contraintes deviennent important lorsque l'épaisseur de la couche augmente, ceci est dû à la différence entre les paramètres de mailles du substrat et ceux de l'alliage InGaN. La figure 2.14 représente une structure possédant une couche active InGaN très fine (30 Å).

Si on veut obtenir une bonne qualité cristalline, on agit sur l'épaisseur de la couche InGaN, donc les contraintes élastiques diminuent et il n'y aurait pas de dislocations.

Nakamura et ses collaborateurs de la société Nichia ont pu réaliser des LED bleues et vertes en agissant sur le taux d'indium de la couche active des LED. Les compositions des couches actives des LED bleues et vertes sont respectivement  $\text{In}_{0,36}\text{Ga}_{0,64}\text{N}$  et  $\text{In}_{0,45}\text{Ga}_{0,55}\text{N}$ . Le substrat est retaillé à la même dimension que (DH) ( $350\mu\text{m} \times 350\mu\text{m}$ ).

Pour les applications industrielles et plus particulièrement pour les feux de signalisation, les LED vertes sont très utilisées car elles consomment moins d'énergie que les lampes classiques.

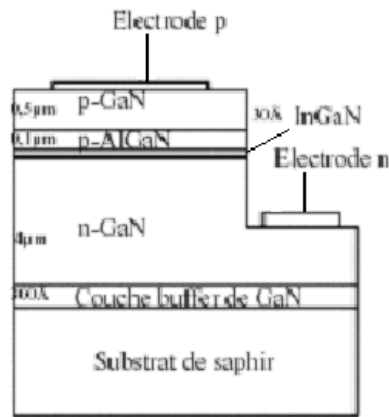


Figure 2.12 : Structure de LED InGaN (SQW), selon S. Nakamura [10].

Par la même société (Nichia), les LED (UV) SQW ayant une forte brillance ont été réalisées tout en diminuant le taux d'indium. Pour rendre plus intense l'émission de la couche active, une très faible quantité d'indium est toujours nécessaire, car la variation du taux d'indium agit sur les niveaux d'énergie des états quantiques de la couche des puits quantiques InGaN ; ces LED sont appelées LED à simple puits quantique à cause de ce phénomène.

### 2.5.7.5 LED à multiples puits quantiques (MQW)

La figure 2.13 représente une structure d'une LED bleue à multiples puits quantiques (MQW) réalisée par Koike et al. Pour "Toyoda Gosei".

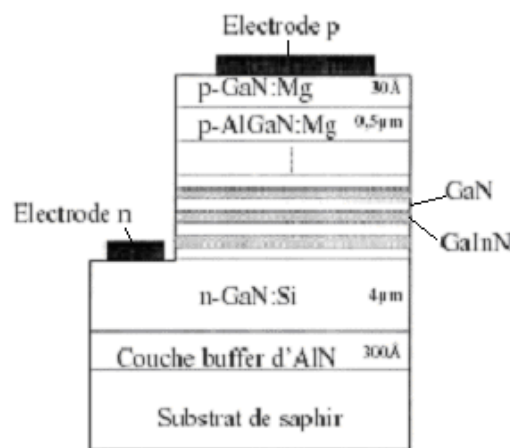


Figure 2.13 : Structure de LED InGaN (MQW), selon M. Koike [10].

Pour ce type de LED, la couche active est caractérisée d'un ensemble de six couches  $\text{In}_{0,08}\text{Ga}_{0,92}\text{N}$  ayant des épaisseurs très fines (100 Å à 30 Å), ceci influe sur la longueur d'onde

émise. Contrairement, si l'épaisseur des couches augmente, l'intensité lumineuse émise diminue considérablement.

Les épaisseurs les plus favorables des couches des LED à multiples puits quantiques sont de l'ordre de 70 Å pour la structure  $\text{In}_{0.08}\text{Ga}_{0.92}\text{N}$  ; par contre pour GaN non dopé, elles sont de l'ordre de 90 Å. Ainsi, les LED vertes réalisées par ce principe émettent des intensités lumineuse allant jusqu'à 10 Cd.

### 2.5.7.6 LED élaborée sur substrat SiC [11]

Bulman et d'autres chercheurs réalisent un autre type de LED utilisant le carbure de silicium (SiC) comme substrat à la place du saphir car SiC présente plusieurs avantages, il a une bonne conductivité électrique qui lui permet de réaliser des structures ayant un bon contact entre la couche active et le substrat. En le comparant au saphir, il permet aussi une meilleure dissipation de la chaleur lors du fonctionnement des dispositifs électroniques et optoélectroniques, vu que sa conductivité thermique est beaucoup plus élevée que celle du saphir.

Le désaccord de maille entre le GaN et SiC (de type 4H et 6H) n'est que de 3.5 % ; par contre pour, il est de 16% avec le saphir. Cet effet influe sur l'amélioration de la qualité des couches de GaN/SiC, ainsi la densité de défauts devient de l'ordre de  $10^8 \text{ cm}^{-2}$ , qui est nettement inférieure pour GaN sur saphir.

Les figures 2.14 a et b représentent deux types de LEDs ; la première LED avec une couche tampon (buffer) de AlN sur substrat SiC, avec un anneau de contact pour court-circuiter la couche isolante d'AlN (figure 2.14 a).

La deuxième LED à double hétérojonction (DH), mais la couche tampon d'AlN est remplacée par une couche tampon d'AlGaIn conductrice (figure 2.14 b).

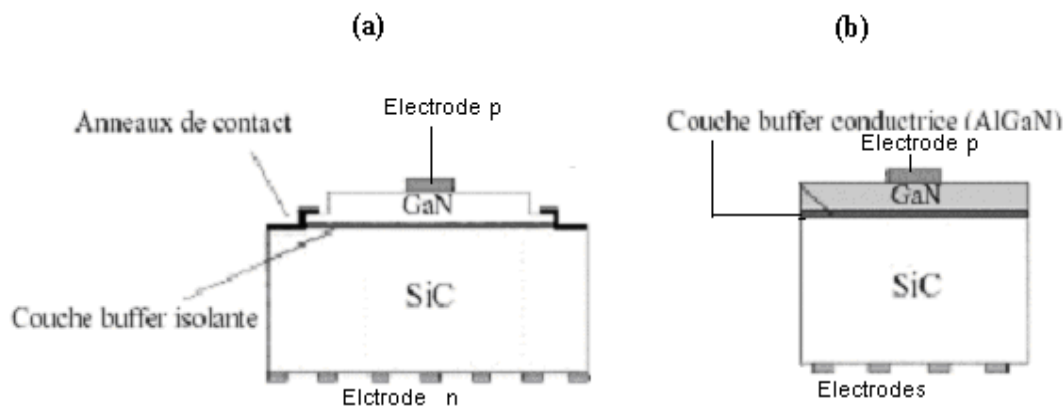
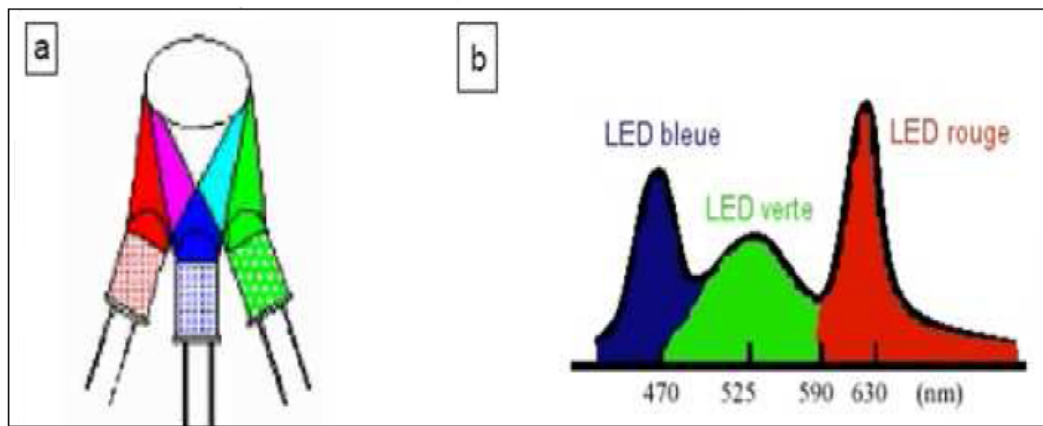


Figure 2.14 : Structure de LEDs : (a) SiC/GaN avec une couche tampon isolante, (b) SiC/GaN avec une couche tampon conductrice AlGaIn selon G. E. Bulman et al [10].

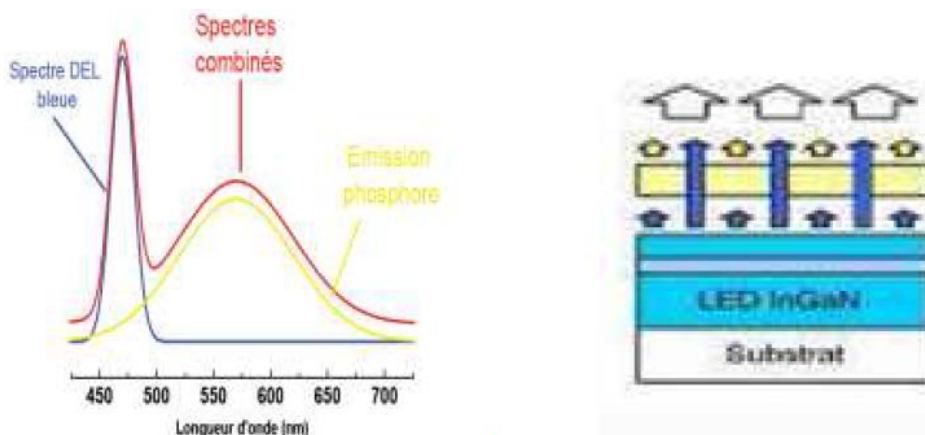
2.5.7.7 LED blanches

Les premières LED blanches sont peu à peu apparues sur le marché et les fabricants ont proposé des diodes plus puissantes. On a plusieurs méthodes pour avoir la lumière blanche.

La première méthode consiste à mélanger trois LED : Une LED rouge, une verte et une bleue. Pour avoir une meilleure lumière blanche, il faut que ces LED soient volumineuses, et nécessitent un circuit spéciale afin d’ajuster l’intensité de chaque couleur [11, 12].



La deuxième méthode consiste à utiliser une LED bleue recouverte par une couche de phosphore. Une partie de la radiation bleue de longueur d’onde courte est convertie en radiation de longueur d’onde longue jaune. La combinaison des rayonnements donne de la lumière blanche [12].



La troisième méthode consiste à utiliser une diode émettant une longueur d'onde courte (dans l'ultraviolet proche) combinée à un ou plusieurs phosphores qui transforme la lumière UV en visible. L'avantage de cette technique est de créer de la lumière blanche de bonne qualité, cette dernière permet de déposer des LED blanches sans lumière bleue sur le marché [12].

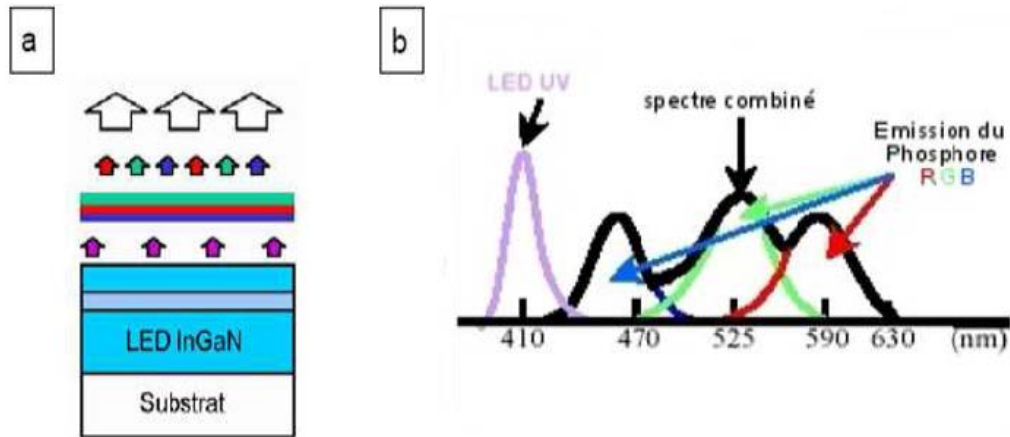


Figure 2.17 : LED ultraviolet multi phosphore [13].

Méthode	Avantages	Inconvénients
LED rouge + LED verte + LED bleue	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Bonne efficacité lumineuse</li> <li>- contrôle de la qualité de la lumière</li> <li>- la minimisation des pertes électriques</li> <li>- permet de faire varier le blanc suivant les désirs de l'utilisateur</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Taille du package plus importante</li> <li>- contrôle individuel de chaque LED</li> <li>- il faut inclure dans un unique boîtier trois puces possédant chacune leur propre valeur de courant d'alimentation</li> <li>- le vieillissement n'est pas identique, le rouge se détériore plus rapidement que le bleu ce qui provoque également une évolution de la qualité de la lumière</li> </ul>
LED bleue + Phosphore jaune	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Bonne efficacité lumineuse</li> <li>- produire de la lumière blanche à partir d'une seule LED bleue</li> <li>- Technologie maîtrisée et économique</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- La lumière blanche obtenue est dite « froide ». Pour obtenir un blanc plus chaud, une couche de phosphore qui produit un rayonnement rouge doit être ajoutée mais cette couche réduit fortement le rendement</li> </ul>

LED UV + phosphores	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Bonne uniformité</li> <li>- Bon indice de rendu de couleurs</li> <li>- large gamme de blancs</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Rendement lumineux inférieur à la méthode bleu + phosphore</li> <li>- l'émission d'UV détériore le package, ce qui réduit la durée de vie et opacifie le boîtier</li> <li>- combiner la fabrication de LED avec celle de phosphore</li> </ul>
---------------------------	--	--

Tableau 2.1 : Avantages et inconvénients des différentes méthodes d'obtention de la lumière blanche [1].

## 2.6 Propriétés des diodes électroluminescentes

### 2.6.1 Propriétés physiques

Le gap est la différence entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence ; pour les matériaux semiconducteurs le gap conditionne un bon nombre de propriétés optiques ou électroniques.

Pour les matériaux à gap direct : le haut de la bande de valence et le bas de la bande de conduction se trouvent dans le même vecteur d'onde  $k$  et la transition se fait verticalement (se situe à la valeur voisine du vecteur d'onde  $k$  sur le diagramme  $E(k)$ ).

Pour les matériaux à gap indirect : le haut de la bande de valence et le bas de la bande de conduction se situent à des valeurs distinctes du vecteur d'onde  $k$  sur le diagramme  $E(k)$ .

On préfère les matériaux à gap direct pour les applications d'émetteurs de lumière, où les recombinaisons radiatives des porteurs sont plus importantes [16].

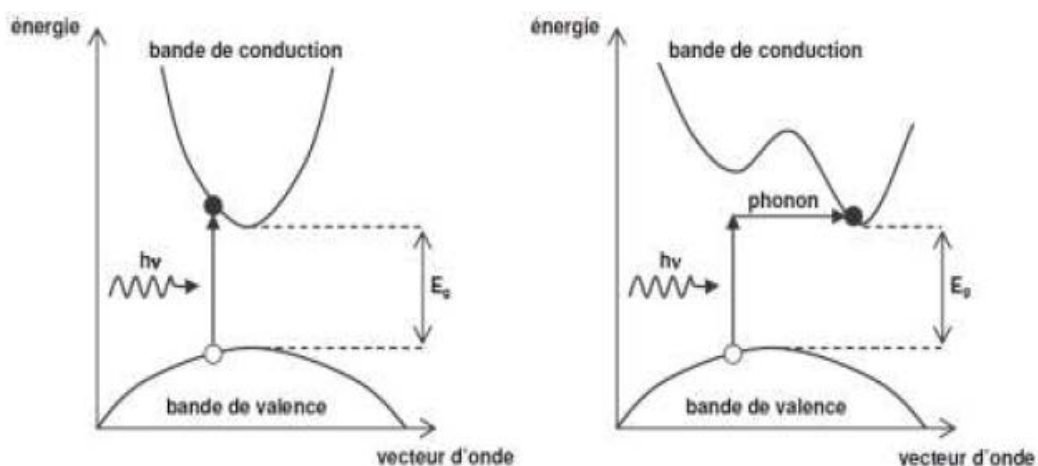


Figure 2.18 : Structure de bande d'un semiconducteur à gap direct et indirect [16].

### 2.6.2 Propriétés électriques

Une diode électroluminescente est 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 (2.9) [19].

$$I = eA \left[ \sqrt{\frac{D_p}{\tau_p}} N_A + \sqrt{\frac{D_n}{\tau_n}} N_D \right] e^{\frac{e(V-V_D)}{K_B T}} \quad (2.9)$$

Où :

$D_n$  et  $D_p$  : constantes de diffusion des électrons et des trous

$\tau_n$  et  $\tau_p$  : temps de vie de ces porteurs minoritaires

$N_D$  : concentration de donneurs

$N_A$  : concentration d'accepteurs

Le terme exponentiel montre une augmentation brusque du courant lorsque la tension  $V_D$  est atteinte (tension de seuil : tension à partir de laquelle des photons sont émis).

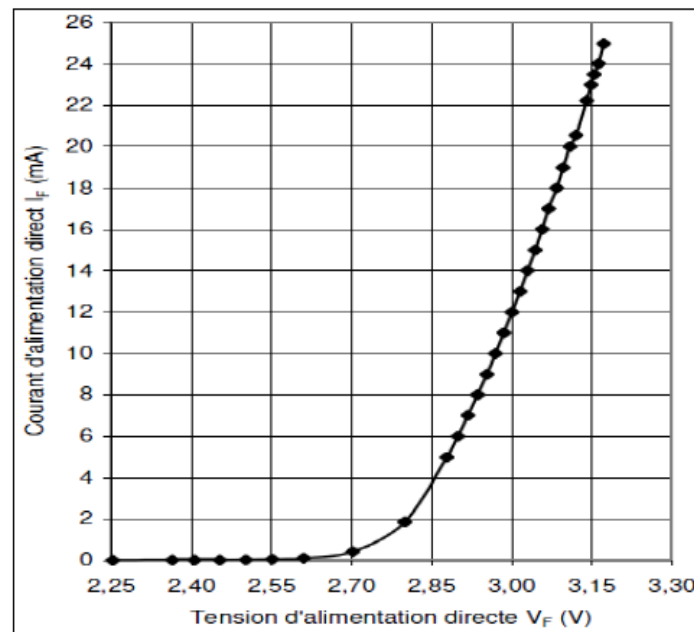


Figure 2.19 : Caractéristique courant-tension d'une LED [20].

### 2.6.3 Recombinaisons radiatives

L'énergie de recombinaison d'un électron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence est libérée sous forme de photon.



### 2.6.3.1 Recombinaisons bande à bande

Elle se fait entre un électron de la bande de conduction et un trou de la bande de valence, entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction. La forme du spectre émis suit la relation [21] :

$$I(h\nu) \propto \nu^2 \times (h\nu - E_g)^{1/2} \times \exp[-(h\nu - E_g)/k_B T] \quad (2.10)$$

T : température des porteurs, elle peut être supérieure à celle du réseau et croît avec l'intensité d'excitation.

$h\nu$  : énergie des photons émis.

$E_g$  : énergie de bande interdite.

$k_B$  : constante de Boltzmann.

La forme spectrale de la recombinaison bande à bande est donc caractérisée par :

- ✓ Un côté basse énergie qui croît comme  $(h\nu - E_g)^{1/2}$ .
- ✓ Un côté haute énergie qui décroît comme  $\exp[-(h\nu - E_g)/k_B T]$ .
- ✓ Un maximum situé à  $E_g + k_B T/2$ .
- ✓ Une largeur à mi-hauteur  $\Delta E = 1.75 k_B T$

### 2.6.3.2 Recombinaisons par excitons libres [22]

Un électron et un trou peuvent rester liés par attraction Coulombienne, pour former un exciton libre ayant la possibilité de se mouvoir dans le cristal sans participer à la conduction électrique.

Les solutions de l'équation de Schrödinger, pour une paire électron-trou en interaction coulombienne, fournissent les états d'énergie stables de l'exciton, avec le sommet de la bande de conduction comme origine des énergies [22] :

$$E_{ix,n} = -m_r^* q^4 / [(4\pi\epsilon_0 \epsilon_r)^2 \times 2\hbar^2 n^2] = -13.6 \times m_r^* / (m_0 \times \epsilon_r^2 \times n^2) (eV) \quad (2.11)$$

$\epsilon_0$  : la permittivité statique du matériau.

n : un entier  $\geq 1$ .

$m_r^*$  : La masse effective réduite de la paire électron-trou

### 2.6.3.3 Emission spontanée

C'est l'émission de lumière par la transition des électrons d'un niveau énergétique supérieur  $E_2$  à un autre niveau  $E_1$  [17]. Autrement dit les électrons qui se trouvent dans la bande de conduction, redescendent dans la bande de valence de manière spontanée et libèrent une énergie (égale à l'énergie du gap) émise sous forme de photon.

L'émission spontanée joue un rôle important dans les dispositifs de génération de lumière (diode électroluminescente).

Le taux d'émission spontanée est donné par :

$$R_{sp} = B \times f_c \times (1-f_v) \times \rho_t(\omega) \quad (2.12)$$

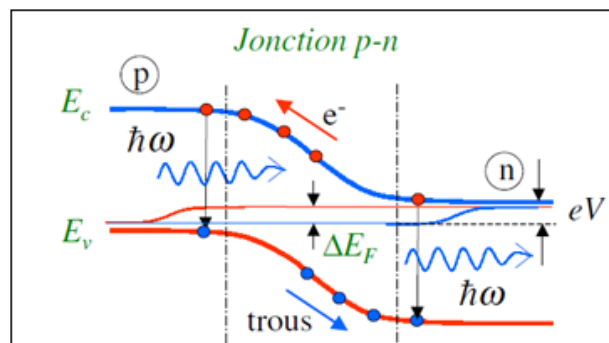


Figure 2.20 : Emission spontanée [5].

### 2.6.3.4 Emission stimulée

Les photons émis sont cohérents c'est-à-dire un électron désexcité de manière active par passage d'un photon d'énergie égale à l'énergie de transition. L'électron se désexcite et émet un photon identique au photon incident.

L'émission stimulée est la base du fonctionnement de diode Laser.

Le taux d'émission stimulé est donné par l'expression suivante :

$$R_{st} = B \times n_\omega \times f_c \times (1-f_v) \times \rho_t(\omega) \quad (2.12)$$

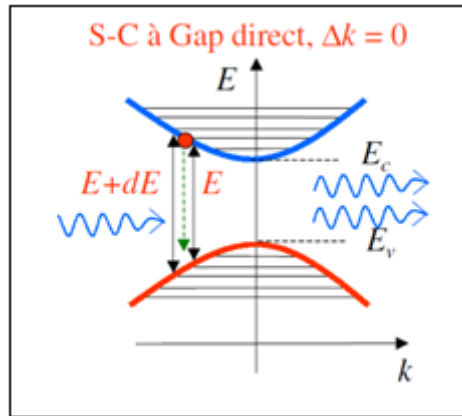


Figure 2.21 : Emission stimulée dans un SC à gap direct [5].

## 2.6.4 Recombinaisons non radiatives

### 2.6.4.1 Recombinaison de type Shockley-Read -Hall (SRH) [18]

C'est le mécanisme principal dans la plupart des semiconducteurs. La recombinaison se fait en deux étapes, par l'intermédiaire d'un centre recombinant qui est un défaut ou une impureté qui introduit un niveau profond  $E_p$  dans la bande interdite (figure 2.22 b).

Les quatre étapes possibles dans ce processus sont :

- La capture d'un électron par un niveau piège (passage de l'électron de  $E_c$  vers  $E_p$ )
- L'émission d'un électron à partir d'un niveau piège (passage de l'électron de  $E_p$  vers  $E_c$ )
- L'émission d'un trou à partir d'un niveau piège (passage de l'électron de  $E_v$  vers  $E_p$ )
- La capture d'un trou par un niveau piège (passage de l'électron de  $E_p$  vers  $E_v$ )

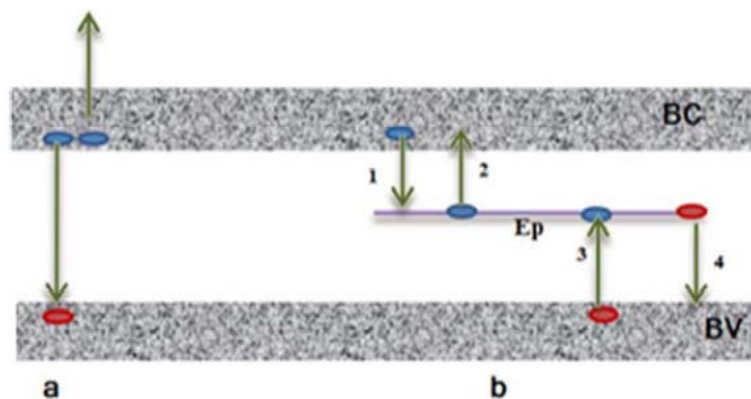


Figure 2.22 : Les types de recombinaisons non radiatives : a-recombinaison Auger, b-recombinaison de type Hall Shockley Read.

## 2.6.4.2 Recombinaisons Auger

### 2.4.4.2.1 Premier mécanisme

Un électron peut céder son énergie à des phonons du réseau, il descend par cascade de transitions intermédiaires avec les niveaux électroniques profonds (collisions photons-réseau cristallin) [5]. Quand on a un semiconducteur de gap 1 eV, l'électron va céder son énergie à 30-40 phonons ; et les transitions se produisent sans émission de photons. C'est le premier mécanisme de recombinaison non radiative.

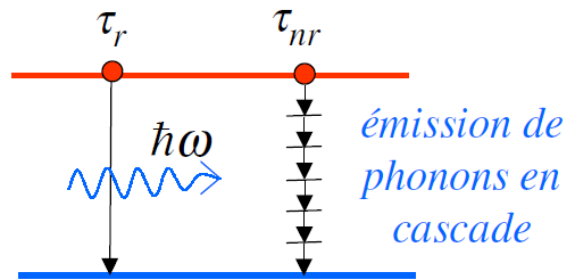


Figure 2.23 : Recombinaison par phonons.

### 2.4.4.2.2 Deuxième mécanisme

C'est le mécanisme le plus important de recombinaison non radiative responsable de limitation de rendement des semiconducteurs et des LED, il s'agit des recombinaisons Auger [5].

L'électron dans la bande de conduction donne son énergie à un autre électron, ce dernier monte dans la bande de conduction, puis il est très vite thermalisé ( $10^{-13}$  sec) et il va descendre en cascade. Aucun photon n'est émis, parce que l'énergie est perdue sous forme de phonons (Figure 2.24 a).

La figure 2.24 b représente le mécanisme avec un électron Auger dans la bande de valence ; l'électron donne son énergie à un trou (l'électron qui descend est vu comme un trou), il donne une énergie positive au trou qui va monter par cascade de phonons.

Le premier effet « **Auger eet** » : recombinaison électron-trou par l'intermédiaire d'un électron Auger.

Le second effet « **Auger ett** » : recombinaison électron-trou par l'intermédiaire d'un trou Auger

Les lettres du milieu e et t dans **eet** et **ett**, représentent la particule Auger.

Ces figures représentent les deux mécanismes de recombinaison Auger dans une jonction p-n polarisée. Comme le mécanisme eet fait intervenir deux électrons simultanément, sa

probabilité est proportionnelle au carré de la densité électronique, soit  $n^2$ . Ce mécanisme affecte donc plus particulièrement les recombinaisons qui se font en région de type n.

De même le mécanisme Auger ett, faisant intervenir deux trous simultanément, est proportionnel au carré de la densité de trous, soit  $p^2$ . Il affecte donc les recombinaisons du côté p et est négligeable du côté n.

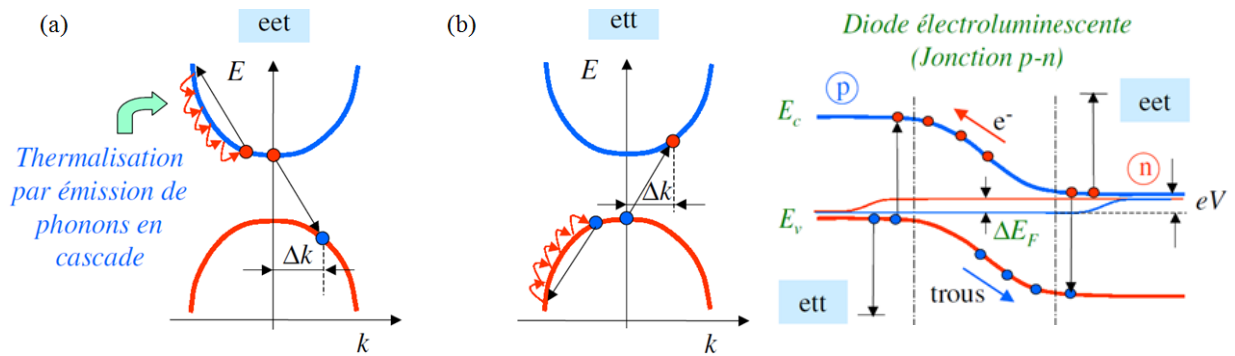


Figure 2.24 : Recombinaisons Auger dans une jonction p-n polarisée.

## 2.5 Rendements

### 2.5.1 Rendement quantique interne [5]

Le rendement quantique interne est défini comme étant le rapport du nombre de recombinaisons radiatives sur le nombre total de recombinaisons  $R_r / (R_r + R_{nr})$ .

$$\eta_{int} = \frac{R_r}{R_r + R_{nr}} \quad (2.13)$$

$$\eta_{int} = \frac{\frac{1}{\tau_r}}{\frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{\tau_{nr}}}$$

$$\eta_{int} = \frac{1}{1 + \frac{\tau_r}{\tau_{nr}}}$$

Où  $R_r$  : recombinaison radiative

$R_{nr}$  : recombinaison non radiative

### 2.5.2 Rendement global

Le rendement global d'une LED est le rapport de la puissance lumineuse émise sur la puissance électrique consommée.

La puissance électrique est donnée par l'expression suivante :

$$P_{\text{élect}} = V \times I \tag{2.14}$$

$$\text{où } I = I_s \left( e^{\frac{eV}{kT}} - 1 \right) \tag{2.15}$$

I : est fourni par la réponse en courant de la jonction p-n.

La puissance lumineuse émise est proportionnelle au courant.

La puissance électrique consommée est le produit de la tension appliquée  $V_a$  multipliée par la charge de l'électron (notée e ou q), multipliée par le courant traversant la jonction (le courant étant le nombre d'électrons passant la jonction par seconde).

Le rendement global d'une DEL est donc donné par l'expression suivante :

$$\eta = \frac{\text{Puiss. lumineuse}}{\text{Puiss. électrique}} = \frac{\hbar\omega \cdot \text{Nbre de photons émis/sec}}{eV_a \cdot \text{Nbre d'électr. passant la jonc. /sec}} \tag{2.16}$$

En introduisant le nombre de photons créés, en le multipliant au numérateur et au dénominateur, on trouve le rendement interne qui n'est que le rapport du nombre de photons créés sur le nombre d'électrons passant dans la jonction (ce dernier étant le nombre de paires électron-trou créés). Le rendement optique est le rapport entre le nombre de photons émis et le nombre de photons créés il limite l'efficacité d'une LED.

$$\eta = \frac{\hbar\omega}{eV_a} \times \frac{\text{Nbre de photons émis/sec}}{\text{Nbre de photons créés/sec}} \times \frac{\text{Nbre de photons créés/sec}}{\text{Nbre d'électr. passant la jonct. /sec}} \tag{2.17}$$

L'expression du rendement d'une LED est :

$$\eta = \frac{\hbar\omega}{eV_a} \times \eta_{\text{opt}} \times \eta_{\text{int}} \tag{2.18}$$

### **2.6 Couleur de la lumière émise**

Les diodes électroluminescentes à base de semiconducteurs, émettent dans la gamme infrarouge et ultraviolette et dans le visible.

Le tableau suivant représente la tension de seuil et la longueur d'onde de la lumière émise et le semiconducteur utilisé.

Couleur	$\lambda$ (nm)	Tension de seuil (V)	Semi-conducteurs
Infrarouge	$\lambda > 760$	$\Delta V < 1.63$	arséniure de gallium-aluminium (AlGaAs)
Rouge	$610 < \lambda < 760$	$1.63 < \Delta V < 2.03$	arséniure de gallium-aluminium (AlGaAs) phospho-arséniure de gallium (GaAsP)
Orange	$590 < \lambda < 610$	$2.03 < \Delta V < 2.10$	phospho-arséniure de gallium (GaAsP)
Jaune	$570 < \lambda < 590$	$2.10 < \Delta V < 2.18$	phospho-arséniure de gallium (GaAsP)
Vert	$500 < \lambda < 570$	$2.18 < \Delta V < 2.48$	nitride de gallium/indium (InGaN) phosphure de gallium (GaP)
Bleu	$450 < \lambda < 500$	$2.48 < \Delta V < 2.76$	séléniure de zinc (ZnSe) nitride de gallium/indium (InGaN) carbure de silicium (SiC)
Violet	$400 < \lambda < 450$	$2.76 < \Delta V < 3.1$	nitride de gallium/indium (InGaN)
Ultraviolet	$\lambda < 400$	$\Delta V > 3.1$	diamant (C) nitride d'aluminium (AlN) nitride d'aluminium/gallium (AlGaN) nitride de gallium (GaN)

Tableau 2.2 : Différents SC, leurs longueurs d'onde et leurs couleurs émises.

## 2.7 Applications des LED

Avec l'évolution technologique, l'utilisation des LED a connu un progrès considérable. On les trouve plus particulièrement :

- Dans les télécommandes, pour transmettre des données.
- Dans la fabrication des écrans de grande taille à LED.
- Dans le secteur de la santé et en biologie, elles trouvent aussi leur place : (LED UV utilisées pour la polymérisation des composites pour réparer les dents, l'intégration de ce type de LED dans les microscopes électroniques pour l'observation des cellules biologiques.

- En télémétrie (émetteur et récepteur ultrasonique).

## **2.8 Avantages et inconvénients**

### **2.8.1 Avantages**

Par comparaison avec les ampoules ordinaires, les LED présentent assez d'avantages :

- Dans la fabrication des circuits électroniques, on peut les monter sans aucune difficulté.
- Faible consommation.
- Durée de vie beaucoup plus longue.
- Fonctionnement en très basse tension.
- En commutation, elles s'allument et s'éteignent en un temps très court (transmission des signaux).
- Elles sont robustes et résistantes (chocs, vibration mécanique).
- Leur taille assez réduite permet de réaliser des sources de lumière ayant un bon rendement en assemblant plusieurs LED.

### **2.8.2 Inconvénients**

Malgré tous les avantages caractérisant les LED, elles présentent certains inconvénients :

- Comme la LED est composée de semiconducteurs, plus qu'elle chauffe plus sa tension directe de jonction décroît ; cet effet affecte son rendement lumineux qui se dégrade. Cela est la cause d'une mauvaise fiabilité de l'appareil utilisant ce type de composants si une mise en œuvre thermique n'est pas prévue.
- Répartition non uniforme de l'énergie spectrale des LED blanches (entre 380 et 780 nm).

## **2.9 Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons fait une étude théorique sur les types des diodes électroluminescentes : leurs structures, leur principe de fonctionnement et leurs propriétés. Nous avons aussi passé en revue les mécanismes de recombinaisons radiatives et non radiatives, ainsi que les différents rendements. Enfin, nous avons donné leurs applications, leurs avantages et leurs inconvénients.



**Références**

- [1] G. Zissis « Diode électroluminescente pour éclairage », cahiers innovation IN-18 technique de l'ingénieur, pp.1-13, 2011.
- [2] G.Zissis « Diode électroluminescente blanche et éclairage général », réseau ecrin, revue trimestrielle N°6, pp.1-8, 2007.
- [3] Comité d'Experts Spécialisés (CES), rapport d'expertise collective. « Effets sanitaires des systèmes d'éclairage utilisant des diodes électroluminescentes (LED) », Anses Saisine N° 0408, pp.40-67, 183-215, 2010.
- [4] Hsien.Yu Liao « Fabrication and Characterization of Micro-membraneGaNLight Emitting Diodes ». King Abdullah University of Science and Technology Thuwal, Kingdom of Saudi Arabia, 2015.
- [5] A. Hamdoune « opto-électronique cours, université Abou Bekr Belkaid ».
- [6] R. Baillot, thèse de doctorat « Méthodologie d'analyse de défaillance pour l'évaluation de la fiabilité de diodes électroluminescente GaN », Université de Bordeaux, 2011.
- [7] [http://www.philipslumileds.com/pdfs/PG01\\_KO.PDF](http://www.philipslumileds.com/pdfs/PG01_KO.PDF).
- [8] Ministère de l'économie française «Etude générique sur les technologies optoélectroniques». juillet 2002.
- [9] Philippe Agnès «Caractérisation électrique et optique du nitrure de gallium hexagonal et cubique en vue de l'obtention d'émetteurs bleus», thèse à l'INSA, Lyon 1999.
- [10] Annaïg Denis «Elaboration, cristallogenèse et caractérisations physico-chimiques des nitrures des éléments de la colonne IIIA et en particulier de GaN», Université Bordeaux I, octobre 2003.
- [11] Hamdoune AEK. « Elaboration du nitrure de gallium ; Etude de ses propriétés et Applications ». Thèse de doctorat, Université de Tlemcen, 2006.
- [12] Bouaraba F. « Etude d'une LED à base d'InGaN pour l'émission de la lumière blanche ». thèse de magister, Université de Tizi-Ouzou, 2012.
- [13] L.Massol. « LEDs blanches les différentes technologies », Led Engineering Développement, 2006.
- [14] S.Nakamura, G. Fasol. « The blue laser diode » édition Springer, 1997.
- [15] A. Dussaigne, thèse de doctorat. « Diodes électroluminescentes blanches monolithiques », université de Nice-Sophia Antipolis, 2005.
- [16] C. Ngo, H. Ngo, livre, « Les semi-conducteurs de l'électrons aux dispositifs » Dunod, Paris, pp, 94-97, 179-184, 2003.

