

N° d'ordre :

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



UNIVERSITE DJILLALI LIABES
FACULTE DES SCIENCES EXACTES
SIDI BEL ABBÈS

THESE DE DOCTORAT

Présentée par

BENICHOU Halima née BOUCHENAF

Spécialité : Sciences Physiques

Option : Physique Energétique et Matériaux

Intitulé

**Etude et Modélisation des Lasers à Boîtes
Quantiques à base des Matériaux Nitrurés**

Soutenue le : 15/05/2018

Devant le jury composé de :

<i>Président</i>	Zakia NABI	Professeur	Université de Sidi Bel Abbès
<i>Examineurs</i>	Habib RACHED	MCA	Université de Chlef
	Ahmed BOUHEKKA	MCA	Université de Chlef
<i>Directeur de thèse</i>	Badra BOUABDALLAH	Professeur	Université de Sidi Bel Abbès

Année universitaire : 2017/2018

Dédicaces

A la mémoire de mon grand père Abdallah et mon père Mohamed

A mon mari Boucif qui m'a soutenu jusqu' à la fin de ce travail

A mes adorables filles : Serine Ines, Assil et Rihem

A ma grande mère et toute ma famille

A tous ceux qu'ils me sont chers

Remerciements

Je remercie en premier lieu Dieu le tout puissant de nous avoir accordé la puissance et la volanté pour terminer ce travail.

J'exprime ma profonde gratitude à Madame Badra BOUABDALLAH, Professeur à l'Université Djilali Liabès de Sidi Bel-Abbès, qui m'a permis de réaliser ce travail, pour son suivi permanent, ses conseils, ses lectures attentives ainsi que l'esprit de recherche qu'il a su me transmettre.

Je remercie vivement Madame Zakia NABI, Professeur à l'Université Djilali Liabès de Sidi Bel-Abbès, pour l'honneur qu'elle me fait en acceptant la présidence du jury.

J'exprime ma vive reconnaissance à Mr Habib RACHED, et Mr Ahmed BOUHEKKA, Maitres de Conférences A à l'université de Hassiba Ben bouali de Chlef, pour l'honneur qu'ils me font de juger ce travail.

Pour finir, je remercie mon mari Boucif pour sa patience et son encouragement. Sans ton soutien, je n'y serais pas arrivé.

Résumé

Les boîtes quantiques semi-conductrices ont fait l'objet d'une attention très considérable ces dernières décennies en raison de leurs propriétés remarquables par rapport au puits quantique, où les porteurs de charges sont confinés dans les trois directions de l'espace. Ce confinement leur confère un spectre en énergie discret. Ces structures ont fait l'objet d'un avantage dans les lasers où leur utilisation donne lieu à des gains plus élevés et des densités de courant de seuil faibles.

Dans cette thèse, nous présentons une étude théorique d'optimisation de composants optoélectroniques lasers à boîtes quantiques à base des nitrures, famille très intéressante de matériaux semi-conducteurs III-V à large gap pour les applications optoélectroniques, car ils couvrent un large domaine de longueurs d'ondes allant de l'infrarouge à l'ultraviolet.

Au premier chapitre, nous rappelons les propriétés générales de ces matériaux binaires (GaN , AlN , InN) et leurs alliages ($InGaN$, $AlGaN$). Au deuxième chapitre, nous décrivons l'effet laser et nous donnons une description générale des boîtes quantiques. Dans le troisième chapitre, nous détaillons le modèle théorique suivi, pour aboutir aux caractéristiques des diodes lasers à boîtes quantiques. Au quatrième chapitre, nous présentons nos résultats de simulation et optimisation.

Mots clés : Lasers, Matériaux III-V, Boîte quantique, Gain optique.

ملخص

قد حظيت النقاط الكمونية لأشباه النواقل بقدر كبير من الاهتمام في العقود الأخيرة بسبب خصائصها الرائعة بالنسبة إلى البئر الكموني حيث تحبس حاملات الشحنة في الاتجاهات الثلاثة للفضاء. هذا الحبس يمنحهم طيفا من الطاقة المنفصلة، و تعد هذه الهياكل مفيدة في أشعة الليزر حيث يؤدي استخدامها إلى مكاسب أعلى مع خفض الكثافة الحالية للعتبة.

في إطار هذه الأطروحة، نقدم دراسة نظرية لتحسين الليزر الضوئية مع النقاط الكمونية على أساس مواد نيتريد، إذ تعتبر هذه عائلة مثيرة جدا للاهتمام من أشباه النواقل ذات الفجوة الواسعة بالنسبة للتطبيقات الضوئية، لأنها تغطي مجال واسع من الأطوال الموجية تتراوح ما بين الأشعة تحت الحمراء والأشعة فوق البنفسجية. في الجزء الأول من هذه الأطروحة ، ذكرنا بالخصائص العامة لمواد النيتريد الثنائية (GaN, AlN, InN) وسبائكها ($InGaN, AlGaN$).

وفي الجزء الثاني، قمنا بعرض تأثير الليزر وأعطينا وصفا عاما للنقاط الكمونية. كما قدمنا بالتفصيل النموذج النظري الذي يؤدي للوصول إلى خصائص الثنائيات الليزر مع النقاط الكمونية في الجزء الثالث. وفي الأخير قدمنا نتائجنا من المحاكاة والتحسين في الجزء الرابع.

الكلمات المفتاحية: الليزر، مواد III-V ، مربع الكم و الربح الضوئي.

Abstract

Semiconductor quantum dots have received considerable attention in recent decades because of their remarkable properties with respect to the quantum well, where charge carriers are confined in the three directions of space. This confinement gives them a spectrum in discrete energy. These structures have been advantageous in lasers where their use gives rise to higher gains and lower threshold current densities.

In this thesis, we present a theoretical study of optimization of optoelectronic lasers with quantum dots based on nitrides, a very interesting family of III-V wide-gap semiconductor materials for optoelectronic applications, as they cover a wide field of wavelengths ranging from infrared to ultraviolet.

In the first chapter, we recall the general properties of these binary materials (*GaN*, *AlN*, *InN*) and their alloys (*InGaN*, *AlGaN*). In the second chapter, we describe the laser effect and give a general description of quantum dots. In the third chapter, we detail the theoretical model followed to arrive at the characteristics of the laser diodes with quantum dots. In the fourth chapter, we present our results of simulation and optimization.

Key words: Lasers, III-V materials, Quantum box, Optical gain.

