

#### ملخص

يهدف موضوع هاته الأطروحة إلى وضع خطة في التركيبات ذات الآبار الكمومية المرغم ( المجبرة) لتركبين (لبنيتين) GaInAs/GaAs و GaInNAs/GaAs. يشارك الموضوع يهدا في تحسين أدوات التقليد التي تؤدي إلى تجويد المركبات قبل انجازها. نعرض الانمودج الفيزيائي المستعمل و كذلك مختلف الطرق المتبعة عادة لحساب الوضعيات سابقة الذكر. الغاية من هدا الحساب تقويم طول موجة الإرسال الكسب مادة تيار العتبة و القدرة البصرية للعناصر الأساسية في تقليد المركبات. زيادة على دلك يحتاج وجود مناطق كمومية إلى الأقتراب من الحل باستعمال مصفوفات الكثافة للتعبير بصفة أدق على ظواهر التوصل. نحاول في النهاية عرض نتائج تمبيز القدرة البصرية في مخرج ثنائه، اللبز رذي الأبار الكمومي المرغم على طوار ولي المراسلة في 980 ننو-متر, 1.3 ميكرو-متر و 1.5 ميكرو-متر) DFB ( المراسلة في 1.55 مايكرو-متر من طراز فابري-بيرو).

#### Résumé

Ce travail de thèse a pour objet la mise en oeuvre d'une méthode de calcul des états liés dans les structures à puits quantiques contraints de structures GaInAs/GaAs et GaInNAs/GaAs. Il participe ainsi à l'amélioration des outils de simulation permettant d'optimiser les composants avant leur réalisation. Nous présentons le modèle physique utilisé ainsi que les différentes méthodes couramment employées pour le calcul de ces états. La finalité de ce calcul est l'évaluation de la longueur d 'onde d'émission, du gain du matériau, du courant de seuil et de la puissance optique des éléments de base de la simulation des composants. Cependant, la présence de zones quantiques peut nécessiter une approche par la matrice de densité pour rendre compte, de manière plus précise, des phénomènes de transport. Pour finir, nous présentons les résultats de la caractérisation de la puissance optique à la sortie des diodes laser à puits quantique contraint, des VCSELs (émettant à 980nm,1.3µm et 1.55µm) et de DFB émettant à 1.55µm de type Fabry-Pérot.

#### Abstract

This work deals with a calculation method concerning linked states in strained quantum well structure such as GaInAs/GaAs and GaInNAs/GaAs. It contributes to the simulation tool elaboration. The model as well as a variety of calculation methods is presented. Therefore, the evolutions of emitting wavelength, materiel gain, threshold current, optical power are determined. However, the presence of quantum region may necessitude to the into accout a more accurate density matrix and transport phenomena's. Finally, two laser diodes which VCSELs (emitting to 980nm and 1.3,  $1.55\mu m$ ) and DFB (emitting to  $1.55\mu m$ ) characterisation are presented.

## Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier très sincèrement Monsieur BERKANI Daoud, Professeur à l'ENP (Ecole Nationale Polytechnique d'Alger), et Monsieur FERDJANI Kais, Maître de conférence à l'université Saad Dahlab de Blida, qui m'ont encadré dans le sujet de thèse de doctorat.

Je remercie Monsieur VILCOT Jean Pierre, Directeur de Recherche à l'IEMN (Lille1, France), pour sa disponibilité, ses nombreux conseils, les discussions extrêmement enrichissantes que j'ai pu avoir avec lui ainsi que pour ses encouragements tout au long de ce travail. Ce fut un réel plaisir de travailler avec lui durant ces trois années.

J'exprime ma gratitude à Monsieur HADDADI Mourad, Professeur à l'ENP, d'avoir bien voulu présider mon jury.

Je suis très reconnaissant à Monsieur SALHI Hassen, Maître de conférence à l'université Saad Dahlab de Blida, d'avoir accepté d'être membre de mon jury de thèse.

J'exprime toute ma reconnaissance à Monsieur BENSEBTI Messaoud, Professeur à l'Université Saad Dahlab de Blida, qui m'a fait l'honneur d'être mon examinateur et de témoigner ainsi de l'intérêt qu'il porte à ce travail. Je tiens à le remercier pour son soutien aux moments les plus difficiles que j'ai passés à l'Université de Saad Dahlab BLIDA et pour la confiance qu'il m'a toujours accordée.

Je remercie Monsieur DECOSTER Didier qui fait partie du laboratoire d'optoélectronique à l'IEMN et n'a jamais hésité pour répondre à mes questions.

Ce travail s'est déroulé au sein des laboratoires signal et communications (ENP), LASICOM (Université de Blida) en Algérie et au laboratoire d'optoélectronique à l'IEMN à Lille1 France. Je remercie les directions de ces deux laboratoires qui ont permis de m'aider pour réaliser cette thèse.

Je remercie aussi Madame le Recteur MIMOUN Nadia, qui m'a apporté son aide tout au long de ce travail.

Je tiens à remercier également les Professeurs BACHA Nacer, BEZINA Mohamed, GUESSOUM Abderazek, qui m'ont aidé pour achever ce travail de recherche.

Je remercie tout particulièrement NACER Said pour avoir eu la patience de répondre à mes nombreuses questions concernant la technologie des lasers. Je remercie également EL-BEY Moussa pour ses conseils et son aide.

Je remercie Mr NADJEMI Omar et Mr YKHLEF Farid qui ont bien voulu me consacrer du temps pour m'aider.

Je ne voudrais pas terminer cette partie sans remercier le personnel administratif qui a toujours été efficace pour répondre à mes demandes. Je pense en particulier à Mr ROUANE Mustapha, KAZED Boualem et BENOTHMANE Mohamed.

Pour finir je remercie très sincèrement toutes les personnes qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail et pour toute l'aide qu'elles ont pu m'apporter.



a	Potentiel de déformation dans la bande conduction
a.	Potentiel de déformation dans la bande valence
Eh	Gan des trous
w	Pulsation du photon
м А	Potentiel vecteur
R	Vecteur de Poynting
m	masse effective de l'électron dans le vide
m*	masse effective
m.	masse effective de l'électron dans le vide
h	Constant de Planck
m <sup>*</sup> bar	masse effective de barrière
En	L'énergie de quantification du niveau
Lp	Largeur de puits
V	Barrière de potentiel
с	La vitesse de la lumière dans le vide
Х	La composition de l'alliage
у	La concentration de l'azote
N	L'injection des porteurs
3	Déformation hydrostatique
εv	Déformation uniaxiale
Н	L'hamiltonien
$E_s$	L'énergie de spin
P	Paramètre de kane
$\Delta$	Energie de split-off
Eg	Energie de gap
Ĕ	Energie de la bande de conduction
$E_v$	Energie de la bande de valence
$E_{hh}$	Energie de trous lourds
E <sub>lh</sub>	Energie de trous légers
$E_{so}$	Energie de la bande spin-orbite
k	Vecteur d'onde
φ(z)	La fonction d'enveloppe
V(r)	Le potentiel du matériau
k <sub>p</sub>	Vecteur d'onde parallèle aux couches
$\gamma_i$	Paramètre de luttinger
χ	L'affinité du matériau
3	Tenseur de déformation
as	Paramètre de maille du substrat
a <sub>e</sub>	Paramètre de maille de la couche active
C <sub>ii</sub>	Tenseur d'élasticité
$\delta_{ii}$	Tenseur de contrainte
BC	Bande de conduction
BV	Bande de valence
13	Déformation dans le plan de croissance
	Déformation dans la direction croissance
E <sub>v.av</sub>	L'énergie moyenne de la bande de valence
$\Delta E_{hh}$	Décalage de l'énergie trous lourds
$\Delta E_{lh}$	Décalage de l'énergie trous légers
$E_{glh}$	Gap des trous légers
-	-

$E_{ghh}$	Gap des trous lourds
λ	La longueur d'onde
L <sub>int</sub>	La longueur effective
Г	Facteur de confinement
$\alpha_i$	Les pertes
L	La longueur de la cavité
$\mathbf{R}_{\mathbf{i}}$	Les coefficients de réflexion
$\alpha_{m}$	Les pertes au niveau des miroirs
n <sub>eff</sub>	L'indice effectif
$\lambda_{\mathrm{m}}$	Longueur d'onde dans le vide
β	Constante de propagation
J <sub>s</sub>	Courant de seuil
W	Longueur du ruban
Р	La puissance optique
q	La charge élémentaire
Ns	Densité de porteur au seuil
σ	La section des porteur des pièges
ν	La vitesse des porteurs
${ m m}^{*}_{ m hh}$	Masse effective des trous lourds
${ m m}^{*}_{ m lh}$	Masse effective des trous légers
Т	Température
T <sub>0</sub>	Température au seuil
$G_0$	Le gain de la transparence
$\mathbf{J}_0$	La densité de courant de la transparence
$N_w$	Nombre de puits
$\Gamma_{\rm w}$	Facteur de confinement moyen
$\tau_{s}$	La duré de vie des porteurs
G	Le gain optique lie à l'émission
Ps	Densité de photon
V	Le volume de la cavité
$\alpha_{int}$	Pertes intérieures de la cavité
α	Perte de cavité
n <sub>d</sub>	Rendement différentiel
ε <sub>0</sub>	Constante diélectrique
n <sub>r</sub>	Indice de réfraction
δ	Fonction Dirac
μ	perméabilité
$f_v$	Fonction Fermi-Dirac de la bande de valence
$\mathbf{f}_{\mathbf{c}}$	Fonction Fermi-Dirac de la bande de conduction
E	Champ électrique
В	Champ magnétique
J	Densité de courant
b	Potentiel de déformation tétragonle



Introduction générale	1
Reférences bibliographques	4

## Chapitre I : Les états électroniques dans les puits quantiques

I. 1. Introduction	5
I. 2. Modèle du gain optique	5
I. 2.1 La méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ et le modèle de Kane	6
I. 2.2 Le modèle de Luttinger-Kohn	8
I. 2.3 Approximation de la fonction enveloppe	11
I. 2.4 Hamiltonien des électrons et des trous	12
I. 2.4.1 Hamiltonien des électrons dans la bande de conduction	12
I. 2.4.2 Hamiltonien des trous dans la bande de valence	13
description matricielle	
I. 2.5 Effets de la contrainte	15
I. 2.6 Eléments de calcul du gain matériau et de l'absorption	20
I. 3. Conclusion	24
Reférences bibliographques	25

# Chapitre II : Etude de la structure GaInAs émettant à 0.980µm

II. 1. Introduction	27
II. 2. puits quantique	27
II. 2.1 Énergie de quantification	29
II. 2.2 Effet de la température sur le gap	32
II. 2.3 Energie de la bande interdite	34
II. 2.3.1 Matériaux contraints	34
II. 2.3.2 Hétérojonction de matériaux non contraints	38
II. 2.3.3 Influence de la contrainte	38
II. 2.3.4 Epaisseur critique	40
II. 2.4 Energie de transition	40
II. 2.5 Largeur et composition de puits émettant à 980nm	42
II. 2.6 Gain optique	43

II.2.6.1 Evolution du gain optique en fonction de la longueur	44
d'onde	
II. 2.6.2 Evolution du gain optique maximum	45
II. 2.7 Condition au seuil	46
II. 2.7.1 Condition sur le gain	46
II.2.7.2 Condition sur la phase	47
II. 2.8 La Double Hétérostructure	48
II.2.8.1 Confinement des porteurs	48
II. 2.8.2 Confinement optique	49
II. 2.9 Caractéristiques statiques	51
II. 2.9.1 Courant de seuil	51
II. 2.9.2 Rendement quantique externe $\eta_d$	52
II. 2.9.3 Les origines du courant de seuil	52
II. 2.9.4 Courant lié à la présence de pièges et	52
aux recombinaisons non radiatives en surface.	
II. 2.9.5 Courant lié aux recombinaisons radiatives spontanées	53
II. 2.9.6 Courant lié à la fuite des porteurs aux hétérointerfaces	54
II. 2.9.7 Courant lié aux recombinaisons non radiatives Auger	54
II. 2.9.7.1 Recombinaisons bande à bande	55
II. 2.9.8 Relation courant de seuil et température	56
II. 2.9.9 Evolution du gain maximum en fonction du	56
courant radiatif	
II. 2.10 Puissance émise	58
II. 2.11. Rendement	61
II. 2.11.1 Rendement différentiel	61
II. 2.11.2 Rendement externe	61
II. 2.11.2 Rendement total	61
II.3 Conclusion	62
Reférences bibliographques	63

.

# Chapitre III : Etude de la structure GaInNAs émettant à 1.3 et 1.55µm

III. 1. Introduction	
III. 2. Modèles proposés	
III. 2.1 Incorporation de N dans GaAs	65
III. 2.2 La nouvelle bande de conduction	66
III. 2.3 Caractéristiques électroniques	68
III. 2.4 Discussion sur le modèle BAC	69
III. 2.5 Les autres interprétations	70
III. 3. Modélisation des hétérostructures à puits quantiques GaInNAs	70
III. 3.1 Approximation de la masse effective	71
III. 3.2 Approximation k.p	72
III. 3.2.1 Calcul k.p	72
III. 3.3 Influence de l'azote sur l'énergie	
III. 3.3.1 Bande interdite	74
III. 3.3.2 Energie de transition	77
III. 3.3.3 Longueur d'onde	77
III. 4. Gain optique	79
III. 5. courant de seuil	83
III. 6. Puissance émise	
III. 6. Validation expérimentale	
III. 7. Conclusion	
Reférences bibliographques	89

# Chapitre IV : Caractérisation des diodes laser émettant à 0.980,1.3 et 1.55µm

IV. 1. Introduction	93
IV.2. Les VCSELs 1.3 μm	93
IV.2.1 Fonctionnement	93
IV.2.2 Avantages des émetteurs à 1.3µm	95

IV.3. Caractérisation	96
IV.3.1 Caractérisation de laser VCSELs émettant à 1.3 et 1.55µm	98
IV.3.2 Caractérisation d'un laser DFB 1.55µm	100
IV.3.3 Caractérisation de VCSEL émettant à 980nm	105
IV.4. Conclusion	107
Reférences bibliographques	
Conclusion générale	110

## Annexe.1

Reférences bibliographques	117
A.1.4 Calcul de la largeur effective d'un puits quantique	115
A.1.3.2 Indice de réfraction dans le matériau puits quantique	115
A.1.3.1 Indice de réfraction dans le matériau massif	114
A.1.3 Indice de réfraction	114
A.1.2. Expression des paramètres	112
A.1.1 Tableaux de paramètres physiques	112





#### Introduction

L'essor des télécommunications optiques repose sur une succession d'avancées technologiques : mise au point de fibres pour les transmissions très longue distance, élaboration de sources laser fiables et avènement des amplificateurs optiques à fibre dopée. L'accroissement rapide des besoins en débits de transmission a conduit récemment à introduire le multiplexage en longueur d'onde en supplément du multiplexage temporel, offrant ainsi des capacités de transmission supérieures à 100 Gigabits par seconde sur une seule fibre optique. Des débits de l'ordre du Térabits par seconde apparaissent désormais comme les prochains objectifs, nécessitant le développement de dispositifs optoélectroniques fonctionnant à très haut débit (10 ou 40 Gigabits par seconde), dans des fenêtres spectrales de l'ordre de la centaine de nanomètres.

Ces évolutions suscitent un foisonnement de travaux tant sur les diodes laser, éléments clés traditionnels des systèmes de transmission, que sur de nouveaux dispositifs optoélectroniques : modulateur, régulateur commutateur, convertisseur en longueur d'onde, multiplexeur et démultiplexeur, filtres, coupleurs [1]....

Malgré la diversité des fonctions, les travaux de conception et d'optimisation menés sur ces composants tendent de façon similaire à tirer profit au mieux des propriétés des matériaux semi-conducteurs en améliorant les filières actuelles ou en développant de nouvelles filières d'alliages.

Depuis le début des années 90, avec l'avènement des structures à puits quantiques contraints, les effets de contrainte conjugués aux effets quantiques ont permis d'accroître les potentialités des semi-conducteurs massifs et d'améliorer les performances des dispositifs. Ainsi, les diodes laser et les amplificateurs optiques, tout en conservant une excellente fiabilité, ont démontré un accroissement significatif de leur niveau de performances : division par dix de la densité du courant de seuil et de la sensibilité à la température, multiplication par deux des bandes passantes, réduction de la largeur de raie, réalisation d'amplificateur à faible bruit insensible à la polarisation [2].

Les effets de contrainte procurent un degré de liberté supplémentaire dans la conception de composants à puits quantiques mais la mise à profit de ces effets nécessite une recherche des configurations de puits contraints les mieux adaptées aux performances visées. Les puits, situés au sein de la cavité optique peuvent être uniques ou multiples ; le choix des dimensions et des matériaux des puits et des barrières permet de combiner les effets

quantiques et de contraintes. L'absence de méthode intuitive simple autorisant une véritable ingénierie quantique des composants a conduit à utiliser deux approches :

- l'une vise à analyser le comportement et à établir les performances d'un composant particulier (laser à cavité verticale, amplificateur optique, etc.). La plupart des modèles correspondants [3,7] sont basés sur une résolution, plus ou moins auto consistante des équations générales des semi-conducteurs et des équations de Maxwell. Les principaux axes d'études concernent l'analyse du confinement électrique bidimensionnel, le comportement modal ou dynamique, la simulation des cavités optiques multisections à réseaux de Bragg,...Malheureusement, la description des phénomènes quantiques et des effets de contraintes repose souvent sur une représentation empirique ou simplifiée de structure de bandes et des mécanismes de transitions optiques.
- L'autre approche consiste à donner une description rigoureuse des propriétés physiques de la structure quantique. Les modèles prennent en considération les phénomènes quantiques et les effets de contraintes sur la structure de bandes et permettent d'en déduire les probabilités de transition, le gain actif et le courant associé à un niveau de porteurs [8]. La prise en compte de la non-parabolicité de la bande de valence rend difficile l'intégration de ce calcul dans un programme général de simulation de composant effectué dans le cadre d'une structure simplifiée à un seul puits sans aboutir aux caractéristiques de fonctionnement du dispositif.

Ces deux approches prises séparément ne permettent pas de simuler correctement le comportement des diodes laser à multipuits quantiques. Notre travail de thèse a pour objectif de proposer un outil d'analyse et d'aide à la conception de diodes laser et d'amplificateurs optiques reposant sur une analyse rigoureuse de la structure active et procure les paramètres clés qui régissent le fonctionnement intrinsèque de ces composants

Ce logiciel comporte une modélisation approfondie de la zone active de composants à puits quantiques alliant une description exacte des phénomènes quantiques au calcul des modes optiques dans le dispositif.

Nous nous sommes tout particulièrement attaché à préciser la contribution des recombinaisons Auger, qui est la principale source de recombinaisons non radiatives dans les lasers émettant à 1.3 et1.55µm.

Enfin, bien que cette thèse n'ait pas un but expérimental, il était essentiel d'inclure dans ce travail une comparaison théorie/expérience sans laquelle il eut été difficile de se prononcer sur l'intérêt réel des avancées sur le plan numérique et physique. La présentation de ce travail comprend quatre chapitres.

Le premier chapitre présente le modèle physique utilisé pour le calcul du gain et comporte un rappel sur les états électroniques dans les semiconducteurs et notamment dans les structures à puits quantiques. Nous détaillons ensuite notre approche pour le calcul de ces états, objet de ce travail de thèse.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons les modèles physiques du simulateur dans lequel nous avons intégré le calcul du gain optique pour des structures contraintes GaInAs/GaAs. Nous calculerons d'abord l'évolution de l'énergie de transition, la longueur d'onde pour aboutir à celui du gain optique en fonction de la longueur d'onde, et en faisant varier différents paramètres (composition d'alliage, largeur du puits). Nous terminerons enfin par le calcul du courant de seuil et la puissance optique émise à la sortie du laser.

Dans le troisième chapitre, nous étudions l'influence de l'incorporation de l'azote sur les propriétés de la structure GaInAs/GaAs. Nous reprenons ainsi le calcul de l'énergie de transition, du gain optique, du courant de seuil et de la puissance optique. Le quatrième chapitre concerne la caractérisation de composants laser. Nous mesurons et traçons l'évolution de la puissance en fonction du courant d'injection pour les lasers : DFB1.55µm, les VCSELs 0.980, 1.3 et 1.55µm. Cette partie a été réalisée au niveau du laboratoire d'électronique, microélectronique et de nanotechnologie (IEMN) de Lille1, (France).

# **REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES**

- S. NACER, A. AISSAT, K. FERDJANI and M. BENSEBTI, Influence of dispersion on spectral characteristics of GADC optical filters," Optical and Quantum Electronics" Volume 38, N°8, June 2006.
- [2] A. Lowery, Semiconductor device and lightwave system performance modelling, Optical Fiber Communication. OFC 97, Vol. 16, N°21 pp. 267 – 268, 1997.
- [3] G.L Tan, N. Bewtra, K. Lee and J.M. Xu, A new semiconductor optoelectronic devices simulator and its applications for variable optical attenuators, IEEE J. Quantum Electron., 29,822, (1993)
- [4] N. Tessler and G. Eisenstien, Distributed Nature of Quantum Well Lasers, Appl. Phys. Lett., 62, 1, pp. 10-12, 1993.
- [5] W.M. Man, S.-F. Yu, Comprehensive modeling of diffused quantum-well verticalcavitysurface-emitting lasers, IEEE Journal Quantum Electronics, Vol. 4, N° 4, pp. 715 – 722, 1998.
- [6] L. Chusseau and C. Kazmierski, "Optimum linear pulse compression of a gain-switched 1.5 μm DFB laser," IEEE Photonic Tech. Lett., *vol.* 6, pp. 24-26, 1994.
- P.C.R. Gurney an R.F. Ormondroyd, A multimode self-consistent model of the lasing characteristics of buried heterostructure lasers, IEEE J. Quantum Electron., Vol. 31, N° 3, pp. 427-438, (1995)
- [8] J. Barrau, O. Issanchou, M. Brousseau, A. Mircea and A. Ougazzaden, Optical gain evaluation in GaInAsP quantum-well lasers : a comparison of the different growth techniques, J. Appl. Phys. vol. 77, N° 2, pp. 821-826, 1995.



## I.1. Introduction

Nous présentons dans ce premier chapitre, les méthodes théoriques qui permettent de déterminer les états électroniques dans une hétérostructure bidimensionnelle à base de semiconducteurs III-V à bandes interdites directes. D'abord, nous exposons le modèle de la fonction enveloppe à une bande, ensuite nous présentons les modèles de Kane et de Luttinger, qui permettent d'obtenir les courbes de dispersion proche du centre de la zone de Brillouin, pour un semiconducteur massif. Par la suite, nous prenons en compte les modifications induites par l'application d'une contrainte biaxiale compressive ou extensive. En fin nous résolvons le problème d'un puits quantique symétrique en tenant compte de l'effet de la contrainte, et déterminons les courbes de dispersion des sous bandes de valence, ainsi que les fonctions d'ondes associées. Les résultats obtenus nous conduisent à calculer les forces de transitions optiques et le gain optique.

## I.2. Modèle du gain optique

L'objet de ce chapitre est de présenter les phénomènes physiques qui interviennent dans les hétéro structures III-V, matériaux semiconducteurs. Pour simuler le comportement des composants optoélectroniques actifs, il est nécessaire de calculer précisément le gain (ou l'absorption) optique en fonction de la structure microscopique. On cherche donc à comparer le nombre de photons émis ou absorbés par rapport au nombre de photons injectés dans la structure active du composant.

Les structures optoélectroniques sont généralement constituées de quatre parties (figure 1.1):

- d'une couche active, elle même constituée de plusieurs couches de taille quantique (de l'ordre du nanomètre);
- de couches de confinement optique de manière à éventuellement guider un mode optique pour optimiser l'interaction lumière matière;
- de couches de contact permettant l'injection de porteurs;
- d'empilements macroscopiques extérieurs à ces trois éléments pour mieux évacuer la chaleur que nous ne considérerons pas dans la présente analyse.

Le problème du gain concerne principalement la couche active, nous nous intéressons essentiellement au cas des structures à multi puits quantiques. Ce problème a déjà fait l'objet de nombreuses études publiées [1-12].



Figure 1.1 : Schéma d'un composant optoélectronique

#### I.2.1 La méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ et le modèle de Kane

Pour les composants optoélectroniques, les bandes intéressantes pour les transitions optiques sont les bandes  $\Gamma$ 6,  $\Gamma$ 7 et  $\Gamma$ 8 au voisinage du point  $\Gamma$ . E.O. Kane [13] propose, en utilisant la méthode **k**•**p** pour résoudre l'équation de Schrödinger, une approximation parabolique de ces bandes d'énergie au voisinage du centre de la zone de Brillouin (**k**~0). On écrit le hamiltonien de l'électron en faisant la somme d'une partie non perturbée (indépendante de **k**): H<sub>0</sub> et d'une perturbation dépendante de **k** : H'(k).

$$H_{0} = \frac{1}{2m_{0}}\vec{p}^{2} + V(r) + \frac{\hbar}{4m_{0}^{2}c^{2}}(\vec{\sigma} \times \vec{\nabla}V(r)).\vec{p}$$
(1.1)

$$H'(k) = \frac{\hbar^2}{2m_0}\vec{k}^2 + \frac{\hbar}{m_0}\vec{k}(\vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0c^2}\vec{\sigma}\times\vec{\nabla}V(r))$$
(1.2)

On suppose connues les solutions de l'équation non perturbée:

$$H_0 u_{n0} = \varepsilon_{n0} u_{n0} \tag{1.3}$$

Ces états, servant de base au calcul, sont notés:

- |S↑⟩ et |S↓⟩ pour les états de conduction qui correspondent à la même valeur propre E<sub>s</sub>;
- $|X \uparrow\rangle$ ,  $|X \downarrow\rangle$ ,  $|Y \uparrow\rangle$ ,  $|Y \downarrow\rangle$ ,  $|Z \uparrow\rangle$  et  $|Z \downarrow\rangle$  pour les états de valence qui correspondent à la même valeur propre  $E_p$ . Les états de conduction, comme les états de valence sont donc dégénérés.