- [17] Emission de lumière par une couche mince organique : les OLEDs (Organic Light Emitting Diodes) Prof. Emérite René WINAND (ICME 1954) Conférence Delta 30 , septembre 2008.
- [18] REBIAI. B. « opto-électronique cours, université Saida ».
- [19] E. Fred Schubert, Livre, « Light emitting diodes » second edition renselaer polytechnic institute. Troy, New York, pp, 59-84, 222-236, 2006.
- [20] N. Pousset, B. Rougié, S. Aubert, A. Razet, manuscrit, « Colorimétrie des LED incertitude et influence du courant électrique », Revue française de métrologie n° 20, Vol 4, 2009.
- [21] C. Charreau «Principes de la photoluminescence dans les composés et alliages III-V », chap. III, p. 21-37, 1985.
- [22] Timothy H. Gfroerer «Photoluminescence in Analysis of Surfaces and Interfaces», in Encyclopedia of Analytical Chemistry, R.A. Meyers (Ed.), p. 9209-9231, 2000.

# **Chapitre 3**

## **Résultats et discussion**

### 3.1 Introduction

Ce chapitre a pour objectif de simuler et optimiser une diode électroluminescente à puits quantique GaN, B GaN émettant dans l'ultraviolet. Tout d'abord nous présentons l'outil de simulation utilisé TCAD SILVACO, ensuite nous regroupons et discutons les résultats obtenus.

### 3.2 Présentation du logiciel SILVACO

SILVACO est une société Américaine, ayant son siège à Santa Clara en Californie ; cette société fournit des logiciels de simulation par éléments finis et de conception assistée par ordinateur.

Les simulateurs TCAD-SILVACO sont conçus pour simuler et modéliser des dispositifs électroniques avant leur fabrication [1, 2]. Ces logiciels sont des outils de simulation qui permettent de faire la modélisation en microélectronique et d'envisager le comportement du dispositif. Ils utilisent des méthodes très efficaces lors du maillage du dispositif à semi-conducteurs qui permettent d'aboutir à une optimisation des solutions linéaires qui sont compliquées à calculer.

Ces logiciels permettent l'amélioration des performances du dispositif à fabriquer, de réduire le coût du développement et de fabrication [3, 2].

Ces simulateurs comprennent des modules tels que Athena et Atlas qui sont très fiables pour les utilisateurs industriels.

### 3.3 Fonctionnement du simulateur TCAD-SILVACO

#### 3.3.1 Equations de base utilisées

Le simulateur TCAD-SILVACO est basé sur la résolution simultanée de l'équation de Poisson et les équations de continuité. Les équations calculent la concentration des électrons et des trous, et la valeur du potentiel électrostatique [4].

##### 3.3.1.1 Equation de Poisson

L'équation de Poisson relie les variations du potentiel électrostatique et les densités de charge d'espace.

$$\varepsilon \Delta V = -q (p - n + N_D^- - N_D^+) \quad (3.1)$$

Où :

$\varepsilon$  : la constante diélectrique

$V$  : le potentiel

$\Delta V$  : le Laplacien du potentiel

$q$  : la charge élémentaire d'électrons

$N_D^-$  et  $N_D^+$  : les concentrations des dopants donneurs et accepteurs ionisées

$n$  et  $p$  sont les densités des porteurs.

### 3.3.1.2 Equations de continuité

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

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G_n - U_n + \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{j}_n \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G_p - U_p + \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{j}_p \quad (3.3)$$

Où :

$n$  et  $p$  sont la concentration en électrons et en trous

$\vec{j}_n$  et  $\vec{j}_p$  sont les densités de courant d'électrons et de trous

$q$  est la charge de l'électron

$G_n$  et  $G_p$  sont les taux de génération d'électrons et de trous

$U_n$  et  $U_p$  sont les taux de recombinaison pour les électrons et les trous.

### 3.3.2 Modules et modèles utilisés

#### 3.3.2.1 Module ATLAS

ATLAS est un simulateur de dispositif 2D et 3D. A l'aide de ce simulateur on peut avoir une idée sur le comportement électrique d'une structure à semi-conducteur, de même il donne un aperçu sur les mécanismes physiques internes qui s'associent au fonctionnement du matériau semi-conducteur.

Deux types de fichiers d'entrée sont utilisés pour ATLAS :

- Un fichier texte qui contient les commandes.
- Un fichier définissant la structure à simuler.

Pour la sortie trois fichiers sont produits :

- Un fichier qui sert à stocker les grandeurs électriques (courant et tension) permettant l'analyse du dispositif.
- Un fichier d'exécution fournissant les messages d'erreur au cours de la simulation.
- Un fichier stockant les données 2D et 3D de la simulation.

### 3.3.2.2 Module DECKBUILD

C'est un outil qui permet la déclaration et la définition du programme de simulation en utilisant des commandes spécifiques. Ce simulateur peut être utilisé avec d'autres logiciels tels que : ATLAS, ATHENA,...etc.

A l'aide de ce simulateur on peut afficher lors de la simulation plusieurs paramètres électriques et technologiques caractérisant le dispositif semi-conducteur (courant, tension de seuil, concentration des porteurs, profondeur de la jonction...).

A l'aide d'une fenêtre d'information dite « Output Window », on peut afficher tous les résultats du programme et faire certaines corrections si des erreurs ont été produites lors de la programmation.

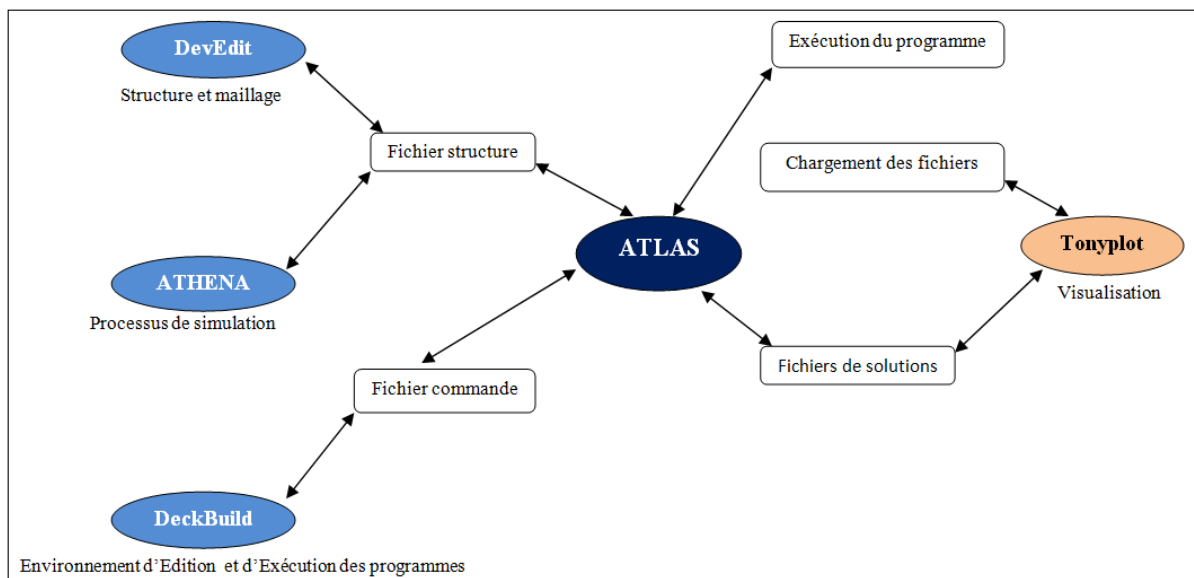


Figure 3.1 : Modules utilisés dans la simulation par TCAD SILVACO [5].

La figure (3.2) représente les groupes de commandes utilisés par ATLAS [6].

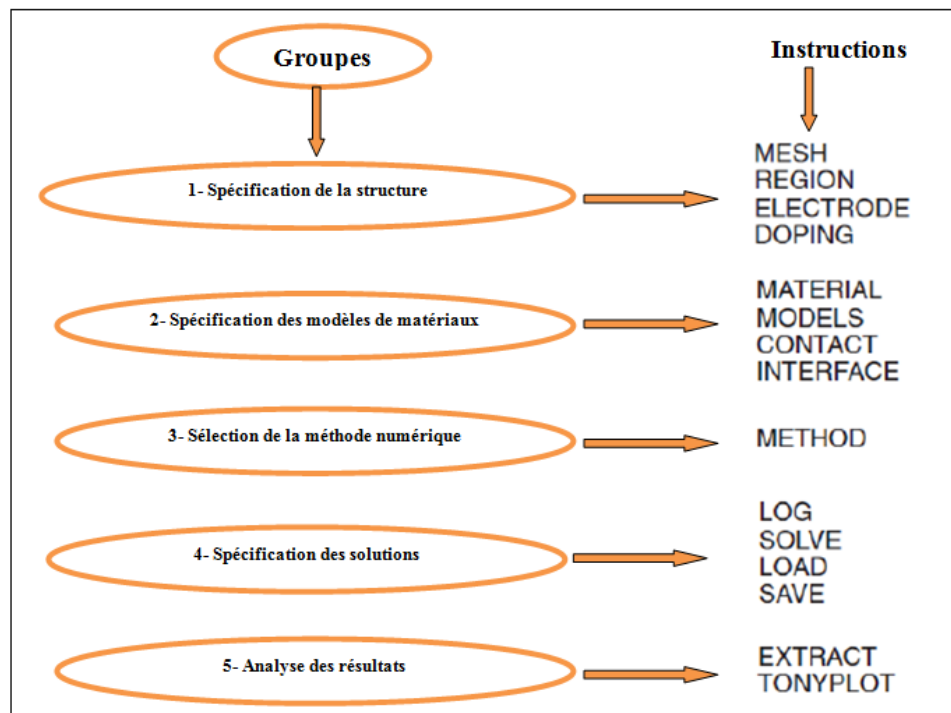


Figure 3.2 : Groupes de commandes d’ATLAS avec leurs instructions [6, 2].

### 3.3.2.3 Tonyplot

Tonyplot est un outil qui permet de visualiser les résultats de la simulation tels que la structure du composant électronique en 2D ou 3D, le diagramme de bande, le maillage et les caractéristiques électriques,... etc).

### 3.3.2.4 Modèles physiques

Dans une simulation le choix du modèle est très important. Les modèles physiques sont spécifiés par l’instruction « MODELS».

#### 3.3.2.4.1 Modèles de recombinaison

- Shockley-Read-Hall (SRH) : Ce modèle s’applique dans le cas où on fait de la simulation, pour ce modèle la durée de vie des porteurs minoritaires est fixe.
- Concentration Dependent (CONSRH) : généralement on l’utilise pour le Si tout en spécifiant la recombinaison Shockley-Read-Hall, ainsi la dépendance de la durée de vie et la concentration est prise en compte.
- AUGER : ce modèle s’utilise dans le cas où les densités de courant sont élevées.

#### 3.3.2.4.2 Modèles de porteurs statistiques

- Boltzmann (BOLTZMANN) : ce modèle est utilisé par défaut.
- Fermi-Dirac (FERMI) : il réduit la concentration des porteurs dans les régions fortement dopées.
- Incomplete Ionization (INCOMPLETE) : Il est utilisé pour les basses températures.
- Bandgap Narrowing (BGN) : Ce modèle est utilisé dans les régions fortement dopées.

#### 3.3.2.4.3 Modèles de la mobilité des porteurs de charge

- Shirahata model (SHI) : c'est un modèle de mobilité de surface, il peut être combiné avec KLA.
- Lambardi model (CVT) : Ce modèle est utilisé pour les dispositifs non planaires.

#### 3.3.2.4.4 Méthodes numériques

On utilise l'instruction "METHOD" pour le choix des méthodes numériques. Pour calculer les solutions aux problèmes de dispositifs à semi-conducteur, il existe plusieurs méthodes numériques ; les plus utilisées sont : Newton, Gummel, et Block [6, 2].

- **Newton** : cette méthode correspond à la résolution itérative d'un système regroupant les trois équations différentielles qui gouvernent le fonctionnement de la structure étudiée [6].
- **Gummel** : cette méthode consiste à découpler le système global décrit précédemment en trois sous-systèmes : les trois équations sont résolues itérativement jusqu'à l'obtention de la convergence globale des solutions. L'intérêt potentiel de cet algorithme par rapport au précédent réside dans la réduction des dimensions des systèmes matriciels à résoudre, ce qui permet de diminuer le temps de calcul [6].
- **Block** : elle est utilisée pour les systèmes d'équations mixtes [6].

### 3.4 Résultats de la simulation

#### 3.4.1 Comparaison de LEDs UV à couche active GaN et B GaN

##### 3.4.1.1 Spécification des deux structures

Lors de la simulation d'un dispositif, on commence par la schématisation de la structure ; ensuite on définit les régions, les électrodes, et le dopage.

Dans cette partie nous allons simuler une diode électroluminescente à ultraviolets à simple puits quantique AlGaIn/GaN/AlGaIn et AlGaIn/BGaIn/AlGaIn, à l'aide du simulateur TCAD Silvaco ; dans le but de faire une comparaison entre les deux structures. La première structure



a un puits quantique GaN pris entre deux couches n-AlGaN et p-AlGaN. La seconde a un puits quantique BGaN au lieu de GaN.

Les structures proposées à simple puits quantiques GaN et BGaN sont représentées dans la figure (3.3).

La première structure (GaN-LED) comporte un substrat saphir, une couche de 5 nm de nitrure de gallium GaN (Buffer layer), une couche de 500 nm de GaN dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , une couche de 60 nm de nitrure d'aluminium de gallium  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$  dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , une couche active GaN non dopée, une couche de 60 nm de  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$  dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , et une couche de 120 nm de GaN dopée type p pour le contact, avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

Dans la deuxième structure (BGaN-LED), la couche active GaN est remplacée par le nitrure de gallium de bore (BGaN) non dopé, avec une concentration de bore fixé à 1%. Les bandes interdites de GaN, BGaN et AlGaN sont respectivement 3.42 eV, 3.32 eV et 3.8 eV.

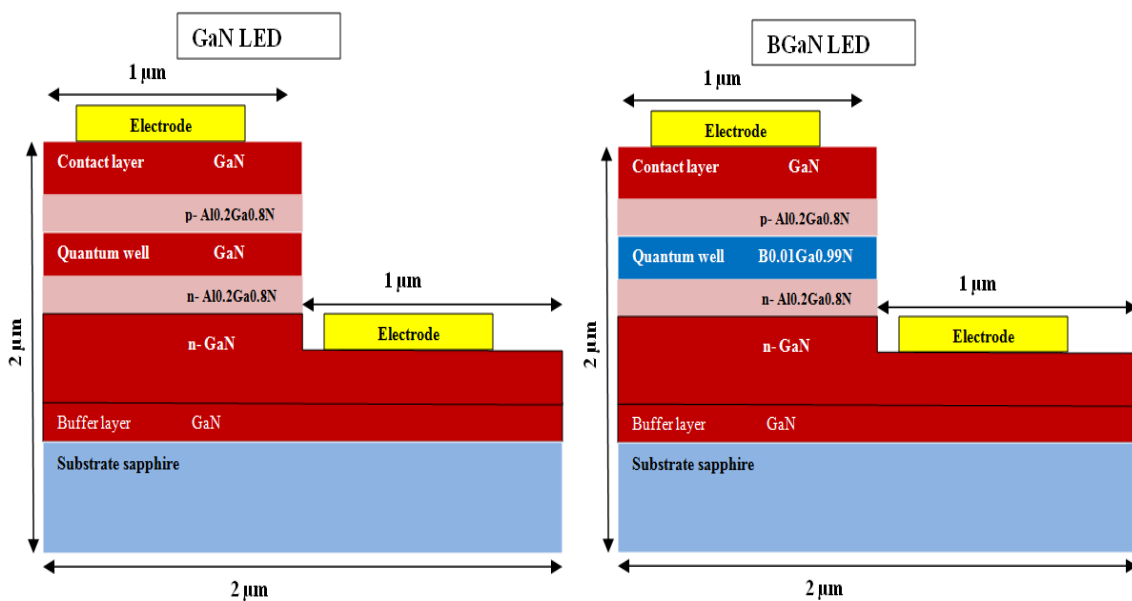


Figure 3.3 : Coupes schématiques des deux LED simulées.

### 3.4.1.2 Spécification du maillage

Généralement pour valider les résultats, on devrait tenir compte de la qualité du maillage car les résultats obtenus en dépendent grandement.

Le principe du maillage consiste à diviser la structure considérée en un certain nombre de points qui sont des nœuds. On cherche alors à déterminer les caractéristiques électriques du dispositif en ces points.

Si le maillage est trop large, il y aura moins d'intersections donc moins de nœuds ; le temps de calcul pour résoudre les équations sera court mais les résultats seront moins bons.

Il faut bien raffiner le maillage dans les régions où le fonctionnement du dispositif se concentre. Dans le cas des LED, il est nécessaire de raffiner le maillage dans la couche active, dans l'interface où passe le courant et sous les électrodes.

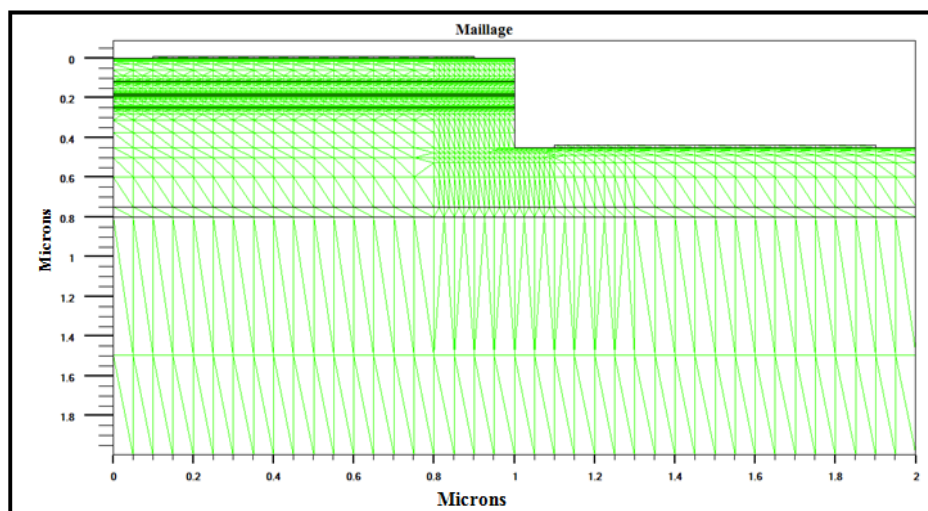


Figure 3.4 : Maillage de la structure.

### 3.4.1.3 Paramètres, modèles et méthodes numériques de calcul

Tout d'abord on commence par la schématisation de la structure sous le logiciel de simulation SILVACO, en déclarant les matériaux des différentes régions, puis en introduisant leurs propriétés telles que :

- L'énergie du gap ( $E_g$ )
- Les durées de vie des électrons ( $\tau_{n0}$ ) et des trous ( $\tau_{p0}$ )
- Les concentrations effectives des électrons ( $N_c$ ) et des trous ( $N_v$ )
- La mobilité des électrons ( $\mu_n$ ) et des trous ( $\mu_p$ )

Il existe d'autres paramètres qui dépendent du domaine de la simulation.

Le choix du modèle est en fonction des matériaux utilisés dans la simulation, dans notre cas nous utilisons le modèle : Fermi incomplete, consrh, Auger opt.

Après, il faut spécifier la méthode numérique pour le calcul ; dans notre cas nous utilisons la méthode de NEWTON.

3.4.1.4 Diagrammes de bande

Les figures 3.5 (a) et (b) représentent respectivement le diagramme de bande d'énergie des deux structures étudiées pour une épaisseur de 20 nm du puits quantique. Nous y représentons les énergies de bandes de conduction et de valence en fonction de la profondeur, à partir de la surface.

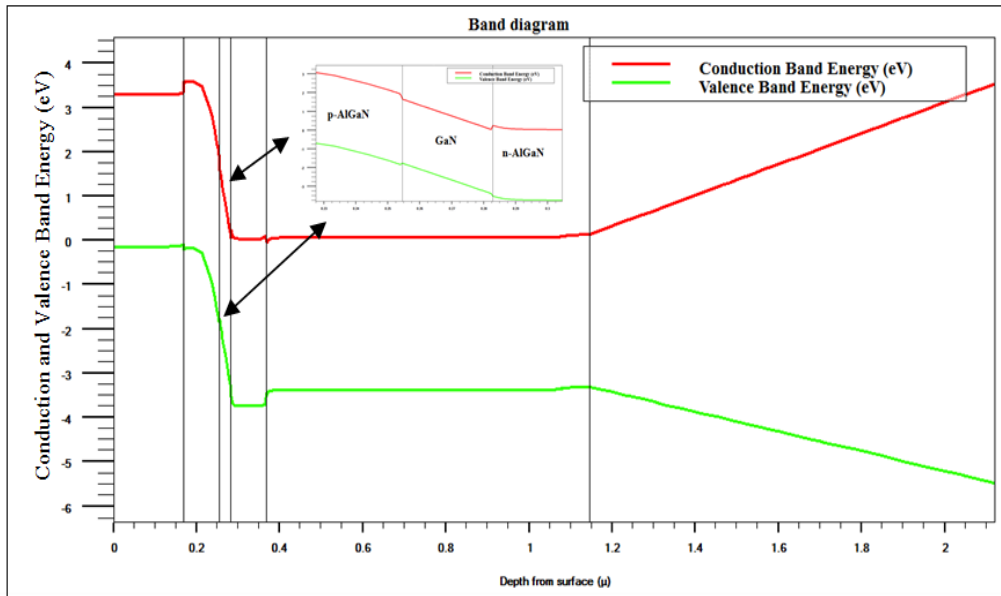


Figure 3.5 (a) : Diagramme de bande d'énergie pour GaN-LED.

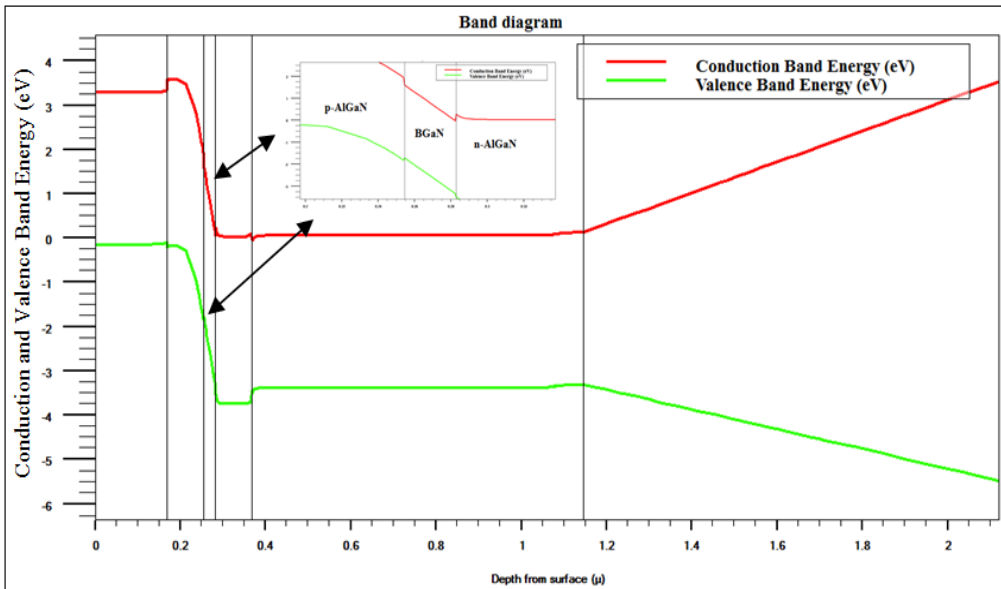


Figure 3.5 (b) : Diagramme de bande d'énergie pour BGaN-LED.

Les figures (3.6, 3.7, 3.8, 3.9, 3.10 et 3.11) représentent respectivement la concentration des électrons et des trous et le champ électrique, pour les deux LED.

La double hétérojonction permet d'augmenter l'efficacité de la LED. La bande interdite du puits quantique est inférieure à celle des couches barrières ; cela forme alors un puits de potentiel qui capture les électrons dans la bande de conduction et les trous dans la bande de valence. Lorsqu'une polarisation directe est appliquée, les quasi-niveaux de 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 le puits quantique. Afin de se recombiner efficacement, l'électron et le trou doivent avoir le même vecteur d'onde. Comme souhaité, la longueur d'onde n'est émise que par le matériau GaN ou B GaN qui constitue la couche active et la proportion du taux de recombinaison se produisant dans le puits quantique augmente [7], ce qui améliore le bon fonctionnement de la LED [8].

**GaN-LED :**

Le champ électrique dans le puits quantique est de l'ordre de  $8.31 \times 10^5$  V/cm ; dans la couche p-AlGa<sub>N</sub>, il est de l'ordre de  $6.52 \times 10^3$  V/cm, et dans la couche n-AlGa<sub>N</sub> il est de l'ordre de  $4.54 \times 10^5$  V/cm.

**B GaN-LED :**

Le champ électrique dans le puits quantique est de l'ordre de  $8.69 \times 10^5$  V/cm. Dans la couche p-AlGa<sub>N</sub> le champ électrique est de l'ordre de  $6.54 \times 10^3$  V/cm. Dans la couche n-AlGa<sub>N</sub> le champ électrique est de l'ordre de  $4.56 \times 10^5$  V/cm.

La concentration des électrons dans le puits quantique est plus grande du côté de la couche barrière n-AlGa<sub>N</sub> que du côté p-AlGa<sub>N</sub> ; et on y voit clairement la formation des band-offset.

La concentration des trous dans le puits quantique varie dans le sens inverse.

La concentration des porteurs est maximale dans le puits quantique, elle est due au confinement des électrons et des trous dans cette couche.

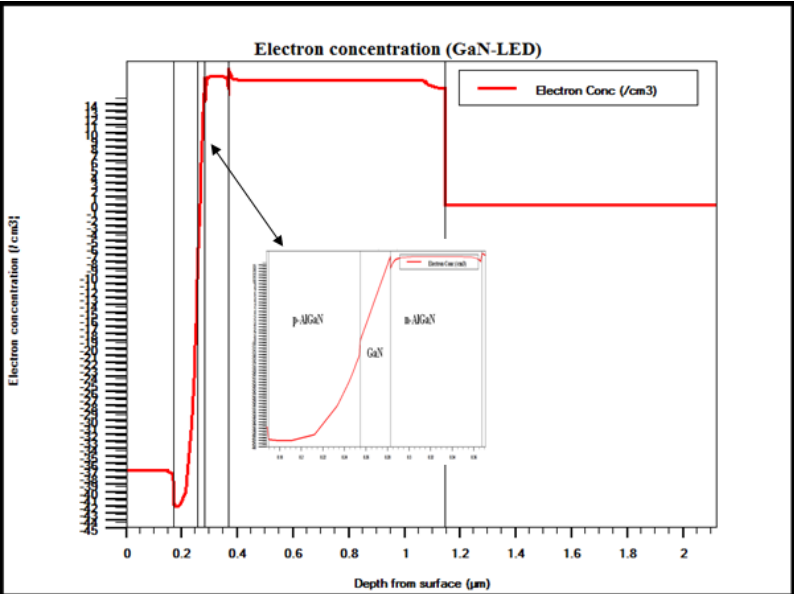


Figure 3.6 : Concentration des électrons dans GaN-LED.

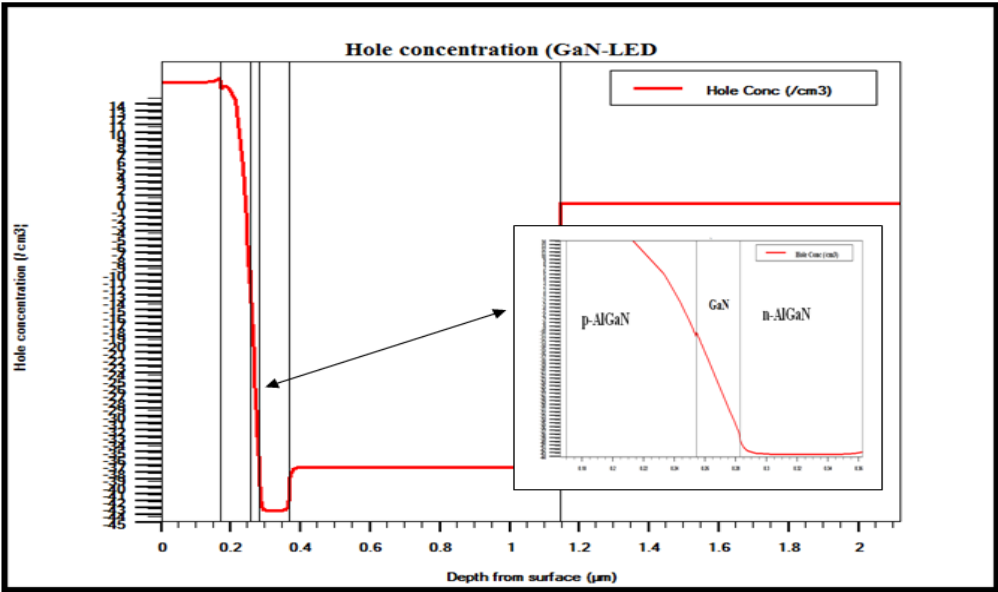


Figure 3.7 : Concentration des trous dans GaN-LED.

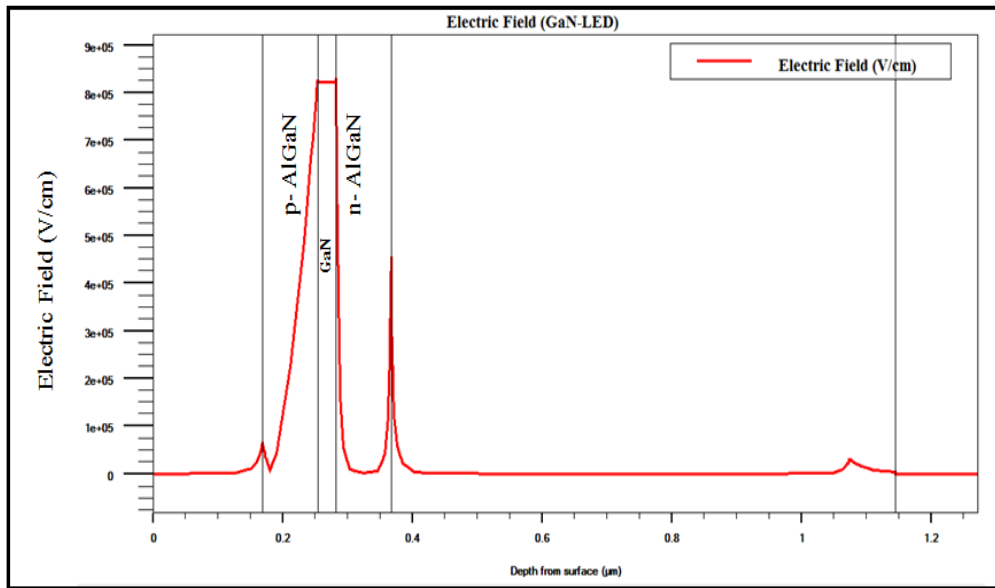


Figure 3.8 : Champ électrique dans GaN-LED.

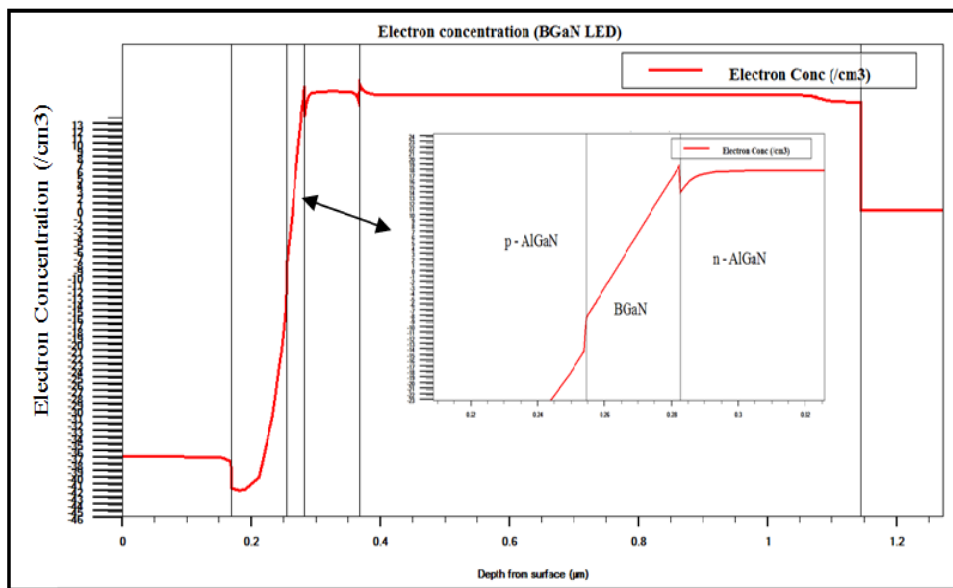


Figure 3.9 : Concentration des électrons dans BGaN-LED.

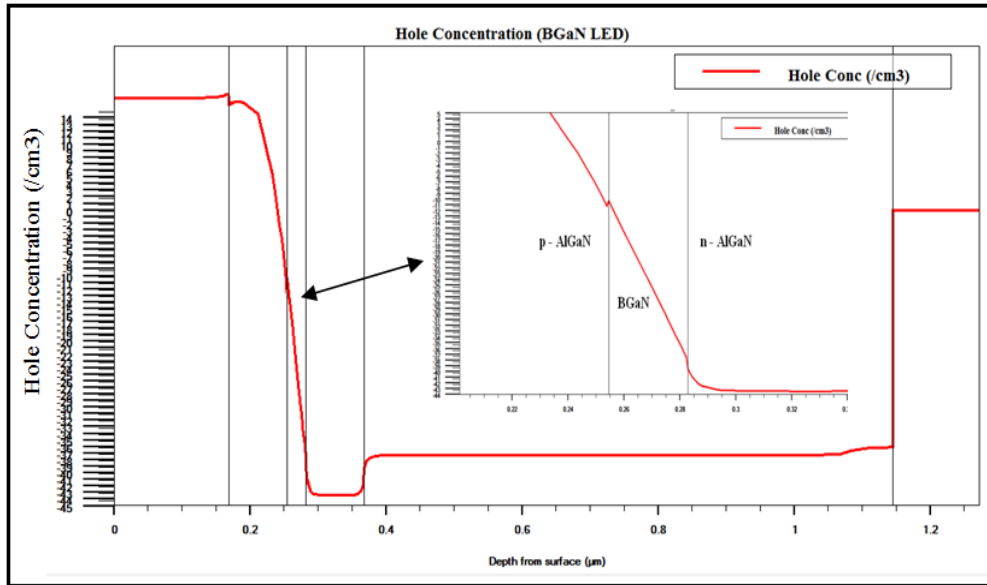


Figure 3.10 : Concentration des trous dans BGaN-LED.

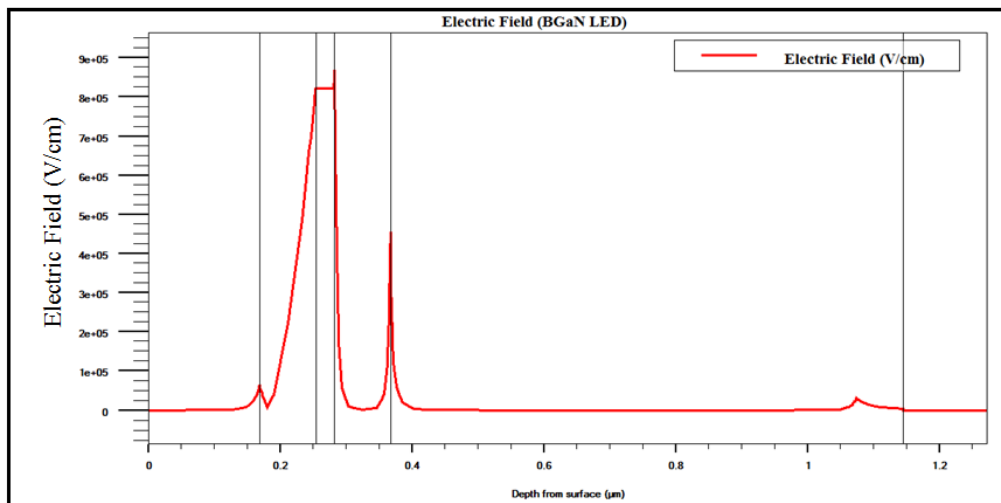


Figure 3.11 : Champ électrique dans BGaN-LED.

### 3.4.1.5 Caractéristique I-V

La figure (3.12) représente le courant en fonction de la tension appliquée, pour les deux structures et pour différentes épaisseurs de la couche active.

#### Pour GaN-LED :

Le courant diminue légèrement lorsque l'épaisseur de la couche active augmente ; pour une épaisseur de 7 nm on a un courant de 0.52 mA (une densité de courant de 26 kA/cm<sup>2</sup>).

#### Pour BGaN-LED :

Le courant augmente légèrement lorsque l'épaisseur de la couche active augmente ; pour une épaisseur de 20 nm on a un courant de 0.27 mA (une densité de courant de 13.5 kA/cm<sup>2</sup>).

Ces résultats sont logiques car B GaN est plus résistif que GaN ; autrement dit, il contient moins d'électrons libres ; de plus, les porteurs de charge ont une meilleure mobilité dans GaN que dans B GaN.