Table des matières

Dédicaces.....	i
Remerciements..	ii
Résumé.....	iii
Table des matières.....	vi
Liste des figures.....	x
Liste des tableaux.....	xiv
Nomenclature.....	xvi
Introduction Générale.....	1
Chapitre I : Propriétés des matériaux III-Nitrures	
I-1. Introduction.....	8
I-2. Historique des nitrures du groupe III	8
I-3. Propriétés générales des matériaux niturés.....	9
I-3-1. Propriétés structurales.....	9
I-3-2. Propriétés électroniques.....	13
I-3-3. Propriétés élastiques.....	19
I-4. Propriétés des alliages ternaires <i>InGaN</i> et <i>AlGaN</i>	21
I-4-1. Energie de bande interdite.....	21
I-4-2. Variation du gap en fonction de la température.....	22
I-4-3. Paramètres de maille.....	23
I-4-4. Indice de réfraction.....	24
I-5. Les techniques de croissance.....	26
I-6. Substrats pour le dépôt de nitrures.....	28
I-6-1. Substrat <i>GaN</i> massif pour l'homo-épitaxie.....	28
I-6-2. Substrats pour l'hétéro-épitaxie.....	30
I-7. Problèmes spécifiques des nitrures pour l'optoélectronique	31
I-7-1. Défauts de réseau.....	31
I-7-2. Solutions envisageables pour un matériau plus performant	32

I-8. Conclusion.....	33
Références.....	34

Chapitre II : Principes des lasers à boîtes quantiques

II-1. Introduction.....	41
II-2. Généralités sur les lasers.....	41
II-2-1. Interactions matière-rayonnement.....	41
II-2-2. Inversion de population.....	44
II-2-3. Les « ingrédients » du laser.....	47
II-2-4. Les différents types de pompage.....	48
II-2-5. Les pertes optiques internes.....	49
II-3. Théorie de laser à semi conducteur.....	50
II-3-1. Discontinuité des bandes aux interfaces des hétéro-structures.....	51
II-3-2. La densité d'état	52
II-3-3. Effet des contraintes mécaniques sur la structure de bandes	54
II-3-4. Confinement quantique.....	55
II-4. Propriétés des boîtes quantiques.....	59
II-4-1. Confinement des porteurs.....	59
II-4-2. Les dimensions caractéristiques des boîtes quantiques.	60
II-4-3. Transitions entre états confinés	61
II-4-4. Le schéma électronique d'une structure à BQ.....	62
II-4-5. Largeurs homogène et inhomogène des boîtes quantiques.....	63
II-5. Fabrication des boîtes quantiques.....	65
II-5-1. Lithographie.....	65
II-5-2. Technique par croissance épitaxiale.....	66
II-6. Conclusion.....	69
Références.....	70

Chapitre III : Approche physique et paramètres de calcul

III-1. Introduction.....	75
III-2. Niveaux d'énergie et fonction d'onde dans une boîte quantique.....	75
III-3. Elément de matrice de transition.....	79
III-4. Niveaux d'énergie d'une boîte quantique sous contrainte.....	80
III-5. La longueur d'onde d'émission dans les diodes lasers à boîtes quantiques	83
III-6. Notion de pseudo niveaux de Fermi.....	84
III-7. Emission et gain de la boîte quantique.....	85
III-7-1. Coefficients d'absorption et d'émission.....	85
III-7-2. Forme analytique du gain optique	87
III-7-3. Densité de porteurs à la transparence	87
III-7-4. Le gain différentiel	87
III-8. Le facteur de confinement optique	88
III-9. Gain modal.....	89
III-10. Condition de seuil, gain de seuil	90
III-11. La densité de courant.....	90
III-11-1. Le courant de seuil	90
III-11-2. Formule analytique du courant de seuil.....	92
III-11-3. Dépendance en température.....	94
III-12. Conclusion.....	95
Références.....	96

Chapitre IV : Résultats et discussions

IV-1. Introduction.....	100
IV-2. Organigramme de calcul.....	100
IV-3. La longueur d'onde d'émission dans les lasers à boîte quantique.....	102
IV-4. Modélisation du gain optique pour un laser à boîte quantique	103
IV-4-1. Spectre du gain d'émission.....	103
IV-4-2. Variation du gain optique en fonction de la densité de porteurs.....	106

IV-4-3. Variation du gain maximal en fonction de la densité de porteurs.....	108
IV-4-4. Variation du gain en fonction de la largeur de boites quantiques.....	109
IV-4-5. Variation du gain en fonction de la température.....	110
IV-4-6. Variation du gain max en fonction de la largeur des boites quantiques ...	111
IV-5. Le facteur de confinement.....	113
IV-5-1. Variation du facteur de confinement en fonction de la largeur de boites..	113
IV-5-2. Variation du facteur de confinement en fonction de la concentration d'Aluminium dans les couches de confinement.....	114
IV-6. Le gain modal	115
IV-6-1. Variation du gain modal en fonction de l'énergie d'émission.....	116
IV-6-2. Variation du gain modal maximal	116
IV-6-2-1. Pour différentes largeurs des boites quantiques	116
IV-6-2-2. Pour différentes valeurs de température.....	117
IV-6-3. Variation de gain modal maximal en fonction de nombre de plans des boites quantiques.....	119
IV-7. L'effet du dopage sur le gain.....	120
IV-8. L'effet de la contrainte sur le gain.....	122
IV-9. La densité de courant de seuil.....	124
IV-9-1. Gain modal maximal en fonction de densité de courant d'injection pour différentes largeurs des boites quantiques.....	125
IV-9-2. Influence de la largeur de boîte sur la densité de courant de seuil.....	126
IV-9-3. Influence de la longueur de cavité sur la densité de courant de seuil.....	127
IV-9-4. Influence de l'effet contrainte sur la densité de courant de seuil.....	128
IV-9-5. Influence de dopage sur la densité de courant de seuil.....	130
IV-10. Caractéristique d'une structure à boîte quantique optimale.....	131
Références.....	133
Conclusion Générale.....	135

Liste des figures

Figure I-1	Structures cristallines des nitrures d'éléments III.....	10
Figure I-2	Définition des orientations cristallographiques $[0001]$ et $[000\bar{1}]$ en fonction des polarités gallium et azote du GaN wurtzite.....	11
Figure I-3	Structures de bande de GaN , AlN et InN calculées par Christensen et al...	14
Figure I-4	Détails de la bande de valence autour du point Γ pour le GaN	15
Figure I-5	Bande interdite de divers semi-conducteurs en fonction de leur paramètre de maille.....	16
Figure I-6	Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la fraction molaire de l'Indium dans $In_xGa_{1-x}N$	21
Figure I-7	Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la fraction molaire de l'Aluminium dans $Al_xGa_{1-x}N$	21
Figure I-8	Influence de la température sur la variation de l'énergie de bande interdite en fonction de la fraction molaire de l'Indium.....	23
Figure I-9	Influence de la température sur la variation de l'énergie de bande interdite en fonction de la fraction molaire de l'Aluminium.....	23
Figure I-10	Variation des paramètres de maille en fonction de la fraction molaire de l'Indium dans $In_xGa_{1-x}N$	24
Figure I-11	Variation des paramètres de maille en fonction de la fraction molaire de l'Aluminium dans $Al_xGa_{1-x}N$	24
Figure I-12	Variation de l'indice de réfraction en fonction de fraction molaire de l'Indium dans $In_xGa_{1-x}N$	25
Figure I-13	Variation de l'indice de réfraction en fonction de fraction molaire de l'Aluminium dans $Al_xGa_{1-x}N$	25
Figure I-14	Variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde et fraction molaire de l'Aluminium dans $Al_xGa_{1-x}N$	26
Figure II-1	Représentation schématique des transitions électroniques possibles dans un modèle à deux niveaux.....	43
Figure II-2	Transitions possibles suivant la statistique de Fermi-Dirac.....	45