L'application de la théorie des perturbations dans le cas où des états sont dégénérés conduit à un système matriciel pour traduire le couplage entre ces états. Kane a montré que l'on peut obtenir une matrice bloc-diagonale en prenant la base suivante:

$$|iS\downarrow\rangle, \quad \left|\frac{X-iY}{\sqrt{2}}\uparrow\rangle, \quad \left|Z\downarrow\rangle, \quad \left|-\frac{X+iY}{\sqrt{2}}\uparrow\rangle\right.$$
(1.4)

$$|iS\uparrow\rangle, \left|-\frac{X+iY}{\sqrt{2}}\downarrow\rangle, \left|Z\uparrow\rangle, \right|-\frac{X+iY}{\sqrt{2}}\downarrow\rangle$$
 (1.5)

Ayant choisi la base de solutions du hamiltonien non perturbé, on peut développer une solution générale en fonction de cette base en appliquant la théorie des perturbations indépendantes du temps pour des états dégénérés, au second ordre. Les éléments de correction au premier ordre sont nuls pour des raisons de parité des états de base. Le calcul conduit à la matrice suivante:

$$H = \begin{bmatrix} H_{\text{int}} & 0\\ 0 & H_{\text{int}} \end{bmatrix}$$
(1.6)

$$H_{\text{int}} = \begin{bmatrix} E_s & 0 & kP & 0 \\ 0 & E_p - \frac{\Delta}{3} & \sqrt{2} \frac{\Delta}{3} & 0 \\ kP & \sqrt{2} \frac{\Delta}{3} & E_p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_p + \frac{\Delta}{3} \end{bmatrix}$$
(1.7)

Le paramètre de Kane P et l'énergie  $\Delta$  (énergie de Split-Off) entre les bandes  $\Gamma$ 7 et  $\Gamma$ 8, sont:

$$P = -i\frac{\hbar}{m_0} \left\langle S \big| p_z \big| Z \right\rangle \tag{1.8}$$

$$\Delta = \frac{3i\hbar}{4m_0^2 c^2} \left\langle X \left| \frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x \right| Y \right\rangle$$
(1.9)

En modifiant l'origine des énergies pour avoir  $E_p = -\Delta/3$  et  $E_s = E_g$ , le hamiltonien d'interaction devient:

$$H_{\text{int}} = \begin{bmatrix} E_g & 0 & kP & 0\\ 0 & -\frac{2\Delta}{3} & \sqrt{2}\frac{\Delta}{3} & 0\\ kP & \sqrt{2}\frac{\Delta}{3} & -\frac{\Delta}{3} & 0\\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
(1.10)

La dernière bande étant découplée des autres, on a une valeur propre E' =0, les autres étant déduites du polynôme caractéristique:

$$E'(E' - E_g)(E' + \Delta) - k^2 P^2(E' + \frac{2\Delta}{3}) = 0$$
(1.11)

Pour une valeur très petite de  $k^2$ , les trois valeurs propres seront très proches de E'=E<sub>g</sub>, E'=0 et E'=- $\Delta$ . La dépendance de l'énergie selon  $k^2$  s'obtient en remplaçant E' successivement par E<sub>g</sub>+E( $k^2$ ), 0+E( $k^2$ ) et - $\Delta$ +E( $k^2$ ) dans l'équation (1.11). La variation d'énergie E( $k^2$ ) étant très petite devant E<sub>g</sub> et  $\Delta$ , on peut établir les approximations suivantes (les quatre valeurs propres du hamiltonien sont notées E<sub>c</sub>, E<sub>hh</sub>, E<sub>lh</sub> et E<sub>so</sub>):

$$E_{c}(k) = E_{g} + \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m_{0}} + \frac{k^{2}P^{2}(E_{g} + 2\frac{\Delta}{3})}{E_{g}(E_{g} + \Delta)}$$

$$E_{hh}(k) = \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m_{0}}$$

$$E_{hh}(k) = \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m_{0}} - \frac{2k^{2}P^{2}}{3E_{g}}$$

$$E_{so}(k) = -\Delta + \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m_{0}} - \frac{k^{2}P^{2}}{3(E_{g} + \Delta)}$$
(1.12)

On a donc une approximation parabolique de la dispersion des bandes d'énergie au voisinage de k = 0. Cependant, ce modèle n'est pas suffisamment précis car le couplage avec les autres bandes d'énergie a été négligé, il en résulte une erreur sur la masse effective des trous lourds. Même si dans les applications optoélectroniques, seules les bandes  $\Gamma_6$ ,  $\Gamma_7$  et  $\Gamma_8$  nous intéressent, le couplage avec les autres bandes est tel qu'il ne peut être négligé. Il faut donc faire appel à un modèle plus précis.

#### I.2.2. Le modèle de Luttinger-Kohn

Le modèle proposé par Luttinger-Kohn [14] prend en compte l'influence des autres bandes sur les bandes de trous lourds, de trous légers et de Split-off. On sépare les bandes selon deux groupes A et B. Les bandes auxquelles on s'intéresse particulièrement qui sont les bandes de valence  $\Gamma_7$  et  $\Gamma_8$  sont dans le groupe A et toutes les autres sont dans le groupe B. On note que la bande de conduction est prise en compte dans le groupe B. On développe la fonction d'onde sur la base des fonctions  $u_{j0}(\mathbf{r})$ , solutions de l'équation de propagation en  $\mathbf{k} = 0$ :

$$u_{k}(\vec{r}) = \sum_{j}^{A} a_{j}(\vec{k}) u_{j0}(\vec{r}) + \sum_{j}^{B} a_{j}(\vec{k}) u_{j0}(\vec{r})$$
(1.13)

L'hamiltonien est décomposé en deux parties:

$$H = H_0 + H' \tag{1.14}$$

avec

$$\begin{cases}
H_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(r) \\
H' = \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \Pi \\
\Pi = \vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V
\end{cases}$$
(1.15)

 $ec{\sigma}$  représente les matrices de Pauli

Pour les fonctions d'ondes de la classe A, on considère trois bandes dégénérées deux fois:

$$u_{10}(r) = \left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}} |(X + iY)\uparrow\rangle$$

$$u_{20}(r) = \left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{-1}{\sqrt{6}} |(X + iY)\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z\uparrow\rangle$$

$$u_{30}(r) = \left|\frac{3}{2}, \frac{-1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY)\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z\downarrow\rangle$$

$$u_{40}(r) = \left|\frac{3}{2}, \frac{-3}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY)\downarrow\rangle$$

$$u_{50}(r) = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X + iY)\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z\uparrow\rangle$$

$$u_{60}(r) = \left|\frac{1}{2}, \frac{-1}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X - iY)\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |Z\downarrow\rangle$$

Ces fonctions sont solutions de l'équation:

$$H(k=0)u_{j0}(r) = E_{j}(0)u_{j0}(r)$$
(1.17)

En posant le changement d'énergie suivant:

$$E_{j}(0) = E_{p} + \frac{\Delta}{3} = 0 \quad pour \ j = 1, 2, 3, 4$$
 (1.18)

$$E_{j}(0) = E_{p} - \frac{2\Delta}{3} = -\Delta \quad pour \ j = 5,6$$
 (1.19)

En suivant [10], on cherche les états électroniques du groupe A:

$$\sum_{j'}^{A} (U_{jj'}^{A} - E\delta_{jj'}) a_{j'}(k) = 0$$
(1.20)

$$U_{jj'}^{A} = H_{jj'} + \sum_{\gamma \neq jj'}^{B} \frac{H_{j\gamma}' H_{jj'}'}{E_0 - E_{\gamma}}$$
(1.21)

L'effet des autres bandes, celles du groupe B, est bien pris en compte dans l'élément  $U_{jj'}^A$ :

$$U_{jj'}^{A} = \left[ E_{j}(0) + \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m_{0}} \right] \delta_{jj'} + \frac{\hbar^{2}}{m_{0}^{2}} \sum_{\gamma \neq jj'}^{B} \sum_{\alpha,\beta} \frac{k_{\alpha}k_{\beta}p_{j\gamma}^{\alpha}p_{\beta'}^{\beta}}{E_{0} - E_{\gamma}}$$
(1.22)

L' hamiltonien obtenu est de la forme:

$$H = \begin{pmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -\frac{S}{\sqrt{2}} & \sqrt{2}R \\ -S^* & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^* & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^* & S^* & P+Q & -\sqrt{2}R^* & -\frac{S^*}{\sqrt{2}} \\ -\frac{S^*}{\sqrt{2}} & -\sqrt{2}Q^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^* & \sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \sqrt{2}Q^* & -\frac{S}{\sqrt{2}} & 0 & P+\Delta \end{pmatrix}$$
(1.23)

avec

$$P = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), \quad Q = \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2),$$
$$R = \frac{\hbar^2}{2m_0} [-\sqrt{3}\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + i2\sqrt{3}\gamma_3 k_x k_y]$$
$$S = \frac{\hbar^2 \gamma_3}{m_0} \sqrt{3} (k_x - ik_y) k_z$$

Nous avons ainsi une description plus complète des états électroniques dans la bande de valence.

#### I.2.3 Approximation de la fonction enveloppe

Lorsqu'on utilise des hétérostructures, les deux phénomènes importants, à prendre en compte, sont la quantification due à la faible épaisseur des couches et la contrainte due à la différence de maille atomique des couches déposées sur le substrat. Le premier phénomène auquel nous nous intéressons est la quantification dans la direction (z) (voir figure 1.2). Le modèle décrivant la densité de probabilité électronique dans les hétérostructures III-V est celui de la fonction d'onde enveloppe. Ce modèle revient à écrire que l'onde de Bloch de base dans chaque couche, gouvernée par les états "atomiques" propres à chaque matériau, est modulée par une enveloppe lentement variable à l'échelle de la distance inter-atomique:

$$\varphi(r) = \varphi(z)u(r) \tag{1.24}$$

où u(r) est périodique à l'échelle atomique et  $\varphi(z)$  est la fonction enveloppe. Ce modèle est largement inspiré de la théorie de masse effective qui décrit les orbitales hydrogénoïdes d'un électron sur une impureté dont le niveau est proche de la bande [3,4].

Avec une hétérostructure, la périodicité du potentiel est rompue par la différence des matériaux. L'électron n'est plus soumis à un potentiel uniquement périodique, l'hamiltonien est alors de la forme:

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V_c(r) + V(r)$$
(1.25)

où  $V_c(r)$  est le potentiel périodique propre à chaque matériau et V (r) est un potentiel lentement variable en fonction de r. Si V (r) = 0, les solutions de l'équation de Schrödinger sont des ondes de Bloch. Nous proposons la notation suivante: (z) désigne la direction perpendiculaire aux couches et (xy), le plan parallèle à celles-ci. Pour la suite, nous définissons  $k_{\rho}$ , le module du moment  $\mathbf{k}_{\rho}$ , parallèle aux couches:

$$k_{\rho}^{2} = k_{x}^{2} + k_{y}^{2} \tag{1.26}$$

En toute rigueur, il faudrait considérer l'énergie suivant  $k_x$  et  $k_y$  car les courbes d'énergie constante sont anisotropiques dans le plan ( $k_x$ ,  $k_y$ ). Cependant, en suivant une approximation axiale et en prenant uniquement  $k_\rho$  comme paramètre, il est possible d'obtenir un hamiltonien diagonal sans perdre l'essentiel de la physique concernant le couplage des bandes de valence [7].



Figure 1.2: Définition des axes

#### I.2.4 Hamiltonien des électrons et des trous

#### I.2.4.1 Hamiltonien des électrons dans la bande de conduction

Lorsque l'énergie de gap  $E_g$  est suffisamment élevée, on peut négliger le couplage entre la bande de conduction et la bande de valence. Cette approximation est notamment valable pour les matériaux à base de GaAs ou d'InP, très utilisés dans les composants optoélectroniques. Pour calculer l'onde enveloppe des états de conduction, il faut résoudre l'équation de Schrödinger selon l'approximation de Ben-Daniel-Duke [11]:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{m_e}\frac{\partial}{\partial z}\right) + \frac{\hbar^2 k_\rho^2}{2m_e} + V_c(z)\right)\varphi(z) = E\varphi(z)$$
(1.27)

où  $V_c$  est le potentiel de conduction,  $m_e$  est la masse effective de l'électron. Cette formulation prend en compte la dispersion en énergie selon le plan parallèle aux couches ainsi que la contribution à l'affinité et la variation hydrostatique de l'énergie de conduction. Sans couplage, la relation de dispersion en énergie selon  $k_p$  est donnée selon l'approximation parabolique:

$$E_{c}(k_{\rho}) = E_{c}(0) + \frac{\hbar^{2}}{2m_{e}}k_{\rho}^{2}$$
(1.28)

Cependant cette approximation n'est pas toujours valable surtout quand la structure comporte des matériaux dont la masse effective dans chaque matériau est très différente. *Thèse de doctorat ENP 2007* 12 I.2.4.2 Hamiltonien des trous dans la bande de valence : description matricielle

Le problème des états de valence est plus complexe en raison de la dégénérescence des trous lourds et des trous légers et de la proximité de la bande dite de split-off . Les deux bandes de trous lourds et de trous légers se trouvent alors découplées à la fois par la quantification du mouvement dans la direction z et par la contrainte biaxiale. Le modèle faisant intervenir ces deux contributions est le modèle de Pikus-Bir [15]. La représentation de la fonction d'onde des états au voisinage du gap dans un semi-conducteur IV ou III-V est donnée par les huit combinaisons de moment orbital et de spin (modèle de Kane ou de Luttinger). En découplant la bande de conduction on retient six états. La méthode de perturbation des états dégénérés conduit à un hamiltonien  $6 \times 6$  qui peut être factorisé en deux blocs  $3 \times 3$  [16]:

$$\overline{\overline{H}} = \begin{pmatrix} \overline{\overline{H}}^U & 0\\ 0 & \overline{\overline{H}}^L \end{pmatrix}$$
(1.29)

Cet hamiltonien est écrit dans une base  $B_1$  ayant subie une transformation unitaire à partir de la base  $B_2$  des fonctions de Bloch,  $B_1 = U B_2$  avec:

$$B_{1} = \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \\ |3\rangle \\ |4\rangle \\ |5\rangle \\ |6\rangle \end{pmatrix}, \quad B_{2} = \begin{pmatrix} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & -i\alpha^{*} & 0 & 0 \\ 0 & i\beta & -\beta^{*} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i\beta & -\beta^{*} \\ \alpha & 0 & 0 & -i\beta & -i\beta^{*} \end{pmatrix}$$
(1.30)

où

$$\alpha = \exp(-i3\frac{\varphi}{2})/\sqrt{2} , \quad \beta = \exp(-i\frac{\varphi}{2})/\sqrt{2} \quad \text{et} \quad tg(\varphi) = \frac{k_x}{k_y}$$
(1.31)

 $\overline{H}_{v}$ , représente la factorisation du hamiltonien, chaque sous-hamiltonien 3 × 3 étant donné par:

$$\overline{\overline{H}}_{v}^{U,L} = -\begin{pmatrix} P + Q - V_{h} & R \mp iS & \sqrt{2}R \pm i\frac{S}{\sqrt{2}} \\ R^{*} \pm iS^{*} & P - Q - V_{l} & \sqrt{2}Q \pm i\sqrt{\frac{3}{2}S} \\ \sqrt{2}R^{*} \pm iS^{*} & \sqrt{2}Q^{*} \mp i\sqrt{\frac{3}{2}S^{*}} & P + \Delta_{so} - V \end{pmatrix}$$
(1.32)

avec

$$P = \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_\rho^2 + k_z^2), \ Q = \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_\rho^2 - 2k_z^2), \ R = \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} (\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2}) k_\rho^2$$
$$S = \frac{\hbar^2 \gamma_3}{m_0} 2\sqrt{3} \gamma_3 k_\rho k_z$$
$$V = \chi - E_g$$

où  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  et  $\gamma_3$  sont les paramètres de Luttinger que l'on peut relier aux masses effectives des matériaux non contraints par les cinq relations suivantes:

$$m_{hz} = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2}, \ m_{lz} = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2}$$
$$m_{hk_{\rho}} = \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma_2}, \ m_{lk_{\rho}} = \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma_2} \qquad m_{sz} = \frac{m_0}{\gamma_1} = m_{sk_{\rho}}$$
(1.33)

 $\Delta_{so}$  étant l'énergie entre le haut de la bande de valence et la bande de split-off.

V est la différence entre l'affinité  $\chi\,$  et l'énergie de gap  $E_g,$ 

En tenant compte des contraintes:

- pour les trous lourds,  $V_h = V + a_v \sigma_{hy} + b\sigma_{sh}$  (1.34)
- pour les trous légers,  $V_l = V + a_v \sigma_{hy} b\sigma_{sh}$  (1.35)

La fonction d'onde associée à la partie haute du hamiltonien, de dimension 3, sera notée:

$$\varphi_{\nu} = \begin{pmatrix} \varphi_{\nu}^{hh} \\ \varphi_{\nu}^{lh} \\ \varphi_{\nu}^{sh} \end{pmatrix}$$
(1.36)

I.2.5 Effets de la contrainte

La succession des couches formant la structure des diodes lasers à puits quantique GaInAs impose l'épitaxie de deux matériaux de paramètres de mailles différents GaInAs et GaAs, constituant respectivement le puits et les barrières. Deux cas de figure peuvent se présenter:

- si l'épaisseur de la couche active est supérieure à une certaine épaisseur appelée épaisseur critique, les déformations induites par le désaccord de maille sont telles que la génération de dislocations au sein de la couche GaInAs devient énergiquement favorable, autorisant ainsi la relaxation de la contrainte. Cette situation est catastrophique quant aux propriétés électroniques du matériau.
- si l'épaisseur de la couche active reste inférieure à l'épaisseur critique, le paramètre de maille du matériau GaInAs peut s'adapter à celui du GaAs dans le plan de croissance grâce à une déformation élastique tétragonale de sa maille cristalline. La couche GaAs, plus épaisse, reste non déformée.

De l'adaptation du paramètre de maille du GaInAs à celui de GaAs résulte une contrainte biaxiale, dans le plan de l'interface, de composantes  $\sigma_{vv}$  et  $\sigma_{zz}$ .

Dans les paragraphes qui suivent, il sera tout d'abord calculé la déformation de la couche active épitaxiée sur substrat. Il sera ensuite analysé l'influence de cette déformation sur les bandes de valence et de conduction de ce matériau et enfin l'énergie de la bande interdite de la couche active contraint sera déterminée.

La condition nécessaire à une bonne hétéro-épitaxie est évidemment que les deux matériaux aient d'une part la même structure cristalline et, d'autre part, des paramètres de mailles voisins. Lorsque les paramètres de mailles sont différents, le matériau constituant la couche de plus grande épaisseur impose sa maille à l'autre, au moins au voisinage de l'interface. Ceci entraîne l'existence, dans le matériau de faible épaisseur, d'une contrainte biaxiale dans le plan des couches [10]. Prenons le cas de deux cristaux comme le montre la figure 1.3.



Figure 1.3 : Déformation tétragonale d'une couche épitaxiée sur un substrat de paramètre de maille différent : compression biaxiale ( $a_e > a_s$ ) et tension biaxiale

$$(a_e < a_s)$$

Après épitaxie, le dépôt est déformé par le substrat. Soit  $\vec{X} = (x, y, z)$ , la position d'un atome de cristal du matériau SC1 avant épitaxie. Sa nouvelle position est :  $\vec{X}' = \varepsilon \vec{X}$  avec

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix},$$
(1.37)

 $\epsilon$  et le tenseur de déformation du cristal dans le cas d'une déformation biaxiale.

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_s - a_e}{a_e} \tag{1.38}$$

a<sub>s</sub> étant le paramètre de maille du substrat et a<sub>e</sub> celui de la couche déposée.

De plus, la théorie de l'élasticité nous permet d'écrire les relations constitutives entre le tenseur d'élasticité  $C_{ij}$ , le tenseur de contrainte  $\sigma$  et le tenseur de déformation  $\epsilon$ .

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{yz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathcal{E}_{xx} \\ \mathcal{E}_{yy} \\ \mathcal{E}_{zz} \\ \mathcal{E}_{xy} \\ \mathcal{E}_{xz} \\ \mathcal{E}_{yz} \end{bmatrix}$$
(1.39)

où  $C_{ij}$  sont les constantes d'élasticité. Dans le cas d'une compression biaxiale ou tension biaxiale on aura:

$$\sigma_{yz} = \sigma_{yx} = \sigma_{zx} = 0$$

$$\sigma_{yy} = \sigma_{xx}$$

$$\sigma_{zz} = 0$$

$$\varepsilon_{yz} = \varepsilon_{yx} = \varepsilon_{zx} = 0$$
(1.40)

Compte tenu du tenseur de contrainte [ $\sigma$ ], on a:

$$\sigma_{zz} = C_{12} \left( \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} \right) + C_{11} \varepsilon_{zz} \tag{1.41}$$

Si aucune force externe n'est appliquée à la structure, l'équilibre statique implique la nullité de la composante  $\sigma_{xx}$  du tenseur des contraintes

$$C_{12}\left(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}\right) + C_{11}.\varepsilon_{zz} = 0 \tag{1.42}$$

alors :

$$\varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{xx} \tag{1.43}$$

Ce qui permet de déterminer la quantité

$$a_{\perp} = a_e + (a_e - a_s) \frac{2C_{12}}{C_{11}}$$
(1.44)

La contrainte entraîne une variation du potentiel comme cela est montré dans le cas d'un puits contraint en compression sur la figure 1.4.



Figure 1.4 : Déformation du potentiel en fonction de la contrainte (cas de la compression)

Pour la bande de conduction

$$V_c = \chi + a_c (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})$$
(1.45)

où  $\chi$  est l'affinité du matériau et  $a_c$  le potentiel de déformation.

$$V_{C} = \chi + 2a_{c} \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_{xx}$$
(1.46)

Pour la bande de valence, la contrainte a pour effet de lever la dégénérescence trous lourds trous légers, on a alors deux potentiels différents :

$$V_h = \chi - E_g + a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})$$
(1.47)

$$V_{l} = \chi - E_{g} + a_{v} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})$$
(1.48)

$$V_{h} = \chi - E_{g} + 2a_{v}(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}})\varepsilon_{xx} + b(1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}})\varepsilon_{xx}$$
(1.49)

$$V_{l} = \chi - E_{g} + 2a_{v}(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}})\varepsilon_{xx} - b(1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}})\varepsilon_{xx}$$
(1.50)

A partir de la matrice du tenseur de déformation, la contrainte biaxiale peut être décomposée en deux composantes:

- a- une contrainte hydrostatique.
- b- une contrainte uniaxiale.

La composante hydrostatique induit un changement de volume du réseau cristallin et modifie l'énergie de la bande interdite. La composante uniaxiale correspond à un cisaillement pur qui baisse la symétrie du système et lève la dégénérescence de la bande de valence en séparant les bandes de trous légers et de trous lourds (figure 1.5).



Figure 1.5 : Evolution de l'énergie de la bande interdite en fonction de l'état de contrainte d'une couche déposée sur un substrat

• composante hydrostatique 
$$\sigma_{hy} = 2 \left( 1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \epsilon_{xx}$$
 (1.51)

• composante de cisaillement  $\sigma_{sh} = \left(1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon_{xx}$  (1.52)

On peut alors exprimer la variation du gap dans le matériau

$$E_{g,h} = V_c - V_h = E_g + (a_c - a_v)\sigma_{hy} - b\sigma_{sh}$$
 (1.53)

$$E_{g,l} = V_c - V_l = E_g + (a_c - a_v)\sigma_{hy} + b\sigma_{sh}$$
 (1.54)

I.2.6 Eléments de calcul du gain matériau et de l'absorption

Les états électroniques étant connus, on peut alors calculer le gain matériau. Il s'agit d'évaluer le rapport entre le nombre net de photons et le nombre de photons injectés dans la zone active du composant. Quand on utilise les semiconducteurs pour les lasers ou les amplificateurs optiques, il faut pouvoir évaluer les phénomènes schématisés sur la figure 1.6, à savoir:



absorption

émission spontanée

émission stimulée

Figure 1.6 : Schéma des transitions radiatives entre un état de la bande de valence et un état de la bande de conduction

- l'absorption où l'énergie ħω d'un photon est utilisée pour permettre à un électron de passer d'un état E<sub>2</sub> de la bande de valence vers un état vide E<sub>1</sub> de la bande de conduction tels que : E<sub>1</sub> − E<sub>2</sub> = ħω
- l'émission spontanée où un électron passe d'un état  $E_1$  de la bande de conduction vers un vide  $E_2$  de la bande de valence en émettant un photon d'énergie  $E_1 - E_2 = \hbar \omega$
- l'émission stimulée où un photon d'énergie ħω vient interagir avec le semiconducteur et favoriser le passage d'un électron d'un état E<sub>1</sub> de la bande de conduction vers un état vide E<sub>2</sub> de la bande de valence en émettant un deuxième photon identique au premier. L'interaction entre les photons et les électrons dans un semiconducteur est décrite par le hamiltonien suivant:

$$H = \frac{1}{2m_0} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + V(r) = \frac{\vec{p}^2}{2m_0} - \frac{1}{2m_0} (\vec{p}\vec{A} + \vec{A}\vec{p}) + \frac{e^2\vec{A}^2}{2m_0} + V(r)$$
(1.55)

Cet hamiltonien peut se mettre sous la forme:

$$H = H_0 + H_{\text{int}} \tag{1.56}$$

avec

$$H_{\rm int} \approx -\frac{e}{m_0} \vec{A}.\vec{p} \tag{1.57}$$

Le terme e<sup>2</sup>**A**<sup>2</sup>/2m<sub>0</sub> a été négligé car  $\left| e\vec{A} \right| \langle \langle |\vec{p}|$ .

Le nombre de photons injectés  $N_{inj}$  est égal au rapport de l'intensité optique S reçue par l'énergie d'un photon de pulsation  $\omega$ :

$$N_{inj} = \frac{S}{\hbar\omega} \tag{1.58}$$

Le potentiel vecteur A du champ optique est de la forme:

$$\vec{A} = A_0 \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t)\vec{u}$$
(1.59)

 $\vec{u}$  étant le vecteur unitaire dans la direction du champ électrique.