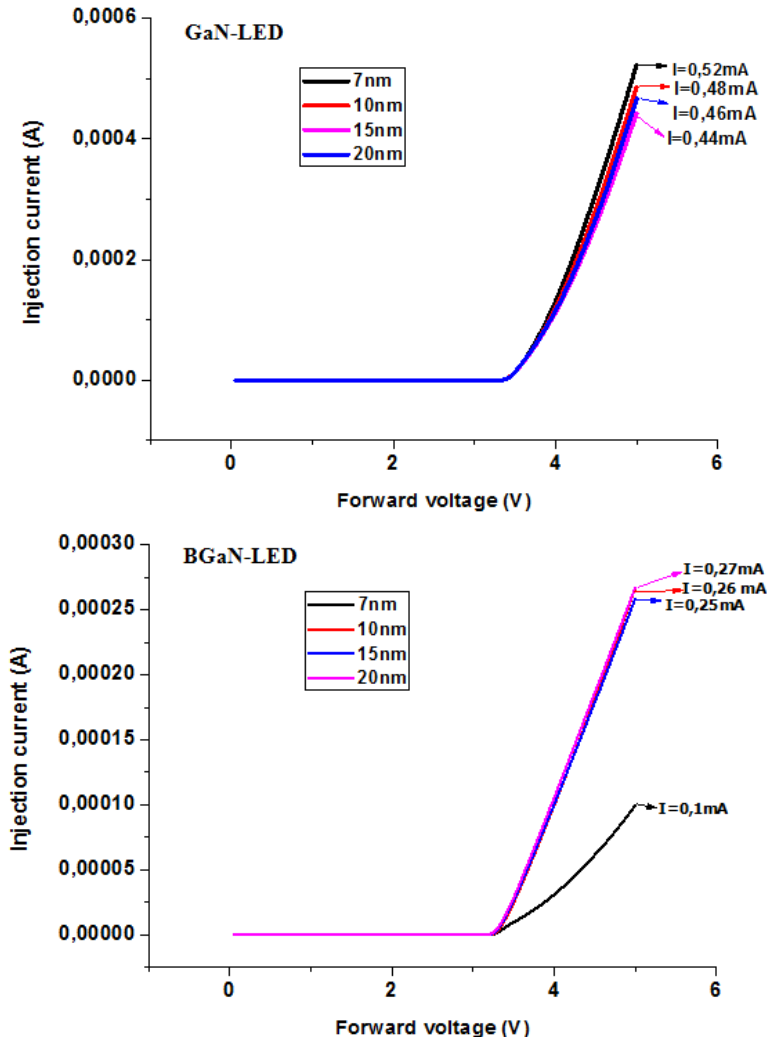


Figure 3.12 : Courant en fonction de la tension pour GaN-LED et B GaN-LED.

### 3.4.1.6 Emission spontanée, densité spectrale de puissance et puissance émise

La génération de lumière dans les LED est principalement due à l'émission spontanée de photons, la magnitude mesurée par un spectromètre est la densité spectrale de puissance ; et la magnitude qui détermine l'efficacité du dispositif est la puissance de sortie de la lumière. L'émission spontanée et la densité spectrale de puissance sont simulées en fonction de l'énergie, pour une tension de polarisation de 3.5 V ; la puissance de sortie lumineuse est simulée en fonction du courant injecté. Les résultats sont donnés par les figures 3.13, 3.14 et 3.15, respectivement. Les valeurs obtenues de l'émission spontanée et de la densité spectrale de puissance sont données dans les tableaux 3.1 et 3.2, respectivement.



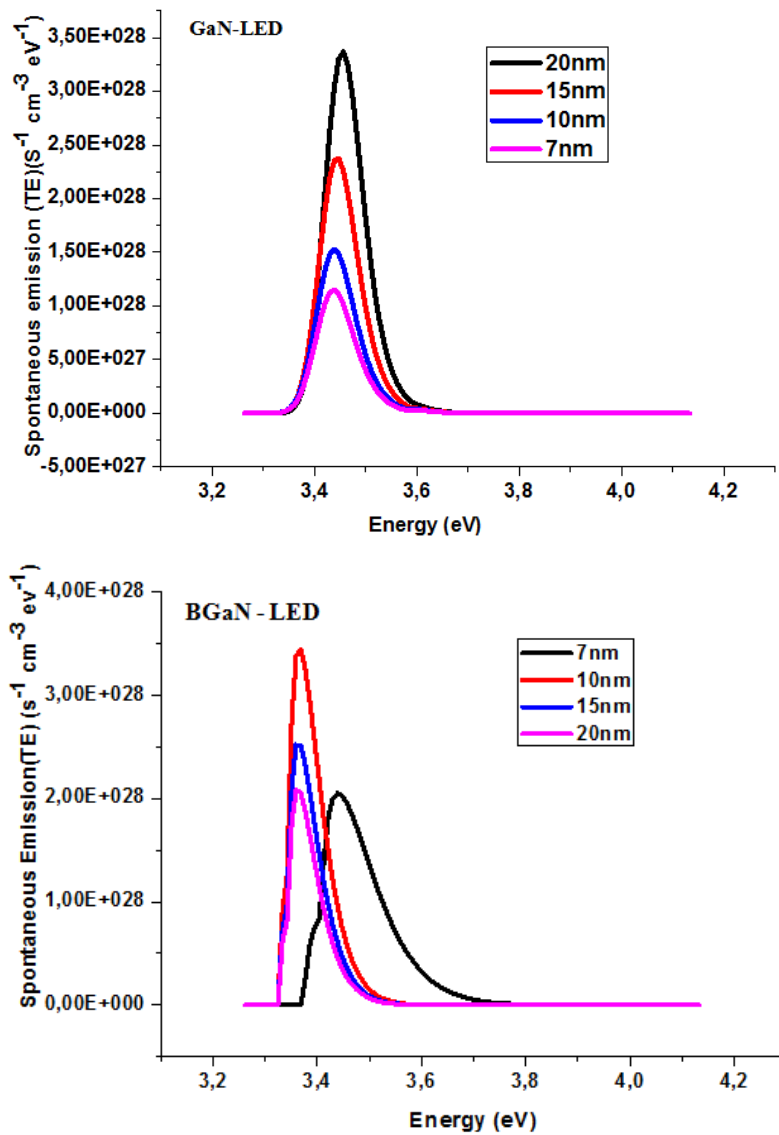
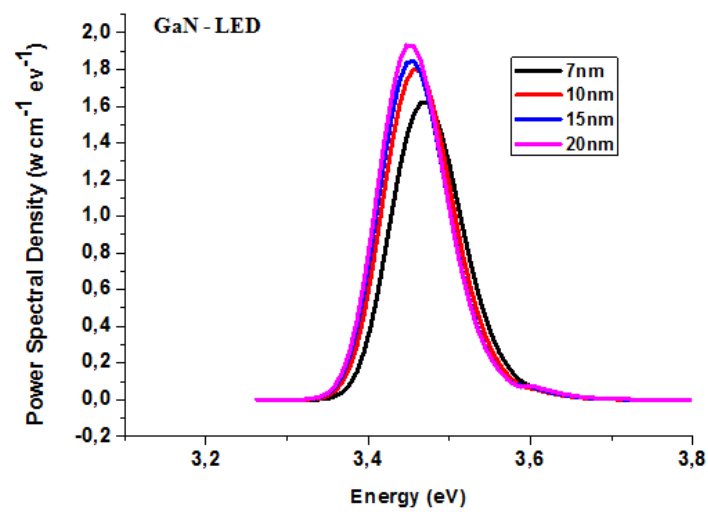


Figure 3.13 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie pour GaN-LED et BGaN-LED.



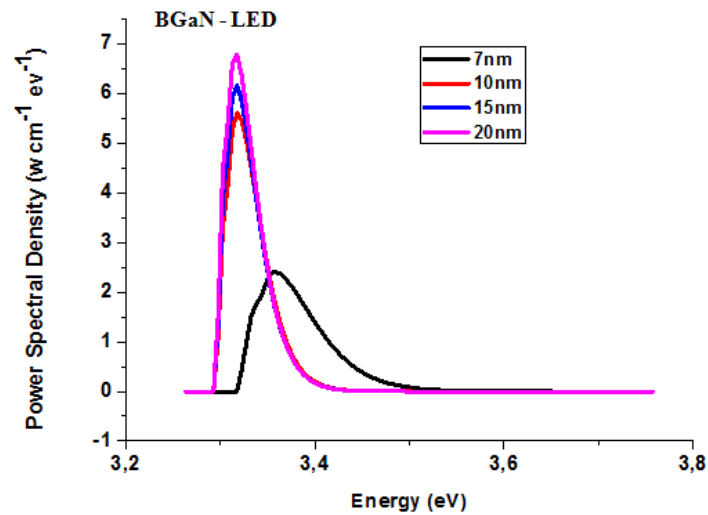


Figure 3.14 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie pour GaN-LED et BGaN-LED.

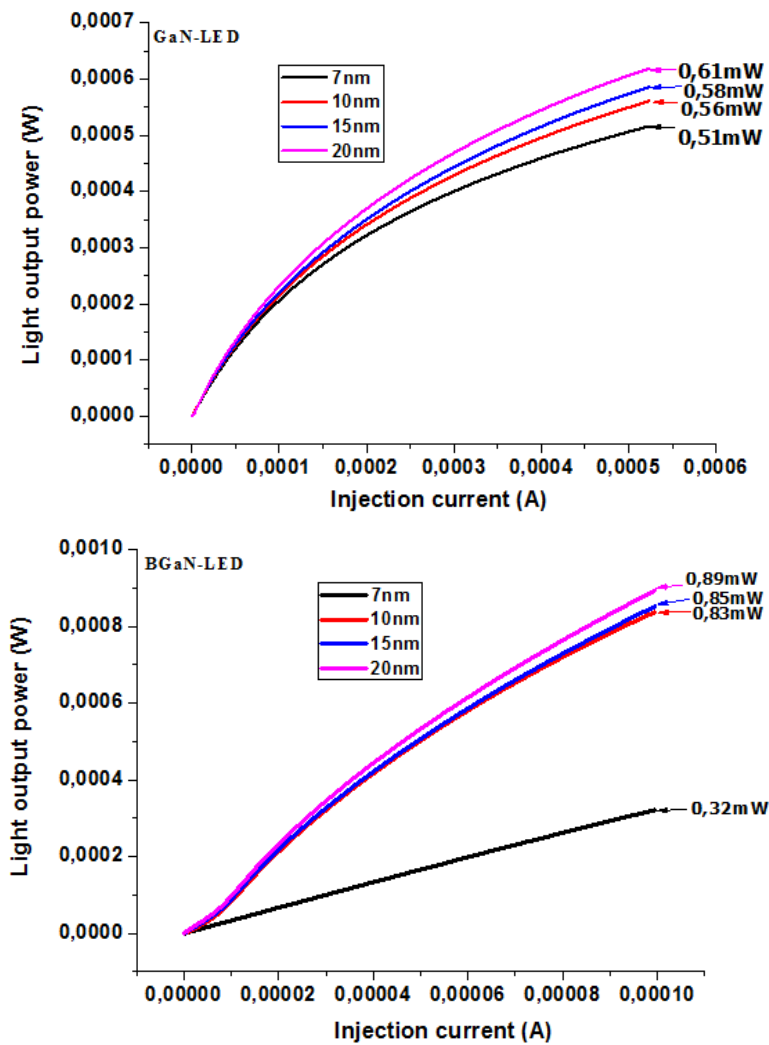


Figure 3.15 : La puissance émise en fonction du courant pour GaN-LED et BGaN-LED.

Épaisseur de la couche active (nm)		7	10	15	20
GaN-LED	Energie du pic (eV)	3.43	3.43	3.44	3.45
	$\lambda$ (nm)	361.5	361.5	360.5	359.4
	Emission spontanée ( $s^{-1} cm^{-3} eV^{-1}$ )	$1.15 \times 10^{28}$	$1.53 \times 10^{28}$	$2.36 \times 10^{28}$	$3.34 \times 10^{28}$
BGaN-LED	Energie du pic (eV)	3.43	3.36	3.36	3.36
	$\lambda$ (nm)	361.5	369	369	369
	Emission spontanée ( $s^{-1} cm^{-3} eV^{-1}$ )	$2.04 \times 10^{28}$	$3.43 \times 10^{28}$	$2.53 \times 10^{28}$	$2.08 \times 10^{28}$
Rapport d'émission spontanée		1.77	2.24	1.07	0.62
Différence entre les émissions spontanées ( $s^{-1} cm^{-3} eV^{-1}$ )		$0.89 \times 10^{28}$	$1.9 \times 10^{28}$	$0.17 \times 10^{28}$	$-1.26 \times 10^{28}$

Tableau 3.1 : Emission spontanée pour GaN-LED et BGaN-LED.

Épaisseur de la couche active (nm)		7	10	15	20
GaN-LED	Energie du pic (eV)	3.46	3.45	3.45	3.45
	$\lambda$ (nm)	358.4	359.4	359.4	359.4
	Densité spectrale de puissance ( $W cm^{-1} eV^{-1}$ )	1.61	1.81	1.84	1.93
BGaN-LED	Energie du pic (eV)	3.35	3.31	3.31	3.31
	$\lambda$ (nm)	370.1	374.6	374.6	374.6
	Densité spectrale de puissance ( $W cm^{-1} eV^{-1}$ )	2.4	5.6	6.1	6.7
Rapport de densité spectrale de puissance		1.49	3.09	3.31	3.47
Différence entre les densités spectrales de puissance ( $W cm^{-1} eV^{-1}$ )		0.79	3.79	4.26	4.77

Tableau 3.2 : Densité spectrale de puissance pour GaN-LED et BGaN-LED.

Les mécanismes de base responsables de la génération de photons dans le SC sont les émissions spontanées et stimulées. Les porteurs minoritaires injectés donnent de la lumière si leur durée de vie radiative est plus courte que leur durée de vie non radiative.

Les transitions bande à bande peuvent par exemple provenir de collisions avec le réseau cristallin (interactions photon-phonon), ou de cascades de transitions de basse énergie dues à la présence de niveaux électroniques profonds dans la bande interdite.

Ces niveaux électroniques profonds peuvent être dus à des impuretés chimiques, des défauts du réseau cristallin (dislocations) ainsi que des surfaces libres et des interfaces avec d'autres matériaux. La performance est limitée par ces transitions non radiatives.

Le deuxième et le plus important mécanisme de recombinaison non radiative qui limite les performances des DEL est la recombinaison Auger ; il se caractérise par des durées de vie des porteurs Auger inversement proportionnelles au carré des concentrations des régions correspondantes.

BGaN contient moins d'électrons libres ; le taux de recombinaison Auger est donc plus faible dans BGaN que dans GaN. Ainsi ; dans le cas de BGaN, nous avons une meilleure émission spontanée, une meilleure densité spectrale de puissance et une meilleure puissance de sortie lumineuse.

La meilleure valeur de l'émission spontanée est  $3.34 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ , pour une épaisseur de 20 nm de la couche active dans GaN-LED. Elle est  $3.43 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ , pour une épaisseur de 10 nm de la couche active dans BGaN-LED, et elle diminue pour une plus grande épaisseur car le matériau devient trop résistif.

La meilleure valeur de la densité spectrale de puissance dans GaN-LED et BGaN-LED est obtenue pour une épaisseur 20 nm de la couche active ; elle est respectivement  $1.93 \text{ Wcm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  et  $6.7 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ . Nous avons alors un rapport de 3.47 entre les deux valeurs.

La puissance de sortie lumineuse augmente avec l'épaisseur de la couche active ; nous obtenons de meilleures valeurs pour une épaisseur de 20 nm de la couche active. Pour GaN-LED, nous avons 0.61 mW pour un courant de 0.55 mA ; pour BGaN-LED, nous avons 0.89 mW pour seulement un courant de 0.1 mA. Pour ce dernier courant, la puissance de sortie de la lumière dans GaN-LED n'est que d'environ 0.25 mW. La puissance lumineuse totale est multipliée par 3.56 dans BGaN-LED.

Il existe une légère différence entre les longueurs d'onde d'émission dans les deux LED, mais les performances sont nettement améliorées dans la seconde LED, en raison des propriétés du matériau BGaN.

### 3.4.1.7 Densité de flux spectrale

La densité de flux spectrale est représentée par la figure (3.16) pour une polarisation de 3.5 V, et les valeurs obtenues sont indiquées par le tableau (3.3). Pour GaN-LED, la plus petite valeur est obtenue pour l'épaisseur de puits quantique de 7 nm ; elle est environ  $2.91 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.47 eV. Pour 10 nm, la densité maximale est à 3.46 eV ; pour 15 nm et 20 nm, la densité maximale est pratiquement à la même énergie 3.45 eV.

Pour BGaN-LED, nous obtenons la densité maximale à une énergie 3.47 eV pour l'épaisseur du puits quantique de 7 nm, et à 3.31 eV pour les autres épaisseurs de puits quantique. La densité de flux spectrale est respectivement  $3.25 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $3.32 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $3.5 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour GaN-LED ;  $4.48 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $1.03 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $1.13 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  et  $1.25 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour BGaN-LED. Le maximum de la densité de flux spectrale augmente avec l'épaisseur du puits quantique.

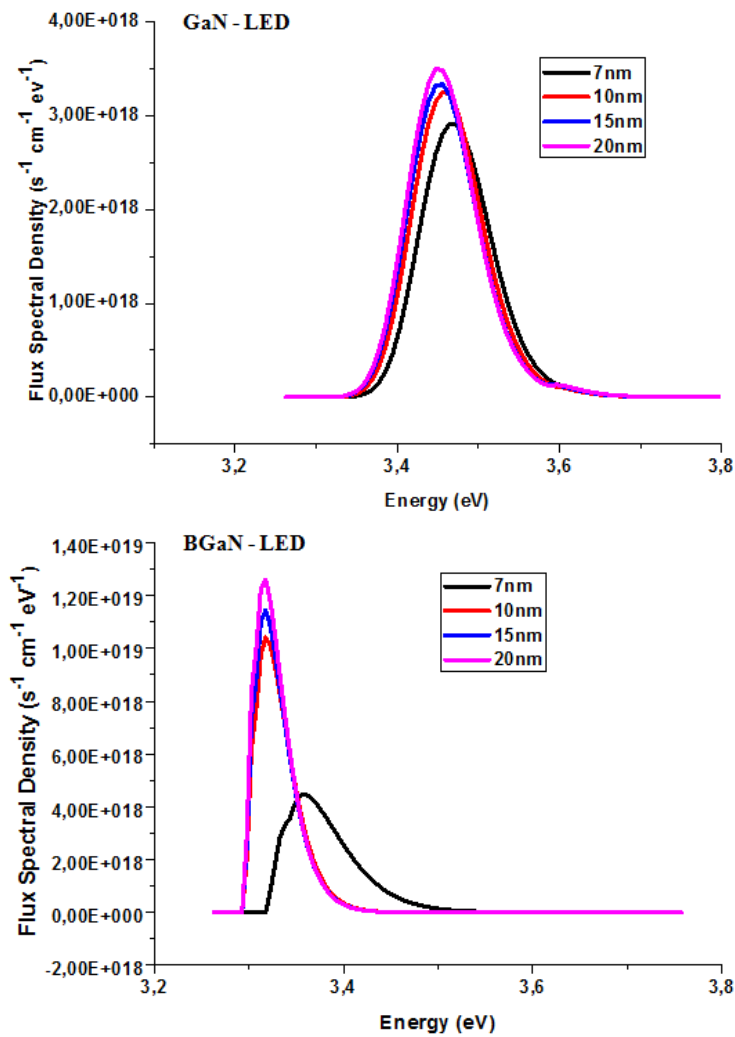


Figure 3.16 : La densité de flux spectrale en fonction de l'énergie pour GaN-LED et BGaN-LED.

Epaisseur de la couche active (nm)		7	10	15	20
GaN-LED	Energie du pic (eV)	3.47	3.46	3.45	3.45
	$\lambda$ (nm)	357.3	358.4	359.4	359.4
	Densité de flux spectrale ( $s^{-1} cm^{-1} eV^{-1}$ )	$2.91 \times 10^{18}$	$3.25 \times 10^{18}$	$3.32 \times 10^{18}$	$3.5 \times 10^{18}$
BGaN-LED	Energie du pic (eV)	3.35	3.31	3.31	3.31
	$\lambda$ (nm)	370.1	374.6	374.6	374.6
	Densité de flux spectrale ( $s^{-1} cm^{-1} eV^{-1}$ )	$4.48 \times 10^{18}$	$1.03 \times 10^{19}$	$1.13 \times 10^{19}$	$1.25 \times 10^{19}$
Rapport de densité de flux spectrale ( $s^{-1} cm^{-1} eV^{-1}$ )		1.54	3.17	3.40	3.57
Différence entre les densités de flux spectrales ( $s^{-1} cm^{-1} eV^{-1}$ )		$1.57 \times 10^{18}$	$7.05 \times 10^{18}$	$7.98 \times 10^{18}$	$9 \times 10^{18}$

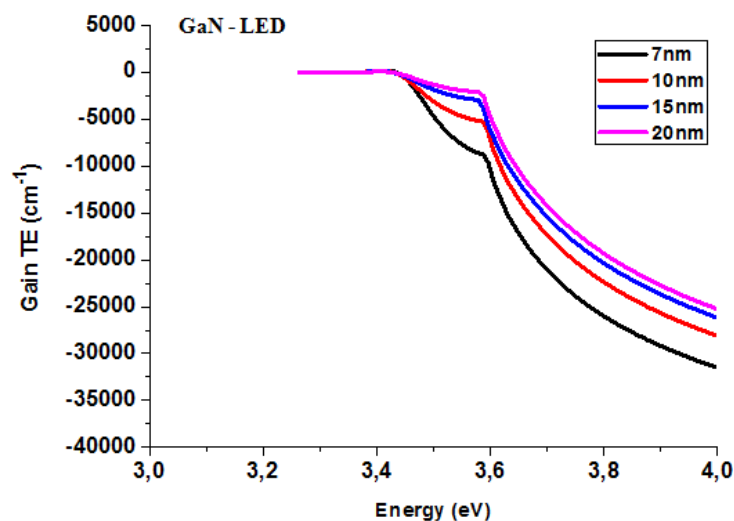
Tableau 3.3 : Densité de flux spectrale pour GaN-LED et BGaN-LED.

### 3.4.1.8 Gain (TE)

Le gain TE (TE: champ électrique transversal) et le rendement quantique externe sont représentés par les figures 3.17 et 3.18, respectivement ; la tension appliquée est 3.5 V.

Pour GaN-LED, le gain commence à diminuer lentement à partir de l'énergie 3.43 eV ( $\lambda = 361.5$  nm), puis diminue plus rapidement à partir de l'énergie 3.58 eV ( $\lambda = 346.3$  nm).

Pour BGaN-LED, le gain commence à diminuer à partir de l'énergie d'environ 3.34 eV ( $\lambda = 371$  nm). Avec BGaN, nous avons une largeur de bande de fréquence légèrement supérieure à celle du GaN en tant que puits quantique.



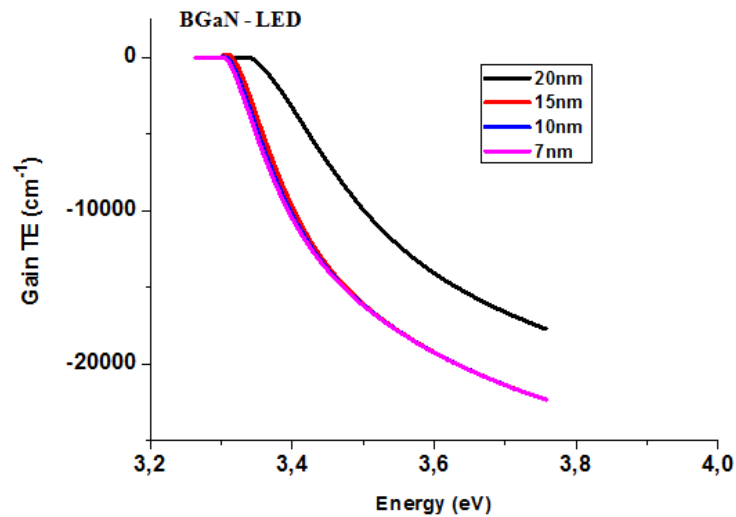


Figure 3.17 : Gain TE pour GaN-LED et BGaN-LED.

### 3.4.1.9 Rendement quantique externe

Le paramètre le plus important qui caractérise une LED est le rendement quantique externe (Wall-Plug Efficiency : WPE) [article 8] ; c'est le rapport entre la puissance optique émise par la LED et la puissance électrique fournie à cette LED.

$$\eta = \frac{P_{out}}{I.V} \quad (3.4)$$

I et V sont le courant et la tension appliqués [9].

La figure 3.18 représente le rendement quantique externe à une température ambiante [10].

Le rendement quantique externe maximal est supérieur à 80% pour un courant d'environ 13.7  $\mu\text{A}$  dans GaN-LED, et il est d'environ 68% pour un courant d'environ 81.7  $\mu\text{A}$  dans BGaN-LED. Pour cette deuxième LED, nous avons atteint une valeur supérieure à 100%, quelque chose que nous ne comprenons pas.

À un courant de 0.4  $\mu\text{A}$  ; nous obtenons un rendement quantique externe supérieur à 50% pour les épaisseurs de 15 nm et 20 nm dans BGaN-LED, et seulement 50% dans GaN-LED.

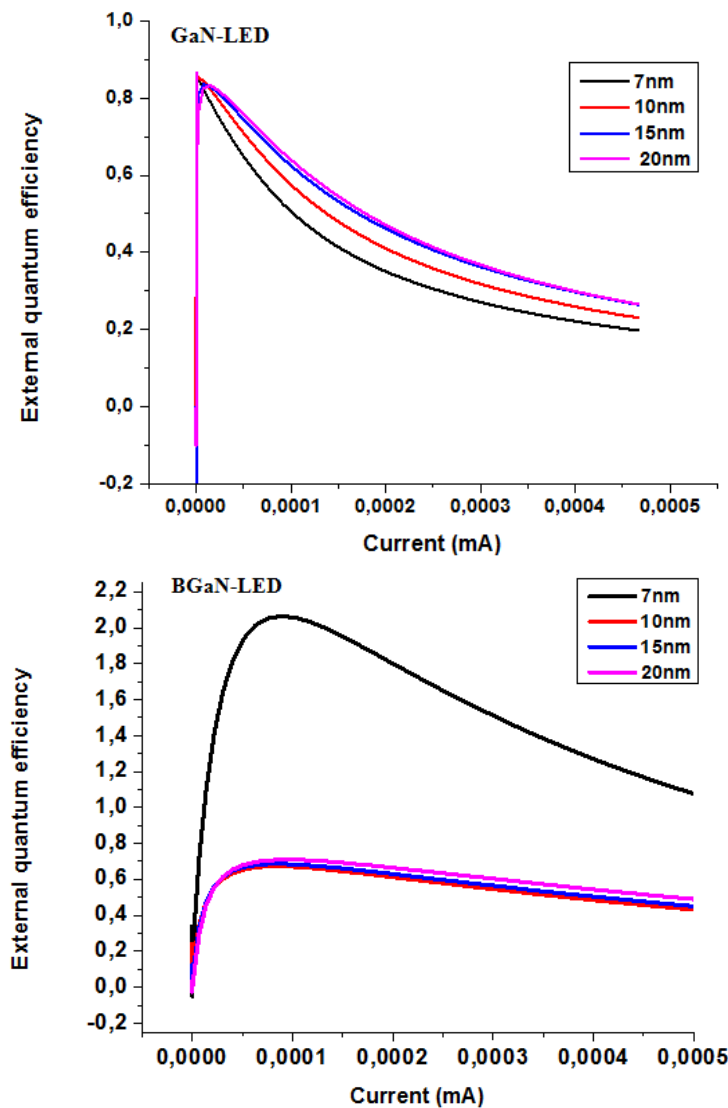


Figure 3.18 : Rendement quantique externe pour GaN-LED et B GaN-LED.

#### 3.4.1.10 Effet de la polarisation sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale

Dans cette partie nous étudions l'effet de la tension de polarisation qui varie de 3.5 V à 5 V, sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale ; les résultats sont représentés respectivement par les figures 3.19, 3.20 et 3.21.

Durant la simulation nous fixons les paramètres physiques et géométriques suivants :

- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 120 nm dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche AlGaIn est de 60 nm dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .



- L'épaisseur de la couche active GaN/BGaN est de 20 nm non dopé, avec 1% de fraction molaire du bore.
  - L'épaisseur de la couche AlGaN est de 60 nm dopée type n, avec une concentration de  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .
  - L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 500 nm dopée type n, avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
  - L'épaisseur de la couche GaN est de 5 nm non dopée.
- Pour GaN-LED nous obtenons un pic de densité spectrale de puissance  $1.93 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie 3.45 eV pour une tension de 3.5 V,  $11.2 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie 3.46 eV pour une tension de 4 V, et  $21.01 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie 3.48 eV pour une tension de 5 V ; nous obtenons un pic de l'émission spontanée de  $3.34 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à 3.45 eV pour une tension de 3.5 V,  $6.33 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à 3.45 eV pour une tension de 4 V, et  $1.08 \times 10^{29} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à 3.46 eV pour une tension de 5 V ; nous obtenons un pic de densité de flux spectrale de  $3.5 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.45 eV pour une tension de 3.5 V,  $2.02 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à 3.46 eV pour une tension de 4 V et  $3.76 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à 3.48 eV pour une tension de 5 V.
  - Pour BGaN-LED nous obtenons un maximum de densité spectrale de  $6.7 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie 3.31 eV pour une tension de 3.5 V,  $20 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie 3.37 eV pour une tension de 4 V, et  $39.36 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie 3.38 eV pour une tension de 5 V ; nous obtenons une émission spontanée maximale de  $2.08 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.36 eV pour une tension de 3.5 V,  $6.46 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.37 eV pour une tension de 4 V, et  $1.31 \times 10^{29} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.38 eV pour une tension de 5 V ; nous obtenons un pic de densité de flux spectrale de  $1.25 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.31 eV pour une tension de 3.5 V,  $3.7 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.37 eV pour une tension de 4 V, et  $7.26 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.38 eV pour une tension de 5 V.

La densité spectrale de puissance ainsi que les recombinaisons radiatives augmentent avec la tension appliquée, car le nombre de porteurs injectés dans le puits quantique augmente. Il faut noter aussi que l'énergie du pic glisse vers les grandes énergies parce que les porteurs de charge des vallées supérieures sont impliqués.

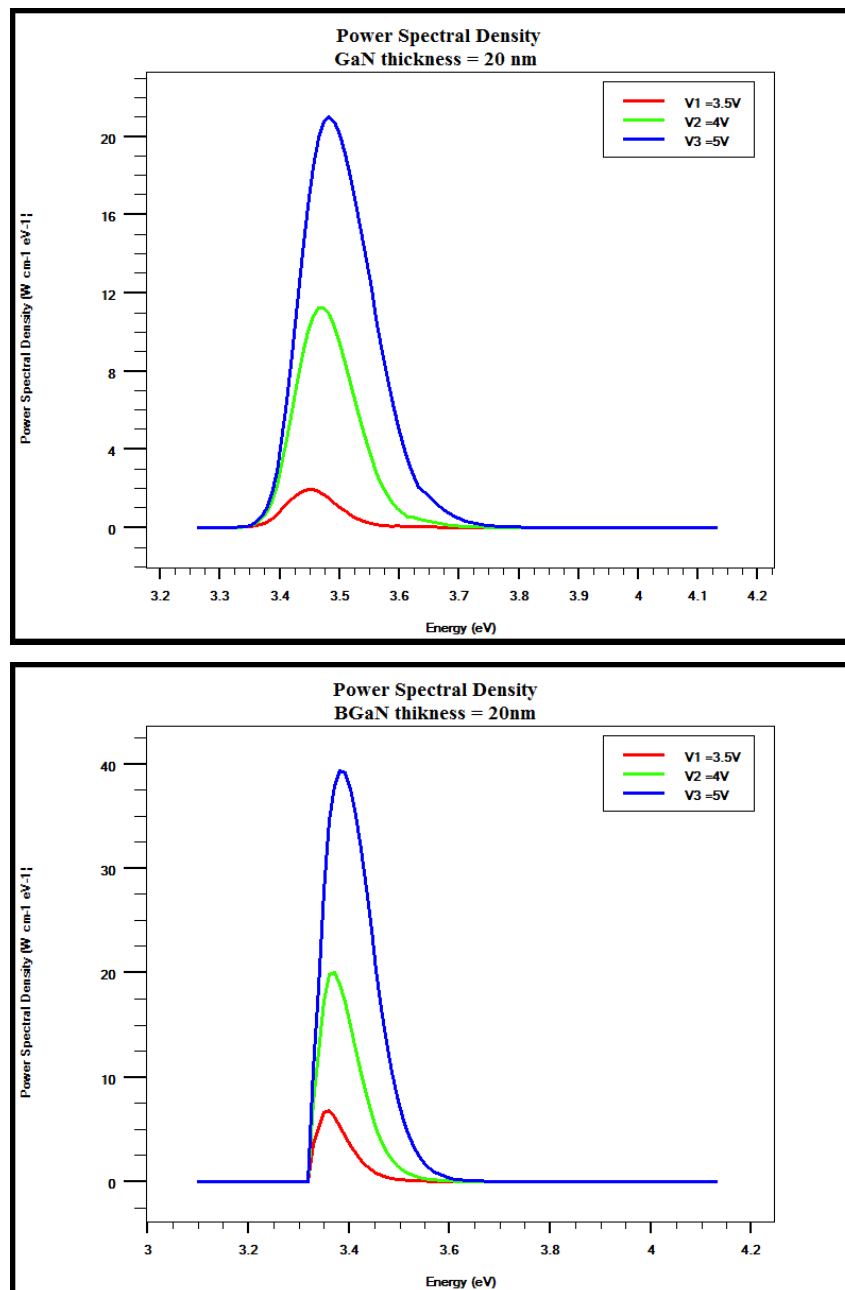


Figure 3.19 : La densité spectrale en fonction de l'énergie à différentes tensions pour GaN-LED et BGaN-LED.

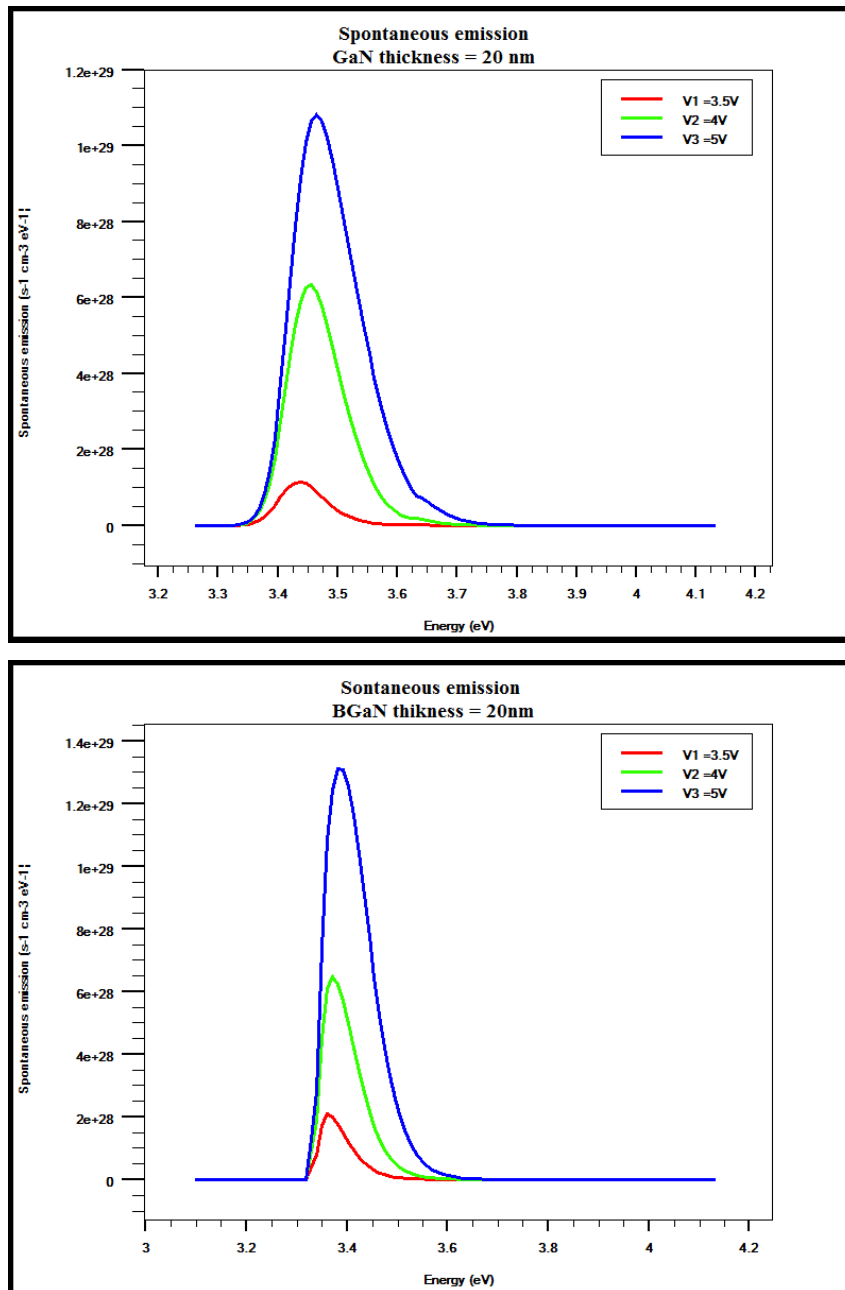


Figure 3.20 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différentes tensions pour GaN-LED et BGaN-LED.