Figure II-3	Schéma d'un système laser.....	47
Figure II-4	Illustration des bandes d'énergie et les gaps d'énergie, pour un gap direct et indirect suivant les groupes de symétries.....	50
Figure II-5	Les différents paramètres d'une hétéro-interface, de type-I.....	51
Figure II-6	Représentation schématique de la structure de bande d'un matériau a) non contraint, soumis à une contrainte bi-axiale b) en tension et c) en compression.....	55
Figure II-7	Représentation des différentes possibilités de confinement dans un SC et densités d'états électroniques $D(E)$ correspondantes dans le cas du SC massif (a), du puits quantique (b), du fil quantique (c) et de la boîte quantique (d).....	58
Figure II-8	Diagramme de bande schématique d'une boîte quantique semi-Conductrice de bande interdite directe E_g^2 enterrée dans une matrice de plus grande bande interdite E_g^1	59
Figure II-9	Schéma électronique d'un îlot quantique (QD), de sa couche de mouillage (WL) et du substrat.....	63
Figure II-10	Spectres de photoluminescence d'une boîte quantique unique à différentes températures.....	64
Figure II-11	Spectres de photoluminescence à basses températures réalisés sur un nombre variable de boîtes quantiques jusqu'à une boîte unique.....	65
Figure II-12	Trois modes de croissance sur un substrat : Franck van der Merwe (FM), Volmer-Weber (VW) et Stranski-Krastanow (SK).	67
Figure III-1	(a) : boîte quantique, (b) : représentation selon la direction x d'un puits de potentiel infini.....	76
Figure III-2	Variation du premier niveau d'énergie de confinement des électrons et des trous (E_{c1} et E_{v1}) et de transition E_{tr} (e-h) en fonction de la taille boîte quantique à base de GaN	79
Figure III-3	Diagramme de bande d'une boîte quantique à une direction $GaN/AlGaN$ utilisé dans le calcul.....	83

Figure III-4	Densité d'états de la bande de conduction (CB) et de la bande de valence (VB) pour le système 2D idéal (PQs) et le système 0D idéal (BQs), et densité d'états occupés (zones hachurées et points noirs (électrons)) au seuil de transparence (a), et au delà du seuil (b).....	92
Figure III-5	Schéma d'un plan de boîtes quantiques.....	93
Figure IV-1	Organigramme de calcul suivi dans ce travail.....	101
Figure IV-2	Variation de la longueur d'onde d'émission du GaN en fonction de la taille de boîte quantique.....	102
Figure IV-3	Variation de la longueur d'onde d'émission du GaN en fonction de la fraction molaire de l'Indium dans la couche active.....	102
Figure IV-4	Spectre du gain optique dans le $In_xGa_{1-x}N$	105
Figure IV-5	Spectre du gain optique pour différentes densités de porteurs.....	107
Figure IV-6	Gain max en fonction de la densité de porteurs injectés dans le $In_xGa_{1-x}N$ de $L = 60 \text{ \AA}$: a) $x = 0$, b) pour différentes compositions d'Indium.....	108
Figure IV-7	Spectre du gain optique en fonction de la largeur de boîtes.....	109
Figure IV-8	Spectre du gain optique en fonction de la température.....	111
Figure IV-9	Gain max en fonction de la densité de porteurs injectés dans le GaN pour différentes largeurs de boîte.....	112
Figure IV-10	Variation du facteur de confinement en fonction de l'énergie d'émission de la structure laser à boîte quantique (BQ) ($GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$) pour différentes largeurs.....	113
Figure IV-11	Variation du facteur de confinement en fonction de la largeur de boîtes de la structure ($GaN/Al_yGa_{1-y}N$) pour différentes compositions d'Aluminium.....	114
Figure IV-12	Evolution du gain modal en fonction de l'énergie d'émission pour différentes densités des porteurs.....	116
Figure IV-13	Variation du gain modal maximal en fonction de la densité de porteurs d'injection pour différentes largeurs des boîtes quantiques.....	117
Figure IV-14	Variation du gain modal maximal en fonction de la densité de porteurs d'injection pour différentes valeurs de températures de la structure $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ de largeur $L = 60 \text{ \AA}$	118

Figure IV-15	Variation du gain modal maximal en fonction de la densité du courant d'injection pour différents nombres de plans des boites quantiques.....	119
Figure IV-16	L'influence du dopage sur le spectre de gain optique d'une boite quantique à base de GaN de largeur $L = 60 \text{ \AA}$	121
Figure IV-17	Comparaison du gain max entre GaN dopé P et N	121
Figure IV-18	Spectre du gain optique d'une structure laser à BQ $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ soumise à une contrainte de tension et une contrainte de compression.....	123
Figure IV-19	Comparaison du gain maximal en fonction de la densité de porteurs pour une structure laser à boite quantique $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ contrainte et non contrainte.....	123
Figure IV-20	Variation du gain modal maximal en fonction de la densité de courant d'injection pour différentes largeurs de boites.....	125
Figure IV-21	Variation de la densité de courant en fonction de la largeur de boites quantiques.	127
Figure IV-22	Variation de la densité de courant de seuil en fonction de la longueur de la cavité.....	128
Figure IV-23	Variation du gain modal max en fonction de la densité de courant d'injection d'une structure laser à boite quantique $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ soumise à une contrainte de tension et une contrainte de compression.....	129
Figure IV-24	Variation du gain modal max en fonction de la densité de courant d'injection d'une structure laser à boite quantique $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ non dopée et dopée N et P	130