Les champs électrique et magnétique se déduisent des quatre équations de Maxwell:

$$div\vec{B} = 0$$
  

$$ro\vec{t}(\vec{E}) = -\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}$$
  

$$div\vec{E} = \rho/\varepsilon$$
  

$$ro\vec{t}(\vec{B}) = \mu(\vec{j} + \varepsilon \frac{\partial\vec{E}}{\partial t})$$
  

$$\vec{E}(r,t) = -gra\vec{d}V - \frac{\partial\vec{A}}{\partial t} = -\omega\vec{A}_0\sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)\vec{u}$$
  
(1.61)

avec V=0

$$\vec{H}(r,t) = \frac{1}{\mu} \vec{\nabla} \wedge \vec{A} = -\frac{1}{\mu} \vec{A}_0 \sin(\vec{k}\vec{r} - \omega t)\vec{k} \wedge \vec{u}$$
(1.62)

On peut alors en déduire l'intensité optique en faisant la moyenne du vecteur de Poynting:

$$\left\langle \vec{S} \right\rangle = \left| \left\langle \vec{E}(r,t) \wedge \vec{H}(r,t) \right\rangle \right| = \frac{1}{2} n_r c \varepsilon_0 \omega^2 A_0^2$$
 (1.63)

 $n_r$  étant l'indice réel du matériau considéré,  $\mu$  la perméabilité magnétique,  $\epsilon_0$  la constante diélectrique du vide et c la vitesse de la lumière dans le vide. Le nombre de photons injectés est S divisé par l'énergie d'un photon:

$$N_{inj} = \frac{S}{\hbar\omega} = \frac{1}{2\hbar} n_r c \varepsilon_0 \omega A_0^2$$
(1.64)

Thèse de doctorat ENP 2007
Le nombre net de photons  $N_{net}$  est égal à la différence entre le nombre de photons émis  $R_{cv}$  par le passage d'un électron de la bande de conduction vers un trou de la bande de valence et le nombre de photons absorbés  $R_{vc}$  par le passage d'un électron de la bande de valence vers un état vacant de la bande de conduction. Ces deux quantités se calculent d'après la règle d'or de Fermi:

$$R_{cv} = \frac{2}{V} \sum_{n,mk_{\rho}} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \psi_n \middle| H_{\text{int}} \middle| \psi_m \right\rangle \right|^2 \delta(E_c^n - E_v^m - \hbar\omega) f_v (1 - f_c)$$
(1.65)

$$R_{\nu c} = \frac{2}{V} \sum_{n,mk_{\rho}} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \psi_n | H_{\text{int}} | \psi_m \right\rangle \right|^2 \delta(E_c^n - E_v^m - \hbar\omega) f_c (1 - f_v)$$
(1.66)

n parcourant les états de conduction et m les états de valence. Le premier facteur 2 vient du fait que l'on prend en compte les deux états de spin possibles pour l'électron [10]. La règle de conservation des moments implique que les moments des deux états électroniques permettant une transition par l'émission ou l'absorption d'un photon doivent être identiques. C'est pour cela que, dans les expressions de  $R_{vc}$  et  $R_{cv}$ , la somme est faite sur le même moment  $k_{\rho}$  pour les états de conduction et de valence. D'autre part, l'électron à l'état n est caractérisé par la fonction d'onde:

$$\psi_{c,n}^{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{C}} \exp(i\vec{k}_{\rho}.\vec{r})\psi_{c,n}(k_{p},z)|s\sigma\rangle$$
(1.67)

où  $\sigma = \uparrow$  ou  $\downarrow$ , la constante C étant choisie de manière à normer la fonction d'onde:  $|\psi^{\sigma}{}_{c,n}| = 1$ 

Pour un trou, s'agissant de la partie haute du hamiltonien, on a:

$$\psi_{\nu,m}^{U} = \frac{1}{\sqrt{C}} \exp(i\vec{k}_{\rho}\vec{r}) [\psi_{\nu,m}^{hh}(k_{\rho},z)|1\rangle + \psi_{\nu,m}^{lh}(k_{\rho},z)|2\rangle + \psi_{\nu,m}^{sh}(k_{\rho},z)|3\rangle]$$
(1.68)

Pour un état de la partie basse du hamiltonien:

$$\psi_{\nu,m}^{L} = \frac{1}{\sqrt{C}} \exp(i\vec{k}_{\rho}\vec{r}) [\psi_{\nu,m}^{hl}(k_{\rho},z)|4\rangle + \psi_{\nu,m}^{ll}(k_{\rho},z)|5\rangle + \psi_{\nu,m}^{sl}(k_{\rho},z)|6\rangle] \quad (1.69)$$

U et L représentant la partie haute et basse du hamiltonien des trous de la bande de valence (expression (1.32)). Les facteurs d'occupation des bandes de conduction et de valence  $f_c$  et  $f_v$  sont donnés par les relations suivantes:

$$f_{c} = \frac{1}{1 + \exp(\frac{E_{c} - E_{F_{c}}}{k_{B}T})}, \ f_{v} = \frac{1}{1 + \exp(\frac{E_{v} - E_{F_{v}}}{k_{B}T})}$$
(1.70)

 $f_c$  et 1- $f_c$  représentent, respectivement, l'occupation des électrons et des trous dans la bande de conduction. De même,  $f_v$  et 1- $f_v$  représentent, respectivement, l'occupation des électrons et des trous dans la bande de valence.  $E_{Fv}$  et  $E_{Fc}$  représentent les niveaux de Fermi.

Le nombre net de photons  $N_{net}$  est donc:

$$N_{net} = R_{vc} - R_{cv} = \frac{2}{V} \sum_{n,m} \sum_{k\rho} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle \psi_n | H_{int} | \psi_m \right\rangle \right|^2 \delta(E_v^m - E_c^n - \hbar\omega) (f_v - f_c)$$
(1.71)

$$\langle \psi_n | H_{\text{int}} | \psi_m \rangle = -\frac{eA_0}{2m_0} \widehat{e} M_{CV}$$
 (1.72)

L'élément de matrice  $M_{cv}$  dépendant des fonctions de Bloch, inclue également les fonctions enveloppes. On peut donc exprimer le nombre net de photons émis en fonction de  $A_0$ :

$$N_{net} = \frac{\pi e^2 A_0^2}{V \hbar m_0^2} \sum_{n,m} \sum_{k_{\rho}} \left| \hat{e} \cdot M_{cv} \right|^2 \delta \left( E_v^m - E_c^n - \hbar \omega \right) (f_v - f_c)$$
(1.73)

Le rapport de  $N_{net}$  par  $N_{inj}$  permet de calculer le gain matériau en fonction de la longueur d'onde des photons, de l'indice réel du matériau, de l'interaction photon-électron et de l'occupation des bandes d'énergie:

$$G = -\frac{N_{net}}{N_{inj}} \tag{1.74}$$

$$G = \frac{2\pi e^2}{n_r \varepsilon_0 c \,\omega m_0^2 V} \sum_{n,m} \sum_{k_\rho} \left| \hat{e} \, M_{cv} \right|^2 \delta \left( E_v^m - E_c^n - \hbar \omega \right) (f_c - f_v) \tag{1.75}$$

$$M_{cv} \cong 3/4 \left( 1 + \frac{E_{eh}}{E_{cn}} \right) \left( M_{cv}^2 \right)_{conv} \qquad E > E_{cv}$$
(1.76)

$$M_{cv} \cong 3/2 \left( M_{cv}^2 \right)_{conv} \qquad E \le E_{cv} \qquad (1.77)$$

$$\left|M_{cv}^{2}\right|_{conv} = \frac{e^{2}h^{2}}{2E_{ev}}\frac{E_{g}(E_{g} + \Delta_{so})}{E_{g} + (2/3)\Delta_{so}}\frac{1}{m_{e}}$$
(1.78)

 $\delta(E_v^m - E_c^n - \hbar\omega)$  est la fonction de Dirac qui traduit la conservation stricte de l'énergie au cours de la transition.

Pour l'absorption interbande de valence  $G_{ivba}$ , le calcul est identique mais on va évaluer les transitions entre électrons et trous à l'intérieur de la bande de valence, comprenant les états liés de trous lourds, de trous légers et ceux de la bande de split-off:

$$G_{ivba} = \frac{2\pi e^2}{n_r \varepsilon_0 c \,\omega m_0^2 V} \sum_{n,m \, k\rho} \left| \hat{e} . M_{cv} \right|^2 \delta(E_v^m - E_c^n - \hbar \omega) (f_v^m - f_c^n) \quad (1.79)$$

#### I.3. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rappelé les bases du calcul du gain et de l'absorption dans les hétérostructures III-V. Le modèle présenté repose sur un calcul détaillé des bandes non paraboliques en présence d'hétérostructure ou de forte contrainte biaxiale. Les hétérostructures sont traitées par la fonction enveloppe et les contraintes par un modèle de maille atomique imposée par le substrat (nous ne considérons pas de relaxation de la contrainte). Compte tenu de la complexité du problème, la méthode numérique de résolution est déterminante pour l'obtention de résultats valables dans un temps de calcul raisonnable.

# **REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES**

- H. Kroemer. A proposed class of heterojunction lasers. In IEEE, Vol. 51, pp. 1782-1783, 1963.
- [2] Zh.I. Alferov and R.F. Kazarinov. Semiconductor laser with electrical pumping. U.S.S.R., Patent, 181737, 1963.
- [3] G. Bastard. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructure. Les éditions de Physique, Les Ulis, France, 1988.
- [4] M. Altarelli. Electronic structure and semiconductor-semimetal transition in InAs-GaSb superlattices. Physical Review B, Vol. 28, N° 2, pp.842-845, 1983.
- [5] M. Asada, A. Kameyama, and Y. Suematsu. Gain and Intervalence Band Absorption in Quantum-Well Lasers. IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 20, N°7, pp. 745-753, 1984.
- [6] A. S. Plaut, J. Singleton, R. J. Nicholas, R. T. Harley, S. R. Andrews and C.T.B. Foxon, Observation of decoupled heavy and light holes in GaAs-Ga1-xAlxAs quantum wells by magnetoreflectivity, Phys. Rev. B 38, pp. 1323 – 1329, 1988.
- [7] D.A. Broido and L.J. Sham. Effective masses of holes at GaAs-AlGaAs heterojunctions. Physical Review, Vol. 31, N° 2, pp. 888-892, 1985.
- [8] T. Ando. Hole Subbands at GaAs/AlGaAs Heterojunctions and Quantum Wells. Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 54, Nº4, pp. 1528-1536, 1985.
- [9] L.C. Andreani, A. Pasquarello, and F. Bassani. Hole subbands in strained GaAs-Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells: Exact solution of the effective-mass equation. Physical Review, Vol. 36, N° 11, pp.5887, 1987.
- [10] S.L. Chuang. Physics of optoelectronic devices. Wiley series in Pure and Applied optics, New-York, 1995.
- [11] G. Bastard and J.A. Brum. Electronic states in semiconductor heterostructures. IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 22, N° 9, pp. 1625 – 1644, 1986.
- [12] C.S. Chang and S.L. Chuang. Modeling od strained quantum-well lasers with spin-orbit coupling. IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol .1, N° 2, pp. 218-229, 1995.
- [13] E. O. Kane. Band Structure of Indium Antimonide. Journal of Physical and Chemical of Solids, Vol. 1, pp. 249-261, 1957.

- [14] J.M. Luttinger and W. Kohn. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. Physical Review, Vol. 97, N° 4, pp. 869-883, 1955.
- [15] G.L. Bir and G.E. Pikus. Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors. Wiley, New-York, 1974.
- [16] C.Y. Chao and S.L. Chuang. Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells. Physical Review B, Vol. 46, N°7, pp. 4110-4122, 1992.

# Chapitre II Etude de la structure GalnAs émettant à 0.980µm

## II.1. Introduction

Le développement des diodes laser à puits quantique contraint GaInAs/GaAs en vue du pompage d'amplification à fibre de silice dopée erbium nécessite de réaliser des composants qui présentent simultanément une émission à 0.980µm, une densité de courant de seuil aussi faible que possible et une puissance optique convenable.

L'étude présentée dans ce chapitre permet d'analyser l'influence des divers paramètres (composition, largeur du puits) sur les différentes caractéristiques : énergie de quantification, énergie de transition, longueur d'onde d'émission, le gain optique, le courant de seuil et la puissance optique émise. Une attention particulière sera portée à l'effet de la contrainte sur les différentes caractéristiques de la structure GaInAs/GaAs.

## II.2. puits quantique

La structure d'un laser à puits quantique GaInAs, comme représentée sur la figure 2.1, peut être décrite selon les trois axes: transverse, latéral et longitudinal, soit respectivement selon les axes oz, ox, oy

a) La structure transverse

Selon l'axe oz, une diode laser à puits quantique contraint GaInAs est constituée d'un empilement de couches sur substrat. La structure du composant comporte:

- une couche active constituée par un ou plusieurs puits quantiques contraints GaInAs (ou GaInAsP) de quelques dizaines d'Angströms d'épaisseur.
- un guide optique constitué de deux couches barrières GaAs, de quelques centaines d'Angströms entourées de deux couches de confinement de 1µm environ.

La couche active GaInAs est constituée d'un matériau de bande interdite inférieure à celle des couches adjacentes et constitue un puits quantique de potentiel pour les porteurs. Ces derniers, compte tenu de la largeur du puits ( $L_p=50\rightarrow100$ Å), sont soumis à la quantification de leur mouvement qui prend alors un caractère bidimensionnel. Les états d'énergies des particules correspondent donc à des niveaux quantifiés.

De plus, compte tenu de l'épitaxie du matériau GaInAs sur le matériau GaAs de paramètre de maille initialement différent, le puits quantique est contraint, ce qui modifie également les énergies des particules et confère au puits des propriétés électroniques particulières.

Par ailleurs, un des problèmes fondamentaux du laser à puits quantique contraint ou non contraint est que l'interaction entre l'onde optique et les porteurs est faible en raison de la largeur du puits. Aussi, pour remédier à cet inconvénient, on utilise l'effet du confinement séparé qui consiste à améliorer le confinement des photons en ajoutant de part et d'autre de la zone active un guide d'onde. Ce dernier peut être réalisé:

- soit grâce au matériau barrière de composition constante GaAs, épitaxié sur la couche de confinement.
- soit grâce au matériau barrière de composition graduelle Ga<sub>x</sub>In<sub>l-x</sub>As épitaxié sur la couche de confinement.



Figure 2.1: Représentation schématique de la structure d'une diode laser à puits quantique GaInAs/GaAs

Les deux sortes de guides optiques ainsi définis réalisent deux types de confinement optique respectivement SCH (Separate Heterostructure Confinement) et GRINSCH (Graded Index Separate Heterostructure Confinement). Sur la figure 2.2 est portée une représentation schématique du profil de la bande de conduction correspondant à ces deux configurations. b) La structure latérale

De façon générale, la structure latérale selon l'axe ox est définie par le mode de guidage latéral: guidage par le gain ou par l'indice. De nombreuses configurations permettent d'obtenir ce type de guidage.

c) La structure longitudinale

Dans le sens longitudinal selon l'axe oy, une cavité optique de type Fabry-Pérot est réalisée grâce au clivage des deux faces extrêmes suivant les axes cristallins dans le plan oxy.



Figure 2.2 : Représentation schématique du profil de la bande de conduction d'un laser à confinement optique de type a)- SCH et b)-GRINSCH

# II.2.1 Énergie de quantification

Le but de ce paragraphe est de rappeler succinctement la méthode de détermination des niveaux quantifiés dans un puits quantique non contraint et d'adapter celle-ci au cas d'un puits contraint. Considérons un ensemble de porteurs (électrons, trous lourds ou trous légers) confinés dans le puits quantique de potentiel constitué par la couche GaInAs contrainte et les couches barrières. En raison de la largeur du puits, ces porteurs sont soumis à la quantification de leur mouvement qui prend alors un caractère bidimensionnel.

Considérons la structure à puits quantique unique de profondeur V et de largeur  $L_p$  représentée par le schéma de bandes de la figure 2.3.



Figure 2.3 : schéma de la structure énergétique d'un puits quantique simple

Pour distinguer les différents niveaux d'énergies, nous adoptons la notion suivante :

- E<sub>en</sub> pour le n<sup>ième</sup> niveau d'énergie des électrons
- E<sub>hhn</sub> pour le n<sup>ième</sup> niveau d'énergie des trous lourds
- E<sub>lhn</sub> pour le n<sup>ième</sup> niveau d'énergie des trous légers

En prenant en compte les niveaux discrets le long de la direction z et le continuum d'états le long des directions x et y, les états d'énergie d'une particule confinée dans un puits quantique sont donnés par l'expression :

$$E(n, k_x, k_y) = E_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2)$$
(2.1)

Dans une telle structure les niveaux d'énergie peuvent être déterminés par la méthodologie classique de Bastard [1-3] utilisant l'approximation de la fonction enveloppe qui conduit à la résolution de l'équation de Schrödinger suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi}{dz^2} + (V - E_n)\psi = 0 \quad \text{à l'extérieur du puits } (z \ge L_p; z \le 0)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\psi}{dz^2} - E_n\psi = 0 \quad \text{dans le puits } (0 \le z \le L_p) \quad (2.2)$$

où  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  ( h est la constante de Planck), L<sub>P</sub> est l'épaisseur du puits,  $\psi$  est la fonction d'onde associée aux porteurs étudiés, m<sup>\*</sup> représente la masse effective de la particule considérée (électron, trou lourd ou trou léger) et V est la profondeur du puits de potentiel.

Ce dernier correspond aux discontinuités de bande de conduction  $\Delta E_c$  et de bande de valence  $\Delta E_v$ . Le spectre énergétique du puits de potentiel est l'ensemble fini des valeurs propres E<sub>n</sub> de l'équation (2.2). Les fonctions d'ondes correspondant à ces énergies se composent d'une sinusoïde dans le puits associée à une exponentielle décroissante dans les barrières. De l'écriture des conditions de raccordement des fonctions d'ondes et de leurs dérivées  $(\frac{1}{m^*})^{d\psi}/dz$  qui doivent être continues aux interfaces z=0 et z=L<sub>p</sub>, on aboutit dans le cas de puits finis à la forme suivante de la fonction enveloppe des états liés [4]:

$$\psi = \begin{cases} A \exp(k_1 z) \ (z \le 0) \\ B \exp(k_2 z + \delta) \ (0 \le z \le L_p) \\ C \exp(-k_1 z) \ (z \ge L_p) \end{cases} \quad \text{avec} \quad k_1 = \left[\frac{2m^* (V - E_n)}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}} \\ k_2 = \left[\frac{2m^* E_n}{\hbar^2}\right]^{\frac{1}{2}} \end{cases}$$
(2.3)

où A, B,C et  $\delta$  sont des constantes.

et à l'équation aux valeurs propres donnée par l'expression [4]:

$$\begin{cases} \tan \\ -\cot \end{cases} \left[ \frac{L_P \sqrt{2m_w E_n}}{2\hbar} \right] = \frac{m_b}{m_w} \sqrt{\frac{V - E_n}{E_n}}, \quad \begin{cases} n, paire \\ n, impaire \end{cases}$$
(2.4)

où  $L_p$  la largeur de la zone active,  $m_w$  et  $m_b$  sont respectivement les masses effectives de l'électron dans le puits et la barrière.

Le caractère périodique des solutions E de l'équation (2.4) prouve la quantification de ces énergies dans le puits représenté sur la figure 2.3.

En toute rigueur, pour déterminer les niveaux quantifiés dans un puits contraint, il convient d'adapter la méthodologie de Bastard en introduisant des termes dépendants de la contrainte dans l'hamiltonien selon la théorie de Marzin,[5]. Cependant, il est possible de prendre en compte les effets de la contrainte simplement et avec une bonne approximation en apportant dans les relations (2.2) et (2.3) les modifications adéquates sur le potentiel de barrière et sur la masse m<sup>\*</sup> des porteurs dans un puits [6].

Le potentiel V est une fonction de l'écart d'énergie de bande interdite  $\Delta E_g$  de part et d'autre de l'hétérojonction puits/barrière, et est donnée par :

$$V = Q.\Delta E_g \text{ avec } \Delta E_g = E_{gbar} - E_g$$
 (2.5)

où  $E_{gbar}$  et  $E_g$  sont les énergies des bandes interdites des matériaux de barrière et du puits et Q = 70%. La contrainte est introduite dans la relation (2.5) en adoptant pour le paramètre  $E_{gpuits}$ , les énergies de bande interdite du matériau contraint. En utilisant la valeur du potentiel V ainsi obtenue, il est possible de déterminer au moyen des relations (2.2) et (2.3), les niveaux quantifiés E des porteurs considérés.

Les masses m<sup>\*</sup> sont les masses des différents types de porteurs considérées dans la direction de quantification, soit dans la direction Oz. Pour déterminer celles-ci, il conviendrait en toute rigueur d'adapter le calcul de Kane tenant compte du couplage des bandes par la contrainte. Cependant, en adoptant cette méthode, les modifications sur les valeurs des énergies quantifiées sont du même ordre de grandeur que les effets d'incertitudes qui affectent la mesure des paramètres structuraux comme la largeur et la composition du puits. Par la suite, l'effet de la contrainte sur les masses m<sup>\*</sup> dans la direction de quantification a été négligé. Il a été conservé en première approximation les valeurs correspondant au matériau massif non contraint.

En ce qui concerne les discontinuités de bandes de conduction  $\Delta E_c$ , des bandes de valence des trous lourds  $\Delta E_{hh}$ , des bandes de valence des trous légers  $\Delta E_{hl}$ , les nombreux travaux qui ont porté sur leur détermination dans le cas de l'interface GaInAs/GaAs ont conduit à un ensemble de valeurs relativement dispersé..

#### II.2.2 Effet de la température sur le gap

La diminution de l'énergie de bande interdite d'un semiconducteur lorsque sa température augmente trouve son origine dans les deux mécanismes suivants.

- La dilatation thermique, qui modifie les positions des bandes de valence et de conduction. Elle est à l'origine d'environ <sup>1</sup>/<sub>4</sub> de la variation de la bande interdite en température.
- Les interactions électron-phonon, qui induisent un décalage des positions relatives des bandes de valence et de conduction. C'est ce phénomène qui donne lieu à la plus forte contribution dans la variation en température de  $E_g$ .

Varshni [7] a mis en évidence que, lorsque la température augmente, l'énergie de bande interdite décroît suivant approximativement la relation empirique (figure 2.4):

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$$
(2.6)

où  $E_g(0)$  est le gap à 0K,  $\alpha$  et  $\beta$  sont des constantes.

Binaires	$E_g(0) (eV)$	$\alpha(10^{-4} \text{eV} \text{k}^{-2})$	β
InP	1.421	3.63	162
InAs	0.420	2.50	75
GaAs	1.519	5.405	204

Tableau 2.1 : Valeurs des paramètres  $E_g(0)$ ,  $\alpha$  et  $\beta$  donnés par Casey et Panish permettant par interpolation linéaire d'accéder aux paramètres des quaternaires.



Figure 2.4 : Variation du gap en fonction de la température.

II.2.3 Energie de la bande interdite

Pour optimiser une structure laser notamment en terme de longueur d'onde d'émission, il est nécessaire de connaître au minimum les masses effectives, les discontinuités de bande de conduction et de valence et aussi l'énergie de bande interdite des matériaux de la zone active.

Nous allons donc décrire dans ce paragraphe les modèles généraux d'évolution de l'énergie de bande interdite en fonction de compositions adaptées des alliages GaInAs. Nous verrons ensuite les variations d'énergie aux extrema des bandes de conduction et de valence en vallée  $\Gamma$  ( $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ ) apportées par la contrainte qui nous permettront d'évaluer le gap du matériau contraint. Par la suite, nous parlerons plus facilement de la longueur d'onde du matériau qui, exprimée (en µm), est reliée à l'énergie de bande interdite (en eV) par la relation suivante:

$$\lambda_g = \frac{hc}{E_g} \approx \frac{1.24}{E_g} \tag{2.7}$$

où c est la vitesse de la lumière

L'expression de l'énergie de bande interdite du matériau massif non contraint Ga<sub>x</sub>In<sub>x-1</sub>As en fonction de la composition du gallium est donnée ci-dessous :

$$E_g = 1.424 - 1.53x + 0.45x^2 \tag{2.8}$$

#### II.2.3.1 Matériaux contraints

La structure de bande d'un matériau, et par conséquent l'énergie de bande interdite, est modifiée sous l'effet de la contrainte. La déformation induite par une contrainte biaxiale décrite au paragraphe I.1.1.2 peut être décomposée en deux parties :

- une partie hydrostatique notée  $\epsilon_H$ . Cette déformation, liée à une contrainte isotrope du cristal, est donnée par l'expression :

$$\varepsilon_{H} = 2\varepsilon_{II} + \varepsilon_{\perp} = 2\varepsilon_{II} \frac{C_{11} - C_{12}}{C_{11}}$$
(2.9)

- et une partie uniaxiale  $\varepsilon_U$  dans la direction de croissance cristalline (001) qui s'exprime par :

$$\varepsilon_U = \varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{//} = -\varepsilon_{//} \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}}$$
 (2.10)

Toutes ces déformations du cristal modifient la position des atomes et par conséquent, les interactions qui dépendent de la distance entre atomes vont donc varier. Des ruptures de symétrie peuvent donc apparaître et engendrer de nouvelles interactions dans le cristal. Pour tenir compte des modifications de structures de bandes provoquées par ces déformations, (Schockley et Bardeen) [9] introduisent la notion de potentiels de déformation.