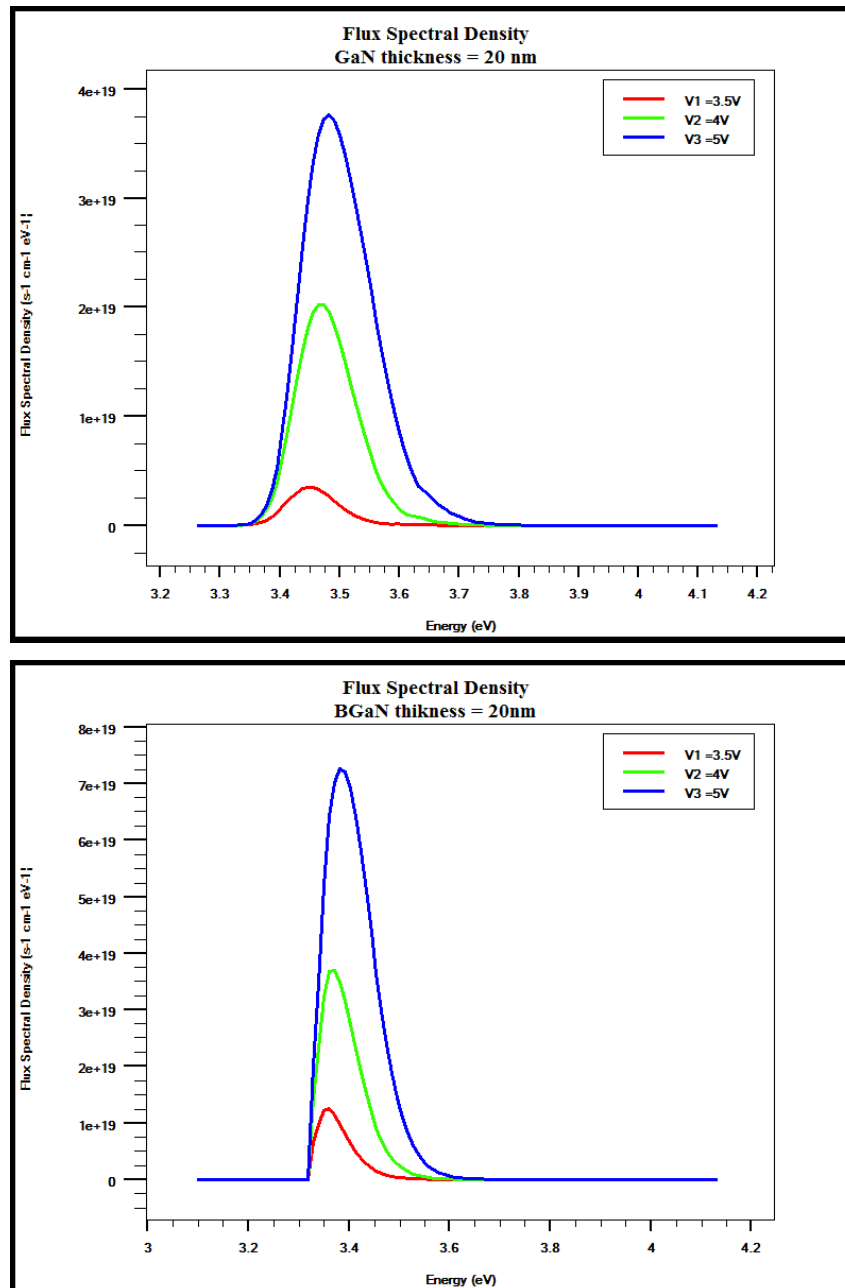


Figure 3.21 : La densité de flux spectrale en fonction de l'énergie à différentes tensions pour GaN-LED et BGaN-LED.

### 3.4.1.11 Effet de la température

L'intensité d'émission des LED diminue avec l'augmentation de la température ; elle est due à plusieurs facteurs dépendant de la température, notamment :

- la recombinaison non radiative par des niveaux profonds,
- la recombinaison de surface,
- la perte de porteurs par des barrières d'hétérostructure.

Généralement lorsque la température augmente, l'énergie du gap des semi-conducteurs diminue.

La relation entre la température et l'intensité d'émission est donnée par l'expression suivante

$$I = I_{300K} \exp - \frac{T-300K}{T_1} \quad (3.5)$$

Où : T1 est la température caractéristique. Une température caractéristique T1 élevée est désirable car elle implique une faible dépendance à la température.

#### 3.4.1.11.1 Effet de la température sur le courant

Nous étudions l'effet de la température qui varie de 300 K à 600 K, sur le courant en fonction de la tension ; les résultats sont représentés par la figure 3.22.

Durant la simulation nous fixons les paramètres physiques et géométriques suivants :

- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 120 nm dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche AlGaIn est de 60 nm dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche active GaN/BGaIn est de 20 nm non dopé avec 1% de fraction molaire du bore.
- L'épaisseur de la couche AlGaIn est de 60 nm dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 500 nm dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche GaN est de 5 nm non dopée.

Le courant augmente avec la température pour les deux structures simulées.

- **Pour GaN-LED :** Le courant augmente de 0.46 mA jusqu'à 2.57 mA à T = 600 K.
- **Pour BGaIn-LED :** Le courant augmente de 0.27 mA jusqu'à 2.63 mA à T = 600 K.

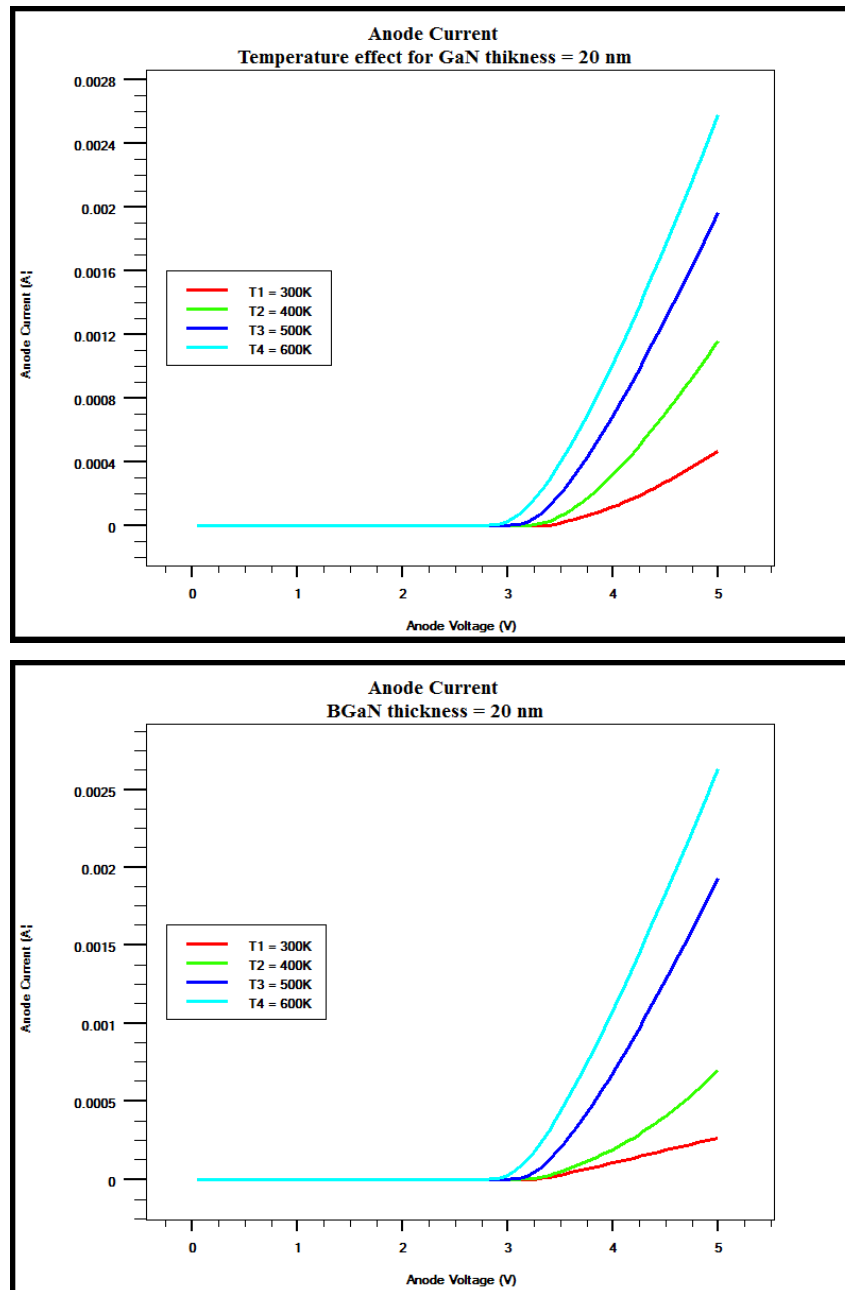


Figure 3.22 : Le courant en fonction de la tension à différentes températures pour GaN-LED et BGaN-LED.

### 3.4.1.11.2 Effet de la température sur la puissance émise

Nous étudions l’effet de la température qui varie de 300 K à 600 K, sur la puissance émise en fonction du courant ; les résultats sont représentés par la figure 3.23.

La puissance diminue lorsque la température augmente, pour les deux structures simulées.

- **Pour GaN-LED** : La puissance diminue de 0.61 mW jusqu’à  $4.7 \times 10^{-6}$  à T = 600 K.
- **Pour BGaN-LED** : La puissance diminue de 0.89 mW jusqu’à  $2.6 \times 10^{-5}$  à T = 600 K.

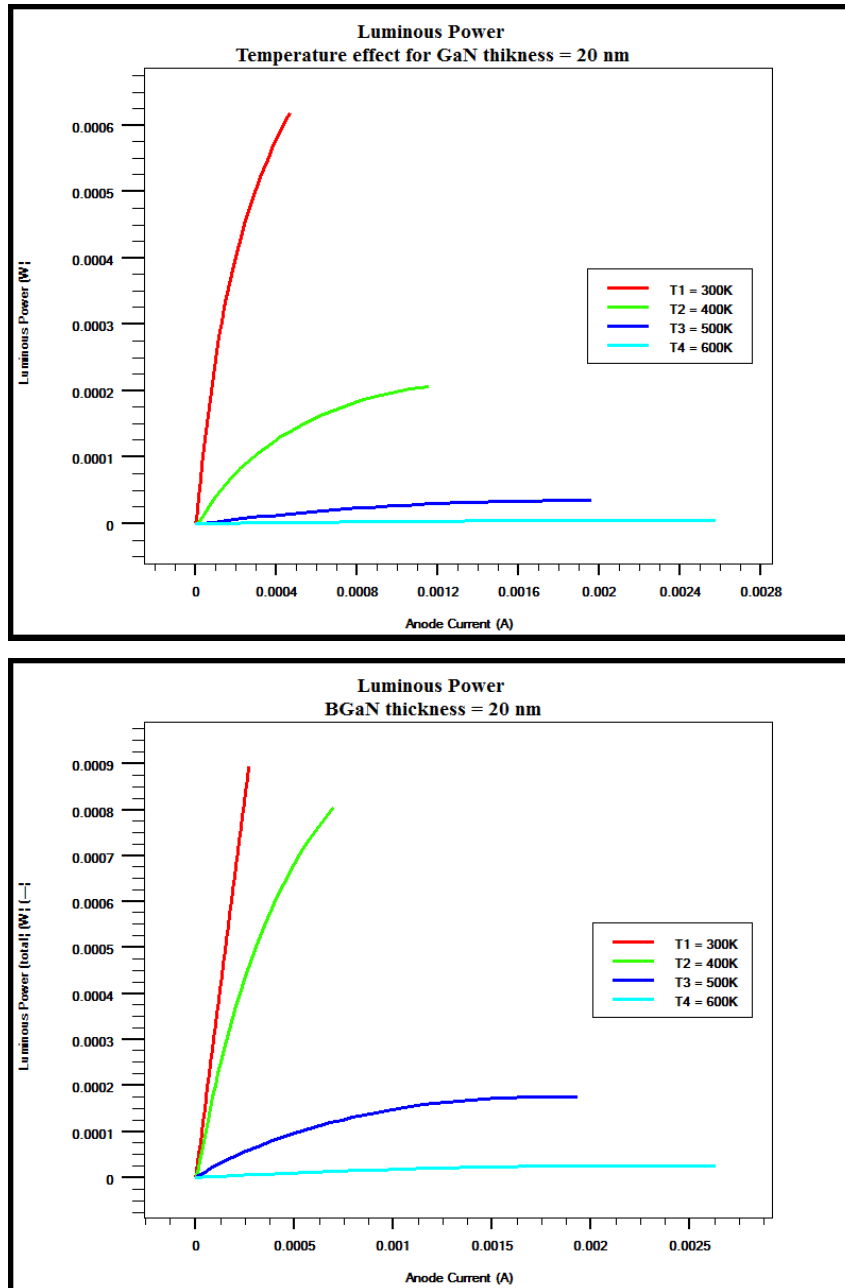


Figure 3.23 : La puissance émise en fonction du courant à différentes températures pour GaN-LED et BGaN-LED.

### 3.4.1.11.3 Effet de la température sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité spectrale de flux

La densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité spectrale de flux sont simulées en fonction de l'énergie, à une polarisation de 3.5 V. Les résultats obtenus sont représentés respectivement sur les figures 3.24, 3.25 et 3.26.

La densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale diminuent lorsque la température augmente.

- **Pour GaN-LED :**

La densité spectrale de puissance diminue de  $1.93 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.44 eV à  $T = 300 \text{ K}$  jusqu'à  $0.04 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.44 eV à  $T = 600 \text{ K}$  ; l'émission spontanée diminue de  $3.34 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.43 eV jusqu'à  $2 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.43 eV à  $T = 600 \text{ K}$  ; la densité spectrale de flux diminue de  $3.59 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.44 eV jusqu'à  $7 \times 10^{16} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.44 eV à  $T = 600 \text{ K}$ .

- **Pour B GaN-LED :**

La densité spectrale de puissance diminue de  $6.7 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV jusqu'à  $0.35 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV à  $T = 600 \text{ K}$  ; l'émission spontanée diminue de  $2.08 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV jusqu'à  $1.16 \times 10^{27} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.37 eV à  $T = 600 \text{ K}$  ; la densité spectrale de flux diminue de  $1.25 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV jusqu'à  $6.6 \times 10^{17} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.37 eV à  $T = 600 \text{ K}$ .



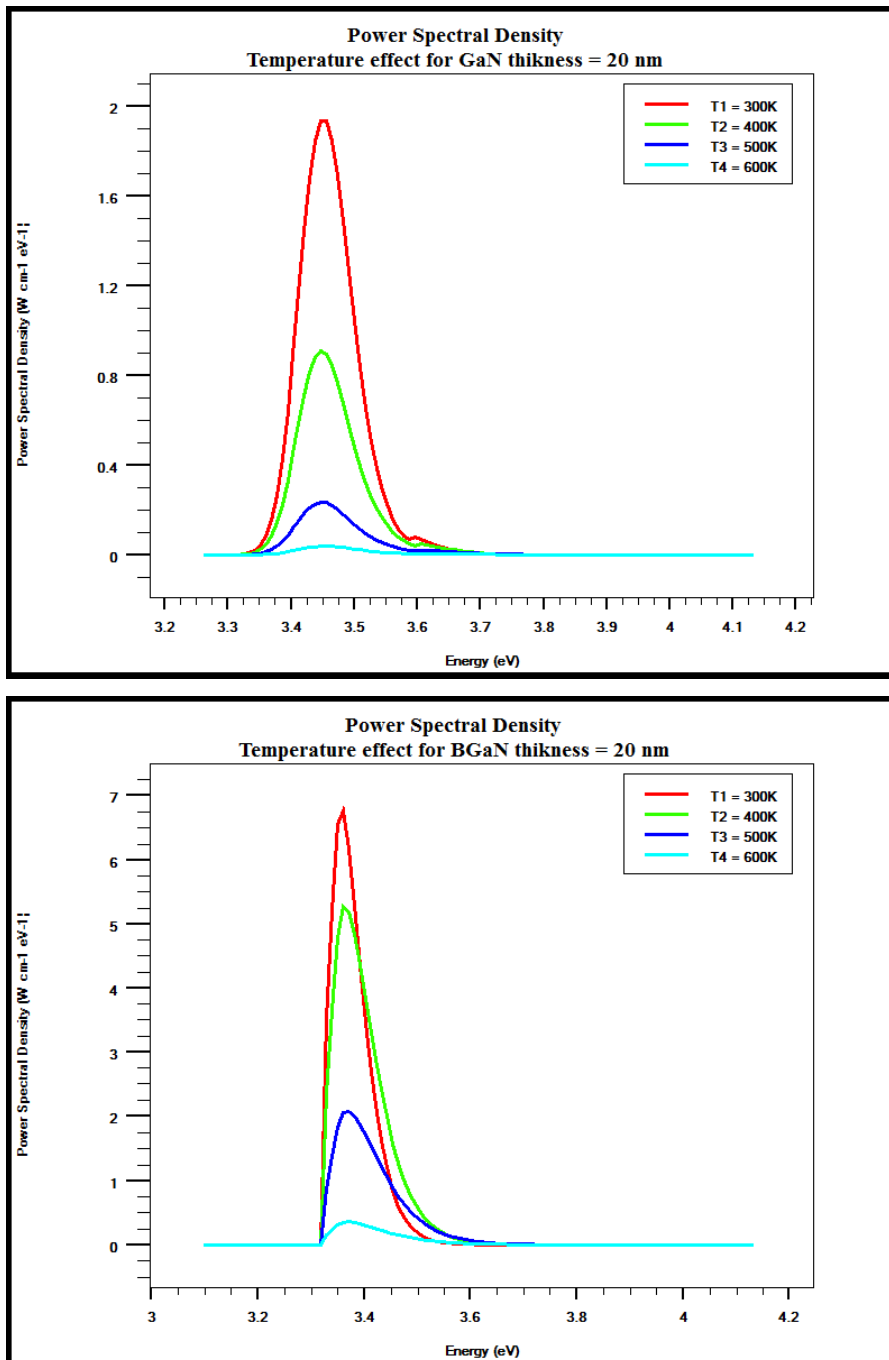


Figure 3.24 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie à différentes températures pour GaN-LED et B GaN-LED.

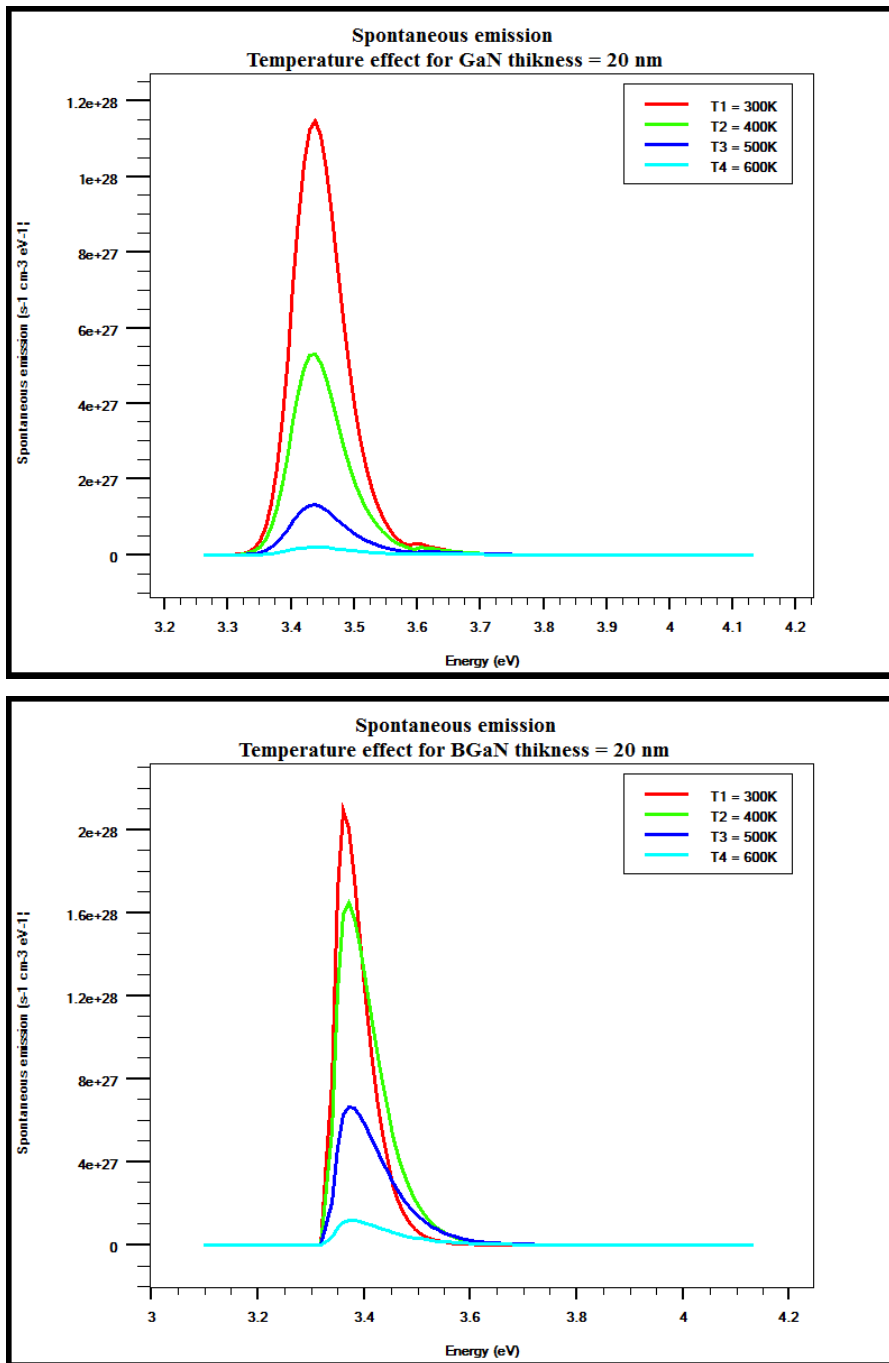


Figure 3.25 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différentes températures pour GaN-LED et B GaN-LED.

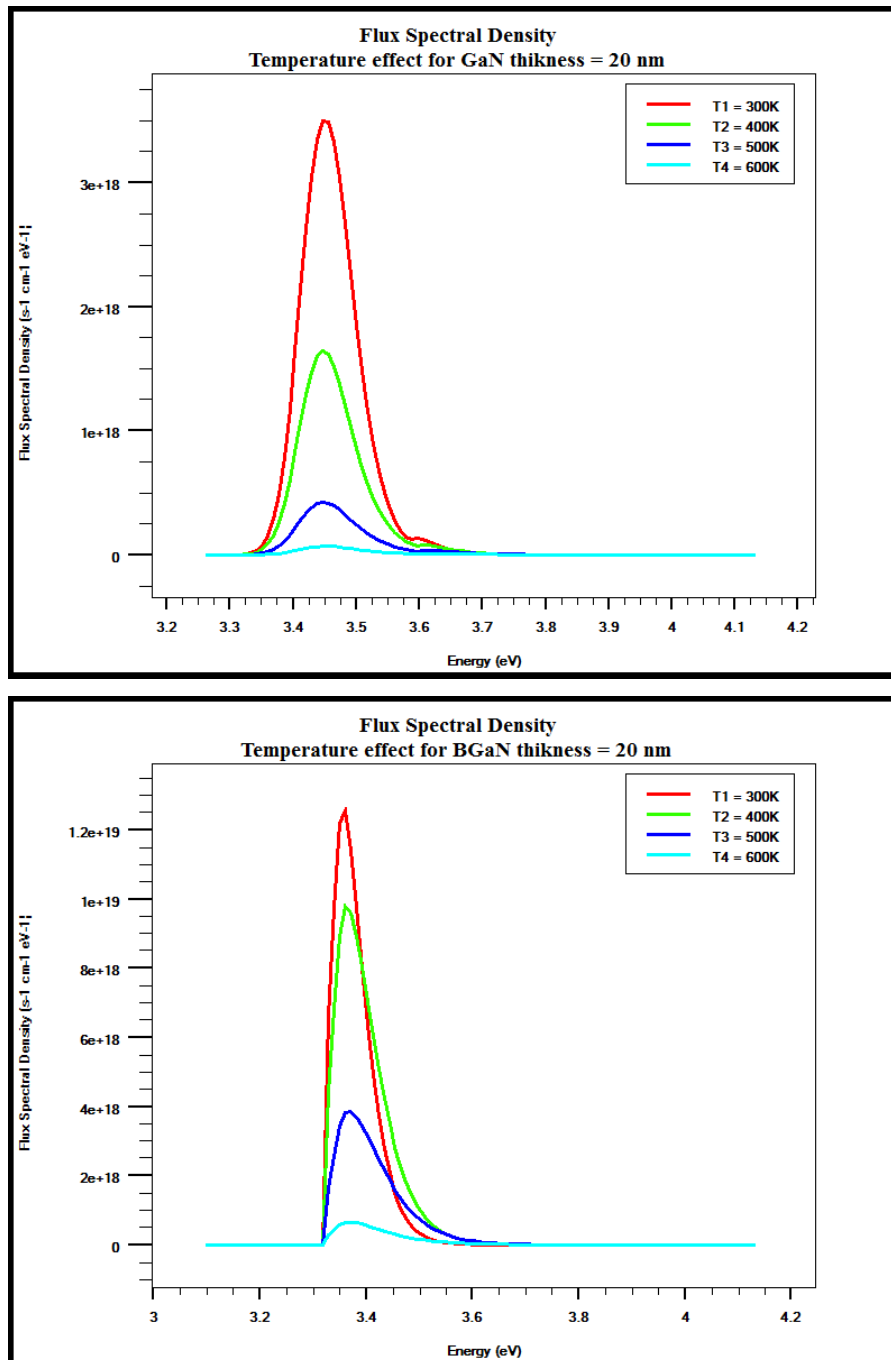


Figure 3.26 : La densité spectrale de flux en fonction de l'énergie à différentes températures pour GaN-LED et BGaN-LED.

### 3.4.1.12 Effet du dopage

Dans cette partie nous étudions l'effet des dopages de type n et de type p des couches AlGaIn dans le but de voir l'effet de ces dopages sur les performances des deux LED.

### 3.4.1.12.1 Effet du dopage de la couche p-AlGaN

Nous fixons le dopage de type n de la couche AlGaN à  $1 \times 10^{16}$  atomes/cm<sup>3</sup> et nous faisons varier le dopage de type p de la couche AlGaN de  $1 \times 10^{16}$  atomes/cm<sup>3</sup> à  $1 \times 10^{19}$  atomes/cm<sup>3</sup> avec une épaisseur de la couche active de 20 nm pour GaN-LED et B GaN-LED.

Les paramètres physiques et géométriques fixés sont :

- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 120 nm dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{18}$  cm<sup>3</sup>.
- L'épaisseur de la couche active GaN/B GaN est de 20 nm non dopé avec 1% de fraction molaire du bore.
- L'épaisseur de la couche AlGaN est de 60 nm dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{16}$  cm<sup>3</sup>.
- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 500 nm dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{18}$  cm<sup>3</sup>.
- L'épaisseur de la couche GaN est de 5 nm non dopée.

- **GaN-LED**

Le courant en fonction de la tension et la puissance émise en fonction du courant sont simulés pour différents dopages. Les résultats obtenus sont représentés respectivement par les figures 3.27 et 3.28.

Il y a une augmentation du courant et de la puissance émise avec le dopage de type p de la couche AlGaN. Nous obtenons un courant de 0.16 mA, 0.2 mA, 0.25 mA, 0.26 mA et une puissance émise de  $1.4 \times 10^{-7}$  W,  $2.56 \times 10^{-6}$  W,  $1.28 \times 10^{-5}$  W,  $1.62 \times 10^{-5}$  W respectivement pour  $p = 1 \times 10^{16}$  cm<sup>-3</sup>,  $1 \times 10^{17}$  cm<sup>-3</sup>,  $1 \times 10^{18}$  cm<sup>-3</sup> et  $1 \times 10^{19}$  cm<sup>-3</sup>.

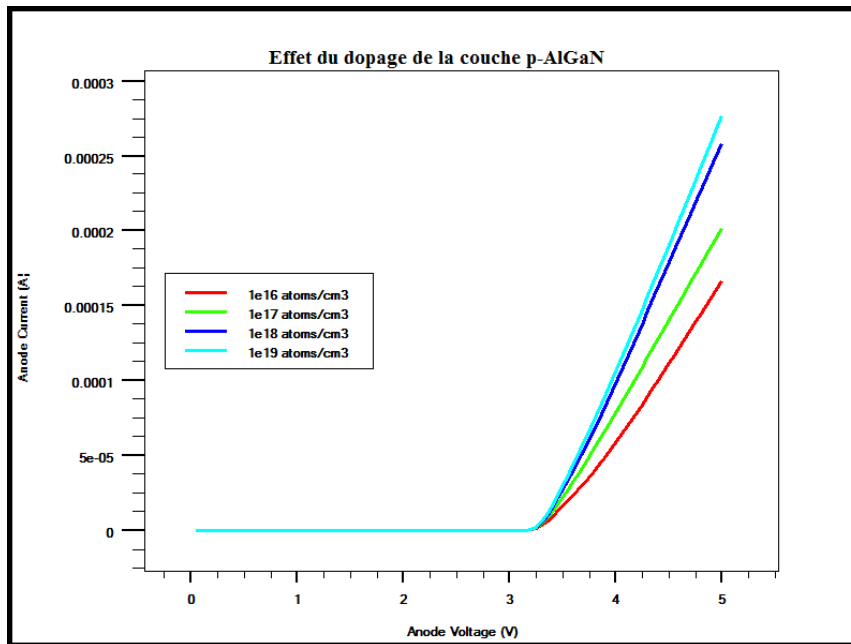


Figure 3.27 : Le courant en fonction de la tension à différents dopages de la couche p AlGaN pour GaN-LED.

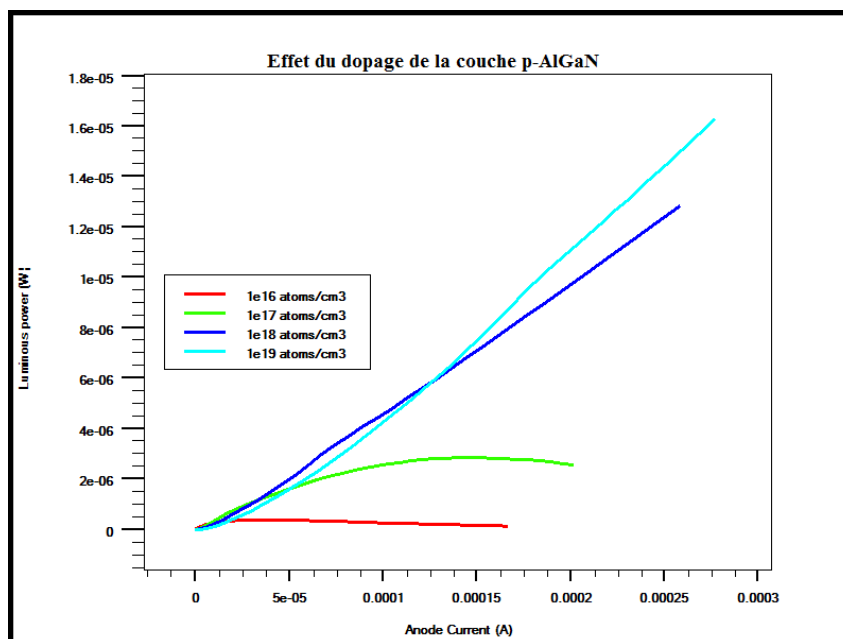


Figure 3.28 : La puissance émise en fonction du courant à différents dopages de la couche p AlGaN pour GaN-LED.

La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie, l'émission spontanée en fonction de l'énergie et la densité spectrale de flux en fonction de l'énergie, sont simulées pour différents dopages. Les résultats obtenus sont représentés respectivement par les figures 3.29, 3.30 et 3.31.

Respectivement pour  $p = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  et  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ; nous obtenons une densité spectrale de puissance  $0.016 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $0.04 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $0.044 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  et  $0.037 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de  $3.42 \text{ eV}$  environ.

Nous obtenons une émission spontanée de  $1.004 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ ,  $2.77 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ ,  $2.22 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  et  $1.3 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de  $3.41 \text{ eV}$ .

La densité spectrale de flux obtenue est  $2.94 \times 10^{16} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $7.31 \times 10^{16} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $8.01 \times 10^{16} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  et  $6.73 \times 10^{16} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de  $3.42 \text{ eV}$ .

Les performances de la LED se détériorent pour un dopage de  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  de la couche p-AlGaN : des électrons de la couche active se recombinent avec des trous qui sont en grand nombre dans p-AlGaN.

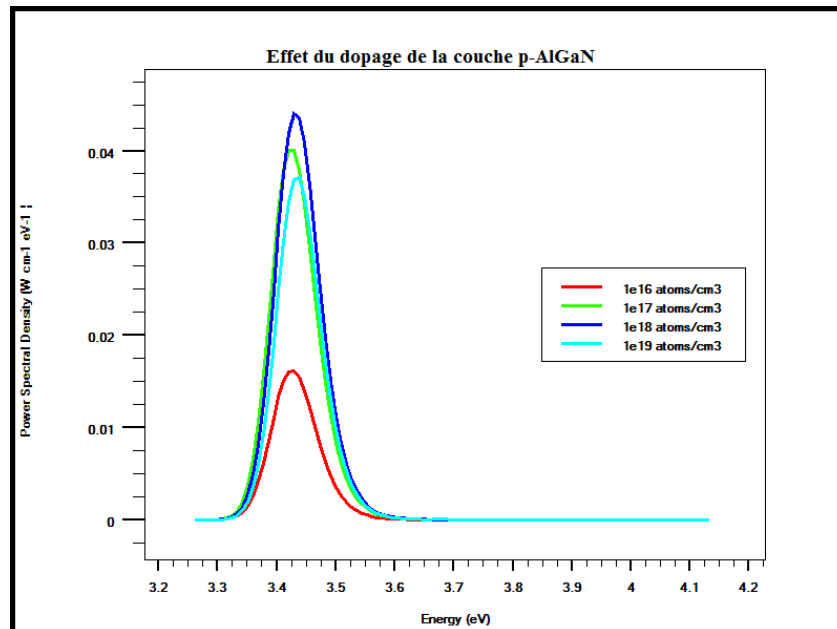


Figure 3.29 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche p AlGaN pour GaN-LED.

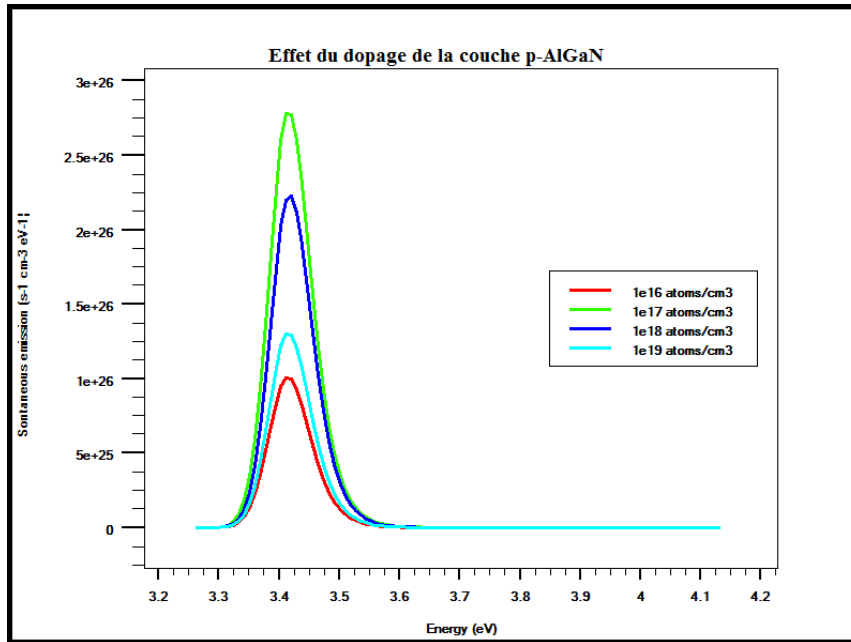


Figure 3.30 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche p AlGaN pour GaN LED.

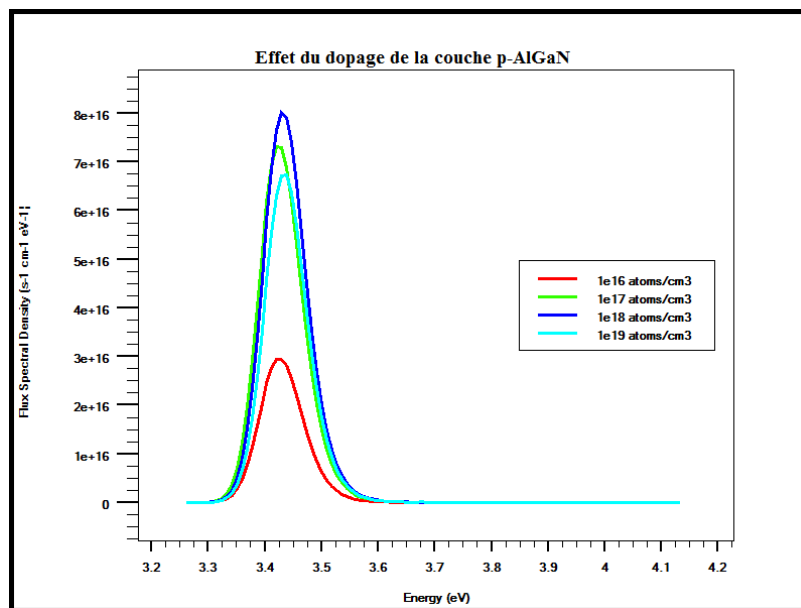


Figure 3.31 : La densité spectrale de flux en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche p AlGaN pour GaN-LED.