Liste des tableaux

Tableau I-1.	Paramètres de maille à 300 K en phase hexagonale.....	12
Tableau I-2.	Coefficient de dilatation thermique des III-nitrures en phase hexagonale.	13
Tableau I-3.	Energie de gap des III-nitrures hexagonale.....	16
Tableau I-4.	Masse effective des électrons et des trous.....	17
Tableau I-5.	Constantes piézoélectriques et valeurs de la polarisation spontanée.....	18
Tableau I-6.	Coefficients élastiques des III-nitrures en phase hexagonale.....	20
Tableau I-7.	Coefficients de Varshni des III-nitrures en phase hexagonale.....	22
Tableau I-8.	Indice de réfraction des III-nitrures en phase hexagonale.....	24
Tableau I-9.	Coefficients de Sellmeier pour l'indice de réfraction ordinaire dans les III-nitrures en phase hexagonale.....	25
Tableau III-1.	Paramètres des énergies et valeurs de potentiels de déformation et constantes d'élasticité de GaN et AlN	82
Tableau IV-1.	Caractéristiques d'émission d'une structure laser à boîte quantique de $L = 60 \text{ \AA}$ à base de $In_xGa_{1-x}N$ pour différentes compositions d'Indium..	106
Tableau IV-2.	Gain max pour différentes densités de porteurs.....	107
Tableau IV-3.	Caractéristiques d'émission d'une structure laser à boîte quantique à Base de $In_xGa_{1-x}N$ pour différentes largeur de boîte et pour $x = 0$	110
Tableau IV-4.	Caractéristiques d'émission d'une structure laser à boîte quantique de 60 \AA de GaN pour différentes valeurs de températures.....	112
Tableau IV-5.	Facteurs de confinement optique pour différentes largeurs de boîtes quantiques.....	114
Tableau IV-6.	Valeurs des facteurs de confinement optique de la structure $GaN/Al_yGa_{1-y}N$ pour $L = 70 \text{ \AA}$ et $L = 100 \text{ \AA}$	115
Tableau IV-7.	Les valeurs de la densité de transparence de la structure $GaN/Al_{0,2}Ga_{0,8}N$ pour différentes largeurs de boîtes.....	117
Tableau IV-8.	Valeurs de la densité de courant de seuil pour différents nombres de plans de boîte avec le gain de saturation correspondant.....	119
Tableau IV-9.	Caractéristiques d'émission pour 60 \AA du laser à boîte quantique à base de $In_xGa_{1-x}N$ en fonction du dopage pour $x = 0$	122

Tableau IV-10.	Caractéristiques d'émission d'une structure laser à boîte quantique à Base de $In_xGa_{1-x}N$ pour $L = 60 \text{ \AA}$ et pour $x = 0$ sous l'effet de contrainte.....	124
Tableau IV-11.	Les valeurs de la densité courant de transparence de la structure $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ pour différentes largeurs de boîtes.....	126
Tableau IV-12.	Valeurs de densité de courant de seuil d'une structure laser à boîte quantique $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ soumise à une contrainte de tension et une contrainte de compression pour $L = 100 \text{ \AA}$	129
Tableau IV-13.	Valeurs de densité de courant de seuil d'une structure laser à boîte quantique $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ non dopée et dopée N et P pour $L = 100$..	130
Tableau IV-14.	Données et caractéristiques d'un résonateur à boîte quantique à base de $In_xGa_{1-x}N/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$	132

Nomenclature

Symbole	Unité	Désignation
ω	$rad. s^{-1}$	La fréquence angulaire de la lumière
λ	μm	La longueur d'onde
c	$m. s^{-1}$	La vitesse de vide
k	$J. K^{-1}$	Constante de Boltzmann
T	K	La température
h	$eV. s$	Constante de Planck
ϵ_0	$F. m^{-1}$	Constante diélectrique
μ_0	$Kg. m. A^{-2}. s^{-2}$	La perméabilité du vide
n_r	--	L'indice de réfraction de la boîte quantique
n_c	--	L'indice de réfraction de la couche de confinement
ρ_{cv}	cm^{-3}	La densité d'états de paires électron-trou
Γ	--	Facteur de confinement optique
τ_{in}	$p. s$	Le temps de relaxation inter-bande
τ_s	$n. s$	La durée de vie du porteur
a_0 et c_0	Å	paramètres de maille à l'équilibre
$\langle R_{cv}^2 \rangle$	eV	L'élément matrice du moment dipolaire
m_e^*	Kg	La masse effective des électrons
m_v^*	Kg	La masse effective des trous
E_{fc}	eV	Pseudo niveau de fermi dans la bande de conduction
E_{fv}	eV	Pseudo niveau de fermi dans la bande de valence
E_g	eV	L'énergie de gap
$f_c(E)$ et $f_v(E)$		Les probabilités d'occupation suivant la statistique de Fermi-Dirac
L	nm	La largeur de boîte quantique
L_c	mm	La longueur de la cavité
α_i	cm^{-1}	Les pertes internes
N_{tr}	cm^{-3}	Densité de porteurs de transparence
N_{th}	cm^{-3}	Densité des porteurs au seuil
J_{th}	A/cm^{-2}	Densité de courant de seuil
g	cm^{-1}	Gain optique
g_m	cm^{-1}	Gain modal
g_{th}	cm^{-1}	Gain de seuil
a	cm^{-1}	Gain différentiel
α_i	cm^{-1}	Coefficient de pertes optiques internes

α_{ext}	cm^{-1}	Coefficient de pertes d'extrémités
η_i	--	Rendement quantique interne
$R_{abs}(\nu)$	--	Le taux de transition
$R_{spon}(\nu)$	--	Le taux d'émission spontanée
$R_{stim}(\nu)$	--	Le taux d'émission stimulée
B_{12}	--	Le coefficient d'absorption d'Einstein
A_{21}	--	Le coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée
B_{21}	--	Le coefficient d'Einstein d'émission stimulée
D_j	eV	Les potentiels de déformation
a_{cz}	eV	Potentiel de déformation de la bande de conduction parallèle à l'axe c
a_{ct}	eV	Potentiel de déformation de la bande de conduction perpendiculaire à l'axe c

Liste des symboles utilisés dans le contexte.

Abréviation	Désignation
HVPE	Epitaxie en phase vapeur d'hydrure
MOCVD	Metalorganic chemical vapor deposition
EJM, MBE	Molecular beam epitaxy
LDA	Local Density Approximation
DFT	La théorie de la fonctionnelle de la densité
EPVH	Epitaxie en phase vapeur par la méthode des halogénures
EPVOM	Epitaxie en phase vapeur par pyrolyse d'organo-métalliques
RHEED	Reflection high energy electron diffraction
H.P.N.S.G	High Pressure Nitrogen Solution Growth
TDI	Technology and Devices International
GPa	Giga Pascal

Liste des notations utilisées dans le texte.

*INTRODUCTION
GENERALE*

Introduction générale

En physique des semi-conducteurs, les systèmes de basse dimensionnalité sont largement étudiés depuis les années 70. Les puits quantiques [1], où les porteurs sont confinés suivant une seule direction de l'espace, ont fait l'objet de nombreuses applications en micro-électronique et en optoélectronique. Dans ce dernier domaine, le confinement des porteurs permet une meilleure efficacité radiative comparé au simples jonctions P-N. Les diodes lasers à base de puits quantiques sont ainsi utilisées quotidiennement (lecteurs de disques numériques, télécommunications, etc...).