Les énergies des extrema des bandes de conduction  $E_c$  et de valence  $E_v$ , définies telles que l'énergie de bande interdite du matériau non contraint soit  $E_g=E_c-E_v$ , vont donc être modifiées sous l'effet de ces déformations hydrostatique et uniaxiale. En introduisant les potentiels de déformation de Schokley et Bardeen, ces nouveaux extrema notés  $E_c^{cont}$  pour la bande de conduction et  $E_{hh}^{cont}$ ,  $E_{lh}^{cont}$ ,  $E_{so}^{cont}$  pour les sous bandes de valence respectivement de trous lourds, de trous légers et de "split-off" deviennent :

$$E_{c}^{cont} = E_{c} + a_{c}\varepsilon_{H}$$

$$E_{hh}^{cont} = E_{v} + a_{v}\varepsilon_{H} - b_{v}\varepsilon_{U}$$

$$E_{th}^{cont} = E_{v} + a_{v}\varepsilon_{H} - \frac{1}{2}(b_{v}\varepsilon_{U} + E_{so} - \sqrt{E_{so}^{2} + 2E_{so}b_{v}\varepsilon_{U}} + 9b_{v}^{2}\varepsilon_{U}^{2})$$

$$E_{so}^{cont} = E_{v} + a_{v}\varepsilon_{H} - \frac{1}{2}(b_{v}\varepsilon_{U} + E_{so} + \sqrt{E_{so}^{2} + 2E_{so}b_{v}\varepsilon_{U}} + 9b_{v}^{2}\varepsilon_{U}^{2})$$
(2.11)

où  $a_c$ ,  $a_v$  sont les potentiels de déformation respectivement en bande de conduction et en bande de valence caractérisant la variation de l'énergie de bande interdite amenée par la déformation hydrostatique  $\varepsilon_{\rm H}$ . La différence entre ces deux potentiels  $a=a_c-a_v$  est généralement plus utilisée,  $b_v$  caractérise quant à lui la dégénérescence des sous-bandes de valence de trous lourds et de trous légers en  $\vec{k} = \vec{0}$  apportée par la déformation uniaxiale  $\varepsilon_u$  $E_{so}$  est l'énergie de "split-off" correspondant au décalage en énergie des bandes de valence dû au couplage spin-orbite. Si l'on néglige ce couplage spin-orbite, les expressions (2.11) se réduisent à :

$$E_{c}^{cont} = E_{c} + a_{c}\varepsilon_{H}$$

$$E_{hh}^{cont} = E_{v} + a_{v}\varepsilon_{H} - b_{v}\varepsilon_{U}$$

$$E_{lh}^{cont} = E_{v} + a_{v}\varepsilon_{H} + b_{v}\varepsilon_{U}$$
(2.12)

La figure 2.5 représente schématiquement les modifications apportées aux bandes de conduction et de valence dans la direction de croissance perpendiculaire à l'hétérojonction  $k_{\perp}$  et dans la direction parallèle  $k_{l'}$  lorsque l'on contraint faiblement le matériau en compression et en tension (autour de  $\vec{k} = \vec{0}$ ).



Figure 2.5: Evolution de la structure de bande d'un matériau soumis à une contrainte biaxiale compressive

Lorsque l'on contraint le matériau de manière compressive, la sous bande de valence des trous lourds (trous légers) présente, comme le montre la figure 2.5.a, une énergie supérieure en  $\Gamma$  dans la direction de croissance  $(k_{\perp})$ . Il en découle que l'énergie de bande interdite du matériau contraint en compression  $E_{hh}^{cont}$  ( $E_{lh}^{cont}$  tension) est définie par :

$$E_{ghh}^{cont} = E_c^{cont} - E_{hh}^{cont}$$

$$E_{glh}^{cont} = E_c^{cont} - E_{lh}^{cont}$$
(2.13)

A partir des relations (2.12) et (2.13), le gap du matériau contraint en compression  $E_{hh}^{cont}$  ( $E_{lh}^{cont}$  en tension) est exprimé en fonction du gap du matériau adapté  $E_{g}$  par la relation suivante:

$$E_{ghh}^{cont} = E_g - a\varepsilon_H + b_v \varepsilon_U \tag{2.14}$$

$$E_{glh}^{cont} = E_g + a\varepsilon_H - b_v \varepsilon_U \tag{2.15}$$

où  $E_g$  est calculé à partir de la relation (2.8). Les potentiels de déformation sont évalués par interpolation linéaire (loi de Végard) à partir des valeurs des binaires données dans le tableau 2.2.

Matériaux	a <sub>v</sub> (eV)	a <sub>c</sub> (eV)	a(eV)	b <sub>v</sub> (eV)
GaAs	1.16	-7.17	-8.33	-1.7
InP	1.27	-5.04	-6.31	-1.6
InAs	1.00	-5.08	-6.08	-1.8

Tableau 2.2 : Valeurs des potentiels de déformation des binaires associés données par Van de Walle [10].

Les modifications des extrema de bandes de conduction et de valence lors de l'application d'une contrainte biaxiale compressive sur un matériau non contraint sont schématisées en figure 2.6. Afin de simplifier cette représentation, nous avons négligé la présence de la bande de split-off  $E_{SO}$  (cf. relation (2.12)) bien que celle-ci ait été prise en compte dans l'optimisation de structures laser (cf. relation (2.11)).



Figure 2.6: Transitions des énergies en Γ des 3 bandes de valence et de la bande de conduction d'un semiconducteur non déformé à un semiconducteur contraint biaxialement de manière compressive

II.2.3.2 Hétérojonction de matériaux non contraints

Dans le cas d'une hétérojonction de deux matériaux A/B non contraints, les discontinuités de bande de conduction et de bande de valence sont définies respectivement par:

$$\Delta E_c = (E_c)^B - (E_c)^A$$
 (2.16)

$$\Delta E_{\nu} = \Delta E_{\nu,a\nu} + \left(\frac{E_{so}}{3}\right)^B - \left(\frac{E_{so}}{3}\right)^A \tag{2.17}$$

où  $\Delta E_{v,av} = (E_{v,av})^B - (E_{v,av})^A$  avec pour convention  $\Delta E_{v,av} > 0$  quand la bande de

valence du matériau B est supérieure à celle du matériau A.

#### II.2.3.3 Influence de la contrainte

La contrainte, modifiant la structure de bandes et donc les énergies de transitions, influe directement sur l'indice de réfraction du matériau. Le modèle d'énergie d'Adachi peut prendre en compte la modification des énergies de transitions avec la contrainte. Il est clair que ce modèle ne décrit pas rigoureusement la modification de la structure de bande avec la contrainte mais il permet d'obtenir une estimation de l'indice de réfraction d'un matériau contraint.

Sous l'effet d'une contrainte biaxiale, le matériau subit, comme nous l'avons vu au paragraphe II.2.3.1, une déformation hydrostatique et uniaxiale modifiant l'énergie de bande interdite  $E_{\rm g}$  en  $E_{\rm g}+\Delta E_{\rm hh}$  pour les trous lourds et en  $E_{\rm g}+\Delta E_{\rm lh}$  pour les trous légers. L'énergie de "split-off"  $E_{\rm so}$  ne subit qu'une modification liée à la déformation hydrostatique du matériau que l'on note  $\Delta(E_{\rm g}+E_{\rm so})$ . Si l'on néglige les couplages spin-orbite, les différentes contributions modifiant l'énergie de bande interdite  $E_{\rm g}$  sont données par les expressions ci-dessous :

$$\Delta E_{hh} = \varepsilon_{//} \left[ 2a \frac{C_{11} - C_{12}}{C_{11}} - b_v \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}} \right]$$

$$\Delta E_{lh} = \varepsilon_{//} \left[ 2a \frac{C_{11} - C_{12}}{C_{11}} + b_v \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}} \right]$$

$$\Delta (E_g + E_{so}) = \varepsilon_{//} \left[ 2a \frac{C_{11} - C_{12}}{C_{11}} \right]$$
(2.18)

Le calcul de l'énergie de la bande interdite du matériau GaInAs contraint nécessite la détermination des valeurs propres de l'hamiltonien contraint [11]. La résolution de ce problème n'est pas traitée dans ce manuscrit. Seuls les résultats développés au premier ordre selon  $\varepsilon$  concernant l'énergie de la bande interdite électrons - trous lourds  $E_{ghh}$  et électrons-trous légers  $E_{ghh}$  sont utilisés dans notre travail.

$$E_{glh}(x) = E_g(x) + \left[2a(x) \cdot \frac{C_{11}(x) - C_{12}(x)}{C_{11}(x)} + b(x) \cdot \frac{C_{11}(x) + 2C_{12}(x)}{C_{11}(x)}\right] \varepsilon(x)$$
(2.19)

$$E_{ghh}(x) = E_g(x) + \left[ 2a(x) \cdot \frac{C_{11}(x) - C_{12}(x)}{C_{11}(x)} - b(x) \frac{C_{11}(x) + 2C_{12}(x)}{C_{11}(x)} \right] \varepsilon(x) \quad (2.20)$$

où :  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  sont les constantes d'élasticité, a(x) et b(x) les potentiels de déformation hydrostatique et de cisaillement, et  $\epsilon(x)$  la déformation de la couche GaInAs dans le plan de l'interface [11]. L'effet du taux de gallium provoque l'augmentation de l'énergie de la bande interdite du matériau GaInAs, comme illustré sur la figure 2.7 qui représente les variations de l'énergie de la bande interdite du matériau GaInAs non contraint  $E_g$  et contraint des trous lourds et trous légers respectivement  $E_{ghh}$ ,  $E_{glh}$  avec le taux de gallium.



Figure 2.7 : Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la composition du gallium

#### II.2.3.4 Epaisseur critique

Lors de l'épitaxie d'un matériau sur un substrat de paramètre de maille différent, il apparaît une contrainte de compression ou de dilatation biaxiale dans la couche épitaxiée, qui s'accompagne d'une accumulation d'énergie élastique. Au-delà d'une épaisseur critique, l'énergie élastique emmagasinée devient suffisante pour générer des défauts structuraux qui relaxent partiellement les contraintes dans le cristal. Le matériau tend alors à reprendre son paramètre de maille, et des dislocations apparaissent à l'interface (relaxation plastique). L'épaisseur critique dépend directement de la différence de paramètre de maille entre le substrat et la couche (figure 2.8).



Figure 2.8 : L'évolution de l'épaisseur critique en fonction de la composition du gallium.

## II.2.4 L'énergie de transition

La variation des énergies de recombinaison  $E_{rhn}$  et  $E_{rln}$  en fonction de la largeur du puits quantique pour différentes valeurs de composition x est illustrée par la figure 2.9. Les énergies de recombinaison s'approchent de la valeur du gap contraint, à cause de la décroissance de l'effet de quantification, lorsque la largeur du puits quantique croit. Pour le cas non contraint, l'énergie de recombinaison tend vers la valeur  $E_g=1.42eV$  du matériau  $Ga_xIn_{1-x}As$ , ce qui est conforme aux résultats expérimentaux [12].



Figure 2.9 : Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits quantique [13]



Figure 2.10 : Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits quantique [13]

La largeur du puits quantique  $L_P$  et la composition x ont une influence importante sur le processus de recombinaison dans le puits, à savoir des électrons du premier niveau  $E_{e1}$  avec les trous du niveau  $E_{hh1}$  ou avec ceux du niveau  $E_{lh1}$ . En général, ces recombinaisons entre premiers niveaux sont les plus probables. On constate que la longueur d'onde croit si la largeur du puits et la composition d'indium augmentent (figure 2.10). Dans le cas où la largeur du puits quantique dépasse 100Å, l'effet de quantification est faible et la recombinaison se fait avec les trous lourds du niveau  $E_{hh1}$  pour une composition d'indium égale à 28%.

## II.2.5 Largeur et composition de puits émettant à 980nm

A partir du jeu des paramètres largeur de puits et taux de gallium il est possible de déterminer la structure GaInAs/GaAs émettre à 980nm. A chaque simulation, il est vérifié que la largeur du puits obtenue reste inférieure à l'épaisseur critique  $L_c$ . Les couples ( $L_p$ , x) pour obtenir l'émission à 980nm sont donnés par la figure 2.11.



Figure 2.11: Evolution de la largeur de puits en fonction de la composition du gallium émettant à 980nm

## II.2.6 Gain optique

Le coefficient de gain /absorption intrinsèque, relié à l'accroissement ou à l'atténuation de la puissance optique au travers de la structure, s'obtient à partir de l'expression (1.75), en sommant les contributions de tous les états peuplés. Cependant, comme le souligne G. Bastard [14], la définition du gain intrinsèque pour une hétérostructure, n'est pas aussi précise que pour une structure massive (3D) ou purement bidimentionnelle (2D). En effet, il faut garder à l'esprit, que dans un puits quantique, le niveau d'énergie d'un état lié, est défini tout le long de l'extension spatiale de la fonction enveloppe qui lui est associée. Pour un puits de potentiel de profondeur finie, cette extension spatiale dépend de l'état confiné considéré et est supérieure à la largeur du puits quantique, de par la présence des ailes évanescentes dans la barrière. Par conséquent, si l'on veut exprimer le coefficient de gain/absorption d'une hétérostructure par unité de longueur, comme dans le massif (cm<sup>-1</sup>), il faut définir de manière empirique une longueur effective L<sub>int</sub>, qui traduit la zone d'interaction du champ électromagnétique avec le gaz d'électrons-trous[15].

En réalité, pour évaluer les potentialités d'une structure laser, le paramètre qui nous intéresse est le gain modal; produit du facteur de confinement  $\Gamma^{\text{TE}(\text{TM})}$  par le coefficient de gain intrinsèque. Or, dans une structure à confinement séparé (SCH), le facteur de confinement du mode fondamental TE ou TM, qui représente la fraction de puissance lumineuse confinée dans le guide optique qui interagit avec le gaz électrons-trous, est proportionnel à la longueur effective L<sub>int</sub> [16]. De ce fait, le gain modal dans une structure donnée  $\Gamma G(\hbar \omega)$ , est indépendant de L<sub>int</sub>. Il est par conséquent judicieux, de confronter les performances lasers de différentes structures, en comparant leur gain modal respectif.

## II.2.6.1 Evolution du gain optique en fonction de la longueur d'onde

Les figures (2.12, 2.13) présentent le spectre du gain optique du puits quantique en fonction de la longueur d'onde pour différentes densités de porteurs. Le maximum de gain varie avec la densité de porteurs. Un très faible décalage du maximum de gain vers les courtes longueurs d'ondes est observé lorsque la densité de porteurs augmente. Ce phénomène est lié au remplissage des états de plus en plus élevés dans les bandes de valence et de conduction au fur et à mesure de l'augmentation du nombre de porteurs.



Figure 2.12 : Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition x=0.70 et une largeur de puits quantique de 60Å



Figure 2.13: Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition x=0.72 et une largeur de puits quantique de 80Å



Figure 2.14 : Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition x=0.73 et une largeur de puits quantique de 98Å

II.2.6.2 Evolution du gain maximum en fonction de l'injection



Figure 2.15 : Variation du gain maximum en fonction de l'injection  $Nx10^{18}$  cm<sup>-3</sup>

On conclu que le gain optique maximum augmente en fonction de l'injection N et la largeur de puits (figure 2.15).



Figure 2.16 : Comparaison de spectre de gain net théorique et expérimental [17]

La figure 2.16 illustre les spectres de gain optique net théoriques et expérimentaux pour différentes injections à température ambiante. Aux grandes énergies, les courbes tendent vers une valeur constante du gain, approximativement 5 cm<sup>-1</sup>. Le bon accord obtenu nécessite toutefois une légère translation des spectres de gain théoriques vers les basses énergies d'une quinzaine de meV pour les deux lasers. Nous attribuons ce décalage aux effets de renormalisation de l'énergie de bande interdite dus à l'injection de porteurs.

#### II.2.7 Condition au seuil

#### II.2.7.1 Condition sur le gain

Pour obtenir l'effet laser, il faut que le gain compense les pertes, les pertes internes propres au matériau et celles liées aux miroirs. Nous considérons ici le cas d'une cavité Pérot-Fabry (figure 2.17), dans laquelle l'onde après un aller retour doit retrouver son intensité soit :

$$R_1 R_2 \exp(g_{act} - \alpha_i) 2L = 1$$
 (2.21)

où  $g_{act}$  est le gain du matériau actif,  $\alpha_1$  représente la somme des pertes internes dans la zone active (en cm<sup>-1</sup>),  $R_1$  et  $R_2$  sont les coefficients de réflexion en intensité des deux miroirs définissant la cavité de longueur *L*.



Figure 2.17 : Cavité Fabry-Pérot

Ces coefficients, généralement inférieurs à 1 et typiquement de l'ordre de 0,3 pour des facettes clivées, traduisent les pertes localisées de photons par transmission. La condition de gain au seuil s'exprime alors par la relation :

$$g_{act} = \alpha_i + \frac{1}{L} ln(\frac{1}{\sqrt{R_1 R_2}})$$
 (2.22)

où l'on pose

$$\alpha_{\rm m} = \frac{1}{\rm L} \ln(\frac{1}{\sqrt{\rm R_1 R_2}}) \tag{2.23}$$

où  $\alpha_m$  sont les pertes localisées au niveau des miroirs assimilées à des pertes distribuées le long de la cavité. Ces pertes sont d'autant moins négligeables, au regard du bilan dans la cavité, que le laser est court.

## II.2.7.2 Condition sur la phase

Si l'on considère la phase du champ propagé après un aller - retour dans la cavité Pérot-Fabry, on aboutit à la condition d'oscillation du résonateur donnée par :

$$L = m \frac{\lambda_m}{2n_{eff}}$$
(2.24)

avec *L* la longueur de cavité m un nombre entier  $n_{eff}$  l'indice effectif du mode de propagation  $\lambda_m$  la longueur d'onde dans l'espace libre Comme la courbe de gain s'étale sur quelques dizaines de nanomètres, une cavité de longueur typique de 300µm oscille, d'après la relation (2.24), sur plusieurs modes. Les lasers de type Pérot-Fabry sont dits multimodes.

#### II.2.8 La Double Hétérostructure

#### II.2.8.1 Confinement des porteurs

La Double Hétérostructure (DH), représentée en figure 2.18, est constituée d'un matériau petit gap non dopé entouré de deux matériaux de plus grand gap, généralement en InP pour des lasers épitaxiés sur substrat GaAs, fortement dopé de type n d'un côté et de type p de l'autre. Par la suite, on prendra le matériau GaAs comme matériau dopé entourant la zone active formée du matériau à petit gap. La DH présente l'avantage par rapport à l'homojonction de mieux confiner les porteurs dans le matériau petit gap, favorisant ainsi les recombinaisons à l'intérieur de celui-ci. Cette zone d'énergie de bande interdite plus faible constitue la zone active du laser. La région de gain se situe dans cette zone active d'épaisseur comprise généralement entre 0,1µm et 0,3µm. Le gain considéré dans une Double Hétérostructure est le gain net, c'est-à-dire le gain de la zone active corrigé du facteur de confinement  $\Gamma$ :  $g_{net} = \Gamma g_{act}$ . Le facteur de confinement explicité plus en détail au paragraphe suivant correspond à la fraction de l'onde optique se trouvant uniquement dans la zone active, le profil du mode débordant généralement de part et d'autre du matériau actif.



Figure 2.18 : Structure de bande d'une Double Hétérostructure (DH)

## II.2.8.2 Confinement optique

Pour obtenir un bon fonctionnement du laser DH (faible courant de seuil, fort rendement quantique différentiel...), il est nécessaire de confiner l'onde optique générée dans la région de gain. Les composants étudiés dans ce travail sont des lasers à "large contact" ne présentant pas de confinement latéral. Ils ne possèdent qu'un confinement transverse par l'indice de l'onde optique dans la zone active qui constitue alors un guide optique plan (figure 2.19).



Figure 2.19 : Schéma du guide optique

Le profil du mode optique dans ce guide est obtenu par la résolution de l'équation de propagation suivante :

$$\Delta \vec{E} - (\beta^2 - n^2 k^2) \vec{E} = \vec{0}$$
 (2.25)

avec  $\beta = kn_{eff}$  représente la constante de propagation avec  $n_{eff}$  l'indice effectif du mode propagé

 $\mathbf{k} = \left\| \vec{\mathbf{k}} \right\|$  est la norme du vecteur d'onde dans le vide

n l'indice de réfraction du matériau

On considère, dans notre cas, que le champ optique ne dépend que de la direction transverse z et non pas de la direction latérale. Il se met alors sous la forme :

$$\vec{E} = \vec{E}_0(z) \exp(i\beta y) \tag{2.26}$$

Cela revient donc à résoudre, pour chaque couche, l'équation :

$$\frac{d^2 \vec{E}_0}{dz^2} + (n^2 k^2 - \beta^2) \vec{E}_0 = 0$$
(2.27)

La forme des solutions dépend du signe de  $n^2k^2 - \beta^2$ . Si cette quantité est positive, alors la solution sera sinusoïdale. Par contre, si elle est négative la solution sera exponentielle. Pour confiner l'onde optique dans la zone active, il est nécessaire de respecter la condition suivante sur les indices:

$$n_{GaAs} \left\langle \frac{\beta}{k} \left\langle n_{za} \right\rangle \right\rangle$$
(2.28)

où  $n_{GaAs}$  est l'indice des couches supérieure et inférieure de GaAs,  $n_{z.a}$  est l'indice de la zone active (*z.a*)

Deux types de modes: Transverse Electrique (TE) et Transverse Magnétique (TM), sont susceptibles de se propager. A partir des conditions de continuité aux interfaces des champs électriques et magnétiques et de leurs dérivées, il est possible de remonter au profil du champ optique schématisé en figure 2.20. Cette distribution permet d'accéder au facteur de confinement  $\Gamma$ , fraction de l'onde lumineuse dans la zone active définie par :

$$\Gamma = \frac{\int\limits_{-L_p/2}^{+L_p/2} |E(z)|^2 dz}{\int\limits_{-\infty}^{+\infty} |E(z)|^2 dz}$$

(2.29)

où  $L_P$  est l'épaisseur de la zone active z la direction transverse





La figure 2.21, montre les variations du facteur de confinement  $\Gamma$  pour le mode fondamental en fonction de l'épaisseur de la couche active. On constate que le facteur de confinement croit lorsque la composition de gallium dans la couche active augmente.



Figure 2.21 : Variation du facteur de confinement en fonction de la largeur du puits quantique [18]

# II.2.9 Caractéristiques statiques

# II.2.9.1 Courant de seuil

Le courant de seuil, courant minimal à injecter pour obtenir l'effet laser, est une des principales caractéristiques du laser que l'on cherche absolument à minimiser. Pour des lasers de type "large contact", la notion de densité de courant de seuil  $J_s$  (courant de seuil par unité de surface de la zone active) est généralement plus utilisée :

$$J_s = \frac{I_s}{WL} \tag{2.30}$$

avec W est la largeur du ruban et L est la longueur de la cavité qui sont généralement exprimées en cm. La densité du courant de seuil est souvent donnée en KA.cm<sup>-2</sup>.

#### II. 9.2 Rendement quantique externe $\eta_d$

Le rendement quantique externe est relié directement à la pente  $(\Delta P/\Delta I)$  de la caractéristique P(I) par la relation suivante :

$$\eta_d = \frac{2q}{\hbar\omega} \frac{\Delta P}{\Delta I} = \frac{2q}{\hbar\omega} R_c \tag{2.31}$$

pour les deux facettes d'un laser émettant de la même façon de part et d'autre. Dans cette expression, q est la charge élémentaire,  $\hbar \omega$  l'énergie du photon et on pose  $R_c = \Delta P / \Delta I$ , quantité plus communément utilisée pour les lasers et que l'on appellera rendement de conversion par facette.

II.2.9.3 Les origines du courant de seuil

Différents phénomènes physiques contribuent à l'augmentation du courant de seuil. Par souci de simplification de langage, nous parlerons indifféremment dans ce paragraphe de densité de courant ou de courant sachant que ces deux grandeurs, d'après la relation (2.30), sont définies à une constante multiplicative près. Pour tenir compte de ces différents phénomènes, il est possible de décomposer le courant de seuil en une somme de différents termes [19]:

$$J_s \propto J_{piéges / surf} + J_{spon} + J_{auger} + J_{fuite}$$
 (2.32)

où

 $J_{pièges/surf}$  est le courant lié à la présence de pièges et aux recombinaisons non radiatives en surface

J<sub>spon</sub> est le courant lié aux recombinaisons radiatives spontanées

J<sub>auger</sub> est le courant lié aux recombinaisons non radiatives Auger

 $J_{\text{fuite}}$  est le courant lié à la fuite des porteurs aux hétérointerfaces

Nous allons maintenant étudier plus en détail chacune de ces contributions.

II.2.9.4 Courant lié à la présence de pièges et aux recombinaisons non radiatives en surface.

Le courant lié à la présence de pièges et aux recombinaisons non radiatives en surface se décompose en deux contributions :

$$J_{piéges / surf} = J_{pièges} + J_{surf}$$
(2.33)

où  $J_{\text{pièges}}$  représente le courant lié à la présence de pièges ou de défauts et  $J_{\text{surf}}$  le courant lié aux recombinaisons de surface. Les défauts ou pièges dans la zone active, contribuant au courant  $J_{\text{pièges}}$ , se créent principalement lors de la croissance épitaxiale des matériaux. Ils se présentent sous la forme d'un continuum d'états localisés sur lequel les électrons et les trous, lors de la diffusion, vont se recombiner de manière non radiative. Le courant  $J_{pièges}$  s'exprime par [20]:

$$J_{pièges} = qL_p A_{nr} N_s \tag{2.34}$$

avec q la charge élémentaire

 $L_p$  largeur du puits d'une structure MQW

N<sub>S</sub> la densité de porteurs au seuil

$$A_{nr} = \sigma v N_t$$

οù σ est la section de capture des pièges
 ν la vitesse des porteurs considérés
 N<sub>t</sub> la densité de pièges

Les surfaces en contact avec l'air, telles que les facettes clivées d'un laser, contribuent au courant  $J_{surf}$ . Elles constituent de fortes perturbations pour le paramètre de maille du cristal qui se traduisent par la formation des liaisons pendantes sensibles aux impuretés extérieures. Il en résulte une accumulation sur ces surfaces de défauts en grande concentration, défauts qui se comportent comme des centres de recombinaisons non radiatives. Ils participent donc à l'augmentation du courant de seuil. Les interfaces d'une hétérostructure constituent également une autre source possible de recombinaisons non radiatives. Le courant  $J_{surf}$  est donné par [20]:

$$J_{surf} = qL_p ASN_s \tag{2.35}$$

avec S le coefficient de recombinaisons en surface exprimé en terme de vitesse de recombinaisons de surface A: aire de la surface où s'effectuent les recombinaisons non radiatives.

#### II.2.9.5 Courant lié aux recombinaisons radiatives spontanées

Le courant lié aux recombinaisons radiatives spontanées est donné par [21]:

$$J_{spon} = qL_p B(T) N_s^2$$
(2.36)

où B(T) représente le coefficient de recombinaisons radiatives spontanées dépendant de la température T.