- **BGaN-LED**

Le courant en fonction de la tension et la puissance émise en fonction du courant sont simulés pour différents dopages. Les résultats obtenus sont représentés respectivement par les figures 3.32 et 3.33. Il y a une augmentation du courant et de la puissance émise avec le

dopage p de la couche AlGaIn. Nous obtenons un courant de 0.1 mA, 0.2 mA, 0.25 mA, 0.27 mA et une puissance émise de  $1 \times 10^{-5}$  W,  $1.23 \times 10^{-5}$  W,  $1.69 \times 10^{-5}$  W,  $1.85 \times 10^{-5}$  W.

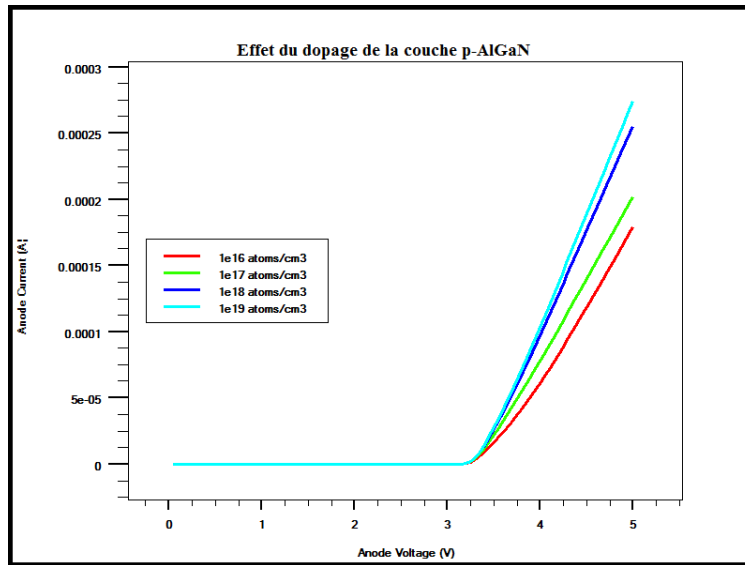


Figure 3.32 : Le courant en fonction de la tension à différents dopages de la couche p AlGaIn pour BGaN-LED.

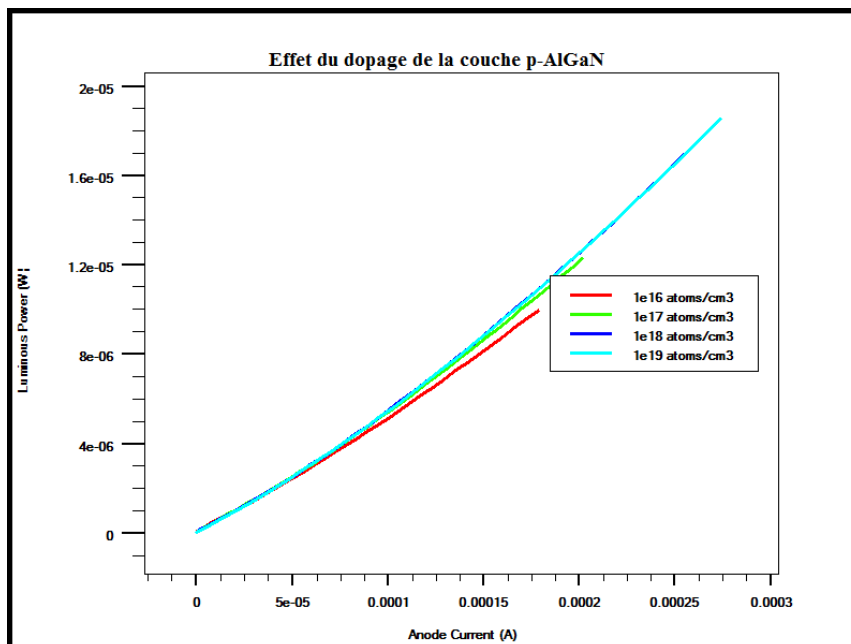


Figure 3.33 : La puissance émise en fonction du courant à différents dopages de la couche p AlGaIn pour BGaN-LED.

La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie, l'émission spontanée en fonction de l'énergie et densité spectrale de flux en fonction de l'énergie sont simulées pour



différents dopages. Les résultats obtenus sont représentés respectivement par les figures 3.34, 3.35 et 3.36.

Nous obtenons une densité spectrale de puissance de  $0.06 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $0.08 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $0.09 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  et  $0.1 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de  $3.35 \text{ eV}$ .

Nous obtenons une émission spontanée de  $1.81 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ ,  $2.45 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ ,  $2.87 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  et  $2.97 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de  $3.36 \text{ eV}$ .

Nous obtenons une densité spectrale de flux de  $1.16 \times 10^{17} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $1.57 \times 10^{17} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $1.84 \times 10^{17} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  et  $1.91 \times 10^{17} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de  $3.35 \text{ eV}$ .

BGaN est résistif, il a moins d'électrons libres que GaN ; d'où l'on a une légère amélioration des performances. Les trous en excès dans p-AlGaN ne trouvent pas d'électrons libres en regard, dans BGaN, pour se recombiner.

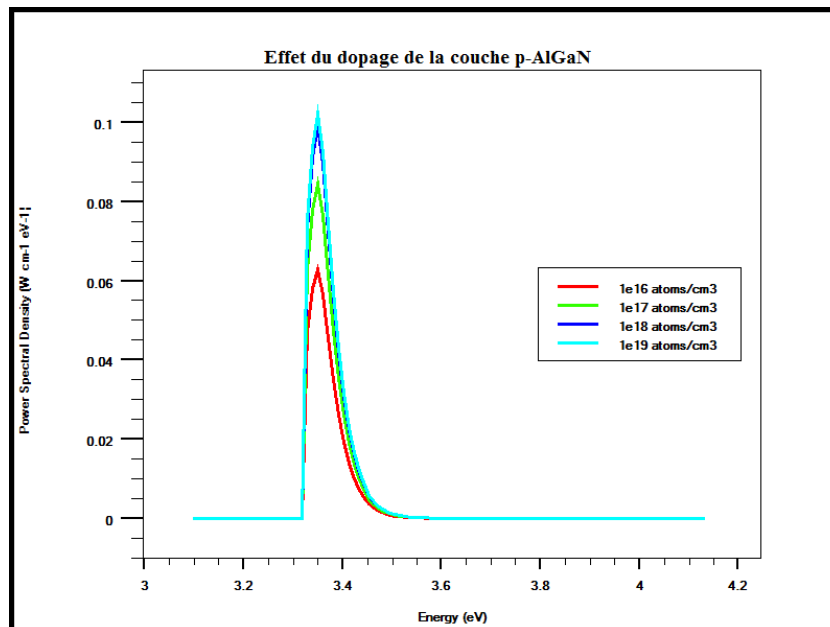


Figure 3.34 : La densité spectrale en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche p AlGaN pour BGaN-LED.

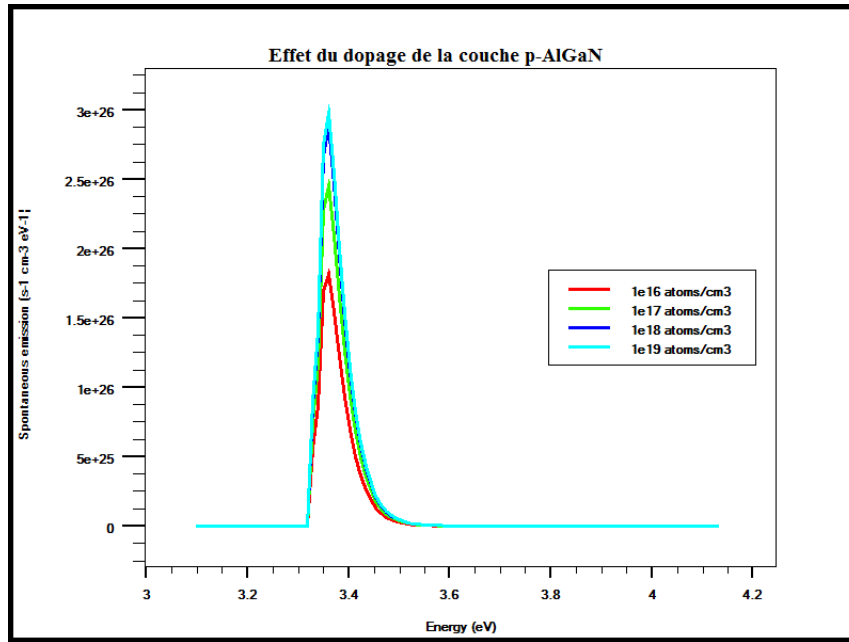


Figure 3.35 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche p AlGaN pour BGaN-LED.

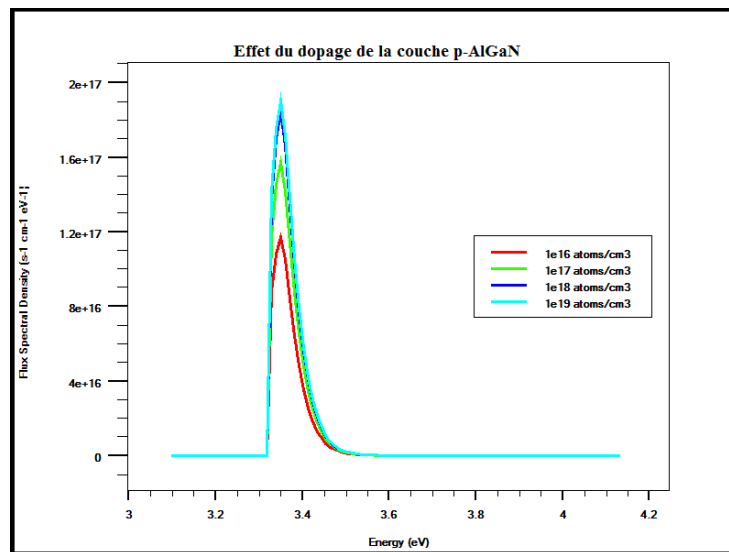


Figure 3.36 : La densité spectrale de flux en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche p AlGaN pour BGaN-LED.

### 3.4.1.12.2 Effet du dopage de la couche n-AlGaN

Nous fixons le dopage p de la couche AlGaN à  $1 \times 10^{18}$  atomes/cm<sup>3</sup> et nous faisons varier le dopage n de la couche AlGaN de  $1 \times 10^{16}$  atomes/cm<sup>3</sup> à  $1 \times 10^{19}$  atomes/cm<sup>3</sup> avec une épaisseur de la couche active de 20 nm pour GaN-LED et BGaN-LED.

Les paramètres physiques et géométriques fixés sont :

- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 120 nm dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche AlGaN est de 60 nm dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche active GaN/BGaN est de 20 nm non dopé avec 1% de fraction molaire du bore.
- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 500 nm dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche GaN est de 5 nm non dopée.

### • GaN-LED

Le courant en fonction de la tension et la puissance émise en fonction du courant sont simulés pour différents dopages. Les résultats obtenus sont représentés respectivement par les figures 3.37 et 3.38.

Nous obtenons un courant de 0.25 mA, 0.24 mA, 0.30 mA, 0.46 mA, respectivement pour  $n = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  et  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .

Il y a une augmentation de la puissance émise avec le dopage n de la couche AlGaN :

$1.28 \times 10^{-5} \text{ W}$ ,  $5.55 \times 10^{-5} \text{ W}$ , 0.41 mW et 0.61 mW.

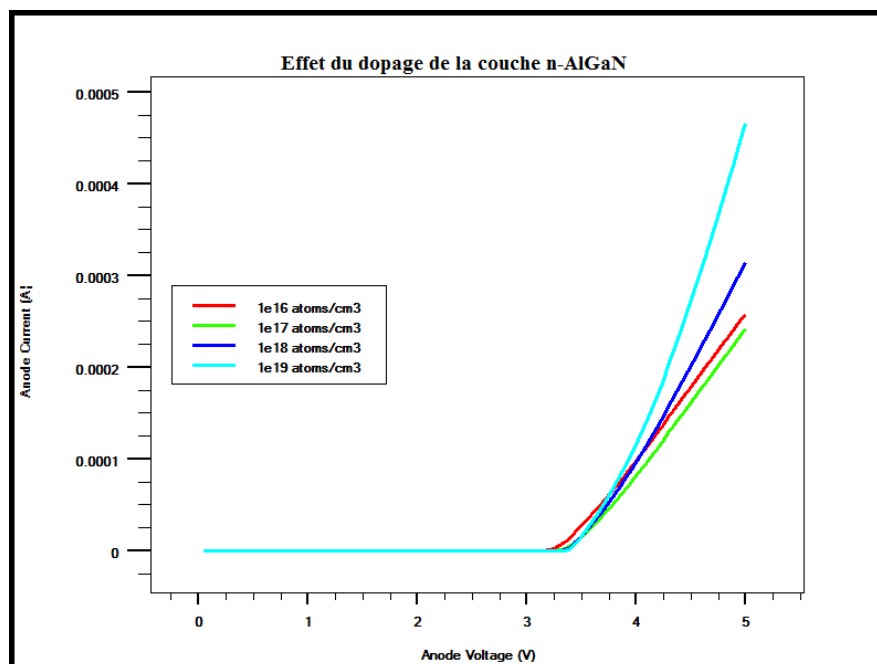


Figure 3.37 : Le courant en fonction de la tension à différents dopages de la couche n AlGaN pour GaN-LED.

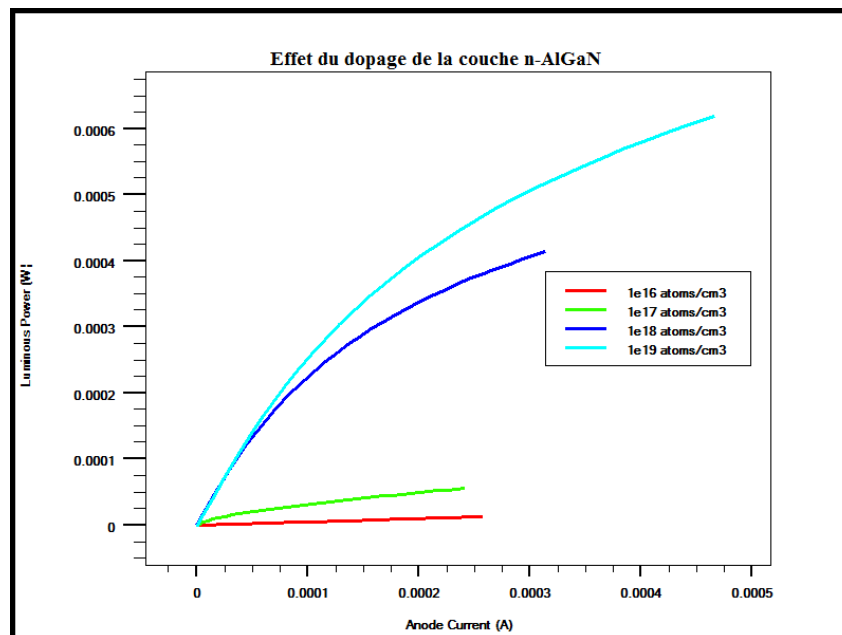


Figure 3.38 : La puissance émise en fonction du courant à différents dopages de la couche n AlGaN pour GaN-LED.

La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie, l'émission spontanée en fonction de l'énergie et la densité spectrale de flux en fonction de l'énergie sont simulées pour différents dopages ; la polarisation est fixée à 3.5 V. Les résultats obtenus sont représentés respectivement par les figures 3.39, 3.40 et 3.41.

Nous obtenons une densité spectrale de puissance  $0.044 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.42 eV,  $0.44 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.43 eV et  $2.12 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.44 eV et  $1.93 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.44 eV.

Nous obtenons une émission spontanée de  $2.22 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.42 eV,  $2.82 \times 10^{27} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.43 eV et  $1.34 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.43 eV et  $1.14 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.43 eV.

Nous obtenons une densité spectrale de flux de  $8.01 \times 10^{16} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.42 eV,  $8.03 \times 10^{17} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.43 eV et  $3.85 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.44 eV et  $3.5 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.44 eV.

On a de moins bonnes performances pour un dopage de n-AlGaN de  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  ; les électrons seraient en quantité suffisante pour qu'il y ait répulsion entre ceux du puits quantique et ceux de la couche n-AlGaN d'une part, et avec la couche de contact de la cathode d'autre part.

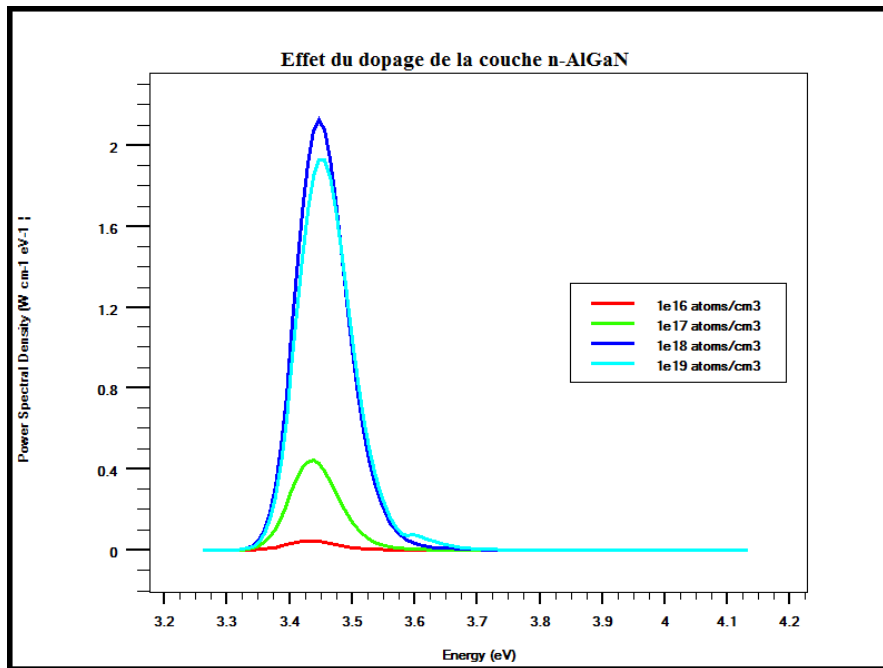


Figure 3.39 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche n AlGaN pour GaN-LED.

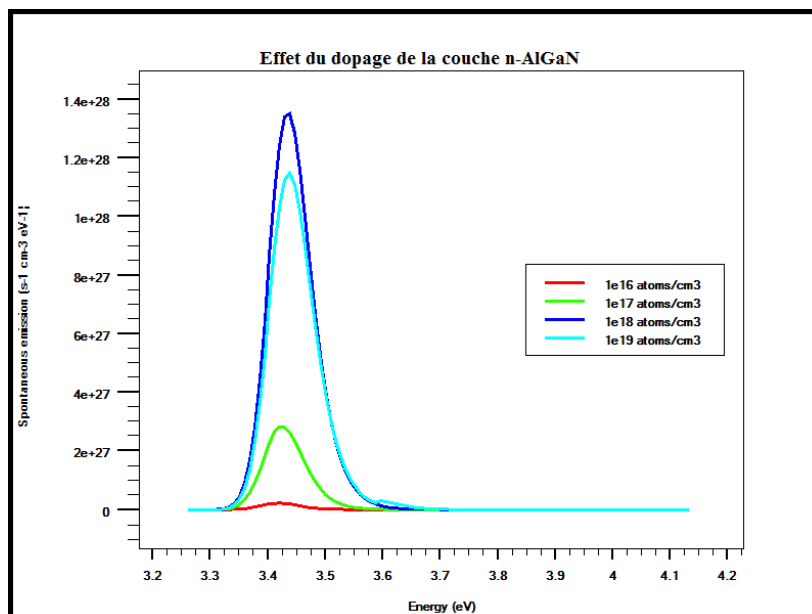


Figure 3.40 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche n AlGaN pour GaN-LED.

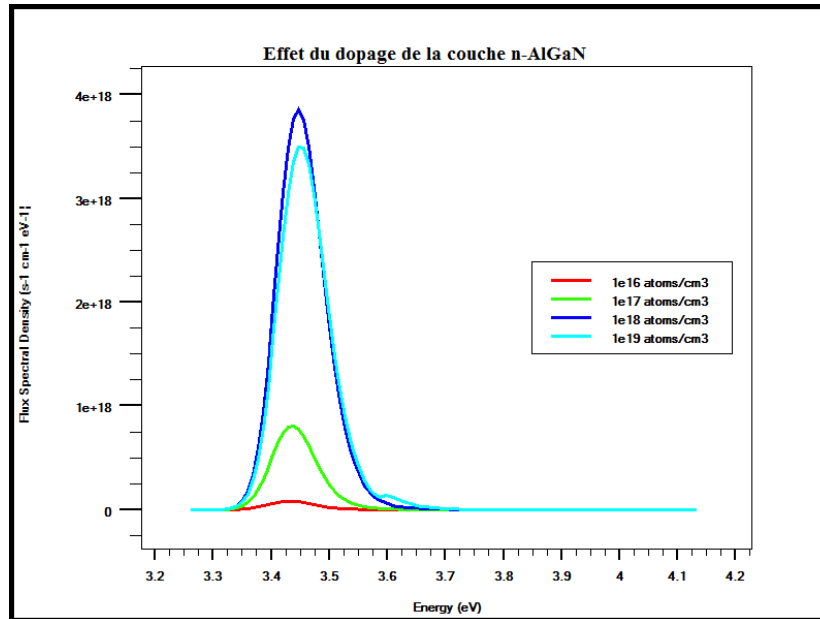


Figure 3.41 : La densité spectrale de flux en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche n AlGaN pour GaN-LED.

- **BGaN-LED**

Le courant en fonction de la tension et la puissance émise en fonction du courant sont simulés pour différents dopages de n-AlGaN. Les résultats obtenus sont représentés respectivement par les figures 3.42 et 3.43. Nous obtenons un courant de 0.25 mA, 0.23 mA et 0.24 mA, 0.26 mA pour les quatre dopages. La puissance émise augmente avec le dopage n de la couche AlGaN ; nous obtenons  $1.69 \times 10^{-5}$  W,  $6.9 \times 10^{-5}$  W et 0.69 mW, 0.89 mW.

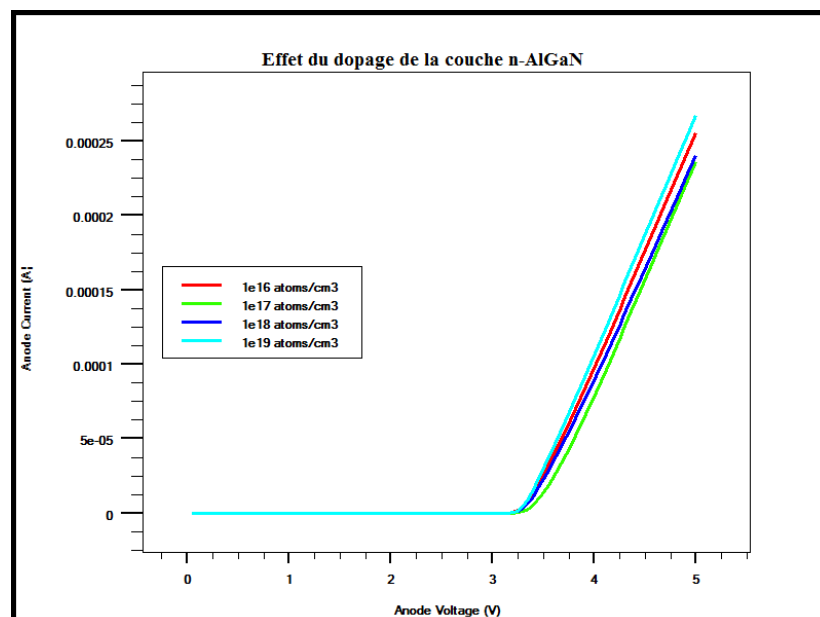


Figure 3.42 : le courant en fonction de la tension à différents dopages de la couche n AlGaN pour BGaN-LED.

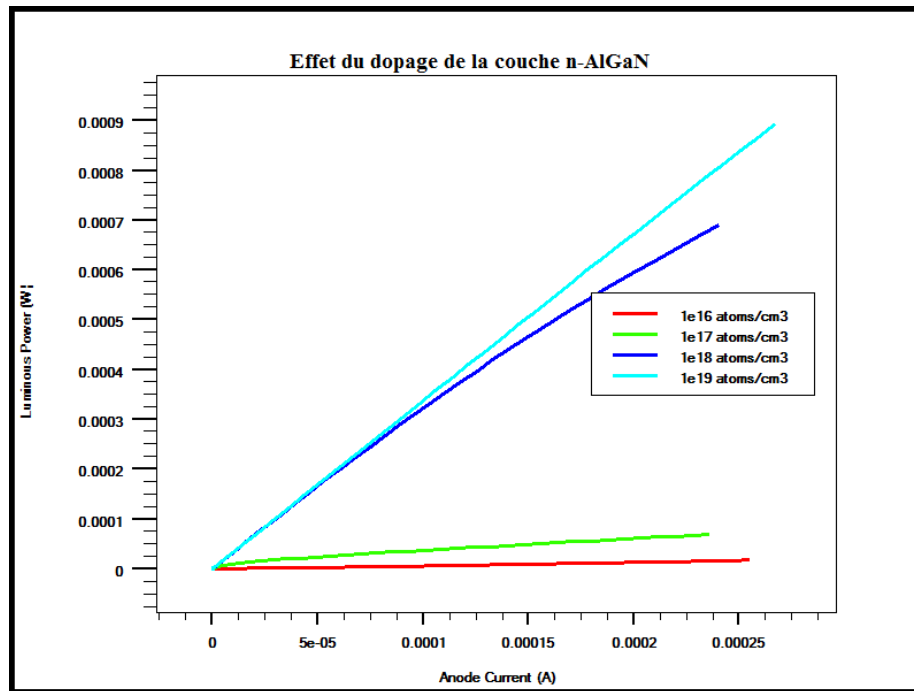


Figure 3.43 : La puissance émise en fonction de courant à différents dopages de la couche n AlGaN pour BGaN-LED.

La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie, l'émission spontanée en fonction de l'énergie et la densité spectrale de flux en fonction de l'énergie sont simulées pour différents dopages ; la polarisation est 3.5 V. Les résultats obtenus sont représentés respectivement par les figures 3.44, 3.45 et 3.46.

Nous obtenons une densité spectrale de puissance  $0.09 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $0.82 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $4.9 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  et  $6.76 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.35 eV.

Nous obtenons une émission spontanée de  $2.87 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ ,  $2.44 \times 10^{27} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ ,  $1.52 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  et  $2.09 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.36 eV.

Nous obtenons une densité spectrale de flux de  $1.84 \times 10^{17} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $1.53 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $9.11 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  et  $1.25 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.36 eV.

Le même effet se produit que pour le cas de p-AlGaN.

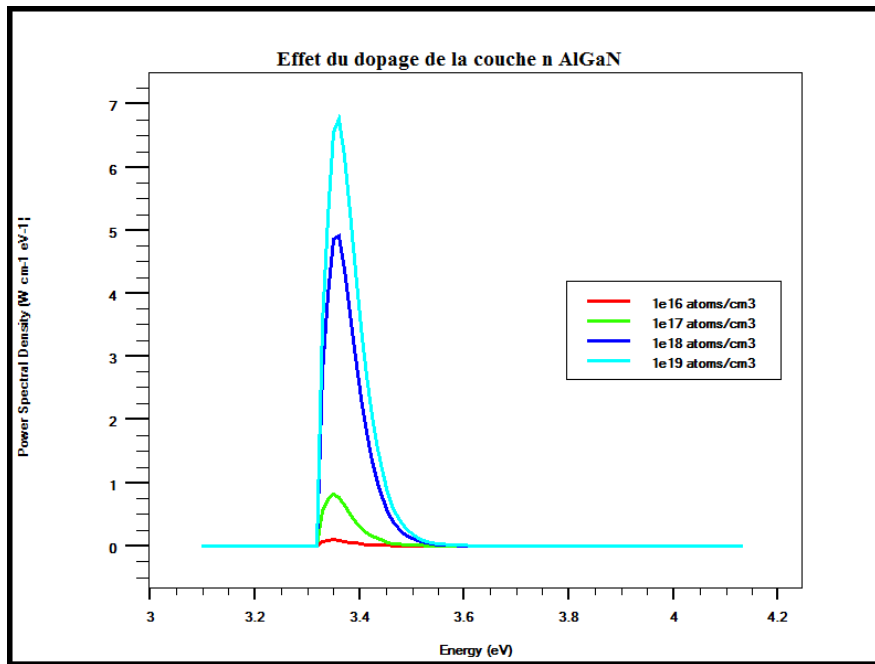


Figure 3.44 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche n AlGaIn pour BGaN-LED.

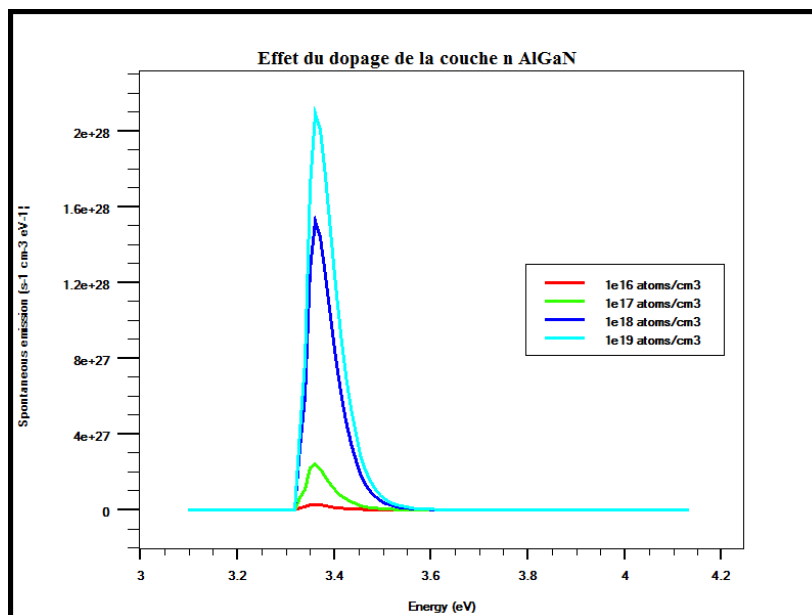


Figure 3.45 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche n AlGaIn pour BGaN-LED.



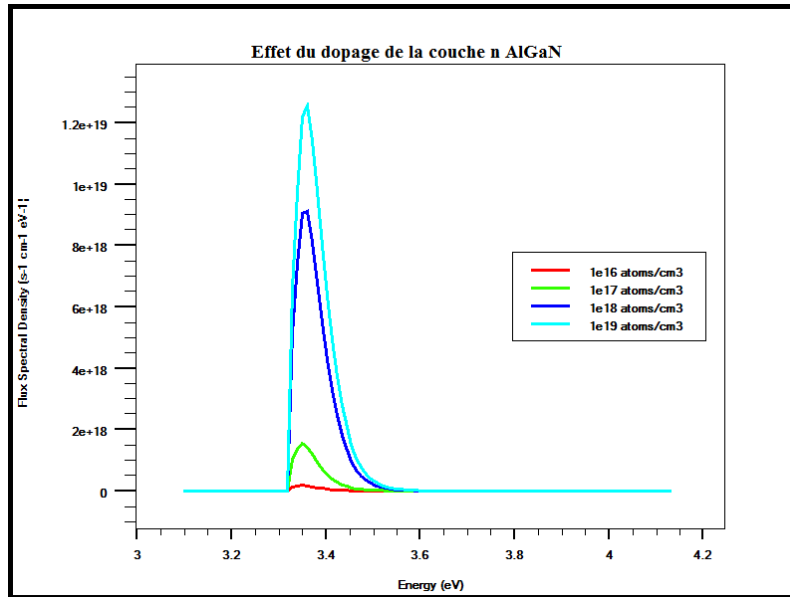


Figure 3.46 : La densité spectrale de flux en fonction de l'énergie à différents dopages de la couche n AlGaIn pour BGaN-LED.

### 3.4.2 Effets de la teneur en bore dans BGaN et des paramètres

#### 3.4.2.1 Spécification de la structure étudiée

Dans cette partie nous étudions la diode électroluminescente (LED) à simple puits quantique GaN/AlGaIn/BGaN/AlGaIn/GaN. Nous examinons l'influence de la concentration de bore dans la couche active, de son épaisseur, des dopages des couches AlGaIn, de la polarisation et de la température, dans le but d'améliorer les performances de la LED. Cette étude consiste à simuler les caractéristiques électriques et optiques.

Tout d'abord nous fixons la concentration de bore à 4% et nous faisons varier l'épaisseur de la couche active de 5 nm à 15 nm. Puis nous fixons l'épaisseur de puits quantique à 15 nm et nous modifions la concentration du bore de 1% jusqu'à 5%.

Nous avons schématisé la structure à l'aide du simulateur commercial bidimensionnel ATLAS TCAD ; la structure comporte un substrat saphir, 50 nm de nitride de gallium (GaN), 500 nm de GaN dopé type n avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , 60 nm de nitride d'aluminium de gallium  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$  dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , un puits quantique GaN non dopé, 60 nm d' $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$  dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  et 120 nm de GaN dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  (contact layer).

La coupe schématique de la LED UV est illustrée par la figure 3.47, le tableau 3.4 rassemble les énergies de gap pour BGaN à différentes concentrations de bore.

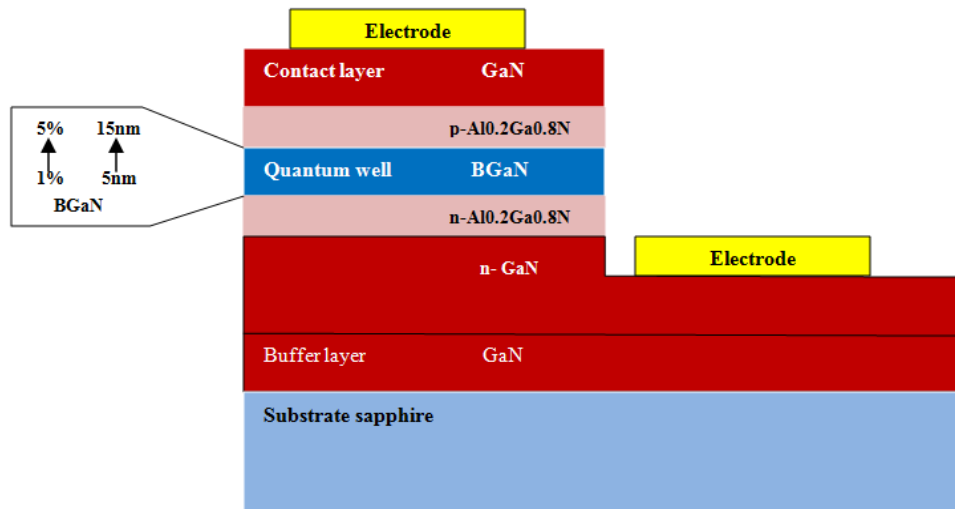


Figure 3.47 : Coupe schématique de la LED étudiée.

x (%)	Eg (eV)
1	3.32
2	3.26
3	3.19
4	3.13
5	3.07

Tableau 3.4 : Energie de gap de  $B_xGa_{1-x}N$  pour différentes concentrations du bore.

### 3.4.2.2 Digrammes de bandes

Les figures 3.48, 3.49, 3.50 et 3.51 illustrent les énergies de bande de conduction et de valence respectivement pour différentes épaisseurs et différentes concentrations de bore de la structure.

BGaN crée une double hétérojonction avec AlGaN dopé p et AlGaN dopé n. La couche de BGaN forme un puits quantique qui capture les électrons dans la bande de conduction et les trous dans la bande de valence.

Le puits quantique ne dépend pas de l'épaisseur; mais il augmente avec la fraction molaire de bore.

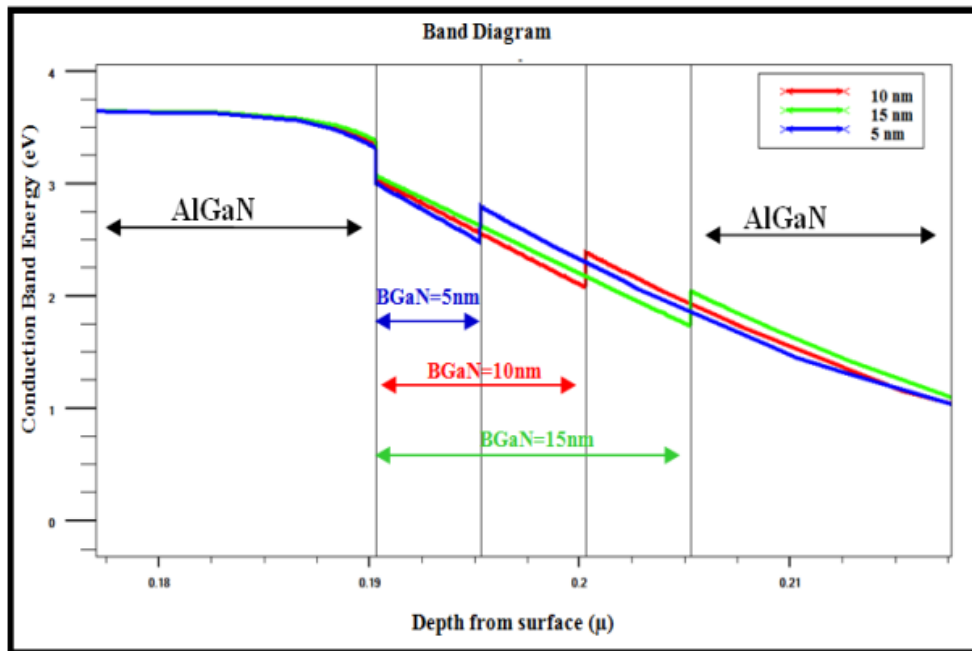


Figure 3.48 : Diagramme de bande d'énergie (bande de conduction) pour différentes épaisseurs de BGaN.