Les diodes lasers de faible dimension et de faible consommation sont les dispositifs clés dont le développement a été le facteur essentiel des récents progrès [2]. En effet, les premières diodes lasers ont été réalisées avec succès par G. Fenner et son équipe et trois autres groupes en 1962, soit M.I. Nathan et al, R. Rediker et al ainsi que N. Holonyak et al. [3]. Les trois premiers groupes ont produit des diodes lasers avec une jonction P-N dans le semi conducteur *GaAs* émettant dans l'infrarouge et le quatrième a utilisé un alliage de *GaAsP* permettant d'obtenir l'émission laser visible par l'œil humain. Ces composantes optoélectroniques ont été commercialisées avant la fin de l'année 1962. En 1963, l'idée d'utiliser une hétérostructure double de semi-conducteurs dans les diodes lasers pour capturer les électrons dans une mince région active a été proposée par H. Kroemer [4] et indépendamment par R. F. Kazarinov et Zh. I. Alferov [5]. Et ce n'est qu'avec l'introduction des diodes lasers à puits quantiques et la forte réduction des densités de courant de seuil, de l'ordre de 50 A/cm^2 , obtenue en premier par Zh. I. Alferov qui a reçu avec H. Kroemer le prix Nobel de physique de l'année 2000 pour « avoir développé les hétéro-structures semi-conductrices utilisées en électronique de haute vitesse et en optoélectronique » [6], que le marché des diodes lasers explosa.

Dans les années 80, la course à la miniaturisation et l'intégration des dispositifs a mené à la découverte des nanostructures de dimensionnalité encore plus réduite, dont notamment les boîtes quantiques où le mouvement des porteurs est quantifié selon les trois dimensions. Une étude théorique de l'absorption de lumière par une sphère semi-conductrice qui prédit la présence d'états d'énergie discrets et localisés pour les particules contenues dans les sphères

conformément à la théorie de la mécanique quantique a été publiée par A. L. Efros en 1982 [7]. Et dans cette même année, les travaux publiés par Y. Arakawa et H. Sakaki de l'université de Tokyo introduisent l'idée de confiner les porteurs de charges en trois dimensions pour obtenir des états localisés dans les diodes lasers en prédisant les avantages d'une réduction de la densité de courant nécessaire pour obtenir de l'émission laser et une meilleure stabilité en température [8]. L'effet de confiner les porteurs en une dimension avait conduit à une première amélioration des performances pour les diodes lasers [9]. Dans le travail d' Y. Arakawa et H. Sakaki , ils ont proposé d'augmenter le nombre de dimensions spatiales qui confinent les porteurs produisant ainsi des fils quantiques et ultimement des points quantiques (boîtes quantiques). Le point fort de leur travail est la démonstration expérimentale qu'un confinement bidimensionnel des porteurs de charge diminue effectivement la sensibilité à la température de la densité de courant nécessaire pour obtenir de l'émission laser. En 1986, Asada a estimé que le maximum du gain théorique d'une boîte quantique est dix fois plus élevé que celui d'un puits quantique de dimension équivalente à température ambiante [10].

Il est évident que l'intérêt de ces boîtes est énoncé dès 1982, mais ce n'est qu'au début des années 1990 que les structures lasers à boîtes quantiques avec des propriétés optiques raisonnables ont pu être élaborées par épitaxie [11]. Les premières démonstrations de ces diodes lasers à boîtes quantiques ont été faites par N. N. Ledentsov et al. [12] ainsi que N. Kirstader et al. [13] avec un spectre d'émission laser quasi-monochromatique dans l'infrarouge près de $1\ \mu\text{m}$. Peu de temps après, une diode laser à point quantique émettant dans le visible près de $0.7\ \mu\text{m}$ a été réalisée par l'équipe du Dr Simon Fafard au Conseil national de recherche du Canada [14].

Les lasers à base des boîtes quantiques font l'objet d'études poussées depuis environ 25 ans du fait de leurs propriétés physiques originales et remarquables principalement liées au confinement des porteurs en trois directions [8], en termes de gain optique élevé, faible courant de seuil, faible sensibilité à la température. De plus, l'émission laser de ces boîtes peut avoir lieu dans une large bande spectrale du fait de la dispersion en taille des boîtes quantiques.

Les longueurs d'ondes couvertes par ces dispositifs actuels se situent dans le proche et le moyen infrarouge. Pour atteindre les courtes longueurs d'onde, il faut de nouveaux systèmes de matériaux avec une grande discontinuité en bande de conduction. Les hétéro-structures à base de nitrures d'éléments III (GaN , AlN , InN) avec une discontinuité de potentiel en bande de conduction de 1.8 eV pour GaN/AlN , se sont imposées vers la fin des années 90 comme les meilleurs candidats prometteurs dont l'élaboration sous forme de couches minces a fait des progrès considérables ces dernières années.

Dans ce travail, on s'intéresse à une étude de modélisation et d'optimisation des diodes lasers à boîtes quantiques à base des matériaux nitrurés $InGaN/AlGaN$. Le but de cette étude est d'analyser les propriétés des boîtes quantiques à base de GaN pour concevoir une structure à hautes performances en s'attachant à plusieurs points importants comme la détermination de la longueur d'onde, les énergies de quantification, le gain optique, le facteur de confinement, le gain modal, les caractéristiques gain-courant de la structure étudiée. Ces différents points sont décortiqués dans cette thèse.

Dans le premier chapitre, nous abordons les généralités sur les principales propriétés structurales, optiques et électroniques des matériaux nitrurés binaires GaN , AlN , InN et ternaires $InGaN$, $AlGaN$ qui rendent ces matériaux attractifs pour les applications en optoélectronique et qui nous servent aussi dans nos calculs.

Le deuxième chapitre consiste à présenter en premier lieu les principes généraux relatifs aux lasers, nous montrons aussi les effets de la réduction de la dimensionnalité sur la densité d'état. En outre, une description générale des boîtes quantiques partant de l'effet de confinement jusqu'aux techniques de croissance y sont détaillées.

Le modèle théorique suivi pour déterminer les caractéristiques courant-gain des diodes lasers à boîtes quantiques est détaillé en troisième chapitre, passant par le calcul des niveaux d'énergies quantifiés, la probabilité de transition, le coefficient du gain optique ainsi que le gain modal.

Dans le quatrième chapitre, on présente nos résultats de modélisation et d'optimisation en étudiant le comportement des boîtes quantiques *InGaN/AlGaN*, vis-à-vis la densité de porteurs injectés, la largeur des boîtes, la température, la densité de courant d'injection, l'effet de dopage et l'effet de la contrainte. Enfin, nous terminons notre travail par une conclusion générale et perspectives.