II.2.9.6 Courant lié à la fuite des porteurs aux hétérointerfaces

Le courant de fuite  $J_{\text{fuite}}$  est lié à la diffusion et à la dérive des porteurs au niveau des hétérointerfaces. Dans une structure laser à multi-puits quantiques, il correspond à la fuite des porteurs vers les barrières et/ou vers les couches de confinement résultant d'une faible discontinuité de bande de conduction. Cette fuite des porteurs à travers les hétérointerfaces est représentée en figure 2.22. La contribution du courant de fuite des porteurs au courant de seuil s'exprime par [22]:

$$J_{fuite} = qL_p \frac{N_b}{\tau_b}$$
(2.37)

où  $N_{\rm b}$  est le nombre de barrières

 $\tau_b$  le temps de vie "phénoménologique" des porteurs injectés dans les barrières. Le courant de fuite est très sensible à la température. Il suit une loi du type [20]:

$$J_{fuite}(T) \propto (kT)^{\frac{3}{2}} \exp(\frac{-\Delta E_c}{kT})$$
(2.38)

avec k la constante de Boltzmann

 $\Delta E_c$  la discontinuité de bande de conduction.

Plus la discontinuité de bande de conduction  $\Delta E_c$  est grande, plus le courant de fuite diminue.





II.2.9.7 Courant lié aux recombinaisons non radiatives Auger

Le courant lié aux recombinaisons non radiatives Auger est défini par [20]:

$$j_{auger} \propto q L_p C(T) N_s^3 \tag{2.39}$$

où C(T) représente le coefficient Auger dépendant de la température T. Ce coefficient varie suivant le type de recombinaisons non radiatives Auger; elles se présentent sous plusieurs formes, recombinaisons bande à bande et recombinaisons assistées par phonons.

#### II.2.9.7.1 Recombinaisons bande à bande

Dans les recombinaisons non radiatives bande à bande, on distingue 3 types de mécanismes notés CHCC, CHHS et CHHL et décrits dans la figure 2-23. La lettre C signifie qu'il s'agit de la bande de Conduction, et H, L, S correspondent respectivement aux sous bandes de trous lourds ("Heavy holes"), trous légers ("Light holes") et de "Split-off" de la bande de valence.

Le principe de l'effet Auger est fondé sur l'interaction coulombienne entre deux électrons de la bande de conduction notés 1 et 2. Comme décrit sur la figure 2.23, dans le mécanisme CHCC, l'électron 1 se recombine avec le trou 1' et l'excès d'énergie est transféré à un électron 2 qui est excité dans un niveau supérieur 2'. Les deux autres processus, CHHS et CHHL, sont fondés sur le même principe mais les particules qui vont gagner de l'énergie à la suite des recombinaisons ne sont plus des électrons mais, comme le montrent les figures 2.23 (b) et 2.23 (c), des trous des sous bandes de valence et de la bande de "split-off". Sous des conditions de forte injection comme lors de la polarisation d'un laser, ces 3 types de recombinaisons bande à bande non radiative interviennent.

Sachant que ces transitions Auger doivent satisfaire les lois de conservation de l'énergie et du moment pour les 4 particules impliquées, le coefficient Auger varie, si l'on se place dans le cadre d'une structure de bande parabolique et dans la statistique de Boltzmann, par la relation suivante [23]:

$$C(T) = C_0 \exp(-\frac{E_a}{kT})$$
(2.40)

avec *E*<sub>a</sub> l'énergie d'activation de l'effet Auger.

Cette énergie, dépendant du type de recombinaisons bande à bande, est définie par les relations suivantes :

$$E_a(CHCC) = m_c^* E_g / (m_c^* + m_{hh}^*)$$
(2.41)

$$E_a(CHHS) = m_{so}^* (E_g - E_{so}) / (2m_{hh}^* + m_c^* - m_{so}^*)$$
(2.42)

où  $m_c^*$ ,  $m_{hh}^*$  et  $m_{so}^*$  sont les masses effectives respectivement des extrema des bandes de conduction, des sous-bandes de valence de trous lourds et de "Split-off".  $E_g$  et  $E_{so}$  sont les énergies de bande interdite et de "Split-off"



Figure 2.23: Description des différentes recombinaisons non radiatives Auger bande à bande

II.2.9.8 Relation courant de seuil et température

L'évolution du courant de seuil  $I_s$  en fonction de la température T est caractérisée expérimentalement par l'intermédiaire de la température caractéristique notée  $T_0$ . La relation entre ces deux paramètres est donnée par [24]:

$$I_s(T) = I_0 \exp(\frac{T}{T_0})$$
 (2.43)

où  $I_0$  est une constante.  $T_0$  traduit la sensibilité en température du courant de seuil. Une faible valeur de  $T_0$  exprime une forte augmentation du courant de seuil avec la température.

II.2.9.9 Evolution de gain maximum en fonction du courant radiatif

Dans l'hypothèse d'une évolution logarithmique du gain en fonction de la densité de courant de seuil J<sub>s</sub> suivant la loi empirique [25] :

$$G = G_0(1 + \ln(\frac{J}{J_0}))$$
(2.44)
où  $J_0$  et  $G_0$  sont des paramètres d'ajustement relativement au courant à la transparence et au gain, il est possible de remonter à la variation de la densité du courant de seuil  $J_s$  avec la longueur de la cavité L.

En combinant cette relation du gain (2.44) avec la condition de seuil définie par la relation (2.22) et que nous rappelons ci-dessous :

$$\Gamma g_{act} = \alpha_i + \alpha_m = \alpha_i + \frac{1}{L} \ln \left( \frac{1}{\sqrt{R_1 R_2}} \right)$$
(2.45)

On obtient la variation de la densité de courant de seuil suivant [26]

$$J_{s} = \frac{N_{w}J_{0}}{\eta_{I}q} \exp\left[\frac{\alpha_{i} + (\frac{1}{L})\ln(\frac{1}{R})}{N_{w}\Gamma_{w}G_{0}}\right]$$
(2.46)

où

 $N_w$  est le nombre de puits

 $\Gamma_w$  est le facteur de confinement moyen par puits défini par  $\Gamma_w=\Gamma/N_w$  avec  $\Gamma$  le facteur de confinement de la structure globale. Cette relation suppose que l'injection dans les puits est uniforme.

 $\eta_i$  est le rendement interne du laser, c'est-à-dire la fraction d'électrons injectés se recombinant en émission stimulée.

L'équation de conservation de porteurs d'un laser s'écrit :

$$\frac{I}{qV} - GP - \frac{N}{\tau_s} = \frac{dN}{dt} = 0$$
(2.47)

avec N la densité de porteurs, I le courant injecté, q la charge des électrons, V le volume de la cavité, G le gain optique lié à l'émission stimulée, P la densité de photons,  $\tau_s$  la durée de vie des porteurs ;

A partir de l'équation (2.47) en régime statique (dN/dt =0) et de la condition au seuil (G=0), on obtient la relation sur le courant de seuil suivante :

$$I_s = \frac{qVN_s}{\tau_s} \tag{2.48}$$

$$\frac{1}{\tau_s} = (A_{nr} + AS) + B(T)N_s + C(T)N_s^2$$
(2.49)

où  $(A_{nr}+AS)$  est le coefficient des recombinaisons non radiatives liées respectivement aux piéges et aux recombinaisons de surface, B(T) et C(T) sont respectivement les coefficients de recombinaisons radiatives spontanées et des recombinaisons non radiatives Auger [27].

Afin d'analyser l'influence sur les densités de courant de seuil de diodes laser émettant à 980nm des différentes configurations de puits ( $L_{p,x}$ ), il a été extrait de la figure(2.24) quatre puits A, B, C et D correspondant à des taux d'indium variant régulièrement de 0.69 à 0.75. La largeur et la composition de chacun de ces puits sont précisées sur le tableau 2.3.

puits	А	В	С	D
X	0.69	0.70	0.71	0.73
L <sub>p</sub> (Å)	60	62	69	98

Tableau 2. 3 : Largeur et composition des puits A, B, C et D permettant l'émission à 980nm



Figure 2.24 : Variation du gain maximum en fonction du courant radiatif

## II.2.10 Puissance émise

La puissance émise par le laser est donnée par l'énergie de l'ensemble des photons de la cavité (c'est à dire  $n_{\omega}V$ ) divisée par le temps de vie des photons dans la cavité en l'absence de milieu à gain, soit  $\tau_m$ . En effet, l'inverse de ce temps de vie représente bien le taux auquel

les photons quittent la cavité par transmission à travers des miroirs. Ce taux multiplié par l'énergie des photons représente donc bien la puissance émise par le laser.

$$P = \begin{bmatrix} \text{énergie } du \\ \text{photon} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \text{densit} \text{\acute{e}} \\ \text{de photons} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \text{volume effectif} \\ \text{du mod } e \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \text{taux } d'\text{\acute{e}} \text{chappement} \\ \text{des photons} \end{bmatrix}$$

$$P = \hbar \omega n_{\omega} V \alpha_{m} v$$

$$\alpha_{m} = \ln(1/R) / L$$

$$\tau_{m} = \frac{1}{\alpha_{m} v}$$
(2.50)

où  $\upsilon$  est la vitesse des photons.

En adoptant pour  $n_{\omega}$  sa valeur correspondant à la solution oscillante et en exprimant  $\tau_p$ en fonction de  $\alpha_{cav} = \alpha_m + \alpha_i$ , nous pouvons écrire P comme indiqué ci-dessous :

$$n_{\omega} = \frac{\tau_{p}}{eV} (I - I_{s})$$

$$P = \frac{\hbar\omega}{e} \frac{\alpha_{m}}{\alpha_{m} + \alpha_{i}} (I - I_{s})$$

$$\tau_{p} = \frac{1}{\alpha_{cav} v}$$
(2.51)

où  $\tau_p$  est la durée de vie moyenne des photons dans la cavité.

La courbe ci-dessous, illustre la variation de la puissance émise en fonction du courant d'excitation de la jonction. Bien entendu, la puissance lumineuse ne devient non nulle qu'au delà du courant de seuil. La pente de la droite donnant la croissance linéaire de la puissance en fonction du courant définit le rendement différentiel du laser. C'est une quantité essentielle dans la mesure où l'on a toujours intérêt à avoir un rendement différentiel le plus élevé possible pour atteindre une puissance lumineuse donnée avec un minimum de courant (figure 2.25). La courbe expérimentale de la puissance optique en fonction du courant injecté notée P(I) dont l'allure est représentée sur la figure 2.26, donne les principales caractéristiques statiques du laser : le courant de seuil I<sub>s</sub>, est le rendement quantique différentiel ou externe  $\eta_{dif}$  que nous allons définir plus précisément .



Figure 2.25 : Evolution de la puissance optique en fonction du courant d'injection



Figure 2.26 : Evolution de la puissance rayonnée en fonction du courant injecté [28]

#### II.2.11. Rendement

II.2.11.1 Rendement différentiel

$$\eta_{dif} \equiv \frac{\alpha_m}{\alpha_m + \alpha_i} \tag{2.52}$$

On constate, d'après la formule ci dessus, que le rendement différentiel est conditionné par le rapport entre les pertes internes du milieu à gain et les pertes par les miroirs. Pour avoir un bon rendement il faut que les pertes internes soient toujours bien inférieures aux pertes par les miroirs. En pratique cela signifie que les cristaux utilisés pour la fabrication des lasers à S-C doivent être de bonne qualité optique (les pertes internes principales se faisant par diffusion sur les défauts du cristal S-C). De même on aura intérêt à avoir une structure guidante telle que la double hétérojonction pour éviter au maximum la perte de photons par réabsorption et réémission hors axe.

#### II.2.11.2 Rendement externe

On définit le rendement externe comme étant le rapport du nombre de photons émis sur le nombre d'électrons utilisés. Au delà du seuil, le rendement externe tend de manière asymptotique vers le rendement différentiel.

$$\eta_{ext} = \frac{P}{\hbar\omega} \frac{e}{I} = \eta_{dif} \left(1 - \frac{I_s}{I}\right)$$
(2.53)

#### II.2.11.3 Rendement total

On définit finalement le rendement total comme étant le rapport entre la puissance lumineuse émise et la puissance électrique consommée. On voit qu'au-delà du seuil le rendement total est essentiellement conditionné par le rendement différentiel.

$$\eta_{tot} = \frac{P}{P_{ele}} = \frac{P}{IVa}$$

$$(2.54)$$

$$\eta_{tot} = \frac{\hbar \omega}{eVa} \eta_{dif} \left(1 - \frac{I_s}{I}\right)$$

où V<sub>a</sub> est la différence de potentiel aux bornes de la diode laser.

## II.3. Conclusion

L'importance des diodes laser à puits quantique contraint GaInAs dans les systèmes de matériaux GaInAs/GaAs ne peut que s'accroître dans un proche avenir dans le cadre de larges champs d'applications auxquelles elles peuvent être associées, notamment le pompage d'amplificateurs à fibres optiques dopées erbium.

Il a donc été développé les calculs fondés sur un modèle physique qui prend notamment en compte l'influence de la contrainte sur la modification de la largeur de la bande interdite et sur la forme des différentes bandes de valence du matériau puits. Il s'est avéré, comme l'a montré un ensemble de comparaisons résultats théoriques-observations expérimentales, que ces hypothèses permettaient de rendre compte du comportement des différentes configurations de ces composants en ce qui concerne la longueur d'onde d'émission au seuil, la densité de courant au seuil, la forme du diagramme de champ lointain.

Dans le cas des diodes à puits quantique contraint GaInAs/GaAs il a été tout d'abord analysé comment pouvaient être choisies la largeur des puits et la concentration en gallium pour parvenir à une longueur d'onde d'émission de 980nm malgré les dérives dues aux mécanismes de remplissage de bandes et de renormalisation de la largeur de bande interdite.

Enfin, dans un souci de rigueur et malgré l'inconvénient d'un accroissement très important de complexité il conviendrait de remplacer la procédure simplifiée d'identification polynomiale de la relation de dispersion des différentes bandes de valence du puits quantique contraint par un module de résolution de l'hamiltonien de Luttinger-Kohn incluant l'effet de la contrainte.

# **REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES**

- G. Bastard, Superlattice band structure in the envelope-function approximation, Phys. Rev. Vol. 24, pp 5693-5697, 1981.
- [2] G. Bastard, Theoretical investigations of superlattice band structure in the envelope- function approximation, Phys. Rev. Vol. 25, pp 7584, 1982.
- [3] G. Bastard, NATO School on MBE and heterostructures, Ecrice, Maech, 1983.
- [4] G.P. Agrawal, N.K. Dutta Van Nostrand Reinhold, Long-wavelength semiconductor lasers Electrical/ Computer Science and Engineering Series, 1986.
- [5] J.Y Marzin., Heterojunctions and Semiconductor Supperlattices, ed par Allan G., Bastard G., Boccara N., Lannoo M., Voos M, (Springer, Berlin), 1986.
- [6] JI G., Huang D., Reddy U.K., Henderson T.S., Houdre R. and Morkov H.,
   optical investigation of highly strained InGaAs-GaAs multiple quantum wells, J. Appl.
   Phys. Vol 62, N°8, pp 3366-3373, 1987.
- [7] A. Philippe ' Caractérisation électrique et optique du nitrure de gallium ' INSA de Lyon ,1999.
- [8] Ramirez-Flores, G., H. Navarro-Contreras, A. Lastrae-Martinez, R.C. Powell, Temperature-dependent optical band gap of the metastable zinc-blende beta-GaN', Phys. Rev. Vol 50, pp.128433-8438,1994.
- [9] P. J. A. Thijs, L. F. Tiemeijer, J. J. M. Binsma, and T. van Dongen, Progress in Long-Wavelength Strained- Layer InGaAs(P) Quantum-Well Semiconductor Lasers and Amplifiers, IEEE J. Quantum Electron. Vol. 30 N°2, pp. 477 – 499, 1994.
- [10] G.P. Agrawal, N.K. Dutta, Long-wavelength semiconductor lasers, Van Nostrand Reinhold Electrical/ Computer Science and Engineering Series ,1986.
- [11] G.E. Pikus and L. Birg, Cyclotron and Paramagnetic Resonance in Strained Crystals, Phys. Rev. Lett. 6, pp. 103-105, 1961.
- [12] A. Ghiti, M. Silver and E.P. O'Reilly J, Low threshold current and high differential gain in ideal compressive and tensile strained quantum well lasers. Appl. Phys. Vol 71, N° 9, pp. 4626-4628,1992.
- [13] A. Aissat, S. Nacer, K. Ferdjani, A. Daoudi, and D. Berkani, Transition energy determination of a strained quantum well structure based on GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N Physical & Chemical News PCN abstracts (USA) INIST of CNRS (France) and British Library (England) Vol 34 ,2007.

- [14] G. Bastard, Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures, Les Editions de Physique (Les Ulis Cedex, France).pp 246, 1988.
- [15] Asada, M.; Adams, A.; Stubkjaer, K.; Suematsu, Y.; Itaya, Y.; Arai, S., The temperature dependence of the threshold current of GaInAsP/InP DH lasers, Quantum Electronics, IEEE Journal, Vol 17, N° 5, pp. 611–619, 1981.
- [16] C. Weisbush, B. Winter, Quantum semiconductor Structures, (Academic, New York) pp.168, 1991.
- [17] G.Oliver, Thèse de doctorat de l'université Paul Sabatier de Toulouse, Physique de la matière optoélectronique, CNRS, 1999.
- [18] A. Aissat, S. Nacer, K. Ferdjani, Colloque International télécom'2005 et
   4èmés Franco Maghrébines des Micro-ondes et leurs Applications JFMMA 23-25
   Mars, Rabat, Maroc, 2005.
- [19] L.F. Tiemeijer; S. Walczyk; A.J.M. Verboven; G.N. van den Hoven; P.J.A. Thijs; T. van Dongen; J.J.M. Binsma; E.J. Jansen, High-gain 1310 nm semiconductor optical amplifier modules with a built-in amplified signal monitor for optical gain control, Photonics Technology Letters, IEEE, Vol. 9, N° 3, pp. 309 – 311, 1997.
- [20] N. K. Dutta, Power penalty due to timing jitter for lasers modulated without prebias, Applied Physics Lett., Vol. 67, N° 22, pp. 3230-3232, 1995.
- [21] T. Higashi, S.J. Sweeney, A.F. Phillips, A.R. Adams, Oapos, E.P. Reilly, T. Uchida, T. Fujii, Observation of reduced nonradiative current in 1.3-μm, AlGaInAs-InP strained MQW lasers, Photonics Technology Lett., IEEE, Vol. 11, N° 4, pp. 409 411, 1999.
- [22] P. S. Zory, Quantum Well Lasers, Jr. (Ed.) Orlando, FL: Academic, 1993.
- [23] R. I. Taylor, R. A. Abram, M. G. Burt, and C. Smith, Auger recombination in a quantum well heterostructure IEE Proc. J. Optoelectron. vol. 132, pp. 364-370, 1985.
- [24] J. Barrau, G.Bacquet, F. Hassen, N. Lauret, T.Amand and M.Brousseau, Superlattices and Microstructures, Vol 14, N°27,1993.
- [25] R. Ferreira and G. Bastard, "Spin"-flip scattering of holes in semiconductor quantum wells, Phys. Rev. Vol 43, pp.9687–9691,1991.
- [26] R. Leon, C. Lobo, T. P. Chin, J. M. Woodall, S. Fafard, S. Ruvimov, Z. Liliental-Weber, M. A. Stevens Kalceff, Self-forming InAs/Gap quantum dots by direct island growth, Appl. Phys. Lett. Vol. 72 N°11, pp. 1356-1358, 1998.
- [27] H. Leymarie, these du doctorat, Laboratoire d'analyse et d'architecture des systèmes du CNRS, University Poul Sabatier de Toulouse, 1994.



## III.1. Introduction

Ce chapitre porte sur la diminution de l'énergie de la bande interdite, des alliages GaAsN et GaInNAs avec l'incorporation d'azote, permettant d'atteindre une longueur d'onde d'émission comprise entre 1.3 et 1.55µm. En utilisant ce modèle, nous allons étudier l'influence de l'incorporation de l'azote sur les caractéristiques de la structure GaInAs/GaAs : le gap, les énergies de quantification, l'énergie de transition, la longueur d'onde d'émission, le gain optique, le courant de seuil et la puissance optique émise. Le modèle d'anticroisement de bande est utilisé pour décrire de manière quantitative la diminution de l'énergie de bande interdite avec l'incorporation d'azote dans le ternaire GaNAs et le quaternaire GaInNAs.

Nous nous penchons ensuite, sur une étude du gain optique, du courant de seuil et de la puissance rayonnée par le laser à puits quantique contraint de la structure GaInNAs/GaAs.

## III.2. Modèles proposés

Le modèle d'anticroisement de bande (ou modèle BAC pour Band Anticrossing) a été proposé en 1999 par Shan et Walukiewicz [1]. Il repose sur l'hypothèse d'un couplage entre les états localisés liés à l'azote et les états étendus de la bande de conduction  $\Gamma$  de la matrice (Ga,In)As. Afin de présenter ce modèle de façon simple, nous allons expliciter le cas du ternaire massif (non contraint) GaAsN. Notons que l'incorporation d'azote est sans effet notoire sur la bande de valence comme l'ont montré des expériences de photoréflectivité [1].

## III.2.1 Incorporation de N dans GaAs

Lorsque l'on substitue de l'azote en faible quantité à de l'arsenic dans GaAs, le caractère très électronégatif de l'atome N introduit un niveau accepteur, c'est-à-dire un piège (puits de potentiel) local pour les électrons. Ce niveau est appelé niveau isoélectronique car la valence de l'atome d'azote est identique à celle de l'atome d'arsenic. Dans GaAs : N ainsi créé, introduit un niveau d'impureté résonant avec la bande de conduction : il se situe à environ 1.65 eV au-dessus du haut de la bande de valence, donc à 0.25 eV au-dessus du bas de la bande de conduction du GaAs, comme l'ont mis en évidence des études en pression [2]. Ce niveau, très localisé dans l'espace réel, est donc très délocalisé dans l'espace des k, d'après la relation d'Heisenberg  $\Delta x.\Delta k \ge \hbar$ .

III.2.2 La nouvelle bande de conduction

L'interaction répulsive entre les états localisés introduits par l'azote et les états étendus de la bande de conduction de GaAs peut être traitée comme une perturbation, donnant lieu au nouvel Hamiltonien des états de conduction :

$$H = \begin{bmatrix} E_{M}(k) & V_{NM} \\ V_{NM} & E_{N} \end{bmatrix}$$
(3.1)

où  $E_M(k)$  représente les états étendus de la bande de conduction  $\Gamma$  de GaAs. On suppose ici une dispersion parabolique dans l'approximation de la masse effective :

$$E_{M}(k) = \frac{\hbar^{2}k^{2}}{2m^{*}}$$
(3.2)

 $m^*$  étant la masse effective des électrons de conduction,  $E_N$  est l'énergie de l'atome d'azote et  $V_{NM}$  est le coefficient de couplage entre les deux types d'états. La résolution de l'équation aux valeurs propres est donnée par l'annulation du déterminant |H - EI|:

$$\begin{vmatrix} E_{M}(k) - E & V_{NM} \\ V_{NM} & E_{N} - E \end{vmatrix} = 0$$
(3.3)

Et finalement, les énergies propres des états de conduction sont données par l'équation :

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \left[ E_N + E_M(k) \pm \sqrt{(E_N - E_M(k))^2 + 4V_{MN}^2} \right]$$
(3.4)

L'interaction entre  $E_M(k)$  et  $E_N$  donne donc naissance à deux sous-bandes non paraboliques  $E_{-}(k)$  et  $E_{+}(k)$  dont l'énergie dépend de la concentration d'azote. Plus la concentration d'azote augmente, plus les deux bandes se repoussent,  $E_{-}(k)$  vers les basses énergies et  $E_{+}(k)$  vers les hautes énergies.

D'après le modèle BAC, c'est l'apparition de cette sous bande E.(k) qui est à l'origine de la réduction de l'énergie de bande interdite avec l'incorporation d'azote, l'énergie de la bande interdite étant alors la différence entre E.(k=0) et  $E_v(k=0)$ ,  $E_v$  représentant la bande de valence. Nous avons reporté sur la figure 3.1.a les courbes de dispersion de la bande de conduction de GaAs et Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>N<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub>, pour y=0.02 ainsi que le niveau lié à l'azote E<sub>N</sub>.



Figure 3.1 .a : Courbe de dispersion de la bande de conduction de  $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$  pour une concentration d'azote y= 0.02 et composition du gallium x=1 d'après le modèle BAC, [3]



Figure 3.1.b : Energie de bande interdite (en k=0) de GaN<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub> en fonction de la fraction d'azote y d'après le modèle BAC, [3]

La variation de l'énergie de bande interdite en fonction de la fraction d'azote contenue dans GaInNAs est reportée en figure 3.1.b. On peut, d'après l'allure des courbes de dispersion, estimer la nature des états électroniques des bandes E.(k) et E<sub>+</sub>(k). Les états de la bande E. devraient être délocalisés en centre de la zone de Brillouin (prés de k=0), présentant une nature proche des états  $E_M$ , alors qu'ils devraient être plus localisés en limite de zone, présentant une nature proche de  $E_N$  (cf.Figure 3.1.a). Le phénomène inverse devrait se produire pour les états de la bande E<sub>+</sub>: localisés de l'azote et les états étendus de la matrice GaInAs.