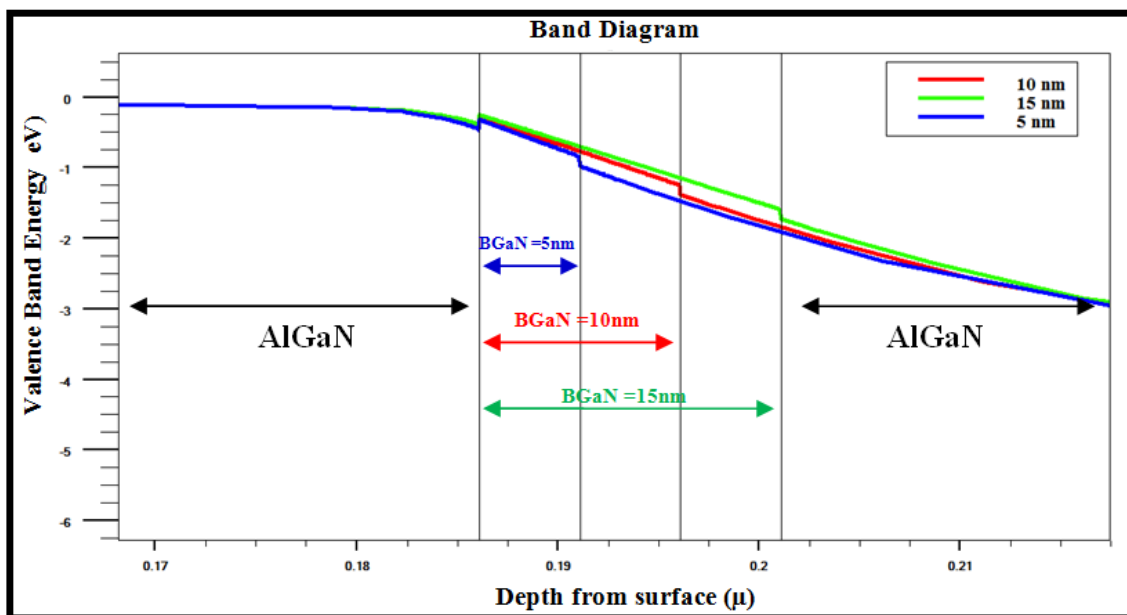


Figure 3.49 : Diagramme de bande d'énergie (bande de valence) pour différentes épaisseurs de BGaN.

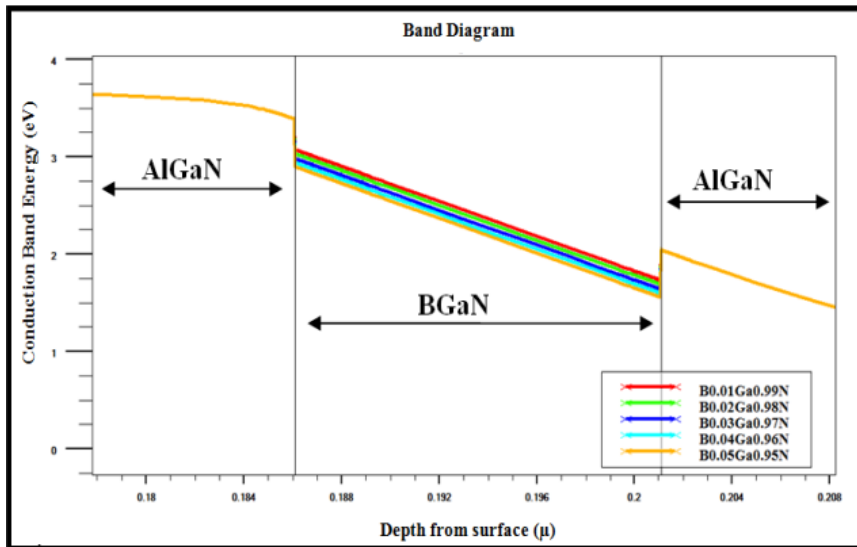


Figure 3.50 : Diagramme de bande d'énergie (bande de conduction) pour différentes concentrations de bore.

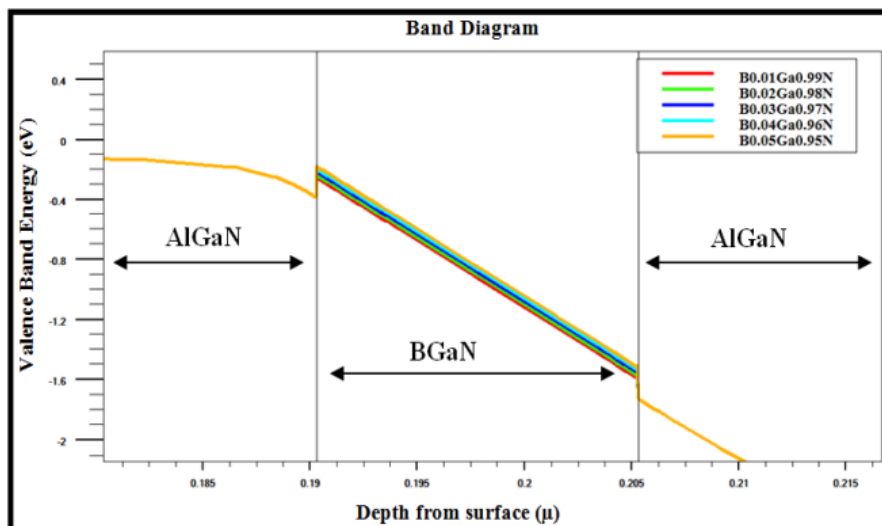


Figure 3.51 : Diagramme de bande d'énergie (bande de valence) pour différentes concentrations de bore.

### 3.4.2.3 Effet de l'épaisseur de la couche active

#### 3.4.2.3.1 Caractéristique I-V

Nous fixons la concentration de bore à 4% et varions l'épaisseur de la couche active BGaN de 5 nm à 15 nm.

Le courant en fonction de la tension est simulé pour différentes épaisseurs de BGaN ; les résultats sont illustrés par la figure 3.52.

Le courant diminue légèrement lorsque l'épaisseur de la couche active augmente ; on obtient 0.61 mA, 0.57 mA et 0.53 mA, respectivement pour 5 nm, 10 nm et 15 nm. Cela est évident car la résistance de la couche active augmente avec son épaisseur.

Plusieurs études [11,12] ont montré qu'il n'était pas nécessaire d'augmenter le courant pour augmenter l'efficacité de la LED.

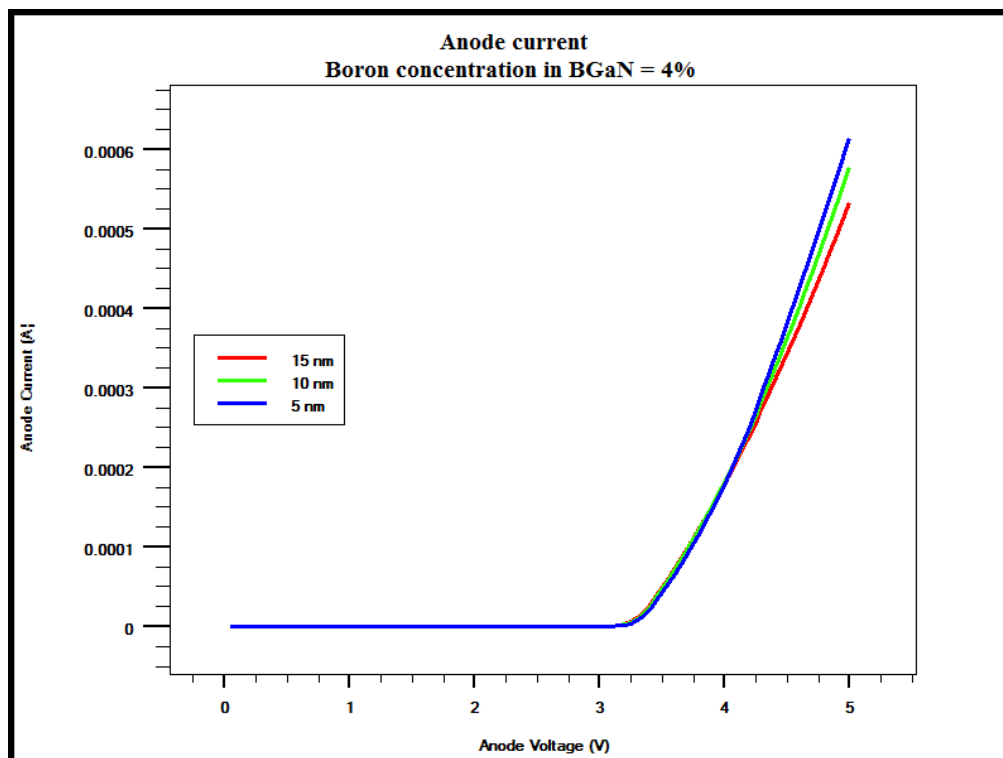


Figure 3.52 : Le courant en fonction de la tension pour différentes épaisseurs de la couche active B GaN.

### 3.4.2.3.2 Puissance émise

La puissance émise en fonction du courant est représentée par la figure 3.53. On obtient 1.04 mW à un courant de 0.61 mA, 1.34 mW à 0.57 mA et 1.43 mW à 0.53 mA, respectivement pour 5 nm, 10 nm et 15 nm.

La puissance émise augmente avec l'épaisseur de la couche active.

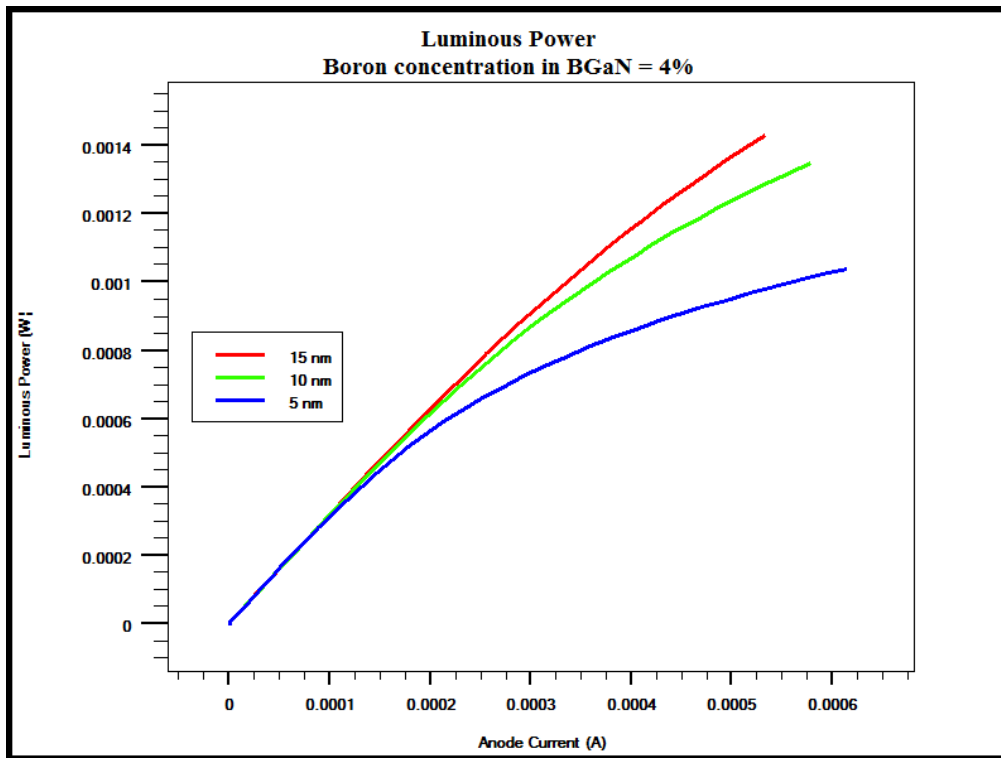


Figure 3.53 : La puissance en fonction du courant pour différentes épaisseurs de la couche active B GaN.

### 3.4.2.3.3 Densité spectrale de puissance

La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie est simulée à une polarisation de 3.5 V et les résultats sont représentés par la figure 3.54. Nous obtenons  $6.13 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour 5 nm à  $\lambda = 389.9 \text{ nm}$ ,  $7.87 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour 10 nm à  $\lambda = 391.1 \text{ nm}$  et  $8.82 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour 15 nm à  $\lambda = 391.1 \text{ nm}$ . La densité spectrale augmente avec l'épaisseur de la couche active.

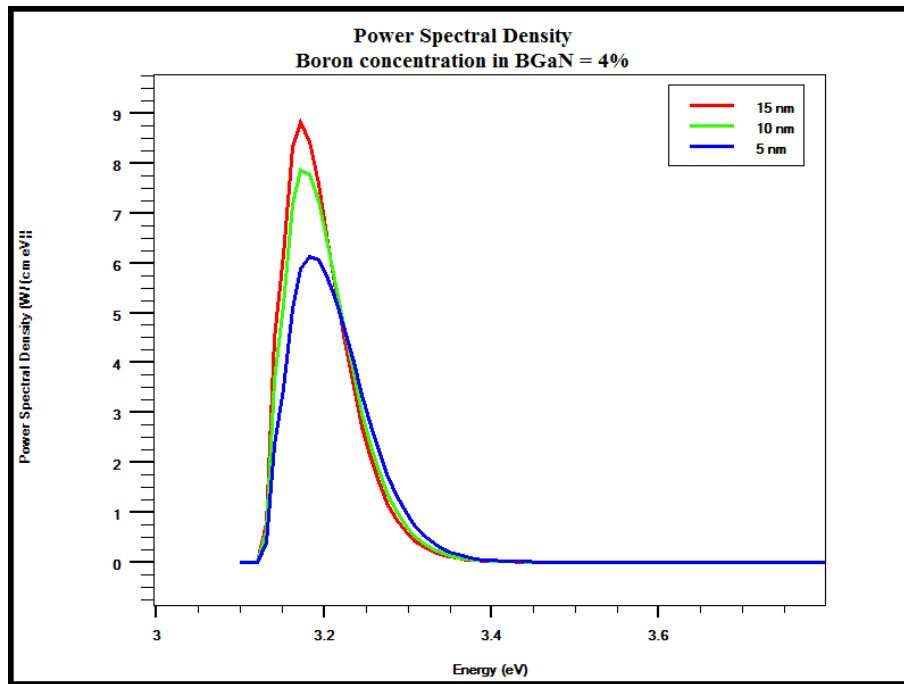


Figure 3.54 : la densité spectrale en fonction de l'énergie pour différentes épaisseurs de la couche active B<sub>0.04</sub>Ga<sub>0.96</sub>N.

### 3.4.2.4 Effet de la concentration en bore de la couche active

#### 3.4.2.4.1 Caractéristique I-V

Nous fixons l'épaisseur de la couche active à 15 nm et nous modifions la concentration de bore dans B<sub>0.04</sub>Ga<sub>0.96</sub>N de 1% (B<sub>0.01</sub>Ga<sub>0.99</sub>N) à 5% (B<sub>0.05</sub>Ga<sub>0.95</sub>N). La figure 3.55 (a) illustre le courant en fonction de la tension ; la figure 3.55 (b) est un zoom sur le courant dans la plage de tension d'anode (4.65 V – 5 V).

Le courant diminue légèrement lorsque la concentration de bore augmente ; il est de 0.57 mA pour B<sub>0.01</sub>Ga<sub>0.99</sub>N et de 0.52 mA pour B<sub>0.05</sub>Ga<sub>0.95</sub>N, à 5 V. Cela est normal puisque la résistance du ternaire B<sub>0.04</sub>Ga<sub>0.96</sub>N augmente avec le taux de bore.

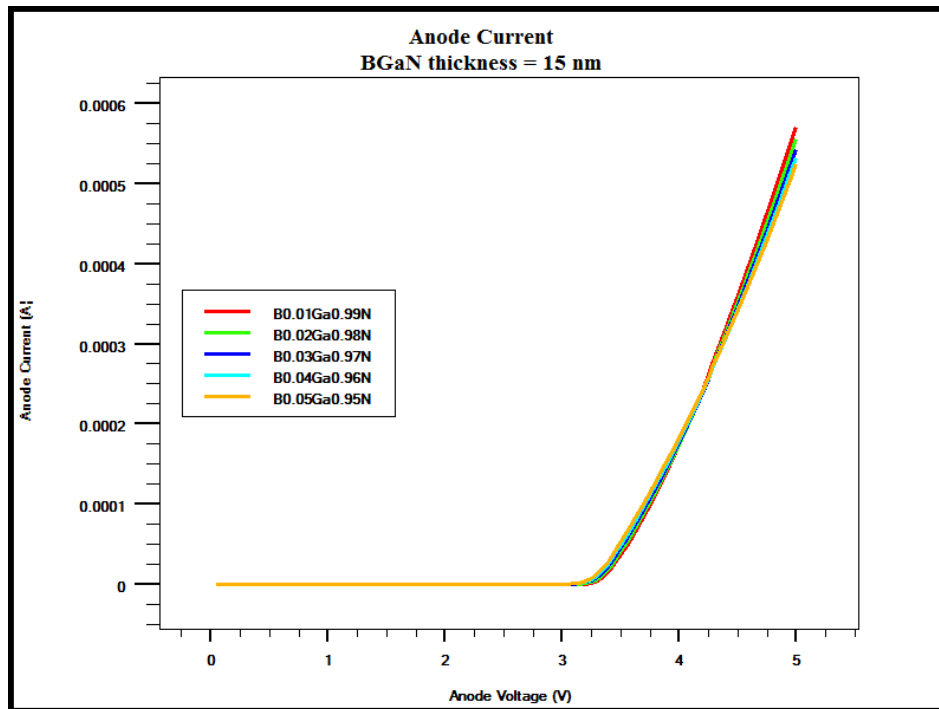


Figure 3.55 (a) : Le courant en fonction de la tension pour différentes concentrations du bore.

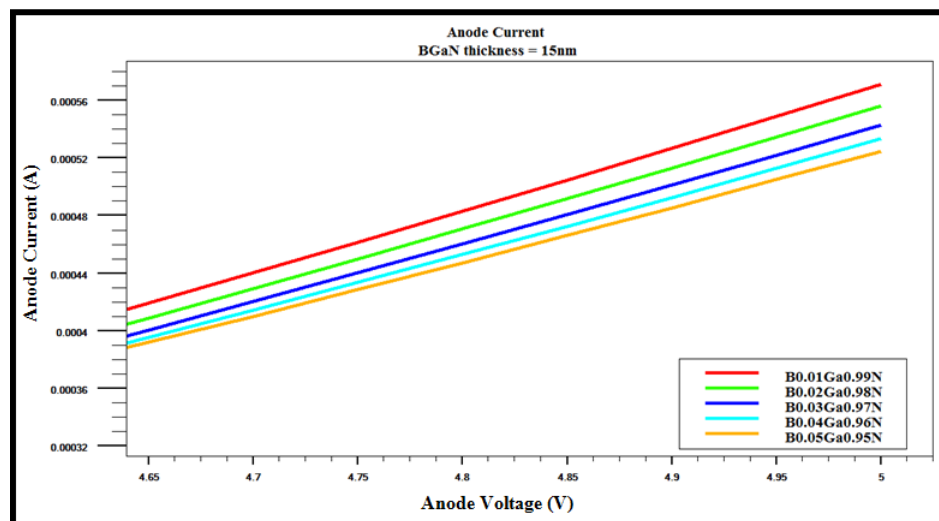


Figure 3.55 : (b) Une section de zoom du courant.

#### 3.4.2.4.2 Puissance émise

La puissance émise en fonction du courant est illustrée par la figure 3.56, elle augmente légèrement lorsque la concentration en bore augmente ; elle est 1.18 mW pour  $B_{0.01}Ga_{0.99}N$  pour un courant d'anode de 0.57 mA, et 1.46 mW pour  $B_{0.05}Ga_{0.95}N$  pour un courant de 0.52 mA.

Malgré la diminution du courant quand le taux de bore dans BGaN augmente, la puissance augmente car les recombinaisons Auger diminuent.



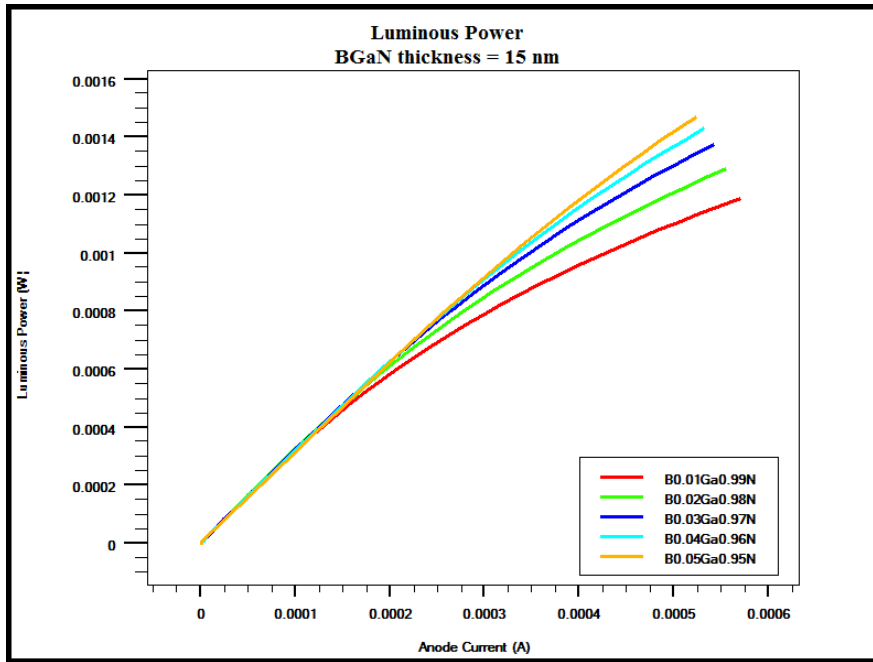


Figure 3.56 : La puissance en fonction du courant pour différentes concentrations du bore.

#### 3.4.2.4.3 Densité spectrale de puissance, émission spontanée et densité de flux spectrale

La densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale sont simulées à une polarisation de 3.5 V ; les résultats sont représentés respectivement par les figures 3.57, 3.58 et 3.59. Les valeurs obtenues sont données respectivement dans les tableaux 3.5, 3.6 et 3.7.

Les trois performances de la LED UV sont améliorées avec l'augmentation du taux de bore dans B GaN, avec un glissement du pic vers des énergies plus basses ; mais on est toujours dans la gamme UV-A. Le facteur le plus décisif est la recombinaison Auger qui s'améliore avec le taux de bore.

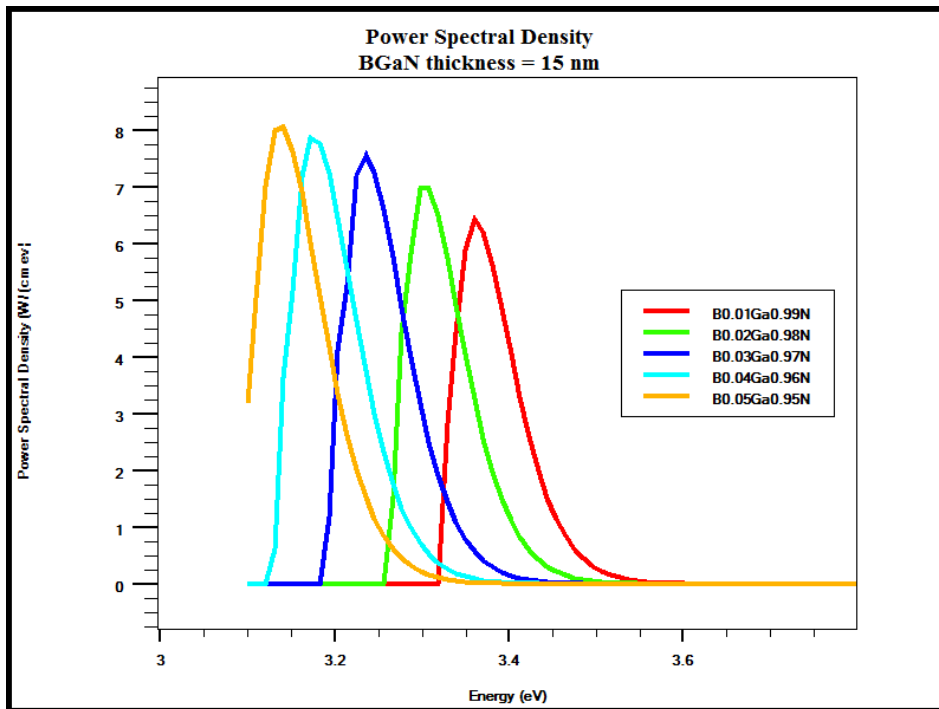


Figure 3.57 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie pour différentes concentrations du bore.

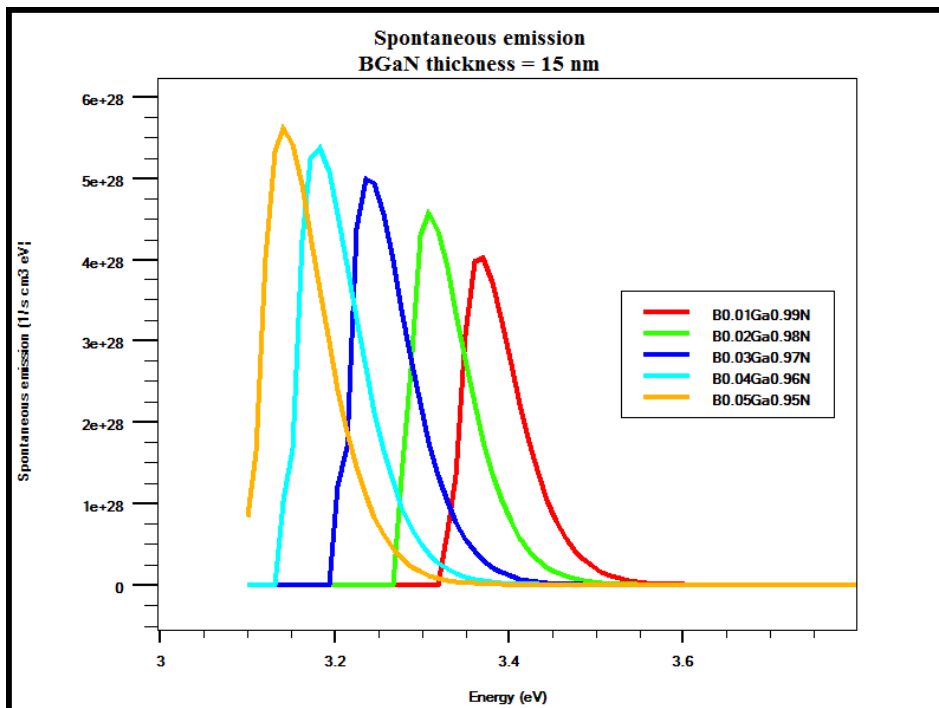


Figure 3.58 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie pour différentes concentrations du bore.

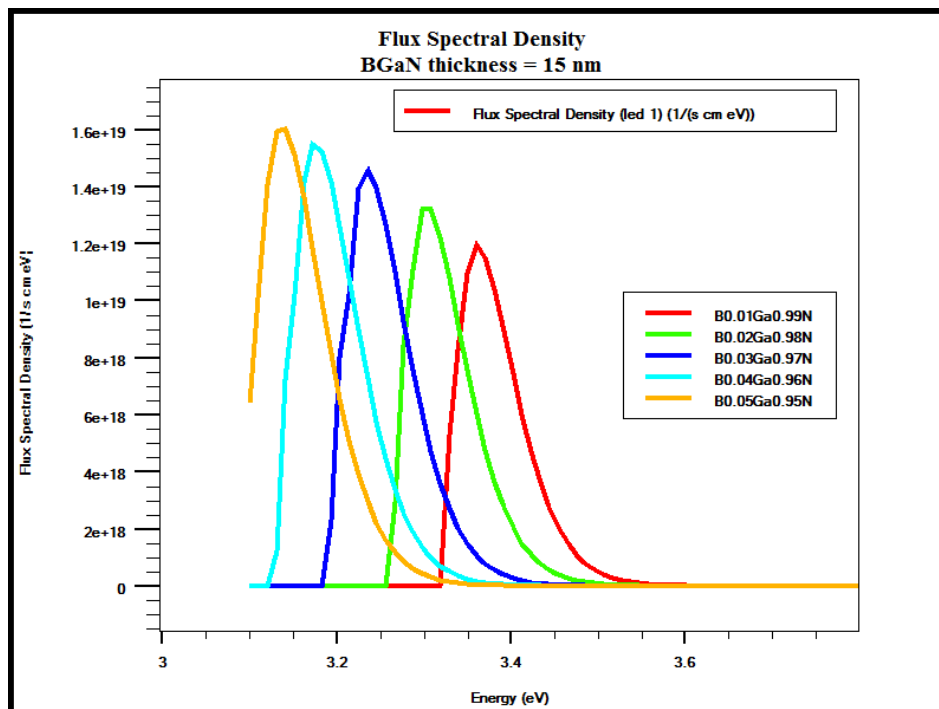


Figure 3.59 : La densité de flux spectrale en fonction de l'énergie pour différentes concentrations du bore.

Concentration de bore	1%	2%	3%	4%	5%
Energie du pic (eV)	3.36	3.29	3.23	3.17	3.11
$\lambda$ (nm)	369	376.8	383.9	391.1	398.7
Densité spectrale de puissance ( $\text{W cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$ )	7.21	7.86	8.35	8.82	9.14

Tableau 3.5 : La densité spectrale de puissance.

Concentration de bore	1%	2%	3%	4%	5%
Energie du pic (eV)	3.36	3.30	3.23	3.17	3.12
$\lambda$ (nm)	369	375.7	383.9	391.1	397.4
Emission spontanée $\times 10^{28}$ ( $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ )	2.98	3.34	3.69	3.92	4.21

Tableau 3.6 : L'émission spontanée.

Concentration de bore	1%	2%	3%	4%	5%
Energie du pic (eV)	3.36	3.29	3.23	3.17	3.11
$\lambda$ (nm)	369	376.8	383.9	391.1	398.7
Densité de flux spectrale $\times 10^{19}$ ( $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$ )	1.34	1.48	1.61	1.73	1.83

Tableau 3.7 : La densité de flux spectrale.

### 3.4.2.5 Effet de la polarisation sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale

Dans cette partie nous étudions la variation de la tension qui varie de 3.5 V à 5 V sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale qui sont représentées respectivement dans les figures 3.60, 3.61 et 3.62.

Lors de la simulation, les paramètres physiques et géométriques fixés sont les suivants :

- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 120 nm dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche AlGaIn est de 60 nm dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche active BGaIn est de 15 nm non dopé avec 1% de fraction molaire du bore.
- L'épaisseur de la couche AlGaIn est de 60 nm dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 500 nm dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche GaN est de 50 nm non dopée.

Nous obtenons un pic de densité spectrale de puissance :  $7.21 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie 3.36 eV pour une tension de 3.5 V,  $24.02 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie 3.38 eV pour une tension de 4 V ;  $42.6 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie 3.4 eV pour une tension de 5 V.

Nous obtenons un pic de l'émission spontanée de  $2.98 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.36 eV pour une tension de 3.5 V,  $1.06 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.38 eV pour une tension de 4 V ;  $1.94 \times 10^{29} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.4 eV pour une tension de 5 V.

Nous obtenons un pic de densité de flux spectrale de  $1.34 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.36 eV pour une tension de 3.5 V ;  $4.43 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.38 eV pour une tension de 4 V ;  $7.81 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à une énergie de 3.4 eV pour une tension de 5 V.

La densité spectrale de puissance augmente avec la tension appliquée, car le nombre de porteurs injectés dans le puits quantique augmente, ainsi que la recombinaison radiative. Il convient également de noter que l'énergie du maximum se déplace vers les énergies supérieures avec la tension appliquée ; des porteurs de charge dans les vallées situées au-dessus de la vallée centrale sont impliqués.

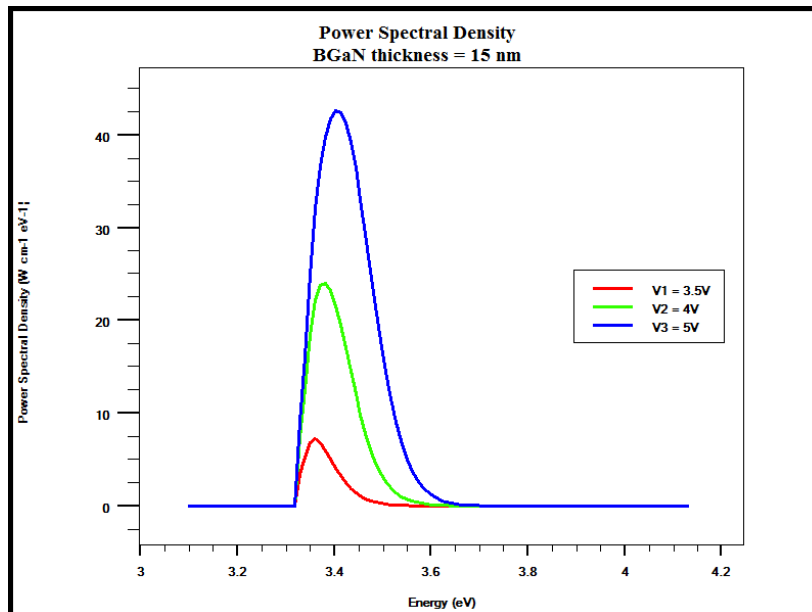


Figure 3.60 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie à différentes tensions.

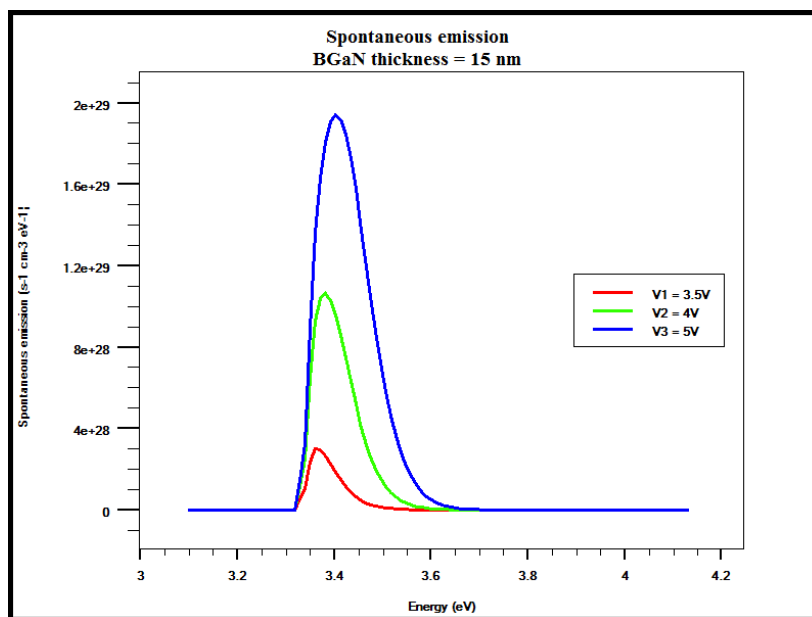


Figure 3.61 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différentes tensions.

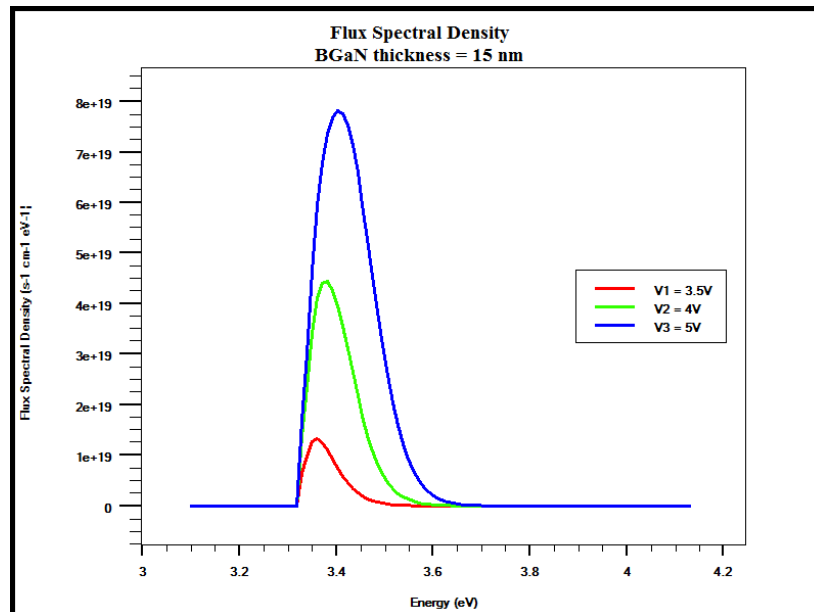


Figure 3.62 : La densité de flux spectrale en fonction de l'énergie à différentes tensions.

### 3.4.2.6 Effet de la température sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale

Ces trois caractéristiques en fonction de l'énergie à une polarisation de 3.5 V sont représentées par les figures 3.63, 3.64 et 3.65.

Lors de la simulation, les paramètres physiques et géométriques fixés sont les suivants :

- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 120 nm dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche AlGaIn est de 60 nm dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche active BGaN est de 15 nm non dopé avec 1% de fraction molaire du bore.
- L'épaisseur de la couche AlGaIn est de 60 nm dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 500 nm dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche GaN est de 50 nm non dopée.

La densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale diminuent lorsque la température augmente. La densité spectrale de puissance diminue de  $7.21 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV jusqu'à  $0.44 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de

3.37 eV à T = 600 K ; l'émission spontanée diminue de  $2.98 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV jusqu'à  $1.9 \times 10^{27} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.37 eV à T = 600 K ; la densité de flux spectrale diminue de  $1.34 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV jusqu'à  $8.24 \times 10^{17} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.37 eV à T = 600 K.