Références

- [1] G. Bastard. « Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures ». Les Editions de Physique, Les Ulis (1988).
- [2] B. Saint-Cricq, « Diodes laser à puits quantique : Modélisation physique et Réalisation par épitaxie par jets moléculaires de dispositifs *GaAs/GaAlAs* », thèse de doctorat, Université Paul Sabatier de Toulouse, France (1987).
- [3] R. D. Dupuis, *Optics and Photonics News* **15**, 30 (2004).
- [4] H. Kroemer, *Proc. IREE* **51**, 1782 (1963).
- [5] R. A. Chirakadze, R. I. Chikovani and A. Z. Ivanovich, Semiconductor light-emitting diode and method for producing same, US Patent (1974).
- [6] Press release: The 2000 Nobel Prize in physics, The Nobel Foundation, <http://nobelprize.org/physics/laureates/2000/press.html>
- [7] A. L. Efros and A. L. Efros, *Sov Phys Semicond+* **16**, 772 (1982).
- [8] Y. Arakawa and H. Sakaki, *Appl Phys Lett*, **40**, 939-641 (1982).
- [9] R. Dingle and C. H. Henry, Quantum Effects in Heterostructure lasers, U.S. Patent 3982207 (1976).
- [10] M. Asada, Y. Miyamoto and Y. Suematsu, *IEEE J. Quantum Electron.* Qe-**22**, 1915 1986.
- [11] D. Guimard, J. Tatebayashi, M. Nishioka, T. Yang, S. Tsukamoto and Y. Arakawa, techniques de l'ingénieur. *Electronique* **1**, (2006).
- [12] N. N. Lendentsov, V. M. Ustinov, A. Y. Egorov, A. E. Zhukov, M.V. Maksimov, I. G. Tabatadze and P.S. Kopev, *Semiconductors+*, **28**, 832 (1994).
- [13] N. Kirstaedter, N. N Lendentsov, M. Grundmann, D. Bimberg, V. M. Ustinov, S.S. Ruvimov, M.V. Maximov, P.S. kopev, Z.I. Alferov, U. Richter, P. Werner, U. Gosele and J. Heydenreich, *Electronics let*, **30**, 1416 (1994).
- [14] S. Fafard, K. Hinzer, S. Raymond, M. Dion, J. McCaffrey, Y. Fenga and S. Charbonneau, *Science* **274**, 1350 (1996).

CHAPITRE I

Propriétés des matériaux

III-Nitrures

Chapitre I

Propriétés des matériaux III-Nitrures

I-1. Introduction.....	8
I-2. Historique des nitrures du groupe III	8
I-3. Propriétés générales des matériaux nitrurés.....	9
I-3-1. Propriétés structurales.....	9
I-3-2. Propriétés électroniques.....	13
I-3-3. Propriétés élastiques.....	19
I-4. Propriétés des alliages ternaires <i>InGaN</i> et <i>AlGaN</i>	21
I-4-1. Energie de bande interdite.....	21
I-4-2. Variation du gap en fonction de la température.....	22
I-4-3. Paramètres de maille.....	23
I-4-4. Indice de réfraction.....	24
I-5. Les techniques de croissance.....	26
I-6. Substrats pour le dépôt de nitrures.....	28
I-6-1. Substrat <i>GaN</i> massif pour l'homo-épitaxie.....	28
I-6-2. Substrats pour l'hétéro-épitaxie.....	30
I-7. Problèmes spécifiques des nitrures pour l'optoélectronique	31
I-7-1. Défauts de réseau.....	31
I-7-2. Solutions envisageables pour un matériau plus performant	32
I-8. Conclusion.....	33
Références.....	34

I-1. Introduction

Les nitrides d'éléments III sont des semi-conducteurs III-V à gaps directs, formés d'atomes d'azote et d'éléments de la colonne III de la classification périodique de Mendeleïev il s'agit des composés GaN , AlN et InN ainsi que leurs alliages ($AlGaN$, $InGaN$). Cette famille de semi-conducteurs présente un grand intérêt en optoélectronique puisqu'elle permet de couvrir une gamme spectrale étendue, allant de l'infrarouge à l'ultraviolet. Contrairement au silicium et aux composés arséniures, GaN et AlN sont particulièrement stables thermiquement et chimiquement, ce qui en fait d'excellents candidats pour l'utilisation dans des conditions adverses, par exemple en électronique de puissance.

Dans ce chapitre, nous présentons les généralités sur les principales propriétés structurales, optiques et électroniques des matériaux nitridés d'éléments III, qui seront exploitées par la suite dans le modèle analytique de calcul des paramètres des boîtes quantiques aux chapitres qui viennent.

I-2. Historique des nitrides du groupe III

Le développement des nitrides du groupe III peut être résumé en quatre phases.

- La 1^{ère} phase du développement des composés III-N correspond à la première partie du 20^{ème} siècle. Bien que Fichter, Johnson et al. et Juza et al. aient synthétisé de l' AlN dès 1907 [1], du GaN en 1932 [2] et de l' InN en 1938 [3], beaucoup plus tôt que les semi-conducteurs classiques type silicium et $GaAs$. Aucun progrès significatif n'a pu être rapporté dans ce domaine avant la fin des années 1960 : la principale cause était la grande difficulté, à l'époque, de synthétiser les cristaux de nitrides de groupe III [4].
- La 2^{ème} phase historique se situe entre 1960 et 1980. Grâce au développement de techniques modernes de croissance épitaxiale, il est devenu possible de réaliser des couches minces de GaN par épitaxie en phase vapeur d'hydruure (HVPE) [5]. Ces réalisations ont été rapidement suivies par le premier dépôt chimique en phase vapeur à partir de précurseurs organométalliques (MOCVD) [6], puis par l'épitaxie par jets moléculaires (EJM ou molecular beam epitaxy : MBE) de GaN [7]

respectivement en 1971 et 1974. D'ailleurs, en 1971 la première observation de l'émission stimulée à partir d'aiguilles de *GaN* a été réalisée [8], préfigurant la fabrication d'une diode laser de longueur d'onde bleu-violet 20 ans plus tard. La première croissance épitaxiale d'*AlN* a été réalisée quant à elle sur saphir par Yoshida et al. en 1975 [9]. La qualité des cristaux de *GaN* de l'époque était suffisante pour permettre l'étude de leurs propriétés optiques.

- La 3^{ème} phase du développement des nitrides de groupe III, couvrant les années 1980, peut être considérée comme la période charnière pendant laquelle deux avancées fondamentales ont été apportées. La première a été l'introduction de la notion de couche tampon à basse température permettant d'accommoder les désaccords de paramètres de maille, typiquement une couche très mince d'*AlN* (< 10 nm) permettant la croissance de couches minces de *GaN* de très faible rugosité sur un substrat de type silicium ou saphir (Yoshida et al. en 1983 [10]). Elle a été suivie par la réalisation de couches de *GaN* fortement épitaxiées (Amano et al. en 1986 [11]).
- La 4^{ème} phase correspond à la période allant de 1990 jusqu'à nos jours. Elle a connu les avancées les plus considérables et spectaculaires en termes de recherche et développement dans ce domaine [4]. Elle a notamment abouti à la commercialisation de la première diode électroluminescente bleue à base de *GaN* en 1993 [12] et à la réalisation d'une diode laser toujours à base de *GaN* par les équipes d'Akasaki et al. en 1995 [13] et Nakamura et al. en 1996 [14].