## III.2.3 Caractéristique électroniques

Le modèle BAC a été validé par des mesures de photoréflectivité [1,4,5], d'électroréflectivité [6] et d'absorption [7] qui ont mis en évidence l'existence des bandes  $E_{\cdot}(k)$  et  $E_{+}(k)$  ainsi que leur répulsion mutuelle lorsque la concentration d'azote augmente. Il permet également de décrire de nombreuses propriétés électroniques de (Ga, In) (As, N) comme :

- (i) le paramètre de courbure géant de l'énergie de bande interdite pour les concentrations d'azote inférieures à 5%, on peut en avoir un aperçu avec l'importante diminution de l'énergie de bande interdite de GaAsN avec l'augmentation de la fraction d'azote reportée en figure 3. 1. b,
- (ii) la saturation de l'énergie de bande interdite des alliages nitrurés lorsque la pression augmente [1] alors qu'elle présente une augmentation linéaire pour les alliages sans azote,
- (iii) l'augmentation de la masse effective des électrons en centre de zone  $(m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2})$  due à la diminution de la courbure de E.(k) dans (Ga,In)(As,N)

en comparaison avec celle de (Ga,In)As [8,9],

(iv) la réduction de dépendance en température de l'énergie de bande interdite (en k=0) qui peut s'expliquer par l'équation (3.5), si l'on considère que  $E_N$  est indépendante de la température [10],

$$E_{\pm}(T, y) = \frac{1}{2} \left[ E_M(T) + E_N \pm \sqrt{\left(E_M(T) - E_N\right)^2 + 4V_{MN}^2} \right]$$
(3.5)

III.2.4 Discussion sur le modèle BAC

Ce modèle, comme nous venons de le voir, permet de décrire nombre de propriétés surprenantes des alliages nitrurés, notamment l'importante diminution de l'énergie de bande interdite avec l'incorporation d'azote et le paramètre de courbure géant pour les faibles taux d'azote. On peut remarquer dans la figure 3. 2, un très bon accord entre la prévision par le modèle BAC et les résultats de caractérisation optiques relevés dans la littérature [11].



Figure 3.2 : diminution de l'énergie de bande interdite de GaAsN avec l'augmentation de la concentration d'azote, comparaison entre résultats expérimentaux et modèle BAC.

Cependant, ce modèle phénoménologique ne permet pas de décrire certains résultats théoriques et expérimentaux qui font part du caractère très localisé de la bande E., contrairement aux prévisions qu'il implique [12-14], et comme nous l'avons présenté au paragraphe III.2.2. De plus, le modèle BAC prend en compte dans  $E_N$  l'effet d'un atome d'azote isolé dans la matrice (Ga,In)As. Or, à moins d'être dilué, l'atome d'azote n'est pas isolé mais d'autres atomes d'azote peuvent se trouver dans son environnement local. La présence de plusieurs de ces atomes influe sur l'énergie du niveau isoélectronique accepteur, ce qui n'est pas décrit par un niveau  $E_N$  unique.

III.2.5 Les autres interprétations

D'autres modèles que le BAC ont été proposés afin de décrire plus finement les caractéristiques des alliages GaAs nitrurés. Mattila *et al*, ont montré que la formation des bandes E. et E<sub>+</sub> était probablement due à une interaction entre les bandes de conduction  $\Gamma$  et L qui augmente avec la concentration d'azote [15]. Jones et al ont montré que la faible dépendance en pression de la bande E. pouvait s'expliquer par une interaction entre les bandes de conduction  $\Gamma$  et X qui n'implique pas nécessairement le niveau d'azote[16]. Gil suggère que la structure de bande particulière de ces alliages est due à l'interaction entre le niveau lié à l'azote et les bandes de conduction  $\Gamma$ , L et X, comme cela a précédemment été observé dans GaPN [17]. Ces résultats semblent confirmés par des caractérisations par spectroscopie Raman qui vont dans le sens d'un mélange d'états  $\Gamma$ , L et X [18,19].

Enfin, un modèle plus complet, basé sur la théorie des pseudopotentiels, qui pourrait bien concilier les différentes interprétations proposées, est celui proposé par Kent et Zunger dans un article récent [20]. Les auteurs suggèrent que l'incorporation d'azote s'accompagne de la génération d'agrégats d'azote (contenant de un- impureté isolée- à plusieurs atomes) qui donnent naissance à des niveaux discrets d'énergies différents dans la bande de conduction et dans la bande interdite. Le niveau d'énergie lié à l'agrégat est d'autant plus profond que l'agrégat contient un grand nombre d'atomes d'azote et que ces atomes sont proches les uns des autres. Ces agrégats représentent des puits de potentiels et induisent une localisation des excitons d'autant plus forte que le niveau d'énergie est profond. Le niveau de l'atome isolé est situé dans la bande de conduction, comme le prédit le modèle BAC; il a été mis en évidence par des expériences de photoluminescence en pression [2].

Les niveaux les plus profonds sont situés dans l'énergie de bande interdite, certaines des raies correspondantes ont été mises en évidence expérimentalement [2,21-23]. En plus de la distribution statistique des agrégats d'azote, le modèle de Kent et Zunger prend en compte le couplage des différentes bandes d'énergie. Notons enfin que cette description prévoit la formation de deux sous bandes de conduction qui peuvent être apparentées aux sous bandes E. et  $E_+$  décrites phénoménologiquement par le modèle BAC.

## III.3. Modélisation des hétérostructures à puits quantiques GaInNAs

Comme nous venons de le voir, le modèle d'anticroisement de bandes n'est pas celui qui donne le plus de précisions sur les propriétés du matériau. Cependant, il permet de donner une très bonne description quantitative de la variation de l'énergie de gap avec l'incorporation d'azote. Notre souci est avant tout de développer un modèle pour l'application laser, incluant le calcul du gain des structures à puits quantique, et est utilisant l'approximation BAC. Ce modèle présente en outre l'avantage de la simplicité, et donc une résolution mathématique plus rapide.

## III.3.1 Approximation de la masse effective

Dans cette approximation, la diminution de l'énergie de bande interdite est de 160meV pourcent d'azote pour des concentrations inférieures à 5% et se répercute uniquement sur la bande de conduction. Les maxima des bandes de valence de GaInNAs massif sont donc inchangés par rapport à ceux de GaInAs. La couche de GaInNAs qui constitue le puits quantique étant contrainte en compression sur GaAs, les décalages de bande peuvent être représentés comme l'indique la figure 3.3, en décomposant le tenseur des contraintes selon une composante uniaxiale qui lève la dégénérescence trous lourds-trous légers du haut de la bande de valence. Les caractéristiques de GaInNAs sont supposées être les mêmes que GaInAs compte tenu de la faible concentration d'azote et du peu de données expérimentales existantes à ce jour, à l'exception du potentiel de déformation hydrostatique de la bande de conduction déduit de la publication de Xin [6,24]. Les positions des énergies du matériau massif contraint étant ainsi déterminées, la théorie de la fonction enveloppe est appliquée au puits quantique contraint à une diminution pour calculer les énergies en k=0 des niveaux d'électrons, de trous lourds et de trous légers. Un abaque de la transition fondamentale  $E_{e-hh}$ peut ainsi être tracé pour différentes largeurs de puits, concentrations de gallium et d'azote.



Figure 3.3 : alignements de bandes de GaInNAs contraint sur GaAs

### III.3.2 Approximation k.p

La dégénérescence des bandes de trous dans le matériau massif relaxé ainsi que leur faible différence d'énergie au voisinage de ce point suffisent à coupler efficacement ces états de trous entre eux. Il en résulte des lois de dispersion non paraboliques et anisotropes, bien plus complexes que celles obtenues dans l'approximation de la masse effective. De même, le couplage des ces bandes de trous avec la bande spin-orbite ne peut être négligé. Afin de proposer un modèle le plus rigoureux possible pour la modélisation des structures laser, un modèle s'appuyant sur l'approximation k.p a été développé.

#### III.3.2.1 Calcul k.p

L'hamiltonien utilisé pour calculer la structure de bande des puits quantiques contraints GaInNAs/GaAs est un Hamiltonien de Pikus-Bir [25] à 8 bandes qui permet de prendre en compte la contrainte, le confinement et l'anticroisement de bandes dû à l'interaction entre le niveau localisé de l'azote et les états étendus de la bande de conduction de la matrice. Dans l'approximation BAC appliquée aux puits quantiques GaInNAs /GaAs, seule la bande d'énergie E. est prise en compte dans l'Hamiltonien, la bande  $E_+$  se trouvant au-dessus de l'énergie de barrière. La valeur de E. en k=0 à été déterminée par la résolution en k=0 de l'équation (3.4), et en supposant [26]

$$E_N = 1.65(1-x) + 1.44x - 0.38x(1-x)$$
(3.6)

$$V_{MN} = C_{MN} \sqrt{y} \tag{3.7}$$

$$C_{MN} = 2.7(1-x) + 2.0x - 3.5x(1-x) \tag{3.8}$$

L'état des porteurs est décrit par le formalisme de la fonction enveloppe [26] qui suppose que tous les matériaux possèdent les mêmes fonctions de Bloch en centre de zone de Brillouin,  $u_{n,0}(r)$ , et qui reporte la variation spatiale lente des fonctions d'ondes sur les fonctions enveloppes  $\psi_n(r)$ . En sommant sur les différentes bandes prises en compte dans les calculs, la fonction d'onde d'un porteur s'écrit :

$$\phi(r) = \sum_{n=1}^{N} \psi_n(r) u_{n,0}(r)$$
(3.9)

La description k.p des puits quantiques contraints GaInNAs/GaAs permet de déterminer leur structure de bandes. Nous avons représenté dans la figure 3.4 la structure d'un puits quantique de 60Å d'épaisseur pour des concentrations de gallium et d'azote de 70% et

1% respectivement. On peut constater une importante non parabolicité des bandes, y compris de celles de conduction, impliquant une importante augmentation de la masse effective des électrons au centre de zone en comparaison avec un puits équivalent de GaInAs. La valeur de la masse effective peut être déterminée en ajoutant la courbe de dispersion du premier niveau électronique en centre de zone de Brillouin par une fonction parabolique. On retrouve alors

une expression du type  $E = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$ .

Pour le puits quantique de GaInAsN à 70% de gallium et 1% d'azote, nous trouvons  $m_e^* \approx 0.14m_0$ , c'est-à-dire une masse effective plus de deux fois supérieure à celle d'un puits de GaInAs de concentration de gallium équivalente pour lequel  $m_e^* = 0.054 \text{ m}_0$ . Cette prévision de l'augmentation de la masse effective est en assez bon accord avec les résultats expérimentaux de la littérature qui font états de valeurs de masses effectives variant de  $0.12m_0$  à  $0.19m_0$  pour GaAsN lorsque la concentration d'azote varie de 1.2 à 2% [8], de  $0.13m_0$  à  $0.4m_0$  pour GaInNAs en accord de maille sur GaAs pour des concentrations d'azote comprises entre 1 et 3.3% [9,27], et de  $0.08m_0$  à  $0.09m_0$  pour des puits contraints de GaInNAs contenant environ 1% d'azote [28,29].



Figure 3.4 : structures de bandes d'un puits quantique de  $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}$  de 6nm de large pour des compositions de gallium et d'azote x=0.70 et y=0.01

III.3.3 Influence de l'azote sur l'énergie

## III.3.3.1 Bande interdite

D'après le modèle d'anticroisement de bande (BAC), c'est la répulsion de  $E_N$  et de  $E_M(k)$  qui serait à l'origine de la réduction de l'énergie de bande interdite avec l'incorporation d'azote et donc du fort paramètre de courbure de l'alliage quaternaire GaInNAs [30-34]. Les énergies de la bande interdite dépendent évidemment de la concentration de l'azote. Les paramètres de la structure Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>N<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub> sont déterminés par la relation globale [33],

$$P(Ga_{x}In_{1-x}N_{y}As_{1-y}) = P(GaAs)(x.(1-y)) + P(InAs)(1-x)(1-y) + P(GaN)(x.y) + P(InN)(1-x)y$$
(3.10)

où P représente les paramètres de la structure.

Le calcul de la bande interdite par le modèle d'anticroisement de bande nous donne l'expression suivante [35-38]:

$$E_{g}(Ga_{x}In_{1-x}N_{y}As_{1-y}) = \frac{1}{2} \Big[ E_{g}(Ga_{x}In_{1-x}As) + E_{N} \\ \pm \sqrt{\Big[ E_{g}(Ga_{x}In_{1-x}As) - E_{N} \Big]^{2} + 4V_{MN}^{2}(y)} \Big]$$
(3.11)

On constate qu'à partir d'un certain pourcentage d'azote, la bande interdite s'éclate en deux bandes et plus la concentration de l'azote augmente plus l'éclatement devient important. Ces résultats sont conformes aux résultats expérimentaux (figure.3.5)[39,40].

Les figures 3.6, 3.7, 3.8 montrent la variation de la bande interdite en fonction de la concentration de l'azote pour différentes compositions x. On constate que si la concentration de l'azote augmente, l'énergie de la bande interdite diminue donc l'incorporation de l'azote influe sur le gap contraint et non contraint. Ces résultats sont en accord avec des travaux expérimentaux [41,42].



Figure 3.5 : Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction du pourcentage de l'azote de la structure GaInNAs [43].



Figure 3.6: Influence de l'incorporation de l'azote sur l'énergie de la bande interdite [43]



Figure 3.7 : Variation de l'énergie de la bande interdite E<sub>hh</sub> en fonction de la concentration de l'azote (y), pour différentes compositions du gallium (x), [43]



Figure 3.8: Variation de l'énergie de la bande interdite E<sub>lh</sub> en fonction de la concentration de l'azote (y), pour différentes compositions du gallium (x)

## III.3.3.2 Energie de transition

La variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur de la zone active est illustrée par la figure 3.9. On remarque que l'énergie de recombinaison diminue sous l'effet de l'azote.



Figure 3.9: Influence de l'azote sur l'énergie de transition

## III.3.3.3 Longueur d'onde

On constate que la longueur d'onde croit en augmentant la concentration de l'azote, cette augmentation est due à la diminution de l'énergie de la bande interdite contrainte avec la composition d'azote (figure. 3.10 (a,b)) pour atteindre une longueur d'onde de  $1.3\mu m$ , on diminue la composition du gallium et on augmente la concentration de l'azote de 1% à 4% ainsi que la largeur du puits quantique L<sub>P</sub>.

A partir du jeu des paramètres largeur du puits, concentration de l'azote et taux du gallium il est possible de déterminer la structure GaInNAs/GaAs émettant à 1300nm. A chaque simulation, il est vérifié que la largeur du puits obtenue reste inférieure à l'épaisseur critique  $L_c$ . Les triplets ( $L_p$ ,x,y) pour obtenir l'émission à 1300nm sont données par la figure (3.11).



Figure 3.10 (a,b) : variation de la longueur d'onde d'émission en fonction de la largeur du puits quantique pour différents pourcentages d'azote [43]



Figure 3.11: Evolution de la largeur de puits en fonction de la composition du gallium pour une émission à 1300nm [43]

III.4- Gain optique

Une fois déterminées la structure de bande et les fonctions enveloppes des états d'électrons et de trous, le gain optique est calculé selon l'équation (1.75). Sur la figure (3.12), ont été reportés le spectre de gain du mode TE pour plusieurs taux d'injection de porteurs, ainsi que la valeur du gain maximal en fonction de la densité d'injection (figure (3.18)). On constate que le spectre du gain se déplace en variant les paramètres x,y et la largeur de la zone active (figures 3. (12-16)).

La figure (3.17) présente la variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes températures à une densité de porteurs fixée (N= $6.10^{18}$ cm<sup>-3</sup>) d'une structure Ga<sub>0.8</sub>In<sub>0.20</sub>N<sub>0.022</sub>As<sub>0.978</sub>/GaAs. L'augmentation de la température entraîne une diminution du gain et un décalage vers les grandes longueurs d'onde. Pour une augmentation de 100K, le gain se décale de 0.05µm et diminue de 700cm<sup>-1</sup> correspondant respectivement à un  $\Delta\lambda/\Delta T=0.50$ nm/K et égal à -7cm<sup>-1</sup>/K.



 $\label{eq:Figure 3.12} Figure 3.12: Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs d'injection de la structure Ga_{0.7}In_{0.30}N_{0.025}As_{0.975}/GaAs$ 



 $\label{eq:Figure 3.13} Figure 3.13: Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs d'injection de la structure Ga_{0.7}In_{0.30}N_{0.046}As_{0.954}/GaAs$ 



Figure 3.14: Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs d'injection de la structure Ga<sub>0.6</sub>In<sub>0.40</sub>N<sub>0.020</sub>As<sub>0.980</sub>/GaAs



Figure 3.15: Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs d'injection de la structure Ga<sub>0.6</sub>In<sub>0.40</sub>N<sub>0.028</sub>As<sub>0.972</sub>/GaAs



 $\label{eq:Figure 3.16: Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs d'injection de la structure Ga_{0.6}In_{0.40}N_{0.025}As_{0.975}/GaAs$ 



Figure 3.17: Variation du gain optique en ioncuon de la longueur d'onde pour différentes températures de la structure Ga<sub>0.8</sub>In<sub>0.20</sub>N<sub>0.022</sub>As<sub>0.978</sub>/GaAs



Figure 3.18: Variation du gain optique maximum en fonction de l'injection de la structure  $Ga_xIn_{1-x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ 

On peut constater que le maximum du spectre de gain se situe à une énergie supérieure à l'énergie d'émission (0.96eV, proche de la longueur d'onde  $1.3\mu$ m). Ainsi, pour obtenir un bon fonctionnement laser à  $1.3\mu$ m, il sera nécessaire d'élaborer des puits quantiques dont l'énergie d'émission est inférieure 0.95eV. Pour cela, nous pensons augmenter la concentration d'indium au-delà de 30%, sans augmenter la concentration d'azote qui pourrait provoquer l'apparition de centres de recombinaisons non radiatives. Ces spectres, bien entendu, sont théoriques et nous comptons, dans un avenir proche, les comparer aux spectres de gain expérimentaux que nous aurons obtenus à partir de structures laser optimisées.

## III.5. Courant de seuil

Le courant de seuil marque la séparation entre un fonctionnement dominé par l'émission spontanée et un fonctionnement dominé par l'émission stimulée (figure 3.19). La densité d'électrons  $N_s$  pour laquelle le gain compense toutes les pertes de la cavité se situe autour de  $10^{18}$  cm<sup>-3</sup>. La densité de courant  $J_s$  nécessaire pour atteindre le seuil laser dans un multi puits quantique est liée à la densité d'électrons  $N_s$ . On constate que l'incorporation de l'azote cause la diminution du courant de seuil de la diode laser à puits quantique contraint (figure 3.20).



Figure 3.19 : Variation du gain optique maximum en fonction de la densité de courant



Figure 3.20 : L'évolution de la densité de courant en fonction de la concentration d'azote

III.6. Puissance émise

L'expérience montre que, pompé très au-dessus de son seuil de lasage, le milieu semiconducteur se comporte comme un milieu homogène; le mode correspondant au gain maximal sur le spectre de gain voit son gain décroître jusqu'à égaler exactement les pertes de cavité. La puissance optique de sortie du laser est donnée par l'équation (2.51) (figure 3.21).



Figure 3.21 : Evolution de la puissance en fonction du courant d'injection pour un puits quantique contraint



Figure 3.22 : Variation de la puissance en fonction du courant d'injection pour (1)- DQW 600x4.1 $\mu$ m<sup>2</sup>, I<sub>s</sub>=22mA, n<sub>ext</sub>=0.25W/A, (2)-TQW, 600x4.7 $\mu$ m<sup>2</sup>, I<sub>s</sub>=29mA, n<sub>ext</sub>=0.23W (3)- 5QW 600x4.6 $\mu$ m<sup>2</sup>, I<sub>s</sub>=52mA, n<sub>ext</sub>=0.16W/A [44,45]



Figure 3.23: comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux [44,45]

## III.6. Validation expérimentale

Afin de valider ce modèle, nous avons comparé les résultats du calcul avec ceux rapportés dans la littérature ainsi qu'avec nos propres structures. Dans le Tableau 3.1 sont reportées les valeurs de : (i) la concentration en gallium (x) du puits quantique, (ii) la concentration en azote (y) du puits quantique, (iii) la largeur du puits quantique ; (iv) la longueur d'onde d'émission de PL expérimentale, (v) la longueur d'onde déterminée par le calcul BAC-k.p. On peut constater qu'un bon accord général est trouvé sur l'ensemble des données. Les structures dont les valeurs de l'énergie de transition s'éloignent le plus de la valeur calculée sont celles qui comportent de très importantes concentrations de gallium, et donc qui présentent un fort taux de contrainte, probablement en limite de la relaxation plastique du matériau, ou qui comportent des quantités importantes d'azote.

PUBLICATIONS	$x_{G}(\%)$	y(%)	L(Å)	$\lambda_{exp}(\mu m)$	$\lambda_{calc}(\mu m)$	Erreur(%)
Yang <i>et al.</i> [46]	70	0.5	60	1.156	1.163	+0.6
//	70	0.82	60	1.231	1.235	0.3
//	70	1.2	60	1.325	1.321	-0.3
Kageyama et al.[47]	66	0.7	70	1.261	1.276	+1
Kondow et al.[48]	90	2	70	1.226	1.164	-5
Hains et al.[49]	70	0.3	70	1.142	1.131	-0.96
Yang et al.[50]	70	0.3	70	1.155	1.131	-2
Kageyama et al.[51]	65	0.3	80	1.195	1.195	0
//	63	0.3	80	1.231	1.217	-1
//	63	0.5	80	1.265	1.275	0.8
Sato et al ,[52]	61	0.5	66	1.28	1.278	-0.15
//	63	0.5	77	1.294	1.271	-1.7
Xin et al.[53]	70	0.9	62	1.255	1.257	0.15
Kondow et al.[54]	70	1	70	1.322	1.295	-2
Kayeyama et al [55]	68	0.6	65	1.163	1.168	0.4
//	66	0.4	75	1.21	1.205	-0.4
//	67	0.4	70	1.181	1.186	0.4
Egorov et al. [56]	80	1.7	62	1.150	1.267	10
//	70	2.8	62	1.270	1.72	35
Reinhard et al.[57]	69	1	80	1.3	1.324	1.8
Shirakata et al [58]	68	1	100	1.319	1.344	1.8
Markus et al. [59]	64		60	1.27	1.544	20
Spruytte et al [60]	70	2	70	1.33	1.553	16
Kitatani et al. [61]	87	1	100	1.32	1.379	4.4
Pan et al. [28]	70	0.5	40	1.107	1.113	0.5
//	70	0.5	5.0	1.143	1.142	-0.08
//	70	0.5	60	1.164	1.163	-0.08
//	70	0.5	65	1.180	1.171	-0.7
//	70	0.5	90	1.204	1.200	-0.3

Tableau 3.1: références bibliographiques utilisées pour valider le calcul.

## III.7. Conclusion

Nous avons présenté, dans la première partie de ce chapitre, les deux modèles essentiels qui ont été proposés pour décrire les propriétés surprenantes des alliages (Ga, In) (As, N). Le modèle BAC d'un coté, s'appuyant sur un couplage fort entre l'état localisé isoélectronique introduit par l'azote et les états étendus de la bande de conduction de la matrice (Ga, In) As. Le modèle basé sur la théorie des pseudopotentiels d'un autre côté, qui suppose que l'incorporation d'azote s'accompagne de la formation d'agrégats qui donnent naissance à des états localisés dans et au-dessous du minimum de la bande de conduction et qui induisent un mélange d'états entre les états très localisés de l'azote et les vallées  $\Gamma$ , L et X de la bande de conduction.

A l'heure actuelle, la profusion des caractérisations aidant, l'expérience tend à valider le modèle développé par Zunger. Nos propres résultats convergent également dans ce sens. D'une part, les phénomènes de localisation observés à basse température sont prévus par le modèle des pseudopotentiels alors que le modèle BAC, qui pourrait être interprété comme une réduction de la théorie des pseudopotentiels à des descriptions de l'énergie des bandes de conduction, n'en fait pas état. D'autre part, les analyses de spectroscopie Raman résonante ont mis en évidence que la bande  $E_+$  du modèle BAC présentait un caractère très localisé, ainsi que des composantes  $\Gamma$ ,L et X.

Les propriétés optiques et électroniques des alliages nitrurés à faible bande interdite sont très particulières, car l'atome d'azote est très différent de l'atome d'arsenic auquel il se substitue (électronégativité, taille). Ces différences sont à l'origine de la diminution drastique de l'énergie de bande interdite avec l'incorporation d'azote (paramètre de courbure géant), qui permet notamment d'obtenir l'émission à 1.3µm sur substrat GaAs. Le modèle d'anticroisement de bande, bien que sujet à discussion, permet d'estimer l'énergie des niveaux dans une structure quantique à base de (Ga, In) (As, N) de forme quelconque. En revanche, le modèle achoppe en ce qui concerne l'existence d'états localisés (induits par l'azote) dans et/ou sous la bande de conduction. Cette existence est prédite par un modèle plus complexe et observé expérimentalement aux premiers stades de formation des alliages nitrurés.

# **REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES**

- W. Shan, W. Walukiewicz, J. W. Ager, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson, S. R. Kurtz, Band Anticrossing in GaInNAs Alloys, Phys. Rev. Lett., Vol. 82, N° 6, pp.1221-1224, 1999.
- [2] X. Liu, M. E. Pistol, L. Samuelson, Nitrogen pair luminescence in GaAs, Appl. Phys. Lett., Vol. 56, N°15, pp. 1451-1453, 1990.
- [3] A. Aissat, F. Kerkar, S. Nacer, K. Ferdjani, M. EL Bey, and D.Berkani, The effect of nitrogen on the wavelength of a structure with strained quantum well containing Ga<sub>0.8</sub>In<sub>0.20</sub>N<sub>0.025</sub>As<sub>0.975</sub>/GaAs, Damascus University –Syria, 13-15, 2006.
- W. Shan, W. Walukiewicz, K. M.Yu, J. W. Ager, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J.
   Friedaman, J. M. Olson, S. R. Kurtz, H. P. Xin, C. W. Tu, Band Anticrossing in III-N-V
   Alloys, Phys. Stat. Sol. (b), Vol. 223, pp.75-85, 2001.
- W. Shan, W. Walukiewicz, J. W. Ager III, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J.
   M. Olson, Sarah R. Kurtz., Effect of nitrogen on the band structure of GaInNAs alloys, Appl. Phys., Vol.86, N°.4, pp 2349-2351, 1999.
- [6] J. D. Perkins, A. Mascarenhas, Y. Zhang, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson,
   S.R. Kurtz, Nitrogen-Activated Transitions, Level Repulsion, and Band Gap Reduction in *GaAs*<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> with x < 0.03, Phys. Rev. Lett, Vol. 82, No. 16, pp. 3312-3315, 1999.</li>
- P. Perlin, P. Wisniewski, C. Skierbiszewski, T. Suski, E, Kaminska, S. G.Subramanya,
   E. R. Weber, D.E.Mars, W. Walukiewicz, Interband optical absorption in free standing layer of Ga<sub>0.96</sub>In<sub>0.04</sub>As<sub>0.99</sub>N<sub>0.01</sub>, Appl.Phys.lett. Vol.76, No.10, pp.1279-1281,2000.
- [8] P. N. Hai, W. M. Chen, I. A. Buyanova, H. P. Xin, C. W. Tu, Direct determination of electron effective mass in GaNAs/GaAs quantum wells, Appl. Phys. Lett., Vol. 77, N° 12, pp. 1843-1845, 2000.
- [9] C. Skierbiszewski, P. Perlin, P. Wisniewski, W. Knap, T. Suski, W. Walukiewicz, W. Shan, K. M. Yu, J.W. Ager, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson, Large, nitrogen-induced increase of the electron effective mass in In<sub>y</sub>Ga<sub>1-y</sub>N<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub>, Appl. Phys. Lett., Vol.76, N°17, pp.2409-2411,2000.
- [10] I. Suemune, K. Uesugi, W. Walukiewicz, Role ... Gap Energy in GaNAs, Appl. Phys. Lett., Vol.77, N<sup>o</sup>.19, pp. 3021-3023, 2000.
- [11] L. Grenouillet, Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, ,2001.