Quand la température augmente, les interactions électrons-électrons et électrons-phonons augmente ; ce phénomène influe grandement sur les performances de la LED qui vont se détériorer.

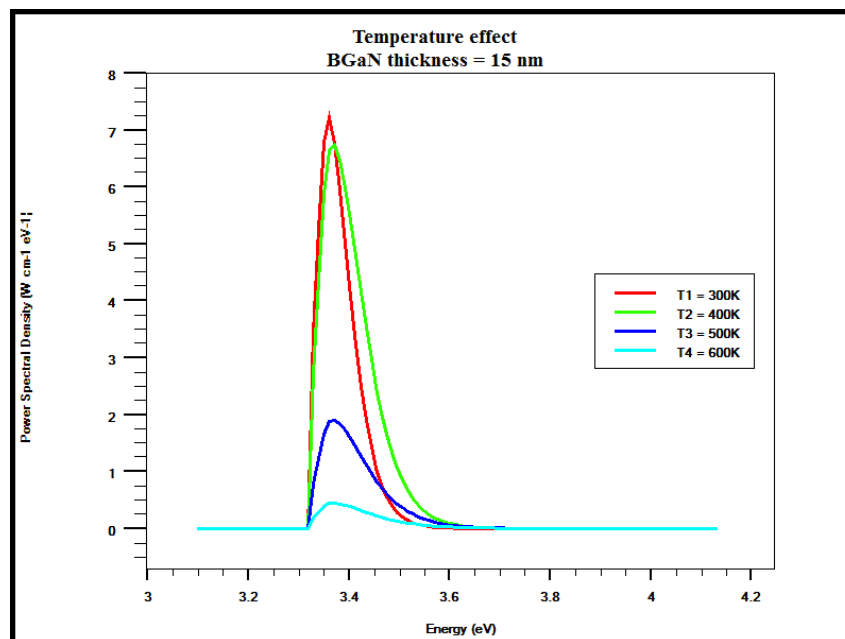


Figure 3.63 : La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie à différentes températures.

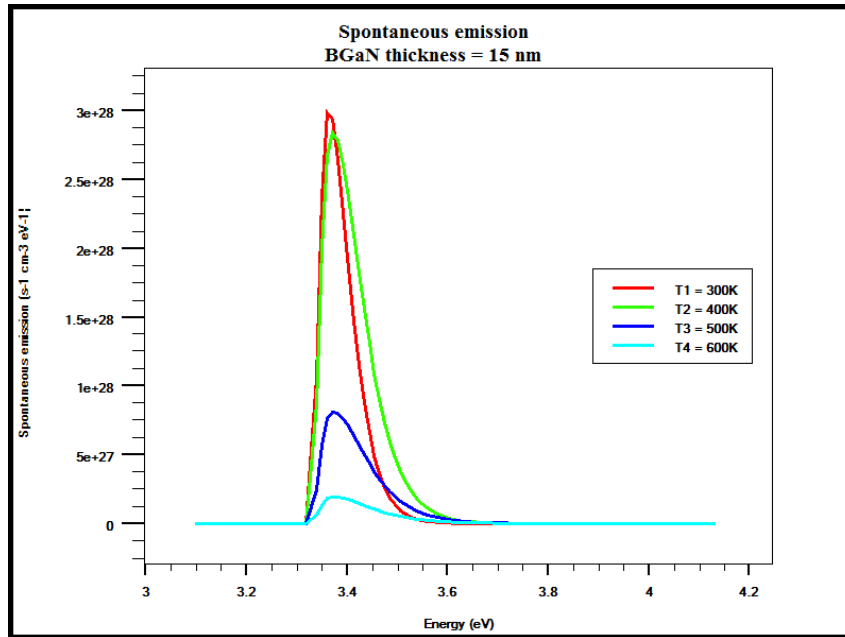


Figure 3.64 : L'émission spontanée en fonction de l'énergie à différentes températures.

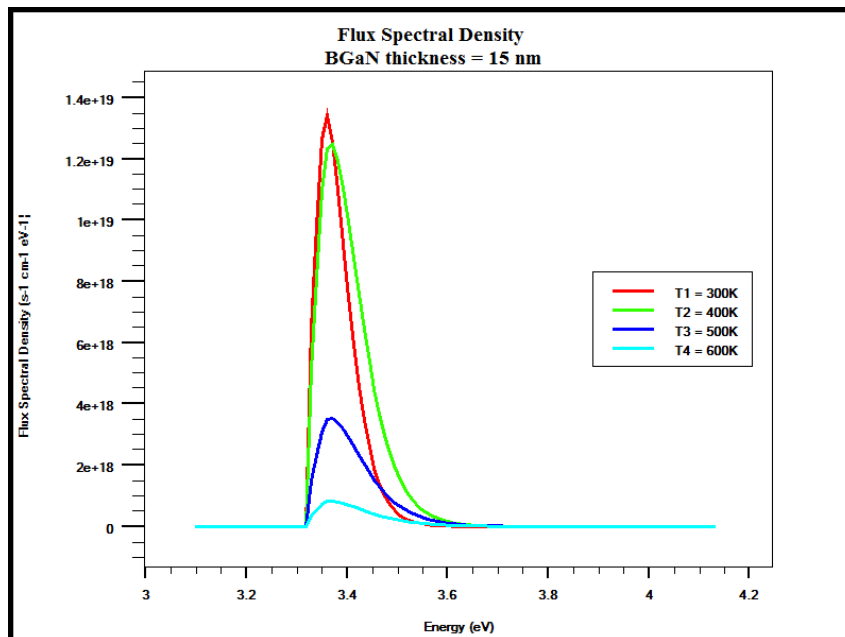


Figure 3.65 : La densité de flux spectrale en fonction de l'énergie à différentes températures.

### 3.4.2.7 Effet des dopages p et n des couches AlGaIn

#### 3.4.2.7.1 Effet du dopage de la couche p-AlGaIn

Nous fixons le dopage de type n de la couche AlGaIn à  $1 \times 10^{16}$  atomes/cm<sup>3</sup> et nous faisons varier le dopage p de la couche AlGaIn de  $1 \times 10^{16}$  atomes/cm<sup>3</sup> à  $1 \times 10^{19}$  atomes/cm<sup>3</sup>.



Lors de la simulation, les paramètres physiques et géométriques fixés sont les suivants :

- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 120 nm dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche active B GaN est de 15 nm non dopé avec 1% de fraction molaire du bore.
- L'épaisseur de la couche AlGaN est de 60 nm dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 500 nm dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .
- L'épaisseur de la couche GaN est de 50 nm non dopée.

#### 3.4.2.7.1.1 Effet sur la caractéristique I-V et la puissance émise

Le courant en fonction de la tension appliquée et la puissance émise en fonction du courant injecté sont illustrés par les figures 3.66 et 3.67.

Nous observons une augmentation de courant et de puissance avec le dopage de la couche p AlGaN.

Nous obtenons un courant de 0.39 mA, 0.42 mA et 0.51 mA, 0.62 mA à 5 V, respectivement pour  $p = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ; une puissance de 0.9 mW, 0.95 mW, 1.1 mW et  $5.1 \times 10^{-5} \text{ W}$  respectivement pour  $p = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  et  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .

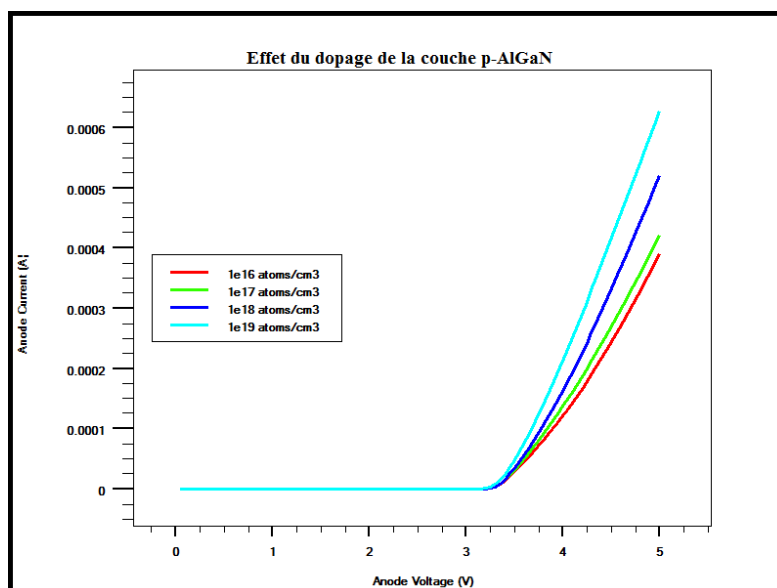


Figure 3.66 : Courant en fonction de la tension pour différents dopages de la couche p-AlGaN.

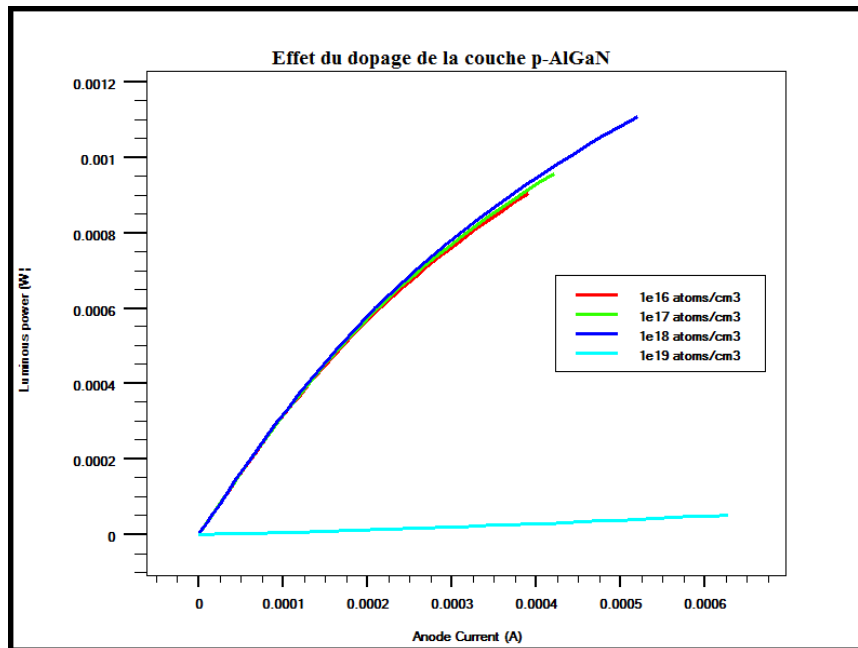


Figure 3.67 : Puissance en fonction de courant pour différents dopages de la couche p-AlGaN.

#### 3.4.2.7.1.2 Effet sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité de flux spectrale

La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie, l'émission spontanée en fonction de l'énergie et la densité spectrale de flux en fonction de l'énergie sont simulées pour différents dopages à 3.5 V. Les résultats obtenus sont représentés respectivement par les figures 3.68, 3.69 et 3.70.

Nous obtenons une densité spectrale de puissance de  $5.7 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $6.26 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $6.94 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  et  $0.16 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV.

Nous obtenons une émission spontanée de  $2.36 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ ,  $2.59 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ ,  $2.86 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  et  $6.57 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV.

Nous obtenons une densité spectrale de flux de  $1.06 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $1.16 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ ,  $1.28 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  et  $3.09 \times 10^{17} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV.

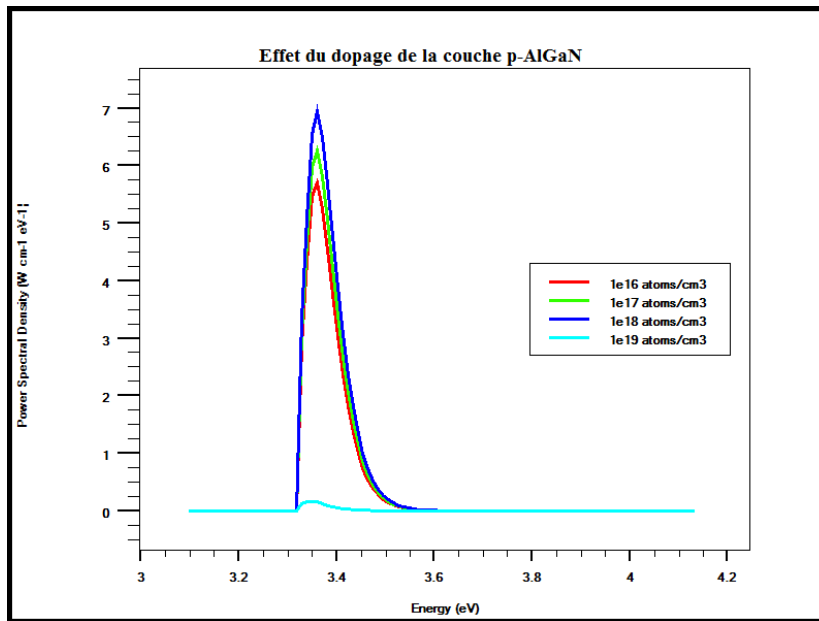


Figure 3.68 : Densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie pour différents dopages de la couche p-AlGaN.

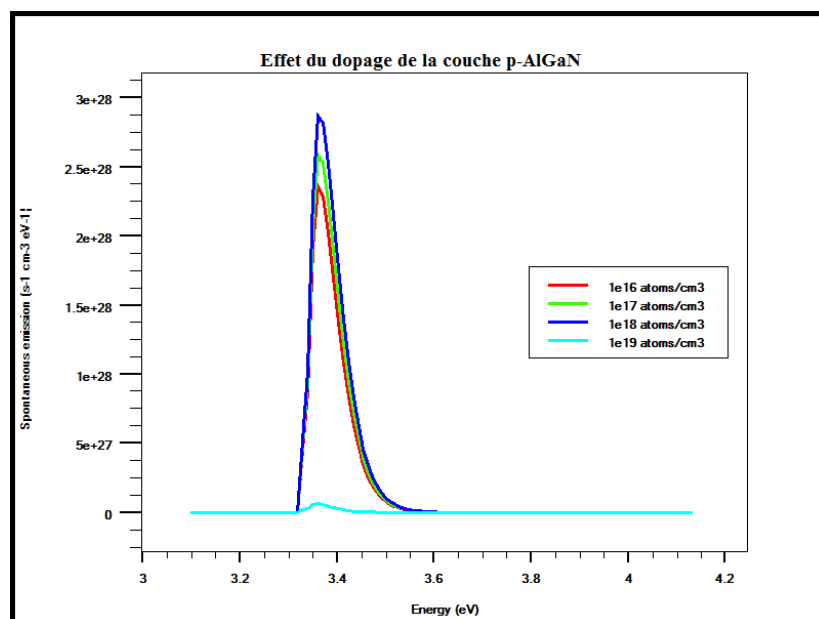


Figure 3.69 : Emission spontanée en fonction de l'énergie pour différents dopages de la couche p-AlGaN.

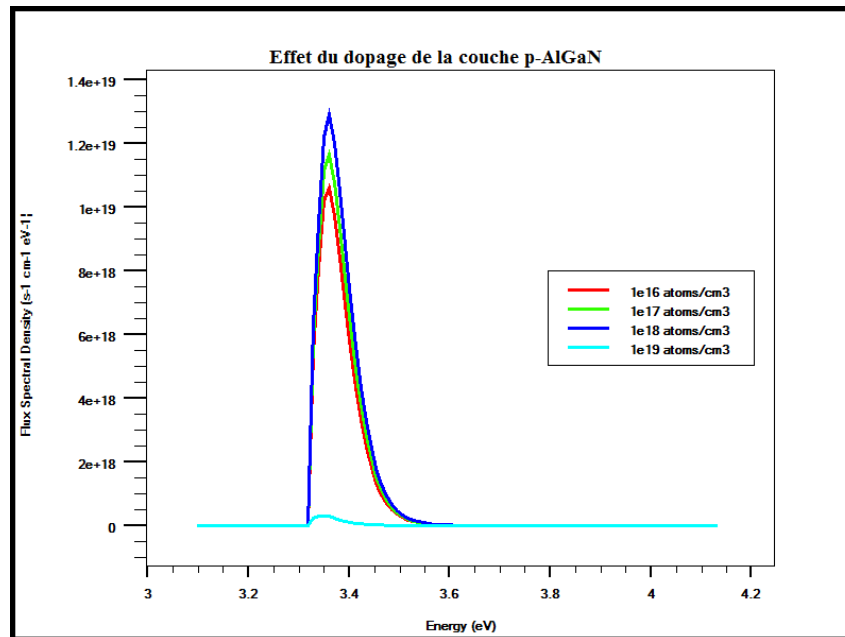


Figure 3.70 : Densité de flux spectrale en fonction de l'énergie pour différents dopages de la couche p-AlGaIn.

### 3.4.2.7.2 Effet du dopage de la couche n-AlGaIn

Nous fixons le dopage de type p de la couche AlGaIn à  $1 \times 10^{18}$  atomes/cm<sup>3</sup> et nous faisons varier le dopage n de la couche AlGaIn de  $1 \times 10^{16}$  atomes/cm<sup>3</sup> à  $1 \times 10^{19}$  atomes/cm<sup>3</sup>.

Les paramètres physiques et géométriques fixés sont les suivants :

- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 120 nm dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{18}$  cm<sup>3</sup>.
- L'épaisseur de la couche AlGaIn est de 60 nm dopée type p avec une concentration de  $1 \times 10^{18}$  cm<sup>3</sup>.
- L'épaisseur de la couche active BGaIn est de 15 nm non dopée avec 1% de fraction molaire du bore.
- L'épaisseur de la couche de contact GaN est de 500 nm dopée type n avec une concentration de  $1 \times 10^{18}$  cm<sup>3</sup>.
- L'épaisseur de la couche GaN est de 50 nm non dopée.

### 3.4.2.7.2.1 Effet sur la caractéristique I-V et la puissance émise

Le courant en fonction de la tension et la puissance émise en fonction de courant sont simulés pour différents dopages. Les résultats obtenus sont représentés respectivement par les figures 3.71 et 3.72.

Nous avons une légère diminution de courant et une augmentation de la puissance émise en fonction de la variation de dopage de type n de la couche AlGaN.

Nous obtenons un courant de 0.55 mA, 0.51 mA, 0.51 mA, 0.6 mA et une puissance émise de  $4.44 \times 10^{-5}$  W, 0.12 mW, 1.10 mW, 1.79 mW.

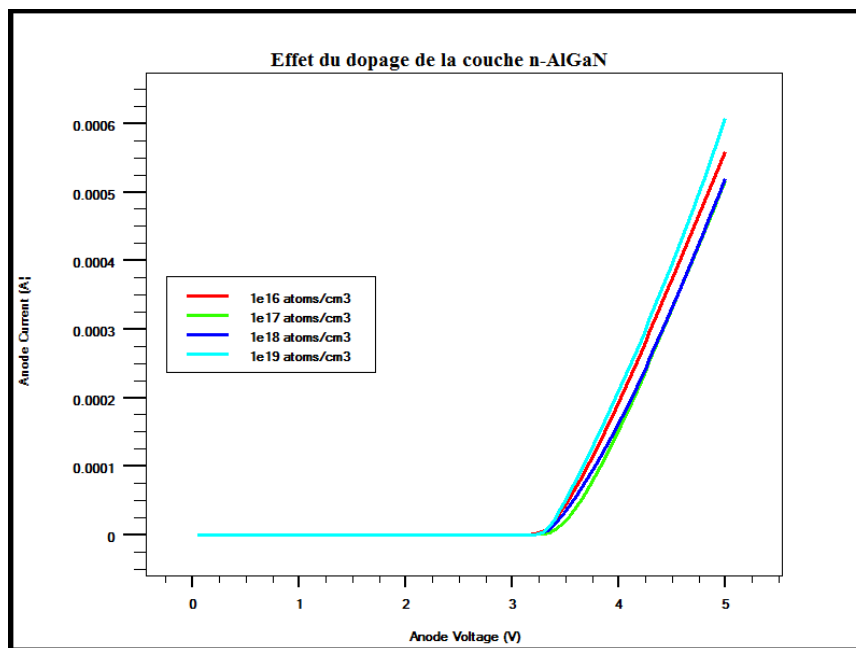


Figure 3.71 : Courant en fonction de la tension pour différents dopages de la couche n-AlGaN.

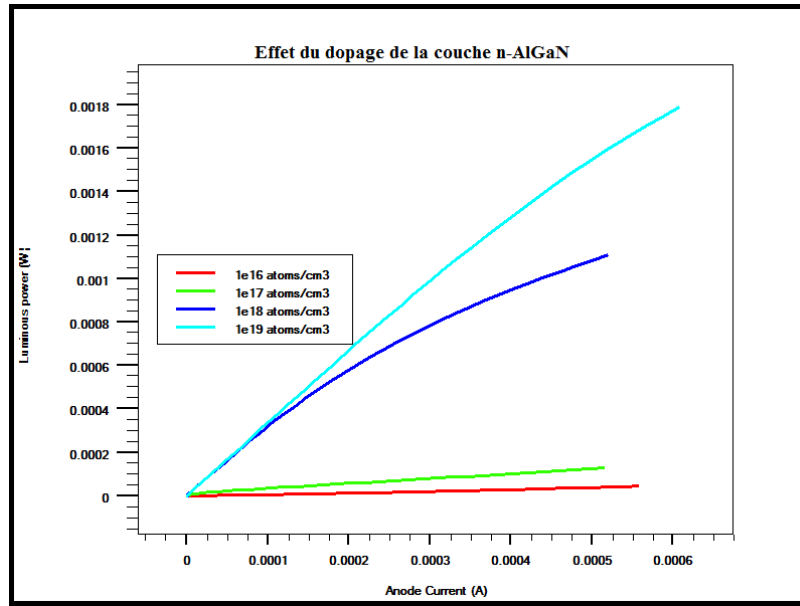


Figure 3.72 : Puissance émise en fonction du courant pour différents dopages de la couche n-AlGaN.

#### 3.4.2.7.2.2 Effet sur la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée et la densité spectrale de flux

La densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie, l'émission spontanée en fonction de l'énergie et la densité spectrale de flux en fonction de l'énergie sont simulées pour différents dopages à une tension de 3.5 V. Les résultats obtenus sont représentés respectivement par les figures 3.73, 3.74 et 3.75.

Nous obtenons une densité spectrale de puissance de  $0.15 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.35 eV,  $0.94 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.35 eV,  $6.94 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV,  $10.36 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV.

Nous obtenons une émission spontanée de  $6.2 \times 10^{26} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV,  $3.77 \times 10^{27} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV,  $2.86 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV,  $4.34 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.37 eV.

Nous obtenons une densité spectrale de flux de  $2.94 \times 10^{17} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV,  $1.75 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV,  $1.28 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV,  $1.92 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  pour une énergie de 3.36 eV.

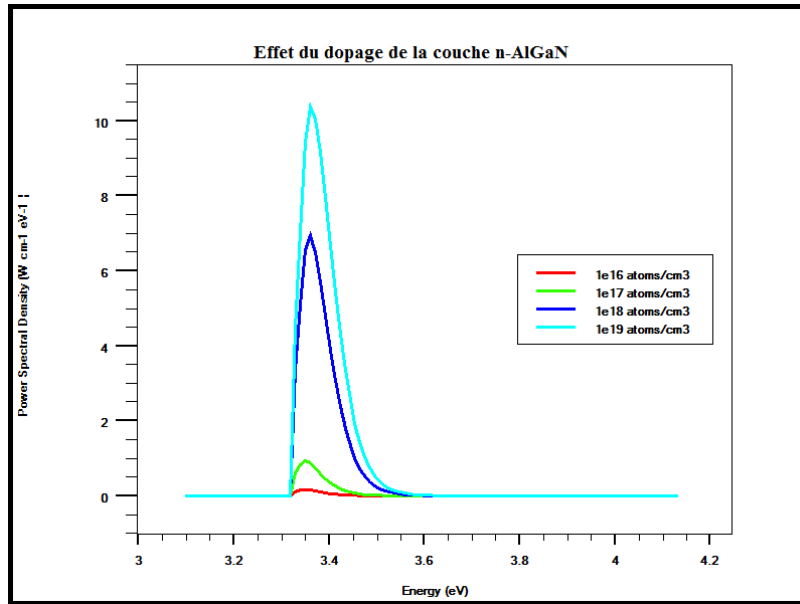


Figure 3.73 : Densité spectrale de puissance en fonction de l'énergie pour différents dopages de la couche n-AlGaIn.

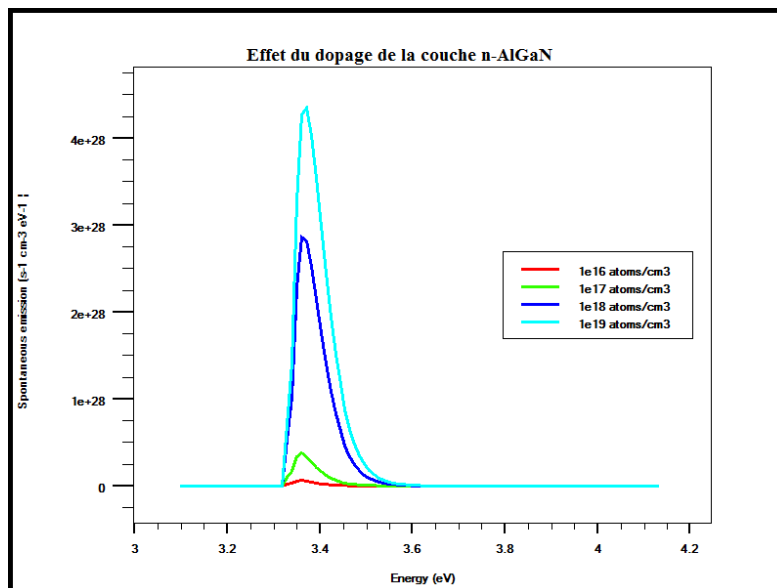


Figure 3.74 : Emission spontanée en fonction de l'énergie pour différents dopages de la couche n-AlGaIn.

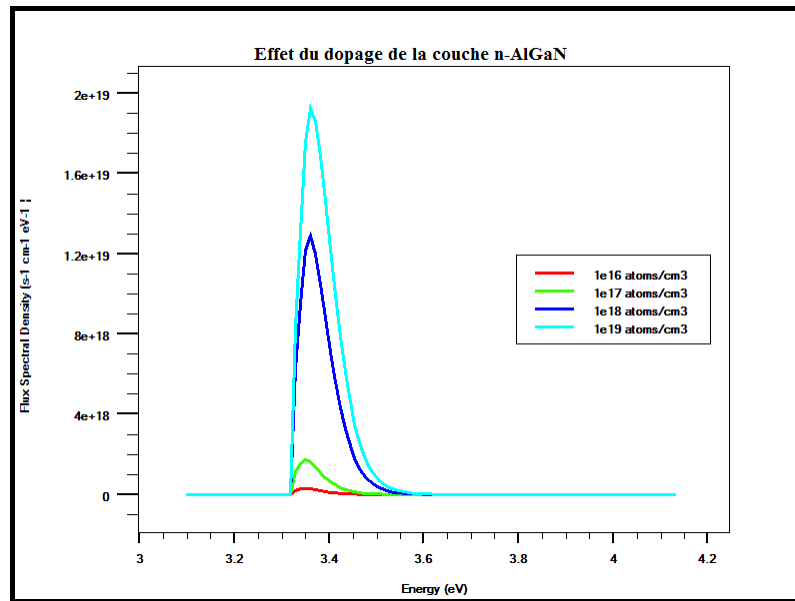


Figure 3.75 : Densité de flux spectrale en fonction de l'énergie pour différents dopages de n-AlGaN.

### 3.5 Conclusion

Ce chapitre était consacré à la simulation de nos structures, où nous avons présenté les résultats obtenus par logiciel de simulation SILVACO avec interprétation.

Dans la première partie nous avons simulé deux LEDs à simple puits quantique AlGaN/GaN/AlGaN et AlGaN/BGaN/AlGaN par logiciel TCAD Silvaco où la concentration du bore dans le BGaN était fixée à 1% ; nous avons varié l'épaisseur de la couche active de 7 nm à 20 nm. Dans la deuxième partie nous avons étudié l'influence de l'épaisseur de la couche active et de la concentration du bore dans BGaN, afin d'améliorer les performances de notre LED UV-A. Nous avons varié l'épaisseur de la couche active de 5 nm à 15 nm. Ensuite nous avons montré l'influence de l'augmentation de la fraction molaire du bore dans BGaN de 1 % à 5 % pour 15 nm. Nous avons également étudié l'influence de la polarisation, de la température et des dopages p et n des couches AlGaN.

Les performances de notre LED UV-A ont été améliorées par l'utilisation du bore dans la couche active ; la raison principale est que les recombinaisons Auger dans BGaN sont nettement inférieures à celles dans GaN.



**Références**

- [1] Navickas, V. B. Microtechnologies. Vilnius gediminas technical university. (2012)
- [2] Taberkit. M « Etude, conception et simulation numérique d'un transistor MOSFET biaxial contraint ». Thèse de doctorat, Université Aboubakr Belkaïd– Tlemcen, (2018).
- [3] Sin, Y. F. Z. L.W. T. N. J. K. O. Integrated power devices, and TCAD simulation. Number 1466583819, 9781466583818. CRC press, (2014).
- [4] D. Truyen «Etude par simulation composant 3D des effets singuliers SEU et SET induits par ions lourds sur le noeud technologique CMOS bulk 180 nm», thèse de doctorat, Université de Montpellier II, (2007).
- [5] ATLAS User's "Manual-device simulation software". Atlas User's Manual; Silvaco International Inc. Santa Clara, CA, USA. Version: (2012).
- [6] M. Khaouani « Etude et conception d'un transistor nanométrique à grille enrobante GAA MOSFETs ». Thèse de doctorat, Université Aboubakr Belkaïd– Tlemcen, (2018).
- [7] Y. Gwangseo, J. Younghu, K. Byung-Ja, and K. Jihyun, Electrical and optical damage t GaN-base light-emittingdiodes by 20-MeV proton irradiation. Science of Advanced Materials 8, 160, (2016).
- [8] M. Pooley (ed.), Investigating LED efficiency via multiphysics simulation, COMSOL Blog (2014).
- [9] H.-Y. Ryu, K.-S. Jeon, M.-G. Kang, Y. Choi, and J.-S. Lee, Dependence of efficiencies in GaN-based vertical blue lightemitting diodes on the thickness and doping concentration of the n-GaN layer. *Optics Express* 21, A190 (2013).
- [10] G. Guorui, X. Weidon, Y. Cheng, F. Weibin, L. Yanme, Z. Zhongfan, and L. Xiaojuan, A novel single-component whiteemitting Tb and Mn Co-doped large-sized Y3Al5O12:Ce3+ Single crystal for white LED. Science of Advanced Materials 8, 1354 (2016).
- [11] S. Nakamura, M. Senoh, N. Iwasa, S. Naghama. "High – brightness InGaN blue, green and yellow light emitting diodes with quantum well sructures". Japanese Journal of Applied physics Vol.34, pp. L797-L799, Part 2, (1995).
- [12] Bouaraba Fazia, Etude d'une LED à base d'InGaN pour l'émission de la lumière blanche. Mémoire de Magister, Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie, (2016).

# **CONCLUSION GENERALE**

## **Conclusion générale et perspectives**

Dans cette thèse nous avons simulé une diode électroluminescente ultraviolette AlGaIn/GaN avec un puits quantique B(GaN), notre objectif était la simulation des propriétés électriques et optiques de cette diode. Nous avons essayé d'optimiser les propriétés physiques et technologiques des couches utilisées pour améliorer les performances de notre diode électroluminescente.

Nous avons commencé par un rappel sur les propriétés des matériaux binaires et ternaires tels que le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN), le nitrure d'aluminium de gallium (AlGaIn) et le nitrure de bore de gallium (BGaN), leur propriétés cristallographiques, électriques et optiques. Ensuite, nous avons étudié les différents types des diodes électroluminescentes et leurs principes de fonctionnement.

Nous avons divisé notre travail proprement dit, en deux parties :

- ✓ Dans la première partie nous avons simulé deux LEDs à simple puits quantique AlGaIn/GaN/AlGaIn et AlGaIn/BGaN/AlGaIn par logiciel TCAD Silvaco où la concentration du bore dans le BGaN était fixée à 1% ; nous avons varié l'épaisseur du puits quantique de 7 nm à 20 nm. Dans la LED AlGaIn/BGaN/AlGaIn ; l'émission spontanée a été multipliée par 1.77 pour une épaisseur de 7 nm de BGaN, la densité spectrale a été multipliée par 3.47 pour une épaisseur de 20 nm, la puissance émise et le rendement quantique externe ont été considérablement améliorés avec BGaN.
- ✓ Dans la deuxième partie nous avons étudié l'influence de l'épaisseur de la couche active et la concentration du bore dans BGaN, afin d'améliorer les performances de notre LED UV. Premièrement nous avons varié l'épaisseur du puits quantique de 5 nm à 15 nm ; la puissance émise a augmenté de 1.04 mW pour un courant de 0.061 mA à 1.43 mW pour un courant de 0.53 mA ; la densité spectrale a augmenté de  $6.13 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à  $8.82 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ . Nous avons obtenu alors une amélioration de 37.5 % dans la puissance émise et 43.8 % dans la densité spectrale.

Ensuite nous avons montré l'influence de l'augmentation de la fraction molaire du bore dans BGaN de 1 % à 5 % pour 15 nm d'épaisseur du puits quantique. La puissance émise a augmenté de 1.18 mW pour  $\text{B}_{0.01}\text{Ga}_{0.99}\text{N}$  pour un courant de 0.57 mA à 1.46 mW pour  $\text{B}_{0.05}\text{Ga}_{0.95}\text{N}$  pour un courant de 0.52 mA. L'émission spontanée a augmenté de  $2.98 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  à  $4.21 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$  ; la densité spectrale a augmenté de  $7.21 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à  $9.14 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  ; la densité de flux spectrale a augmenté de  $1.34 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  à  $1.83 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ . Nous avons obtenu une amélioration de 23.7 % dans

la puissance émise, 41.2 % dans l'émission spontanée, 26.7 % dans la densité spectrale et 36.5 % dans la densité de flux spectrale.

Dans les deux parties, nous avons étudié également l'influence de la polarisation, de la température et des dopages p et n des couches AlGa<sub>N</sub> sur les caractéristiques électriques et optiques.

Les performances de notre LED UV ont été améliorées par l'utilisation de bore dans le puits quantique ; la raison principale est que les recombinaisons Auger dans BGaN sont nettement inférieures à celles dans GaN.

La teneur en bore dans BGaN ne peut pas être augmentée de manière significative ; mais on peut augmenter son épaisseur sans problème et c'est un grand avantage pour améliorer les performances de la LED.

Il serait intéressant d'incorporer BGaN comme une couche Back-Barrier pour améliorer les performances de notre LED UV. Grâce à sa nature résistive, ce matériau jouerait le rôle d'une barrière électrostatique et diminuerait la fuite des électrons vers le substrat.

Tableau récapitulatif des résultats

LED AlGaIn/GaN/AlGaIn @ QW = 20 nm						
Courant (mA)	Puissance émise (mW)	Densité spectrale de puissance ( $\text{W cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$ )	Emission spontanée ( $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ )	Densité de flux spectrale ( $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$ )		
0.46	0.61	1.93	$3.34 \times 10^{28}$	$3.5 \times 10^{18}$		
LED AlGaIn/B <sub>0.01</sub> Ga <sub>0.99</sub> N/AlGaIn @ QW = 20 nm						
Courant (mA)	Puissance émise (mW)	Densité spectrale de puissance ( $\text{W cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$ )	Emission spontanée ( $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ )	Densité de flux spectrale ( $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$ )		
0.27	0.89	6.7	$2.08 \times 10^{28}$	$1.25 \times 10^{19}$		
LED AlGaIn/B <sub>0.04</sub> Ga <sub>0.96</sub> N/AlGaIn						
Epaisseur du QW	Courant (mA)	Puissance émise (mW)	Densité spectrale de puissance ( $\text{W cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$ )	Emission spontanée ( $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ )	Densité de flux spectrale ( $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$ )	
5 nm	0.61	1.04	6.13			
10 nm	0.57	1.34	7.87			
15 nm	0.53	1.43	8.82			
LED AlGaIn/B <sub>x</sub> Ga <sub>1-x</sub> N/AlGaIn @ QW = 15 nm						
Concentration du bore	Courant (mA)	Puissance émise (mW)	Densité spectrale de puissance ( $\text{W cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$ )	Emission spontanée ( $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-3} \text{eV}^{-1}$ )	Densité de flux spectrale ( $\text{s}^{-1} \text{cm}^{-1} \text{eV}^{-1}$ )	
B <sub>0.01</sub> Ga <sub>0.99</sub> N	0.57	1.18	7.21	$2.98 \times 10^{28}$	$1.34 \times 10^{19}$	
B <sub>0.02</sub> Ga <sub>0.98</sub> N	0.55	1.29	7.86	$3.34 \times 10^{28}$	$1.48 \times 10^{19}$	
B <sub>0.03</sub> Ga <sub>0.97</sub> N	0.54	1.37	8.35	$3.69 \times 10^{28}$	$1.61 \times 10^{19}$	
B <sub>0.04</sub> Ga <sub>0.96</sub> N	0.53	1.43	8.82	$3.92 \times 10^{28}$	$1.73 \times 10^{19}$	
B <sub>0.05</sub> Ga <sub>0.95</sub> N	0.52	1.46	9.14	$4.21 \times 10^{28}$	$1.83 \times 10^{19}$	

# Numerical simulation of UV LEDs with GaN and B GaN single quantum well

Asma Belaid<sup>†</sup> and Abdelkader Hamdoune

Department of Electrical and Electronic Engineering, Faculty of technology, Materials and Renewable Energy Research Unit, University of Abou-Bekr Belkaid, Tlemcen, Algeria

**Abstract:** The objective of this work is to simulate a single quantum well ultraviolet light emitting diode (LED) based on AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub> and AlGa<sub>N</sub>/B Ga<sub>N</sub>/AlGa<sub>N</sub>, by using TCAD Silvaco simulator. The first structure has a Ga<sub>N</sub> quantum well taken between two layers, of n-AlGa<sub>N</sub> and p-AlGa<sub>N</sub>. The second one has a B Ga<sub>N</sub> quantum well instead of Ga<sub>N</sub>. We fix the concentration of the boron in B Ga<sub>N</sub> to only 1% and we vary the thickness of Ga<sub>N</sub> and B Ga<sub>N</sub> quantum well layer from 7 to 20 nm, for the two structures. As results, we obtain respectively for Ga<sub>N</sub>-LED and B Ga<sub>N</sub>-LED, a maximum current of 0.52 and 0.27 mA, a maximum power spectral density of 1.935 and 6.7 W cm<sup>-1</sup> eV<sup>-1</sup>, a maximum spontaneous emission of 3.34 × 10<sup>28</sup> and 3.43 × 10<sup>28</sup> s<sup>-1</sup> cm<sup>-3</sup> eV<sup>-1</sup>, and a maximum Light output power of 0.56 and 0.89 mW.