I-3. Propriétés générales des matériaux nitrurés

I-3-1. Propriétés structurales

I-3-1-1. Phases cristallines

Les nitrides d'éléments III : *GaN*, *AlN*, *InN* et leurs alliages se présentent principalement sous deux phases cristallines : la structure wurtzite (hexagonale) et la structure zinc-blende (cubique). Ces composés, représentés sur la figure I-1.

a) La structure wurtzite

La structure wurtzite présente une symétrie hexagonale avec un paramètre de maille c correspondant à la hauteur du prisme et un paramètre de maille a correspondant au côté de l'hexagone de base. Cette structure appartient au groupe d'espace $P6_3mc$, et résulte d'un empilement de couches compactes de type $AaBbAaBb$ selon la direction $[0001]$. Le réseau cristallin complet peut être représenté par deux réseaux hexagonaux compacts décalés de $(0\ 0\ 3/8c)$, un réseau constitué d'atomes d'azote interpénétrant un même réseau constitué d'atomes d'éléments du groupe III, tels que des atomes de gallium, d'aluminium ou encore d'indium.

b) La structure blende de zinc

Elle appartient au groupe d'espace $F\bar{4}3m$ (système cristallin cubique) correspondant à deux réseaux cubiques faces centrées occupés l'un, par les atomes d'azote, et l'autre par ceux de l'élément III. Ces deux réseaux sont décalés l'un de l'autre de $(1/4\ 1/4\ 1/4)$ du paramètre de maille a dans le plan. Elle peut également être vue comme un empilement compact de couches successives $AaBbCcAaBcCc$ selon la direction $[111]$.

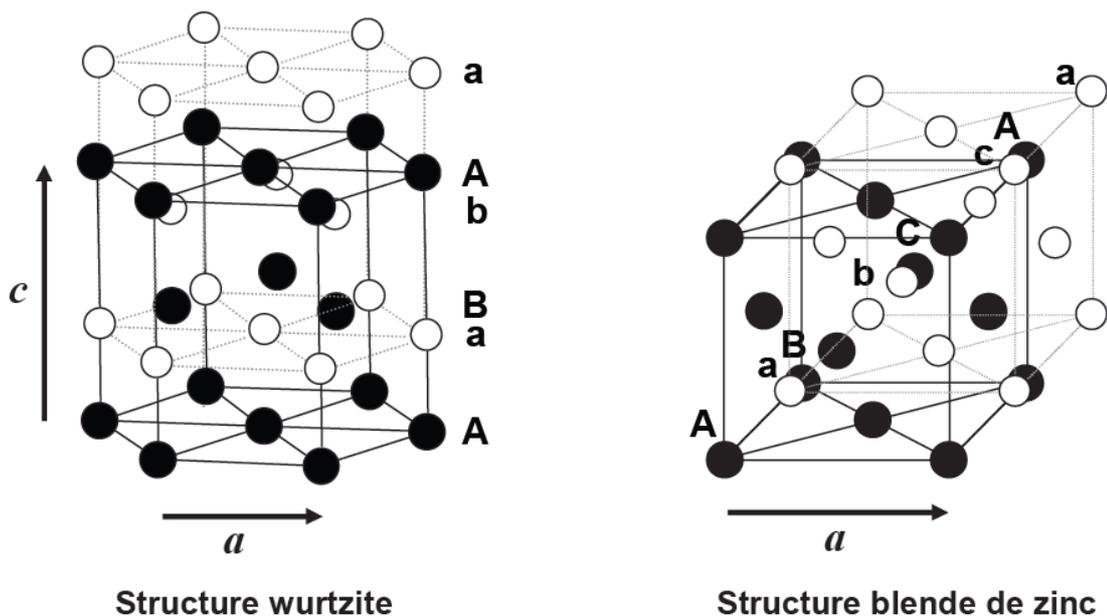


Figure I-1 : Structures cristallines des nitrures d'éléments III.

Les deux phases sont très proches : les différences dans l'environnement d'un atome donné ne se manifestent qu'au niveau des troisièmes voisins. Nous allons dès lors nous concentrer sur la phase wurtzite des nitrures.

I-3-1-2. Polarité

Dans la structure wurtzite comme les directions $[0001]$ et $[000\bar{1}]$ ne sont pas équivalentes, on définit une polarité métal et une polarité azote pour différencier les deux orientations. Par convention, l'axe $[0001]$ est orienté du métal vers l'azote. A la figure I-2, nous avons schématisé les deux situations : les structures faites selon l'orientation $[0001]$ sont dites à polarité métal (*Ga*, *Al*...), et celles faites selon $[000\bar{1}]$ à polarité azote. La polarité d'une couche ne nous renseigne pas sur la nature des atomes en surface, c'est la minimisation de l'énergie de surface qui contrôle ce paramètre (très dépendant des reconstructions de surface).

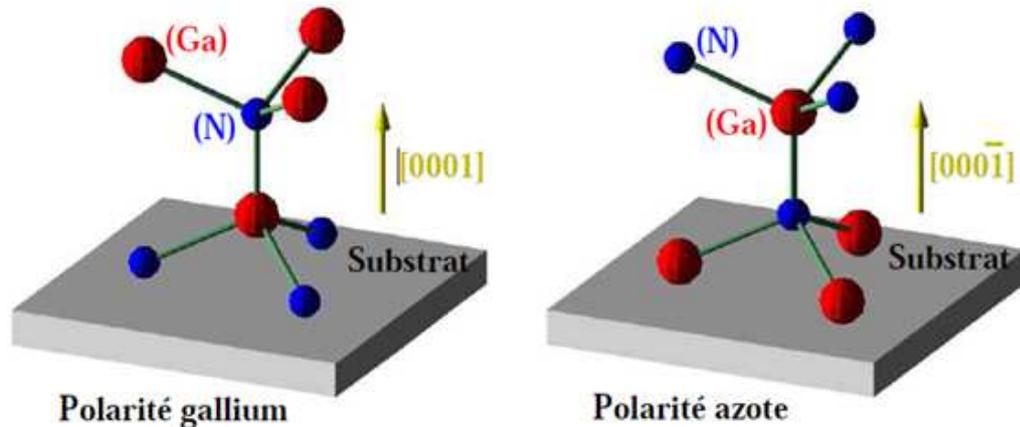


Figure I-2 : Définition des orientations cristallographiques $[0001]$ et $[000\bar{1}]$ en fonction des polarités gallium et azote du *GaN* wurtzite.

I-3-1-3. Paramètres de maille

Les paramètres de mailles de la phase hexagonale non contrainte sont relativement bien connus. Le paramètre c/a est important car il représente une mesure de la séparation relative des deux réseaux hexagonaux qui s'interpénètrent pour former la structure wurtzite. La structure est idéale quand elle est composée de tétraèdres réguliers, ce qui est le cas lorsque $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}} \approx (1.633)$ [15].