- [12] A. Zunger, Anomalous Behavior of the Nitride Alloys, Phys. Stat. Sol. (b), Vol. 216, pp.117-123,1999.
- [13] L. Grenouillet, C. Bru-Chevallier, G. Guillot, P. Duvaut, C. Vannuffel, A. Mllion, A. Chnevas-Paule, Evidence of strong carrier localization below 100 K in a GaInNAs/GaAs single quantum well, Appl. Phys. Lett., Vol.76, N°.16, pp.2241-2243, 2000.
- I. A. Buyanova, G. Pozina, P. N. Hai, N. Q. Thinh, J. P. Bergman, W. M. Chen, H.P. Xin, C. W. Tu, Mechanism for rapid thermal annealing improvements in undoped GaN<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub>/GaAs structures grown by molecular beam epitaxy, Appl. Phys. Lett., Vol. 77, N°. 15, 2325-2327, 2000.
- [15] T. Mattila, S. H. Wei, A. Zunger, Localization and anticrossing of electron levels in GaAs\_ {1-x} N\_ {x} alloys, Phys. Rev.B, Vol.60, N°16, pp. 11245- 11248, 1999,
- [16] E. D. Jones, N. A. Modine, A. A. Allerman, S. R. Kurtz, A. F. Wright, S.T.Tozer, X. Wei, Band structure of In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As<sub>1-y</sub>N<sub>y</sub> alloys and effects of pressure, Phys. Rev.B., Vol.60, N°.7, pp.4430-4433, 1999.
- [17] B.Gil, Elementary description of the optical properties of GaAsN alloys with small nitrogen content, Sol.Stat.Comm., Vol.114, No.12,pp.623-626, 2000.
- [18] H. M. Cheong, Y. Zhang, A. Mascarenhas, J. F. Geisz, Nitrogen-induced levels in GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> studied with resonant Raman scattering, Phys. Rev. B, Vol. 61, N°. 20, pp.13687-13690, 2000.
- [19] M. J. Seong, A. Mascarenhas, J. F. Geisz, Γ–*L*–*X* mixed symmetry of nitrogeninduced states in GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> probed by resonant Raman scattering, Appl. Phys. Lett., Vol. 79, N°. 9, pp.1297-1299, 2001.
- [20] P. R. C. Kent, A. Zunger, Evolution of III-V Nitride Alloy Electronic Structure: The Localized to Delocalized Transition, Phys. Rev. Lett., Vol. 86, N°. 12, pp. 2613-2616, 2001.
- [21] T. Makimoto, N. Kobayashi, Extremely Sharp Photoluminescence Lines from Nitrogen Atomic-Layer-Doped AlGaAs/GaAs Single Quantum Wells, Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 35,N°. 2B, pp. 1299- 1301, 1996.
- [22] T. Makimoto, N. Kobayashi, Sharp photoluminescence lines from nitrogen atomiclayer-doped GaAs, Appl. Phys. Lett., Vol. 67, N°.5, pp. 688-700, 1995.
- [23] H. Saito, T. Makimoto, N. Kobayashi, Photoluminescence characteristics of nitrogen atomic-layer-doped GaAs grown by MOVPE, Cryst. Growth, Vol. 170, N°. 1, pp. 372-376, 1997.

- [24] H. P. Xin, C. W. Tu, M. Geva, Annealing behavior of *p*-type  $Ga_{0.892}In_{0.108}N_xAs_{1-x}$ (0  $\leq X \leq 0.024$ ) grown by gas-source molecular beam epitaxy ,Appl. Lett., Vol. 75, N°10, pp. 1416-1418, 1999.
- [25] G. L. Bi rand Pikur, Symetry and strain induced effects in semiconductors, Wiley, New York, 1974.
- [26] S. T. Ng, W. J. Fan, Y. X. Dang, and S. F. Yoon, Comparison of electronic band structure and optical transparency conditions of In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As<sub>1-y</sub>N<sub>y</sub>/GaAs quantum wells calculated by 10-band, 8-band, and 6-band k⋅p models, physical review Vol. 72, 115341-115354, 2005.
- [27] E. D. Jones, N. A. Modine, A.A. Allerman, I. J. Fritz, S. R. Kurtz, A.F. Wright,
   S. T. Tozer, X. Wei, Optical properties of InGaAsN: a new 1 eV bandgap material system, Proceedings SPIE, Vol.3621, pp.52, 1999,
- [28] Z.Pan, L.H. Li, B. Q. Sun, D.S. Jiang, W. K. Ge, Conduction band offset and electron effective mass in GaInNAs/GaAs quantum-well structures with low nitrogen concentration, Appl. Phys. Lett., Vol. 78, N°.15, pp. 2217-2219? 2001.
- [29] M. Hetterich, M. D. Dawson, A. Y. Egorov, D.Bernklau, H. Riechert, Electronic states and band alignment GaInNAs/GaAs quantum-well structures with low nitrogen content, Appl. Phys. LettVol. 76, N°. 8, pp. 1030-1032., 2000.
- [30] S. Calvez, J.-M. Hopkins, S.A. Smith, A.H. Clark, R. Macaluso, H.D. Sun, M.D. Dawson, T. Jouhti, M. Pessa, K. Gundogdu, K.C. Hall, T.F. Boggess, "GaInNAs/GaAs Bragg-mirror-based structures for novel 1.3 mm device applications» Journal of Crystal Growth 268 (2004) 457–465
- [31] M. Pessa, C.S. Peng, T. Jouhti, E.-M. Pavelescu, W. Li, S. Karirinne, H. Liu, O. Okhotnikov P.O. "Long-wavelength nitride lasers on GaAs" Box 692, 3311 Tampere, Finland (2003).
- [32] K. Nomura, T. Yamada Y. Iguchi, S. Takagishi, M. Nakayama, "Photoluminescence properties of localized states caused by nitrogen alloying in a GaInNAs/GaAs single quantum well" Applied Physics, Koya-kita, Itami, Hyogo 664- 0016, Japan (2004).
- [33] Yu, K.M., Walukiewicz, W., Shan, W., Ager III, J.W., WU, J., Haller, E.E., Geisz, J.F., Friedman, D.J., Olson, J.M. "Nitrogen–induced increase of the maximum electron concentration in group III-N-V alloys" Phys. Rev. B, (2000), vol. 61, n°20, pp. R13337-R13340
- [34] C. Y. Michael. Chan, C. Surya, and P. K. A. Wai, Hung Hom, Kowloon, " The effects of interdiffusion on the subbands in Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>N<sub>0.04</sub>As<sub>0.96</sub>/GaAs quantum well
for 1.3 and 1.55 mm operation wavelengths " Hong Kong (2000).

- [35] W. J. Fana and S. F. Yoon, Electronic structures of GaInNAs/GaAs compressively strained quantum wells, J. Appl. Phys. Vol. 90, N°.2, pp. 843-847, 2001.
- [36] Y. X. Dang, W. J. Fan, S. T. Ng, S. F. Yoon, and D. H. Zhang, Study of interdiffusion in GaInNAs/GaAs quantum well structure emitting at 1.3 μm by eight-band k·p method ,journal of applied physics, Vol. 97, 103718-103724, 2005.
- [37] J. Wu, W. Shan, and W. Walukiewicz, Band anticrossing in highly mismatched III–V semiconductor alloys, Semicond. Sci. Technol. Vol 17, pp. 860-869, 2002.
- [38] I. Vurgaftman and J. R. Meyer, Band parameters for nitrogen-containing semiconductors, J. Appl. Phys. Vol. 94, N°6, 3675-3695, 2003.
- [39] J. D. Perkins<sup>\*</sup>, A. Mascarenhas, J. F. Geisz, and D. J. Friedman, Conductionband-resonant nitrogen-induced levels in GaAs<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> with x<0.03, Phys. Rev. Vol. 64, pp.121301-12305, 2001.
- [40] W. Shan, W. Walukiewicz, J. W. Ager, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson, S. R. Kurtz, Band Anticrossing in GaInNAs Alloys, Phys. Rev. Lett. Vol.82, N°.6, pp.1221 1224, 1999.
- [41] Shiro Sakai, Yoshihiro Ueta, Yoji Terauchi, Band Gap Energy and Band Lineup of III-V Alloy Semiconductors Incorporating Nitrogen and Boron, Jpn. J. Appl. Phys.Vol. 32, N°10, pp. 4413-4417, 1993.
- [42] K. Uesugi, N. Morooka, I. Suemune, Reexamination of N composition dependence of coherently grown GaNAs band gap energy with high-resolution x-ray diffraction mapping measurements, Appl. Phys. Lett. Vol.74, N°9, 1254-1256, 1999.
- [43] A. Aissat, S. Nacer, D. Berkani, M. El Bey, A. Guessoum, K. FERDJANI and J.P. Vilcot, The Effect of Nitrogen over the Energy Gap of a Structure with Strained Quantum Well Containing GaInNAs/GaAs, the Iranian Journal of Electrical and Computer Engineering in, Vol.6, N°, 2007.
- [44] A. Martinez, V. Sallet, D. Jahan, J.G. Provost, B. Dagens, L. Ferlazzo, J. G. Harmand and A. Ramdane, High-frequency performance of triple quantum well GaInNAs/GaAs ridge waveguide lasers emitting at 1.35 /spl mu/m, Optoelectronics, IEE Proceedings, Vol.151,N°5, pp. 429-432, 2004.
- [45] Gollub, D.; Moses, S.; Fischer, M.; Kamp, M.; Forchel, A., GaInNAs-based distributed feedback laser diodes emitting at 1.5 /spl mu/m, Electronics Letters, Vol 40, N°7, pp. 427 – 428, 2004.

- [46] Yang et al., J. Vac. Sci Techno. B17 (3), 1144(1999)
- [47] T. Kageyama<sup>\*</sup>, T. Miyamoto, S. Makino, F. Koyama and K. Iga , Thermal Annealing of GaInNAs/GaAs Quantum Wells Grown by Chemical Beam Epitaxy and Its Effect on Photoluminescence, Jpn. J. Appl. Phys. Vol.38, N°3B, pp.298-300, 1999.
- [48] M. Kondow, K. Uomi, A. Niwa, T. Kitatani, S. Watahiki, Y. Yazawa, GaInNAs: A Novel Material for Long-Wavelength-Range Laser Diodes with Excellent High-Temperature Performance, Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 35, N°. 2B, pp. 1273-1275, 1996.
- [49] N. Y. Li, C. P. Hains, K. Yang, J. Lu, and J. Cheng, Organometallic vapor phase epitaxy growth and optical characteristics of almost 1.2 μm GaInNAs three-quantumwell laser diodes; Applied Physics Lett, Vol 75, N° 8, pp. 1051-1053,1999.
- [50] K.Yang et al., IEEE Phot. Tech. Lett. 12, 7 (2000)
- [51] Kageyama, T. Miyamoto, S. Makino, N. Nishiyama, F. Koyama, K. Iga, Hightemperature operation up to 170°C of GaInNAs-GaAsquantum-well lasers grown by chemical beam epitaxy, IEEE Phot. Tech. Lett., Vol. 12, N°. 1, pp. 10-12, 2000.
- [52] S. Sato et S. Satoh., 1.3 μm continuous-wave operation of GainNAs lasers grown by metal organic chemical vapour deposition, Electronics Lett, Vol.35, N°15, pp. 1251-1252, 1999.
- [53] H. P. Xin, C. W. Tu, GalnNAs/GaAs multiple quantum wells grown by gas-source molecular beam epitaxy, Appl. Phys. Lett., Vol. 72, N°. 19, pp. 2442-2444, 1998.
- [54] M. Kondow et al., a 1.3-μm GaInNAs Laser Diode with a Lifetime of over 1000 Hours, Jpn. J. Appl. Phys. Vol 38, N°12A, 1355-1356, 1999.
- [55] T. Kageyama, T. Miyamoto, S. Makino, F. Koyama, K. Iga, Optical quality of GaNAs and GaInNAs and its dependence on RF cell condition in chemical beam epitaxy', J. Cryst. Growth, Vol. 209, pp.350-354, 2000.
- [56] A. Yu. Egorov, D. Bernklau, B. Borchert, S. Illek, D. Livshits, A. Rucki,
  M. Schuster, A. Kaschner, A.Hoffmann, Gh. Dumitras, M. C. Amann, H. Riechert,
  Growth of high quality InGaAsN heterostructures and their laser application,
  J. Cryst. Growth, Vol. 227/228, pp.545-552, 2001.
- [57] M.Reinhardt, M. Fischer, A. Forchel, GaInAsN/GaAs laser diodes operating at 1.52 μm, Electronics Letters, Vol 36, N° 14, pp.1208-1209, 2000.
- [58] S. Shirakata, M. Kondo, T. Kitatani, Temperature-dependent photoluminescence of high-quality GaInNAs single quantum wells, Appl. Phys. Lett., Vol. 80, N°.12, pp. 2087-2089, 2002.

- [59] A. Markus, A. Fiore, J. D. Ganière, U. Oesterle, J. X. Chen, B. Deveaud, M. Ilegems, H. Riechert, Comparison of radiative properties of InAs quantum dots and GaInNAs quantum wells emitting around 1.3 μm, Appl. Phys. Lett. Vol. 80, N°. 6, pp. 911-913, 2002.
- [60] S. G. Spruytte, M. C. Larson, W. Wampler, C. W. Coldren, H. E. Petersen, J. S. Harris, Nitrogen incorporation in group III-nitride-arsenide materials grown by elemental source molecular beam epitaxy, J. Cryst. Growth, vol. 227, N°.28, pp. 506-515, 2001.
- [61] M. Kondow and T. Kitatani, Molecular beam epitaxy of GaNAs and GaInNAs Semicond. Sci. Technol. Vol.17, pp. 746-754, 2002.



## IV.1. Introduction

Le trafic d'Internet subit actuellement une très forte croissance : la capacité de transmission dans les fibres optiques doit tripler chaque année. Par comparaison, cette croissance est plus rapide que la fameuse loi de Moore utilisée en microélectronique, qui stipule le doublement des performances des circuits intégrés tous les 18 mois. Cette explosion d'Internet nécessite une transmission des informations à débits de plus en plus élevés et sur des distances de plus en plus longues. Ces informations sont actuellement véhiculées dans des réseaux de fibres optiques qu'on appelle aussi réseaux datacoms (qui vient de l'anglais data communications networks). A court ou moyen terme, chaque fibre devra transmettre des informations à des débits de 160Gbits/s, voire jusqu'à 1 Tbits/s. De telles spécifications imposent d'avoir des émetteurs rapides, compacts, non refroidis, peu coûteux et émettant dans la fenêtre de transmission des fibres en silice (1.3 et 1.55µm). Aussi, un fort potentiel de recherche est engagé dans de telles sources de lumière, capables de fonctionner en format parallèle ou en multiplexage en longueur d'onde pour augmenter les débits, tout en maintenant des coûts de production faibles.

Ainsi, on voit la nécessité de fabrication des émetteurs rapides et peu onéreux pour accélérer l'accès à l'information, que ce soit via la communication entre ordinateur (croissance d'Internet) ou via la fréquence de travail de ces derniers (croissance de la Microélectronique). Nous présentons dans ce qui suit les lasers à cavité verticale émettant par la surface (VCSEL pour Vertical Cavity Surface Emitting Lasers), qui sont des candidats de choix pour de telles applications. Après avoir brièvement décrit leurs fonctionnement et principaux avantages, nous discutons de la longueur d'onde d'émission ainsi que du type de substrat adéquat.

### IV.2. Les VCSELs 1.3 $\mu m$

### IV.2.1 Fonctionnement

A la différence d'un laser semi-conducteur classique, qui émet par la tranche, un VCSEL possède une cavité Fabry-Pérot qui est verticale et de faible épaisseur. A l'intérieur de cette cavité sont placés des puits quantiques qui constituent le milieu actif et fournissent le gain optique. Le faible volume de la couche active impose que les miroirs de la cavité aient de fortes réflectivités pour obtenir un gain suffisant pour une émission stimulée. Ces réflectivités élevées sont obtenues avec des réflecteurs de Bragg distribués, qui sont des empilements de bicouches constituées de deux couches quart d'onde d'indices différents. La réflectivité des

miroirs est d'autant plus forte que le nombre de bicouches est élevé et que l'écart d'indice entre deux couches adjacentes est grand.

Pour que le VCSEL fonctionne, il faut qu'il y ait accord entre :

- La longueur d'onde d'émission du milieu actif,
- La longueur d'onde de résonance de la cavité
- Le domaine de longueur d'onde pour lequel les miroirs de Bragg sont réfléchissants,

Ces conditions nécessitent un contrôle très fin de l'épaisseur (précision inférieure à 1%) et de la composition des couches; mais ces exigences peuvent être satisfaites par les techniques de croissance actuelles, telles que l'épitaxie par jets moléculaires (EJM) ou l'épitaxie en phase vapeur par organométalliques (EPVOM).

Mis à part ces contraintes sur la croissance, les VCSELs présentent de nombreux avantages. D'abord, ils émettent par la surface, ce qui permet d'utiliser les procédés de fabrication (et de test) collectifs peu coûteux de la microélectronique et d'envisager la fabrication de matrices 2D, notamment pour les interconnexions optiques. Ensuite, en terme de caractéristique, le faisceau laser émis par le VCSEL est monomode longitudinal par construction, du fait de la très faible longueur de la cavité.

Cette propriété est multimode ou monomode transverse selon que la dimension latérale effective du VCSEL est importante ( $50\mu$ m) ou faible ( $5\mu$ m). En outre, il est de symétrie circulaire et à faible divergence (typiquement 9°), ce qui permet de coupler 80% de la lumière avec une fibre optique monomode sans ajout d'optique de focalisation. De plus, le faible volume actif permet aux VCSELs d'avoir des courants de seuil très faibles et être modulés à des fréquences élevées. Enfin, un autre avantage est que la longueur d'onde d'émission de ces dispositifs optoélectroniques varie relativement peu avec la température. Le packaging de ces lasers est donc simple, puisqu'il n'y a besoin ni d'optique de focalisation, ni de régulation en température.

Ainsi, les VCSELs présentent des avantages en termes de performances et de coût sur les lasers émettant par la tranche. Les premiers VCSELs ont été commercialisés en 1996. Ces VCSELs fonctionnant à 850nm sont maintenant la technologie de choix pour transmettre des informations à des vitesses allant jusqu'à 10Gbit/s dans des fibres multimodes et sur des distances relativement courtes (500m environ). Cependant, de nombreux aspects techniques, notamment les nouvelles contraintes de débits, favoriseraient la longueur d'onde de 1.3µm comme longueur d'onde d'opération de tels systèmes dans des fibres monomodes.

### IV.2.2 Avantages des émetteurs à $1.3 \mu m$

Le minimum de dispersion chromatique des fibres optiques monomodes standards se situe à  $1.3\mu$ m. Des VCSELs émettant à cette longueur d'onde permettraient donc des débits plus élevés qu'à 850nm et sur des distances plus longues, puisque la dispersion chromatique limite la fréquence de modulation des signaux et la distance de transmission. En outre, à cette longueur d'onde l'atténuation du signal par fibre est très faible, autorisant des distances de transmission de l'ordre de la dizaine de kilomètres. La figure (4.1) résume ces propos et montre que des VCSELs émettant à  $1.3\mu$ m seraient compatibles avec le standard '10Gbit Ethernet'. Par ailleurs, les problèmes de sécurité oculaire entrent en jeu que ce soit pour les liens par fibre ou à fortiori pour les liens dans l'espace libre (télécommande par exemple). A  $1.3\mu$ m, l'œil peut tolérer environ 10 fois plus de puissance qu'à 850nm pour un même seuil de dangerosité oculaire. Ceci correspond à 1.5 fois plus de photons injectés dans une fibre, et autorise des distances de transmission encore plus grandes.



Figure 4.1 : Distance de transmission dans une fibre optique en fonction du débit, pour différents types de lasers et de longueurs d'onde d'émission [1]

De plus, la tension d'alimentation d'un émetteur est directement liée à l'énergie de bande interdite du matériau émetteur, et donc à la longueur d'onde d'émission. A 1.3µm, les tensions d'alimentation seraient comparables avec les faibles tensions utilisées dans les filières CMOS, et les substrats de silicium seraient transparents à ces signaux. Ces conditions sont nécessaires pour pouvoir hybrider les VCSELs sur les circuits intégrés.

La figure (4.1) montre aussi que la longueur d'onde de  $1.55\mu m$  est encore plus favorable que  $1.3\mu m$  en termes de débit et distance de transmission. Elle correspond en effet au deuxième minimum d'absorption et de dispersion dans les fibres optiques en silice. Néanmoins dans la filière GaAs, la plus prometteuse pour la réalisation de VCSELs, la longueur d'onde de  $1.3\mu m$  constitue déjà une grande percée technologique, C'est ce que nous nous proposons maintenant de montrer [2-7]

## IV.3. Caractérisation

Afin de caractériser les lasers en température, nous avons développé une cellule de mesure décrite en figure (4.2).

Le banc est constitué par :

- 1. Générateur de courant,
- 2. Analyseur de spectre,
- 3. Voltmètre,
- 4. Wattmètre optique,
- 5. des fibres optiques



Figure 4.2 : banc de mesure



Figure 4.3 : Schéma de mesure



Générateur de courant

Wattmètre optique



VCSEL 1.3µm RT2xxx1-F

Analyseur du spectre

Les caractéristiques des diodes laser que nous allons caractériser sont regroupées dans le tableau 4.1.

	λ	matériau	spectre	Is	Pmax
Laser DFB	1.55 µm	GaInAsP	monomode	qq (mA)	qq(mW)
VCSEL	0.980μm 1.3μm 1.55 μm	GaInAs GaInNAs	multimode monomode	qq(mA)	qq(mW)

Tableau 4.1 : les caractéristiques des diodes laser caractérisées

## IV.3.1 Caractérisation de laser VCSELs émettant à 1.3 et $1.55 \mu m$

Pour la caractérisation statique des VCSELs, nous avons relevé l'évolution de la puissance optique instantanée P à la sortie du laser en fonction du courant injecté I pour différentes manipulations. Nous avons représenté respectivement sur les figures 4.4 et 4.5 les courbes P(I) de diodes laser VCSEL émettant à 1.3 et 1.55µm.



Figure 4.4 : Evolution de la puissance optique en fonction du courant injecté de laser VCSEL 1.3µm



Figure 4.5 : Evolution de la puissance optique en fonction du courant injecté de laser VCSEL 1.55µm

Nous remarquons, qu'à partir d'un courant de 6mA et 10mA des VCSELs 1.3 et  $1.55\mu m$  respectivement, la puissance optique diminue; ceci est dû à l'échauffement du composant. De ces courbes, nous avons calculé le courant de seuil I<sub>S</sub> et comparé avec les résultats expérimentaux (Tableau 4.2).

Paramètres	VCSEL 1.3µm	VCSEL 1.55µm
I <sub>s carac</sub>	1.8mA	2.1mA
I <sub>s donné</sub>	~2.5mA	2mA
P <sub>0carc</sub>	0.27mW	0.6mW
P <sub>0 donnée</sub>	~0.25mW	0.7mW
$\lambda_{\text{carc}}$	1322nm	1560nm
$\lambda_{donnée}$	1310nm	1552nm

Tableau 4.2 : comparaison entre les valeurs caractérisées et les valeurs expérimentales

Pour visualiser l'évolution du spectre d'émission en fonction du courant d'injection, nous avons tracé le spectre d'émission à l'aide d'un analyseur de spectre pour différentes valeurs du courant des VCSELs émettant à 1.3 et  $1.55\mu$ m respectivement (figures (4.5 (a,b), 4.6 (a,b))). On constate que la longueur d'onde d'émission se déplace en augmentant le courant d'injection.



Figure 4.5 (a,b): Spectres d'émission du composant VCSEL 1.3µm en régime continu pour un courant d'injection I



Figure 4.6 (a,b) : Spectres d'émission du composant VCSEL 1.55µm en régime continu pour différents courants d'injection.

### IV.3.2 Caractérisation d'un laser DFB 1.55µm

Nous avons relevé l'évolution de la puissance optique instantanée à la sortie du DFB (**D**istributed **F**eed**B**ack) en fonction du courant injecté I sur une gamme de températures comprises entre 20°C et 80°C (figure 4.7). De ces courbes, nous avons calculé le courant de seuil I<sub>s</sub> et le rendement quantique  $\eta = \Delta P / \Delta I$ .

L'intersection de la régression linéaire dans la zone linéaire de la courbe P(I) avec l'axe des abscisses nous permet d'évaluer le courant de seuil. Nous avons tracé l'évolution du rendement total  $\eta_{ext}$  =P/P<sub>e</sub> en fonction de la température; il est clair que le rendement total de la diode laser diminue avec l'augmentation de la température (figure 4.8). Par contre, le courant de seuil augmente avec celle-ci (figure 4.9). Nous avons tracé l'évolution de la longueur d'onde en fonction de la température pour différents courants d'injection I (figure 4.10) ; et l'évolution de la longueur d'onde en fonction de la longueur d'onde d'émission augmente avec l'augmentation du courant d'injection I et que la longueur d'onde d'émission est influencée par la température.