**Key words:** gallium nitride (Ga<sub>N</sub>); aluminum gallium nitride (AlGa<sub>N</sub>); boron gallium nitride (B Ga<sub>N</sub>); UV light emitting diode (LED)

**Citation:** A Belaid and A Hamdoune, Numerical simulation of UV LEDs with Ga<sub>N</sub> and B Ga<sub>N</sub> single quantum well[J]. *J. Semicond.*, 2019, 40(3), 032802. <http://doi.org/10.1088/1674-4926/40/3/032802>

## 1. Introduction

Group IIIA nitrides such as gallium nitride (Ga<sub>N</sub>), and aluminum nitride (AlN) are used in many devices; they have an importance for electronic and optoelectronic applications.

Ga<sub>N</sub> has demonstrated its superiority to achieve high ultraviolet light-emitting diodes (LEDs) performance; it admits a direct and wide band gap, great chemical and thermal stabilities<sup>[1]</sup>. UV LEDs have attracted considerable interest due to a wide range of applications<sup>[2-4]</sup> such as water treatment, high density optical data storage, sterilization of medical equipment, and biological imaging<sup>[5, 6]</sup>. Each of these applications requires light sources emitting at a different UV wavelength<sup>[6]</sup> where the electromagnetic spectrum is divided into regions based on the wavelength of the radiation, with the UV region defined as the wavelength range from 10 to 400 nm<sup>[7]</sup>. In order to achieve the desired purpose of each application with high performance and optimal reliability such as cost-efficiency and energy-efficiency, many parameters should be controlled, for example the wavelength, the output power, the high densities and so. In this context recently various studies have been realized such as the using of the low-temperature barriers to improve strain relaxation and high performance Ga<sub>N</sub> based LEDs where the authors success to increase the strain-relaxed mechanism of low-temperature barriers and address this problem<sup>[8-12]</sup>. Maximum output power and external quantum efficiency were obtained by employing 222–282 nm AlGa<sub>N</sub> and InAlGa<sub>N</sub>-based deep UV LEDs fabricated on low threading dislocation density AlN template<sup>[13]</sup>, and different growth methods were proposed to obtain AlGa<sub>N</sub>/AlN templates to obtain low threading dislocation density (TDD)<sup>[12-14]</sup>.

With a methodology based on stress management on underlying Ga<sub>N</sub>-based epitaxial films, the authors demonstrated

numerically and experimentally that the optimal tensile stress can increase by over 100% in comparison to the LEDs with compressive stresses<sup>[15]</sup>. Involving a simple high-quality AlN/AlGa<sub>N</sub> buffer template on sapphire substrate which allows a remarkable improvement in the output power of 340 nm-band quaternary InAlGa<sub>N</sub>-based UV-LEDs, however a maximum output power of 7.1 mW was reached and the authors found that the crystalline quality of the AlN/AlGa<sub>N</sub> templates strongly affects the output power of UV-LEDs<sup>[14]</sup>.

These materials acquired many attention towards Solid-State lighting due to their continuous improvement in efficiency and longer life time when compared to other lighting systems including Compact Fluorescent Lamp (CFL) bulbs, filament bulbs etc<sup>[16]</sup>.

Recently, boron nitride (BN) has been introduced in electronic and optoelectronic components. Some of its properties have certain advantages such as electrical conductivity, high mechanical and electrical resistances, chemical stability, and optical transparency in a wide spectral range. It can be distinguished from other elements to give better performance for components; many alloys of the type B(Al, Ga, In)N have been recently proposed to take advantage of these properties<sup>[17]</sup>.

Boron nitride (BN) has some interests, particularly for its hexagonal (h-BN)<sup>[18-22]</sup>, rhombohedral (r-BN)<sup>[19-22]</sup>, and turbostratic (t-BN)<sup>[20-23]</sup> structures. It can occur in several polymorphs, including cubic zinc blende (c-BN)<sup>[21, 22, 23]</sup>. In its cubic structure<sup>[24]</sup>, (c-BN) has a band gap of 6.4 eV<sup>[23]</sup>.

Although the BN does not occur naturally in the wurtzite structure, one can combine the BN with AlN or Ga<sub>N</sub> in order to obtain wider band intervals in this structure<sup>[25]</sup>.

The BN can serve as a natural extension of the family of III-nitrides such as Ga<sub>N</sub> and AlGa<sub>N</sub><sup>[26]</sup> with low concentration of B, to obtain B Ga<sub>N</sub>, and BAlN alloys<sup>[22]</sup>.

## 2. Proposed structure and simulation model

Several works exist on the Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/Ga<sub>N</sub> LED structures

Correspondence to: A Belaid, [belaidaasma@gmail.com](mailto:belaidaasma@gmail.com)

Received 4 MAY 2018; Revised 8 JUNE 2018.

©2019 Chinese Institute of Electronics

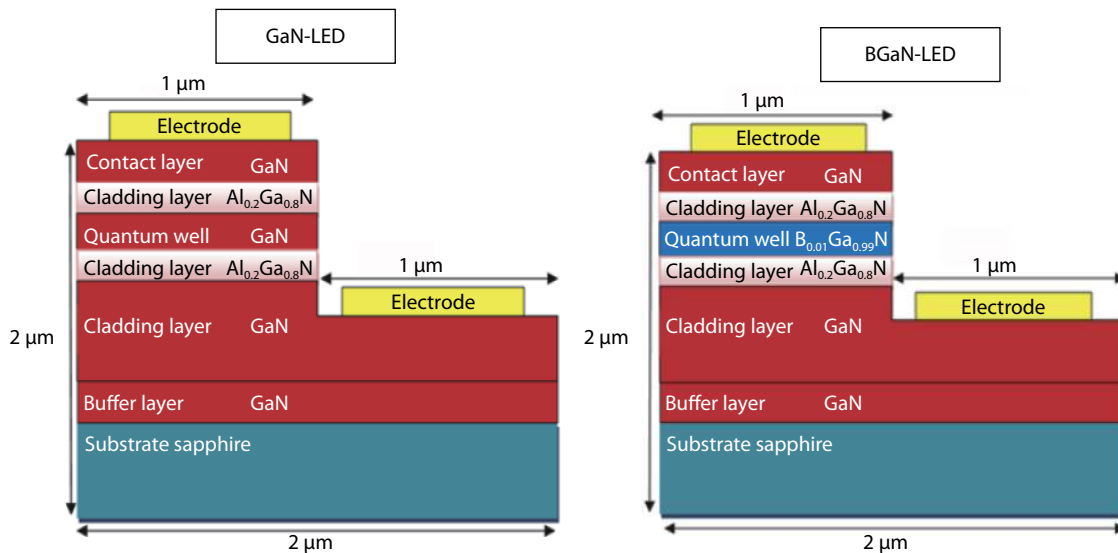


Fig. 1. (Color online) Schematic structure of UV LEDs with GaN and BGaN single quantum well.

but very little on the  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{BGaN}$  LEDs. The purpose of our work is therefore to make a comparison between these two structures, using the ATLAS simulation tool. ATLAS enables device technology engineers to simulate the electrical, optical, and thermal behavior of semiconductor devices. The structures proposed with GaN and BGaN single quantum well (SQW) are shown in Fig. 1.

The GaN-LED structure consists of sapphire substrate, 5 nm GaN buffer layer, 500 nm n-doped GaN cladding layer with a concentration of  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , 60 nm n-doped  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$  cladding layer with a concentration of  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , undoped GaN QW, 60 nm p-doped  $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$  cladding layer with a concentration of  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , and 120 nm p-doped GaN contact layer with a concentration of  $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

In the BGaN-LED, GaN QW is replaced by an undoped BGaN with a boron concentration fixed to only 1%. The band gaps of GaN, BGaN, and AlGaIn are then 3.42, 3.32, and 3.8 eV, respectively.

We consider different thicknesses for the QW: 7, 10, 15, and 20 nm.

For the binary materials (GaN, AlN, and BN), the properties are taken from the ATLAS user's manual and from references<sup>[27, 28]</sup>. For GaN, effective density of states in the conduction band ( $N_c$ ) is  $1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , effective density of states in the valence band ( $N_v$ ) is  $4.2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , electron mobility ( $\mu_n$ ) is  $1000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ , and hole mobility ( $\mu_p$ ) is  $350 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ .

For  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  and  $\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , the parameters are calculated using the Vegard law<sup>[29]</sup>. For carrier recombination, both Shockley-Read-Hall (SRH) and Auger recombination are defined by formulas<sup>[30, 15]</sup>; the SRH and Auger recombination coefficients are  $1 \times 10^{17} \text{ s}^{-1}$  and  $1 \times 10^{-34} \text{ cm}^6/\text{s}$ , respectively<sup>[15]</sup>; effective densities of states in the conduction band  $N_c$  are  $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  and  $2.35 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , respectively; effective densities of states in the valence band  $N_v$  are  $1.4 \times 10^{19}$  and  $4.6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , respectively. Carrier mobilities for AlGaIn are  $\mu_n = 860 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ , and  $\mu_p = 283 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ , respectively; for BGaN  $\mu_n = 992 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ , and  $\mu_p = 351 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ , respectively. Saturation velocity ( $V_{\text{sat}}$ ) is  $2.5 \times 10^7 \text{ cm/s}$  for AlGaIn, and  $2.3 \times 10^7 \text{ cm/s}$  for BGaN. The band offset between AlGaIn and BGaN is 0.48 eV and between AlGaIn and GaN is 0.38 eV.

The origin of the piezoelectric polarization is the crystal-line structure of gallium nitride. The two structures of GaN, hexagonal and cubic, are non Centro-symmetric. This mismatch between the layers induces a kind of mechanical stress, forming an interface bias charge, and thus creating what is called the piezoelectric field.

The spontaneous polarization (polarization at zero strain) is very large in wurtzite group-III nitrides resulting in a further increase of polarization induced electric fields and interface charges<sup>[31]</sup>.

A layer of gallium nitride can present a macroscopic polarization not null. There is an electric field because the crystal has an asymmetry between the barycenters of the electron charges with those of the holes. Also a link between the two atoms that is not purely covalent is a factor that can cause the creation of this electric field.

To obtain good precision, we refine the meshes in the QW layer, under the electrodes, and in the current path from the anode to the cathode.

### 3. Results and discussion

The Injection current versus Forward voltage is simulated for both LEDs, and for various thicknesses of the QW layer; results are illustrated by Fig. 2. In GaN-LED, the anode current decreases slightly when the QW thickness increases; the best one is of 0.52 mA (a current density of  $26 \text{ kA/cm}^2$ ) for 7 nm QW thickness. In BGaN-LED, the Injection current increases more slightly with the QW thickness; the best one is of 0.27 mA (a current density of  $13.5 \text{ kA/cm}^2$ ) for 20 nm QW thickness. We obtain a greater anode current in GaN-LED than that in BGaN-LED.

These results are logical because the BGaN compound is more resistive than GaN, in other words it contains fewer free electrons; in addition the charge carriers have better mobility in GaN than in BGaN.

Generation of light in LEDs is mainly due to spontaneous emission of photons, the magnitude measured by a spectrometer is the power spectral density, and the magnitude that determines the efficiency of the device is the Light output power.

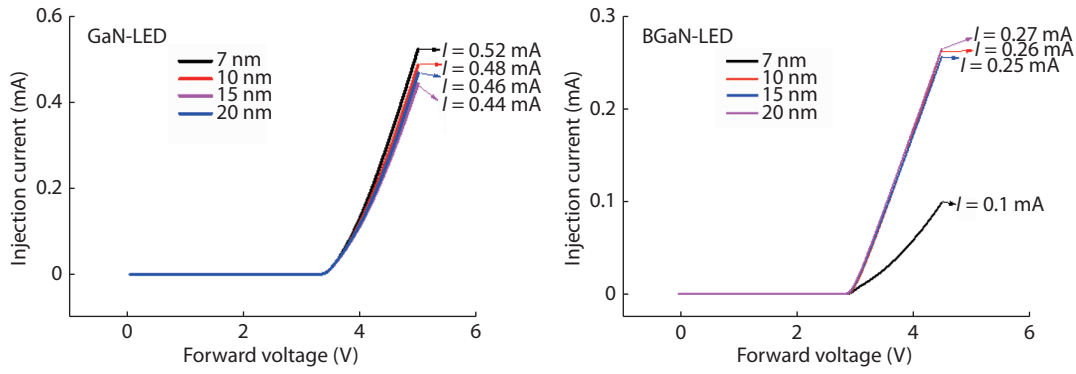


Fig. 2. (Color online) Injection current versus forward voltage for GaN-LED and BGaN-LED.

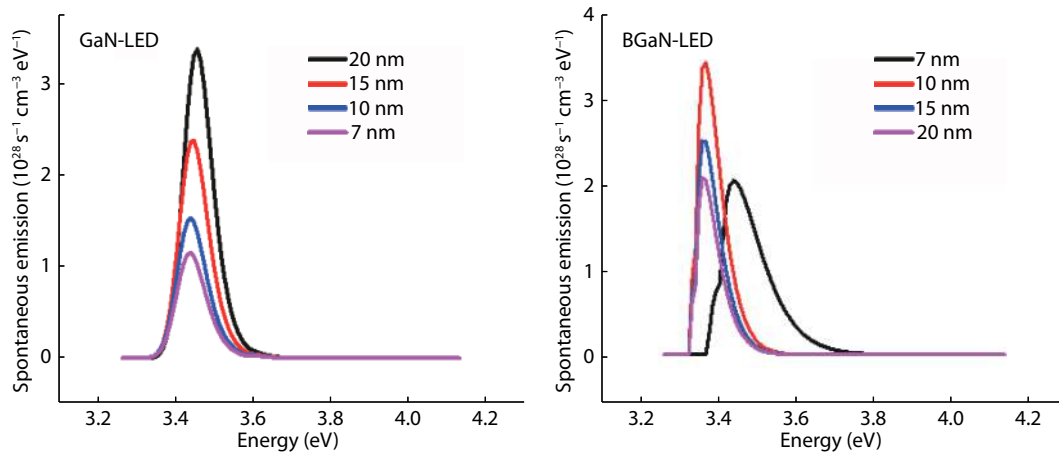


Fig. 3. (Color online) Spontaneous emission of GaN-LED and BGaN-LED.

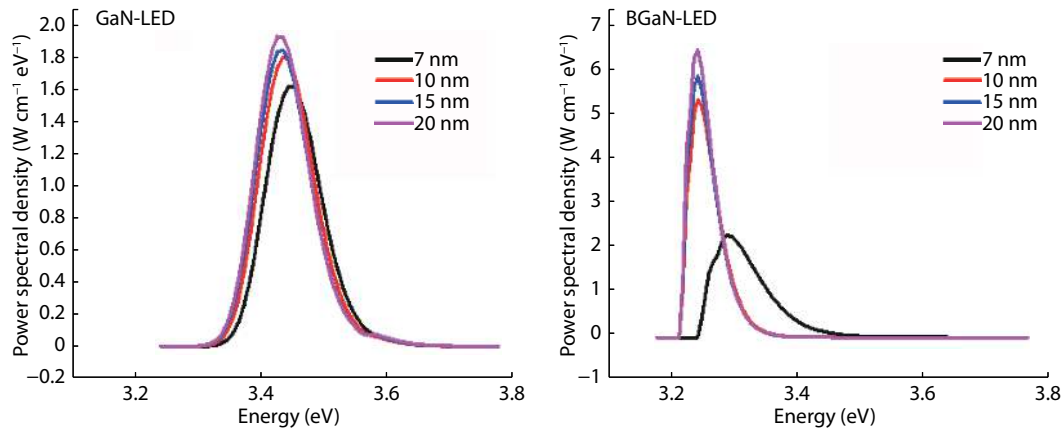


Fig. 4. (Color online) Power spectral density of GaN-LED and BGaN-LED.

Spontaneous emission, power spectral density, and light output power of GaN-LED and BGaN-LED are simulated; results are given by Figs. 3, 4, and 5, respectively. Summarized values of spontaneous emission and power spectral density are given by Tables 1 and 2, respectively.

The basic mechanisms responsible for the generation of photons in the SC are the spontaneous and the stimulated emissions.

The injected minority carriers give a light if their radiative life time is shorter than their non-radiative life time.

Band-to-band transitions can occur for example from collisions with the crystal lattice (photon-phonon interactions), or

from cascades of low energy transitions due to the presence of deep electronic levels in the forbidden band.

These deep electronic levels may be due to chemical impurities, defects in the crystal lattice (dislocations) as well as free surfaces and interfaces with other materials. The performance is limited by these nonradiative transitions.

The second and most important non-radiative recombination mechanism that limits LEDs performance is Auger recombination; it is characterized by the Auger carrier lifetimes which are inversely proportional to the square of the concentrations of the corresponding regions.

BGaN compound contains fewer free electrons; the rate of



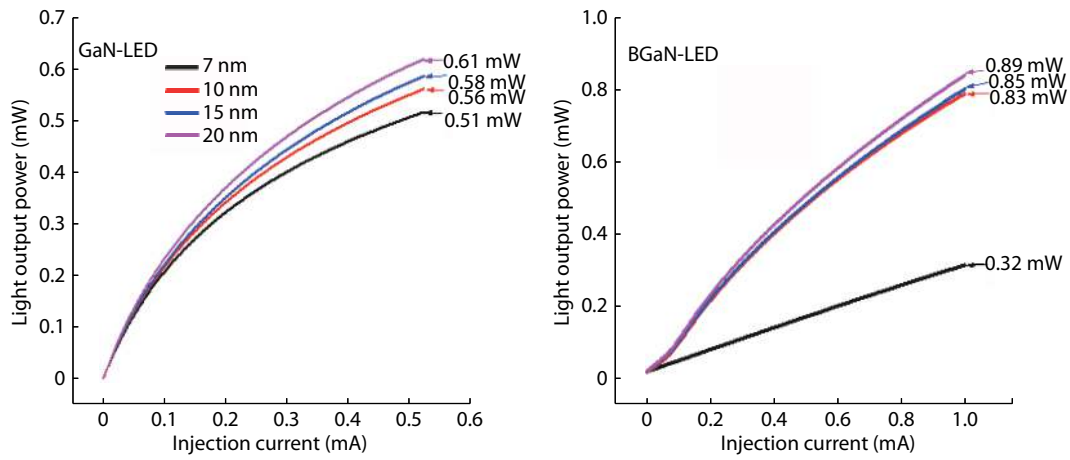


Fig. 5. (Color online) Light output power of GaN-LED and BGaN-LED.

Table 1. Summarized values of spontaneous emission for GaN-LED and BGaN-LED.

		QW thickness (nm)	7	10	15	20
GaN-LED	Peak energy (eV)		3.43	3.43	3.44	3.45
	$\lambda$ (nm)		361.5	361.5	360.5	359.4
	Spontaneous emission ( $10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ )		1.15	1.53	2.36	3.34
BGaN-LED	Peak energy (eV)		3.43	3.36	3.36	3.36
	$\lambda$ (nm)		361.5	369	369	369
	Spontaneous emission ( $10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ )		2.04	3.43	2.53	2.08
Ratio of spontaneous emissions			1.77	2.24	1.07	0.62
Difference between spontaneous emissions ( $10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ )			0.89	1.9	0.17	-1.26

Table 2. Summarized values of power spectral density for GaN-LED and BGaN-LED.

		QW thickness (nm)	7	10	15	20
GaN-LED	Peak energy (eV)		3.46	3.45	3.45	3.45
	$\lambda$ (nm)		358.4	359.4	359.4	359.4
	Power spectral density ( $\text{W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ )		1.61	1.81	1.84	1.93
BGaN-LED	Peak energy (eV)		3.35	3.31	3.31	3.31
	$\lambda$ (nm)		370.1	374.6	374.6	374.6
	Power spectral density ( $\text{W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ )		2.4	5.6	6.1	6.7
Ratio of power spectral densities			1.49	3.09	3.31	3.47
Difference between power spectral densities ( $\text{W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ )			0.79	3.79	4.26	4.77

Auger recombination is therefore smaller in BGaN than in GaN. Thereby, in the case of BGaN, we have better spontaneous emission, better power spectral density and better Light output power.

The better value of the spontaneous emission is of  $3.34 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ , for 20 nm of QW thickness in GaN-LED. It is of  $3.43 \times 10^{28} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$ , for 10 nm of QW thickness in BGaN-LED; and it decreases for a greater thickness because the material becomes too resistant.

The better value of the power spectral density in GaN-LED and BGaN-LED is obtained for 20 nm of QW thickness; it is respectively of 1.93 and  $6.7 \text{ W cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ . We obtain a ratio of 3.47 between the values.

The Light output power increases with the QW thickness; better values are obtained for 20 nm of QW thickness. In GaN-LED, we have 0.61 mW at an injection current of 0.55 nA; and in BGaN-LED, we have 0.89 mW at only 0.1 nA of injection current. For this last current, the Light output power in GaN-LED is only of about 0.25 mW. We can say that the total luminous power is multiplied by 3.56 in the BGaN-LED.

There is a slight difference between the emission wavelengths in both LEDs, but the performance is significantly improved in the second LED, due to the BGaN material properties.

The flux spectral density is represented by Fig. 6, and obtained values are given by Table 3. For GaN-LED, the smallest value is obtained for the quantum well thickness of 7 nm; it is about  $2.91 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  for peak energy of 3.47 eV. For 10 nm we have a peak energy of 3.46 eV; for 15 and 20 nm, we have practically the same peak energy of 3.45 eV. For BGaN-LED, we obtain a peak energy of 3.47 eV for the quantum well thickness of 7 nm, and 3.31 eV for other QW thicknesses. The flux spectral density is, respectively,  $3.25 \times 10^{18}$ ,  $3.32 \times 10^{18}$ ,  $3.5 \times 10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  for GaN-LED; and  $4.48 \times 10^{18}$ ,  $1.03 \times 10^{19}$ ,  $1.13 \times 10^{19}$ , and  $1.25 \times 10^{19} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$  for BGaN-LED. The peak of the flux spectral density increases with the QW thickness.

Gain TE (TE: transverse electric field), and external quantum efficiency are represented by Figs. 7 and 8, respectively.

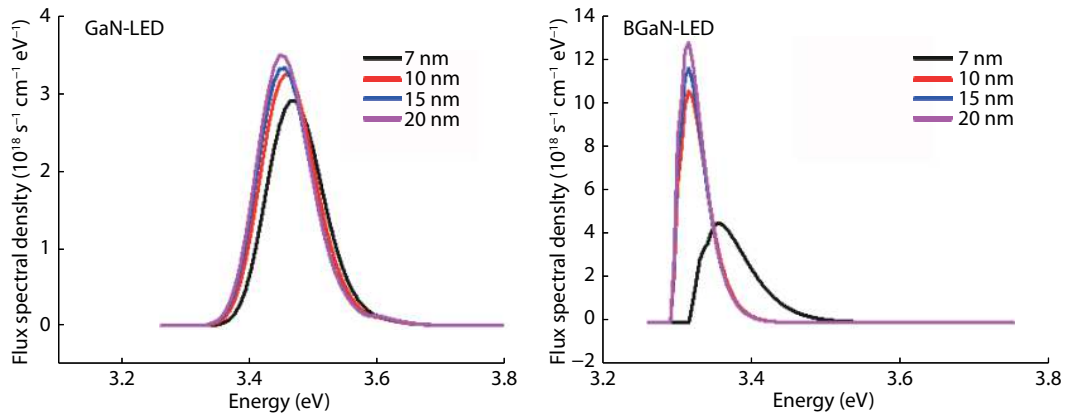


Fig. 6. (Color online) Flux spectral density for GaN-LED and BGaN-LED.

Table 3. Summarized values of flux spectral density for GaN-LED and BGaN-LED.

		QW thickness (nm)	7	10	15	20
GaN-LED	Peak energy (eV)		3.47	3.46	3.45	3.45
	$\lambda$ (nm)		357.3	358.4	359.4	359.4
	Flux spectral density ( $10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ )		2.91	3.25	3.32	3.5
BGaN-LED	Peak energy (eV)		3.35	3.31	3.31	3.31
	$\lambda$ (nm)		370.1	374.6	374.6	374.6
	Flux spectral density ( $10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ )		4.48	10.3	11.3	12.5
Ratio of flux spectral densities ( $\text{s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ )			1.54	3.17	3.40	3.57
Difference between flux spectral densities ( $10^{18} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-1} \text{ eV}^{-1}$ )			1.57	7.05	7.98	9

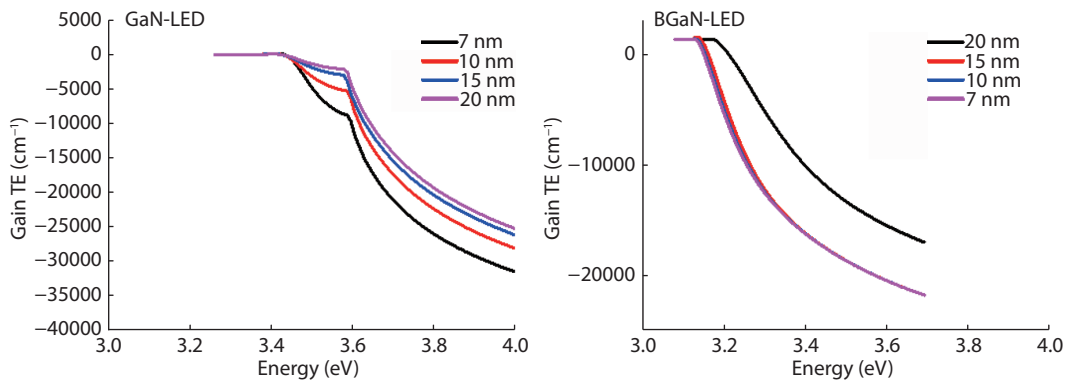


Fig. 7. (Color online) Gain TE for GaN-LED and BGaN-LED.

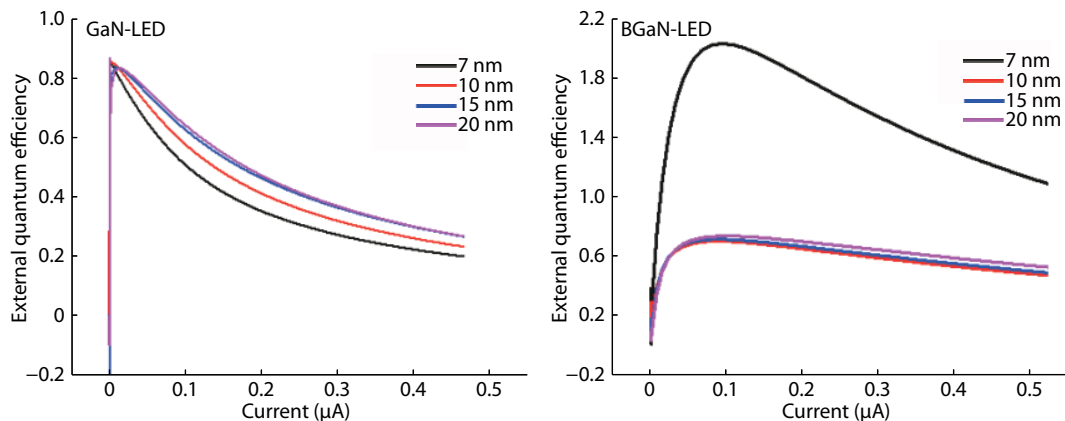


Fig. 8. (Color online) External quantum efficiency for GaN-LED and BGaN-LED.

For GaN-LED, the gain begins to decrease slowly from the energy 3.43 eV ( $\lambda = 361.5$  nm), then it decreases more rapidly

from the energy 3.58 eV ( $\lambda = 346.3$  nm). For BGaN-LED, the gain begins to decrease from the energy of about 3.34 eV

( $\sim \lambda = 371$  nm). With BGaN, we have a slightly higher frequency bandwidth than with GaN as a quantum well.

The maximum external quantum efficiency exceeds 80% for a current of about  $13.7 \mu\text{A}$  in GaN-LED, and it is of about 68% for a current of about  $81.7 \mu\text{A}$  in BGaN-LED. For this second LED, we achieved a value above 100%, something we do not understand.

At a current of  $0.4 \mu\text{A}$ , we obtain external quantum efficiency greater than 50% for the thicknesses of 15 and 20 nm in BGaN-LED, and only 50% in GaN-LED.

#### 4. Conclusion

AlGaIn/GaN/AlGaIn and AlGaIn/BGaN/AlGaIn UV LEDs with SQW were simulated, using TCAD Silvaco software. The boron concentration in BGaN was only 1%, and the thickness of the SQW was varied from 7 to 20 nm. In BGaN-LED; the spontaneous emission was multiplied by 1.77 for 7 nm of QW thickness, and the power spectral density was multiplied by 3.47 for 20 nm of QW thickness. The total Light output power, the frequency bandwidth, and the external quantum efficiency, were significantly improved with BGaN in the quantum well.

#### Acknowledgments

This work was supported by the University of Abou-Bekr-Bekaid, Materials and Renewable Energy Research Unit, Tlemcen, Algeria. I am grateful to Prof. Dr. A. Hamdoun for his support during this work.

#### References

- [1] Hamdoun A. Elaboration du nitride de gallium, étude de ses propriétés et applications. Thesis of Doctorate, University of Abou-Bakr Bekaid, Tlemcen, Algeria, 2006
- [2] Nakamura S. III-V nitride based light-emitting devices. *Solid State Commun*, 1997, 102, 237
- [3] Masui H, Nakamura S, DenBaars S P, et al. Nonpolar and semipolar III-nitride light-emitting diodes: achievements and challenges. *IEEE Trans Electron Devices*, 2010, 57, 88
- [4] Hu H P, Zhou S J, Liu X T, et al. Effects of GaN/AlGaIn/sputtered AlN nucleation layers on performance of GaN-based ultraviolet light-emitting diodes. *Sci Rep*, 2017, 7, 44627
- [5] Kneissl M, Kolbe T, Chua C, et al. Advances in group III-nitride-based deep UV light-emitting diode technology. *Semicond Sci Technol*, 2011, 26, 014036
- [6] Kneissl M, Rass J. III nitride ultraviolet emitters. Springer Series in Materials Science 2016, 227, 1
- [7] Khan A, Balakrishnan K, Katona T. Ultraviolet light-emitting diodes based on group three nitrides. *Nat Photonics*, 2008, 2, 77
- [8] Nakamura S, Krames M R. History of gallium-nitride-based light-emitting diodes for illumination. *Proc IEEE*, 2013, 101(10), 2211
- [9] Verzellesi G, Saguatti D, Meneghini M, et al. Efficiency droop in In-GaN/GaN blue light-emitting diodes: physic mechanisms remedies. *J Appl Phys*, 2013, 114(7), 071101
- [10] Yang W, Wang W, Lin Y, et al. Deposition of nonpolar mplane In-GaN/GaN multiple quantum wells on LiGaO+(100) substrates. *J Mater Chem C*, 2014, 2(5), 801
- [11] Schubert M F, Xu J, Kim J K, et al. Polarization-matched GaInN/Al-GaN multi-quantum-well light-emitting diodes with reduced efficiency droop. *Appl Phys Lett*, 2008, 93(4), 041102
- [12] Lin Z T, Wang H Y, Wang W L, et al. Employing low-temperature barriers to achieve strain-relaxed and high-performance GaN-based LEDs. *Opt Express*, 2016, 24, 11886
- [13] Hirayama H, Fujikawa S, Noguchi N, et al. 222–282 nm AlGaIn and InAlGaIn-based deep-UV LEDs fabricated on high-quality AlN on sapphire. *Phys Status Solidi A*, 2009, 206, 1176
- [14] Takano T, Fujikawa S, Kondo Y, et al. Remarkable improvement in output power for an InAlGaIn based ultraviolet LED by improving the crystalline quality of AlN/AlGaIn templates. *J Phys Status Solidi C*, 2008, 5, 2102
- [15] Lin Z T, Wang H T, Lin Y H, et al. Stress management on underlying GaN-based epitaxial films: A new vision for achieving high-performance LEDs on Si substrates. *J Appl Phys*, 2017, 122, 204503
- [16] Meel K, Mahala P, Singh S. Design and fabrication of multi quantum well based GaN/InGaIn blue LED. *IOP Conf Ser: Mater Sci Eng*, 2018, 331, 012008
- [17] Gautier S, Patriarche G, Moudakir T. Deep structural analysis of novel BGaN material layers grown by MOVPE. *J Cryst Growth*, 2011, 315, 288
- [18] Pease R S. An X-ray study of boron nitride. *Acta Crystallogr*, 1952, 5, 356
- [19] Herold A, Marzluf B, Perio P, et al. Inorganic reactions and methods. Formation of Ceramics Seances Acad Sci, 1958, 246, 1866
- [20] Thomas J, Weston N E, O'connor T, et al. Boron nitride, thermal transformation to ordered-layer-lattice boron nitride. *J Am Chem Soc*, 1962, 84, 4619
- [21] Wentorf R Jr. Cubic form of boron nitride. *J Chem Phys*, 1957, 26, 956
- [22] Wentorf R Jr. Synthesis of the cubic form of boron nitride. *J Chem Phys*, 1961, 34, 809
- [23] Tsao J Y, Chowdhury S, Hollis M A, et al. Ultrawide-bandgap semiconductors: research opportunities and challenges. *Adv Electron Mater*, 2018, 4, 1600501
- [24] Zhang X. Doping and electrical properties of cubic boron nitride thin films: A critical review. *Thin solid films*, 2013, 544, 2
- [25] Dreyer C E, Lyons J L, Janotti A, et al. Band alignments and polarization properties of BN polymorphs. *Appl Phys Express*, 2014, 7, 031001
- [26] Gunning B P, Moseley M W, Koleske D D, et al. Phase degradation in  $\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  films grown at low temperature by metalorganic vapor phase epitaxy. *J Cryst Growth*, 2017, 464, 190
- [27] Ougazzaden A, Gautier S, Moudakir T. Band gap bowing in BGaN thin films. *Appl Phys Lett*, 2008, 93, 083118
- [28] Atlas User's Manual; Silvaco International Inc. Santa Clara, CA, USA. Version: 2012
- [29] Lachebi A, Abid H, DrizMand Al-Douri Y. First-principles study of cubic  $\text{B}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  alloys. *Int J Nanoelectron*, 2008, 1, 81
- [30] Schubert E F. Light-emitting diodes. 2nd ed. Cambridge University Press, 2006, 432
- [31] Ambacher O, Dimitrov R, Stutzmann M, et al. Role of spontaneous and piezoelectric polarization induced effects in group-III nitride based heterostructures and devices. *Phys Status Solidi*, 1999, 216, 381

## Résumé

Notre travail consiste à simuler et optimiser une diode électroluminescente ultraviolette à base de B(Ga, Al)N/GaN qui est une récente filière d'hétérostructure. Cette modélisation s'appuie sur l'étude des propriétés physiques et optiques des matériaux utilisés afin de concevoir une structure performante. L'utilisation du matériau ternaire BGaN nous a permis d'améliorer les performances de la diode UV tels que : le courant, la puissance émise, la densité spectrale de puissance, l'émission spontanée, la densité de flux spectrale et le rendement.

**Mots clés:** GaN, AlN, BN, AlGaN, BGaN, diode électroluminescente UV.

## Abstract

Our work consists in simulating and optimizing an ultraviolet light-emitting diode based on B(Ga, Al) N/GaN which is a recent heterostructure sector. This modeling is based on the study of the physical and optical properties of the materials used to design a efficient structure. The use of the ternary material BGaN allowed us to improve the performance of the UV diode such as: the current, luminous power, power spectral density, spontaneous emission, flux spectral density and External quantum efficiency.

**Key words:** GaN, AlN, BN, AlGaN, BGaN, UV light emitting diode.

## ملخص

يتمثل عملنا في محاكاة و تحسين الصمام الثنائي الباعث للضوء فوق بنفسجي بناء على B(Ga, Al)N/GaN و هو عبارة عن هيكل متغاير الأحداث. يعتمد هذا النموذج على دراسة الخصائص الفيزيائية و البصرية للمواد المستخدمة في تصميم بنية فعالة. سمح لنا استخدام المادة الثلاثية BGaN بتحسين أداء الصمام الثنائي للأشعة فوق البنفسجية مثل : التيار ، الطاقة المنبعثة، الكثافة الطيفية، الانبعاث التلقائي، الكفاءة الخارجية.

**الكلمات المفتاحية:** GaN ، AlN ، BN ، AlGaN ، BGaN ، الصمام الثنائي الباعث للضوء فوق بنفسجي.