Banc de caractérisation de la diode laser DFB 1.55µm



Figure 4.7 : Variation de la puissance optique en fonction du courant d'injection pour différentes températures



Figure 4.8 : Variation du rendement η en fonction du courant d'injection pour différentes températures







Figure 4.10 : Variation de la longueur d'onde d'émission en fonction de la température





Nous avons utilisé l'analyseur de spectre pour visualiser l'évolution du spectre d'émission de la diode laser DFB 1.55µm (figures (4.12 (a,b), 4.13 (a,b))).



Figure 4.12.a : Spectre d'émission du composant DFB 1.55 $\mu$ m en régime continu pour I=25mA, T=15°C



Figure 4.12.b : Spectre d'émission du composant DFB 1.55 $\mu$ m en régime continu pour I=25mA T=35°C



Figure 4.13. a : Spectre d'émission du composant DFB 1.55µm en régime continu pour I=40mA,T=15°



Figure 4.13. b: Spectre d'émission du composant DFB 1.55µm en régime continu pour I=40mA,T=35°C

IV.3.3 Caractérisation de VCSEL émettant à 980nm

Pour caractériser la diode VCSEL émettant à 980nm, nous avons utilisé le matériel suivant :

- 1. un wattmètre optique
- 2. une fibre optique en silice
- 3. un voltmètre
- 4. un analyseur de spectre
- 5. un support de la diode
- 6. un générateur de courant

Nous avons tracé l'évolution de la puissance optique à la sortie de la diode en fonction du courant d'injection (figure 4.14).



Figure 4.14 : Variation de la puissance optique de sortie en fonction du courant d'injection



Schéma du banc de caractérisation de la diode VCSEL (GaInAs)







Les valeurs données par le constructeur et mesurées sont données par le tableau 4.3:

Paramètre	VCSEL (980nm)
I <sub>s donné</sub>	1.5mA
I <sub>carac</sub>	~1.7mA
P <sub>s donné</sub>	1.5mW
P <sub>cara</sub>	~1.5mW
λ <sub>e donné</sub>	978nm
$\lambda_{carac}$	~979nm

Tableau 4.3 : comparaison des valeurs théoriques et mesurées

### IV.4. Conclusion

Cette partie a consisté en la mesure des paramètres caractéristiques de lasers de type Fabry-Perot, DFB et VCSELs commerciaux et plus généralement de l'ensemble d'une liaison optique. Nous avons donc ainsi réalisé de nombreuses expérimentations sur des composants laser nous permettant d'appréhender les aspects purement liés à la manipulation et caractérisation de ces objets et d'en mesurer les différents paramètres distinctifs. Ceci nous a notamment permis de "visualiser" directement les grandeurs physiques que nous avons l'habitude de modéliser. Cet aspect a d'abord inclus une prise en main des différents équipements de caractérisation, qu'ils soient dans le domaine électrique ou optique, utilisés en mesure de composants et systèmes optoélectroniques dans le domaine des télécommunications optiques. La caractérisation de liens fibre optique a alors été effectuée principalement dans le domaine analogique, ce qui permet de chiffrer les performances des différents types d'émetteurs lasers.

La corrélation entre modèle théorique et caractérisations expérimentales ne peut toutefois être menée complètement, la structure des composants commerciaux ayant servis à l'expérimentation n'étant pas divulguée. Néanmoins, une concordance satisfaisante peut être obtenue.

# **REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES**

- J.S. Harris, A new Material in the Race for Long Wavelength VCSELs, http://www-ee.stanford.edu//harris/Agilent Seminar., 2001.
- [2] P. Salet, F. Gaborit, P. Pagnod-Rossiaux, A. Plais, Derouin, E., Pasquier, J., Jacquet, Room-temperature pulsed operation of 1.3 μm vertical-cavitylasers including bottom InGaAsP/InP multilayer Bragg mirrors, J. Electron. Lett., vol.33, N°24, pp. 2048-2049, 1997.
- [3] Egorov, A. YU., Bedarev, D., Bernklau, D., Dumitras, G., Riechert, Self-assembled InAs quantum dots in an InGaAsN matrix on GaAs, H. Phy. Stat. Sol. (b), vol. 224, N° 3, pp. 839-843, 2001.
- [4] P. Ballet, P. Gilet, L. Grenouillet, P. Duvaut, G. Feuillet, A Million, Les nitrures à faible bande interdite pour l'émission de la lumière à 1.3µm sur substrat GaAs, Mat, Res. Soc. Symp. Proc., vol. 642, pp. J3.33.1-J3.33.6, 2001.
- [5] S. Makino, T., Miyamoto, T. Kageyama, N. Nishiyama, F. Koyama, Iga, K,
   GaInNAs/GaAs quantum dots grown by chemical beam epitaxy, J. of Cryst. Growth, vol. 221, pp. 561-565, 2000.
- [6] J. C Harmand, A Caliman, E V K Rao, L Largeau, J. Ramos, R Teissier, L Travers, G Ungaro, B Theys, I F L Dias, GaNAsSb: how does it compare with other dilute III–Vnitride alloys, Semicond. Sci. Technol. Vol.17 pp.778-784, 2002.
- [7] X.Yang, J.B. Heroux, L.F. Mei, W.I. Wang, InGaAsNSb/GaAs quantum wells for 1.55 μm lasers grown by molecular-beam epitaxy; Appl. Phy. Lett., vol.78, N°26, pp. 4068-4070, 2001.



#### Conclusion générale

Les travaux présentés dans ce mémoire ont eu pour objectifs de contribuer au développement d'outils de simulation de lasers et d'amplifications optiques à puits quantiques contraints des structures GaInAs/GaAs et GaInNAs/GaAs ainsi qu'à la compréhension des phénomènes physiques dont ils sont le siège.

La première partie de ce mémoire présente l'ensemble des modèles utilisés pour la simulation de la structure à puits quantique. Elle regroupe le calcul exact de la structure de bandes, le calcul de l'énergie de quantification et de transition ainsi que celui du gain optique des structures.

Dans la seconde partie, nous avons développé les calculs fondés sur un modèle physique qui prend notamment en compte l'influence de la contrainte sur la modification de la largeur de la bande interdite, l'énergie de transition et la longueur d'onde du puits quantique. Dans le cas de puits quantique contraint GaInAs/GaAs, il a été tout d'abord analysé comment pouvaient être choisies la largeur des puits et la concentration en gallium pour parvenir à une longueur d'onde d'émission de 980nm malgré les dérives dues aux mécanismes de remplissage de bandes et de renormalisation de la largeur de bande interdite.

Dans la troisième partie, nous avons vu que les propriétés optiques et électroniques des alliages nitrurés à faible bande interdite sont très particulières, car l'atome d'azote est très différent de l'atome d'arsenic auquel il se substitue. Ces différences sont à l'origine de la réduction de l'énergie de bande interdite avec l'incorporation d'azote, ce qui permet spécialement d'obtenir l'émission à 1.3µm. Le modèle d'anticroisement de bande, bien que sujet à discussion, permet d'estimer l'énergie des niveaux dans une structure quantique à base de GaInNAs de forme quelconque. Nous avons étudié l'évolution du gain optique en fonction de la longueur d'onde et l'évolution de la puissance de sortie du laser en fonction du courant d'injection. Dans le cas de puits quantique contraint GaInNAs/GaAs, il a été analysé comment pouvaient être désignées la largeur de puits, la composition d'indium et la concentration de l'azote pour arriver à une longueur d'onde d'émission de 1300nm ou à 1550nm pour les applications des fibres optiques en télécommunication.

La dernière partie, a consisté en la mesure des paramètres caractéristiques de lasers de type Fabry-Perot, DFB et VCSELs commerciaux et plus généralement de l'ensemble d'une liaison optique. Nous avons donc ainsi réalisé de nombreuses expérimentations sur des composants laser nous permettant d'appréhender les aspects purement liés à la manipulation et caractérisation de ces objets et d'en mesurer les différents paramètres distinctifs. Ceci nous a notamment permis de "visualiser" directement les grandeurs physiques que nous avons l'habitude de modéliser. Cet aspect a d'abord inclus une prise en main des différents équipements de caractérisation, qu'ils soient dans le domaine électrique ou optique, utilisés en mesure de composants et systèmes optoélectroniques dans le domaine des télécommunications optiques. La caractérisation de liens fibre optique a alors été effectuée principalement dans le domaine analogique, ce qui permet de chiffrer les performances des différents types d'émetteurs lasers.

La corrélation entre modèle théorique et caractérisations expérimentales ne peut toutefois être menée complètement, la structure des composants commerciaux ayant servis à l'expérimentation n'étant pas divulguée. Néanmoins, une concordance satisfaisante peut être obtenue.

En conclusion, dans la continuité de ces travaux, nous proposons une méthodologie d'analyse de diode laser à puits quantique contraint à base de GaInNAs/GaAs. La bonne adéquation entre le modèle que nous avons utilisé et les caractéristiques expérimentales d'un dispositif autorise l'analyse de son comportement et permet de dégager les paramètres physiques pertinents qui régissent ses performances. Elle pourrait comporter plusieurs évolutions visant à incorporer des modélisations physiques plus avancées prenant en compte d'autres phénomènes agissant sur le bon fonctionnement de la diode par exemple (les calculs des recombinaisons Auger, les excitons ...). Cette version peut être évidemment étendue à d'autres filières de matériaux par exemple les antimoniures (GaInNAsSb/GaAs). On peut aussi analyser plus précisément le comportement relatif de chaque puits dans une structure multipuits, l'effet du peuplement des barrières ou les mécanismes d'autoconfinement des porteurs.



## ANNEXE A1

A.1.1 Tableaux des paramètres physiques [1, 2].

	GaAs	InAs	GaN	InN
Paramètre de maille : a (Å )	5.6533	6.0583	4.46	5.02
L'énergie spin orbite : $\Delta_0$ (eV)	0.34	0.39	0.017	0.005
Potentiel hydrostatique de déformation a <sub>c</sub> (eV)	-7.17	-5.08	-6.17	2.65
Potentiel hydrostatique de déformation av (eV)	1.16	1.00	0.69	0.7
Potentiel de déformation de cisaillement : b (eV)	-2	-1.8	-2.0	1.2
Constante élastique : C <sub>11</sub> (Gpa)	122.1	83.29	293	187
Constante élastique : C <sub>12</sub> (Gpa)	56.6	45.26	159	125
Masse effective des électrons : $m_e(m_0)$	0.0632	0.0213	0.13	0.14
Masse effective des trous lourds : $m_{hh}(m_0)$	0.5	0517	0.806	0.8
Masse effective des trous légers : $m_{lh}(m_0)$	0.088	0.024	0.205	0.19
Bande interdite à 300°K : Eg (eV)	1.519	0.414	3.470	1.994
Indice de réfraction : n <sub>ref</sub>	3.62	3.89	2.39	2.73
Constante : $\alpha$	4.76.10 <sup>-4</sup>	$2.18.10^{-4}$	6.14.10 <sup>-4</sup>	$2.2.10^{-4}$
Constante : $\beta$	360	262	870	700
Référence du niveau d'énergie : Evav (eV)	-6.92	-6.67	-6.5	-5.4
$\delta_1$	2.85	20.4	3.07 <sup>e</sup>	3.72 <sup>g</sup>
δ2	2.1	8.3	0.86 <sup>e</sup>	1.26 <sup>g</sup>
δ <sub>3</sub>	25.7	22.2	25.4 <sup>g</sup>	29.9 <sup>g</sup>
$E_{P}(eV)$	28.1	21.5	25.0	25.0

Paramètres de Bowing

Matériau	InGaN	InGaAs	InNAs	GaNAs
C(eV)	1.4	0.51	4.22	20

A.1.2. Expression des paramètres

Pour les alliages ternaires ou quaternaires, les paramètres  $\Delta_0$ ,  $m_e$ ,  $m_{lh}$ ,  $m_{hh}$ , a,  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $a_v$ ,  $b_v$  et  $dE_g/dP$  sont déterminés à partir de relations type loi de Végard. Soit P un des paramètres ci-dessus, ona :

• ternaire type  $AB_xC_{1-x}$ 

$$P_{ABC} = x P_{AB} + (1 - x) P_{AC} \tag{A1.1}$$

• quaternaire type  $A_x B_{1-x} C_y D_{1-y}$ 

$$P_{ABCD} = y(1-x)P_{AC} + (1-x)(1-y)P_{AD} + xyP_{BC} + x(1-y)P_{BD}$$
(A1.2)

• quaternaire type  $A_x B_y C_{1-x-y} D$ 

$$P_{ABCD} = x P_{AD} + y P_{BD} + (1 - x - y) P_{CD}$$
(A1.3)

En l'absence de théorie physique aboutissant à une forme analytique reconnue de l'énergie de bande interdite de GaInAsP, on choisit d'adapter une forme quadratique conforme à l'idée que le quaternaire peut être considéré comme le mélange de deux ternaires de maille que le quaternaire.

Si sa maille est plus grande que celle d'InP, le quaternaire est considéré comme un mélange des ternaires  $Ga_{x1}In_{1-x1}As$  et  $InAs_{y1}P_{1-y1}$ , on remarque que [3]:

$$E_{g}(Ga_{x}In_{1-x}As_{y}P_{1-y}) = A(1-z) + zB - 0.256z(1-z)$$
(A1.4)

avec

 $A=0.36+0.625x_{1}+0.434x_{1}^{2}$   $B=0.36+0.897y_{1}+0.093y_{1}^{2}$   $1-y_{1}=2.1366x_{1}$   $(1-z)x_{1}=x$  $(1-y_{1})z=1-y$ 

Si sa maille est comprise entre celle de GaAs et d'InP, le quaternaire est considéré comme un mélange des ternaires  $Ga_{x1}In_{1-x1}As$  et  $Ga_{x2}In_{1-x2}P$  et on a :

$$E_{g}(Ga_{x}In_{1-x}As_{y}P_{1-y})=C(1-z)+zD-0.12z(1-z)$$

$$C=0.36+0.625x_{1}+0.434x_{1}^{2}$$

$$D=1.35+0.643x_{2}+0.786x_{2}^{2}$$
(A1.6)

Pour le cas du matériau Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>N<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub> les expressions du gap s'écrivent :

$$E_{ghh}^{c}(x, y) = E_{ghh}^{nc}(x, y) + \Delta E_{c}(x, y) + \Delta E_{hh}(x, y) + Q_{hh}(x, y)$$
(A1.7)

$$E_{glh}^{c}(x, y) = E_{glh}^{nc}(x, y) + \Delta Ec(x, y) + \Delta Elh(x, y) + Qlh(x, y)$$
(A1.8)

$$\Delta E_{c}(x, y) = 2ac(x, y)(1 - \frac{C_{12}(x, y)}{C_{11}(x, y)}) \mathcal{E}(x, y)$$
(A1.9)

$$\Delta Ehh(x, y) = -2av(x, y)(1 - \frac{C_{12}(x, y)}{C_{11}(x, y)})\varepsilon(x, y)$$
(A1.10)

 $\Delta Ehh(x,y) = \Delta Elh(x,y) \tag{A1.11}$ 

$$Qhh(x, y) = \delta(x, y)$$
(A1.12)

$$\delta(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\mathbf{b}(\mathbf{x}, \mathbf{y})(1 + \frac{2C_{12}(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{C_{11}(\mathbf{x}, \mathbf{y})})\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$
(A1.13)

$$Qlh(x,y) = \frac{1}{2} [\Delta(x,y) - \delta(x,y) - \xi]$$
(A1.14)

$$\xi(x, y) = \sqrt{\Delta^2(x, y) + 2\Delta(x, y)\delta(x, y) + 9\delta^2(x, y)}$$
(A1.15)

$$\Delta = -1.5E_{cis} + 0.5\Delta_{so}.\delta_0 \tag{A1.16}$$

$$\delta_0 = \left[1 - \sqrt{1 + 2\frac{E_{cis}}{\Delta_{so}} + 9\frac{E_{cis}}{\Delta_{so}^2}}\right]$$
(A1.17)

où  $\Delta_{s0}$  est le doublement spin-orbite,  $E_{cis}$  variation d'énergie due à la composante de cisaillement donnée par :

$$E_{cis} = b(\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{\parallel})$$
(A1.18)

#### A.1.3 Indice de réfraction

### A.1.3.1 Indice de réfraction dans le matériau massif

La variation des indices de réfraction des matériaux semi-conducteurs massifs sous le gap a été évaluée selon la formule de Sellmeier :

$$n = \sqrt{\alpha + \frac{\beta \lambda^2}{\lambda^2 - \gamma}}$$
(A1.19)

avec  $\lambda$  en micromètre

Pour les principaux binaires, les constantes  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  sont données dans le tableau cidessous [4-6].

Binaire	α	β	γ
GaAs	8.95	2.054	0.39
GaP	4.54	4.31	0.22
InAs	7.79	4.00	0.25
InP	7.255	2.316	0.392
AlAs	2.015	6.147	0.079

Tableau1 : Coefficients de Sellmeier pour les principaux binaires III.V

Les indices de réfraction pour les ternaires et pour les quaternaires sont ensuite calculés à partir des indices des binaires selon des lois de type Vegard.

• ternaire type AB<sub>x</sub>C<sub>1-x</sub>

$$n^{2} = xn_{AB}^{2} + (1 - x)n_{AC}^{2}$$
(A1.20)

• quaternaire type A<sub>x</sub>B<sub>1-x</sub>C<sub>y</sub>D<sub>1-y</sub>

$$n_{ABCD}^{2} = y(1-x)n_{AC}^{2} + (1-x)(1-y)n_{AD}^{2} + xyn_{BC}^{2} + x(1-y)n_{BD}^{2}$$
(A1.21)

• quaternaire type  $A_x B_y C_{1-x-y} D$ 

$$n_{ABCD}^2 = xn_{AD}^2 + yn_{BD}^2 + (1 - x - y)n_{CD}^2$$
(A1.22)

### A.1.3.2 Indice de réfraction dans le matériau puits quantique

Pour prendre en compte l'effet du confinement quantique sur l'indice de réfraction nous avons choisi le modèle de Tagaki [7] qui présente l'avantage d'être très général.

$$n^{2} = 1 + \frac{E_{0}E_{d}}{E_{0}^{2} - (h\nu)^{2}}$$
(A1.23)

avec

$$E_0 = 1.80E_g^{OW} + 0.90 \tag{A2.24}$$

$$\frac{E_d}{E_0} = 9.89\alpha_m.\beta_v, \qquad (A1.25)$$

où

 $\alpha_m = 0.76^u$ ,  $\beta_v = 0.82^w.1.26$ 

La formulation de l'indice de réfraction fait ainsi apparaître l'énergie de bande interdite effective du puits quantique.

A1.4 Calcul de la largeur effective d'un puits quantique

Il est possible de remplacer la fonction enveloppe réelle associée à une particule confinée dans un puits quantique de profondeur finie par une fonction enveloppe caractéristique d'un puits infini du type :

$$\phi_l(z) = \sqrt{\frac{2}{L_{efff}}} \sin(l \frac{\pi}{L_{eff}} z) \qquad avec \quad l = 1, 2, 3, ..., N \ et \ z \in [0; L_{eff}]$$
(A1.26)

Où  $L_{eff}$  est la largeur effective du puits qui permet de prendre en compte la pénétration de la fonction enveloppe dans les barrières.

On montre que la profondeur sur laquelle la fonction enveloppe s'étend dans les barrières est typiquement  $\frac{\hbar}{\sqrt{2m^*(V_0 - E_n)}}$  où m<sup>\*</sup> est la masse associée à la particule, V<sub>0</sub> la

profondeur du puits de potentiel et  $E_n$  l'énergie de confinement associée au niveau n. Par conséquent, pour le niveau lié n, la largeur effective du puits s'écrit :

$$L_{eff} = L_p + \frac{2\hbar}{\sqrt{2m^*(V_0 - E_n)}}$$
(A1.27)

A chacun des niveaux confinés correspond une largeur effective de puits quantique. Cependant, le fait de considérer une largeur effective particulière pour chaque niveau lié alourdit considérablement le calcul des facteurs de forme. Pour simplifier, nous utilisons une largeur effective moyennée sur l'ensemble des niveaux discrets, soit :

$$L_{eff} = L_p + \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} \frac{2\hbar}{\sqrt{2m^*(V_0 - E_n)}}$$
(A1.28)

## **REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES**

- T. Hakkarainen, J. Toivonen, M. Sopanen, and H. Lipsanen, GaInNAs quantum well structures for 1.55 mm emission on GaAs by atmospheric pressure metalorganic vapor phase epitaxy J. Cryst. Growth 234, 631, 2002.
- [2] N. Tansu, J.-Y. Yeh, and L. J. Mawst, High-performance 1200-nm InGaAs and 1300-nm InGaAsN quantum-well lasers by metalorganic chemical vapor deposition, IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron. Vol. 9, N°.5, pp. 1220- 1227, 2003.
   (2003).
- [3] O. Issanchou, Thèse de doctorat, N° d'ordre 2459, Université Paul Sabatier, Toulouse, (1996)
- [4] J. Buss and M.J. Adams, Sol. State. And Elect. Dev., 3,189, (1994).
- [5] R.E. Fern and A. Onton, Refractive Index of AlAs, J. Appl. Phy., Vol. 42, N°9, pp.3499-3500, 1971.
- [6] L. Chusseau, P. Martin, C. Brasseur, C. Alibert, Carrier-induced change due to doping in refractive index of InP: Measurements at 1.3 and 1.5 μm, Appl. Phys. Lett., Vol. 69, No. 20, pp. 3054-3056, 1996.
- [7] T. Takagi, Yamakoshi, Y.. Yamaura, M. Kondow, R. Matsushima, Development of a New Type Fault Locator Using the One-Terminal Voltage and Current Data, The Tokyo Electric Power Con, Vol. 101, N°8, pp 2892-2898, 1982.

Structure de rattachement : Université Saad Dahlab de Blida Nom : AISSAT Prénom : Abdelkader Poste occupé : Chargé de cours, Enseignant chercheur Adresse : 125 logts Bt c1 N°07 Soumaa Blida 09.000 Algérie Grade : chargé de recherche E-mail : sakre23@yahoo.fr Tel : 213 72 52 50 50 Fax : 213 25 43 38 50



#### **RESPONSABILITES**:

- 1- Responsable de laboratoire de physique année 1994-1996, Département de technologie
- 2- Chef de département DEUA année 1996-2001 Département d'électronique
- **3-** Directeur de la pédagogie chargé de la graduation poste graduation et de la recherche année 2001-2003, **Faculté des sciences de l'ingénieur**
- Membre de la commission paritaire des chargés de cours (4ans) (université Saad Dahlab de BLIDA)
- 5- Membre du conseil de discipline de la faculté des sciences de l'ingénieur depuis 2003
- 6- Reviewer dans la revue WSEAS Grèce 2007.

#### **COMMUNICATIONS**

- 1- Simulation du gain optique d'un laser à puits quantique
- Séminaire International à Halbe la Syrie novembre 2002
- 2- Modélisation et calcul du gain optique d'un laser à puits quantique contraint à base de Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As/InP Séminaire national CDTA Alger septembre 2003
- 3- Calcul du gain optique d'un laser à puits quantique contraint à base de Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As/InP Collogue International TELECOM' 2003 et 3<sup>è</sup> Journées Franco- Maghrébines des Micro-ondes et Leurs Applications Actes du colloque 15, 16, 17 octobre 2003 Marrakech- Maroc
- 4- Colloque International télécom'2005 et 4èmées Franco Maghrébines des Micro-ondes et leurs Applications JFMMA 23-25 Mars 2005, Rabat, Maroc
- 5- Séminaire international sur les métiers de la nouvelle Économie fondée sur le savoir Palais des Nations Club des pins Alger 24-26 janvier 2004

(Pr EL HADI KHALDI. ministre de la formation et de la l'enseignement professionnel)

- 6- Séminaire du conseil des enseignants supérieur Maghrébines le 5-6 décembre 2005, Oran, Algérie
- 7- The effect of nitrogen on the wavelength of a structure with strained quantum well containing Ga0.8In0.20N0.025AS0.975/GaAs,
- Damascus University Syria, November 13-15- 2006
- 8- Etude du coupleur optique GADC,19 et 20 Avril 2006, INPT, Maroc
- 9- Effet de la concentration de l'azote sur la longueur d'onde d'émission d'une structure à puits quantique contraint compressive à base de Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>N<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub>/GaAs" ICMNT06, Tizi- Ouzou Alegria, 19-23 Nov. 2006
- **10-** L'énergie de transition d'une structure à puits quantique contraint à base de GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N, 19 et 20 Avril2006, INPT, Maroc
- 11- Effet de la concentration de l'azote sur la bande de conduction d'une structure à puits quantique contraint compressive à base de  $Ga_xIn_{1x}N_yAs_{1-y}/GaAs$ " ICMNT06, Tizi-Ouzou Alegria, 19-23 Nov. 2006
- 12- Etudes des caractérisations spectrales du coupleur optique GADC Colloque TELICOM'2007 & 5émes JFMMA, 14-15 & 16 Mars '2007', Fès, Maroc
- 13- Gain optique d'un laser a puits quantique contraint à base de Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>N<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub>/GaAs ' SETIT 2007 international conference: Science of Electironics, Technologies of Information and Telecommunications March 25-29, 2007 Hammamet-Tunisia
- 14- Investigation of the Emission Wavelength of Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>N<sub>y</sub>As<sub>1-y</sub>/GaAs Compressive Strained Quantum Well Lasers 1.3 to 1.55μm, Sixth International Conference on Laser Science and Applications, ICLSA-07, January 15-18, 2007, Cairo, Egypt

#### **PUBLICATIONS**

- 1- Influence of dispersion on spectral characteristics of GADC optical filters." Optical and Quantum Electronics" Volume 38, N°8, June 2006.
- **2-** Transition energy Determination of a strained quantum well structure based on GaN/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N, Physical & Chemical News PCN abstracts (USA) INIST of CNRS (France) and British Library (England) 05 February 2007.
- **3-** The Effect of Nitrogen over the Energy Gap of a Structure with Strained Quantum Well Containing GaInNAs/GaAs, the Iranian Journal of Electrical and Computer Engineering (IJECE) indexée dans la base INSPECin (2007).