Paramètres	<i>GaN</i>	<i>AlN</i>	<i>InN</i>
$a(\text{Å})$	3.189	3.112	3.545
$c(\text{Å})$	5.185	4.982	5.703
c/a	1.626	1.601	1.609
u/c	0.377	0.382	0.375

Tableau I-1. Paramètres de maille à 300 K en phase hexagonale [16].

I-3-1-4. Coefficients de dilatation thermique

Tout matériau soumis à un changement de température se déforme : c'est le phénomène de la dilatation thermique. Il convient d'en tenir compte lorsque l'on étudie les propriétés des semi-conducteurs à des températures différentes mais également lors de la croissance du matériau car celle-ci se fait à haute température. Ainsi, une couche hétéro-épitaxiée complètement relaxée à la température de croissance peut être contrainte à la température ambiante.

Les coefficients de dilatation thermique permettent d'évaluer la déformation de la maille cristalline en fonction de la variation de température.

Coefficient de dilatation thermique	<i>GaN</i>		<i>AlN</i>		<i>InN</i>		Réf
	298K	1000K	298K	1000K	298K	600K	
$\Delta a/a(10^{-6}K^{-1})$	4.3	5.3	3.0	6.5	3.0	3.7	[17]
	3.93	5.454	2.989	6.497	--	--	[18]
$\Delta c/c(10^{-6}K^{-1})$	3.8	4.6	2.2	5.5	4.0	5.7	[17]
	3.52	4.748	2.182	5.507	--	--	[18]

Tableau I-2. Coefficient de dilatation thermique des III-nitrures en phase hexagonale.

Les valeurs tirées de [17] sont expérimentales. Celles tirées de [18] sont les résultats d'une modélisation.

I-3-2. Propriétés électroniques

I-3-2-1. Structure de bandes

Les semi-conducteurs *GaN*, *AlN*, *InN* en phase hexagonale sont à gap direct. Le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situés au point Γ de la zone de Brillouin. Les diagrammes de bande dans les nitrures ont été calculés par différents auteurs [19 – 24]. La figure I-3 présente les structures de bandes pour *GaN*, *AlN* et *InN* calculées par Christensen et al. [24] en utilisant la méthode de la densité locale (LDA pour Local Density Approximation).

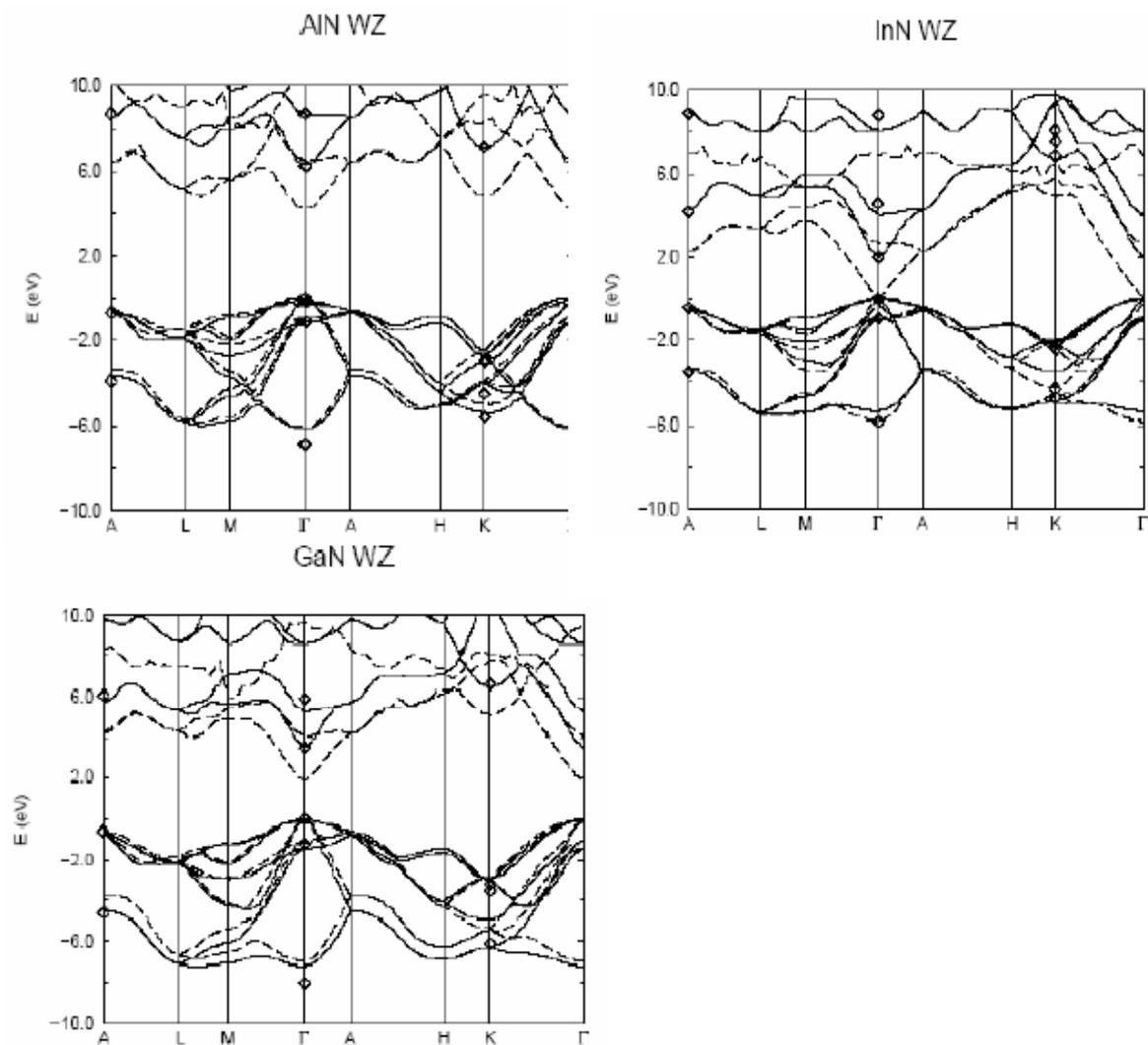


Figure I-3 : Structures de bande de *GaN*, *AlN* et *InN* calculées par Christensen et al [24].

Au voisinage du point Γ , la bande de conduction est unique alors que la bande de valence se subdivise en trois bandes nommées HH, LH et CH cette séparation est due à deux facteurs (figure I-4) :

- **le champ cristallin** (bande CH).
- l'interaction **spin-orbite** (bande des trous lourds HH et bande des trous légers LH).

A ces trois bandes correspondent trois types de trous qui peuvent interagir avec les électrons de la bande de conduction pour former des excitons.

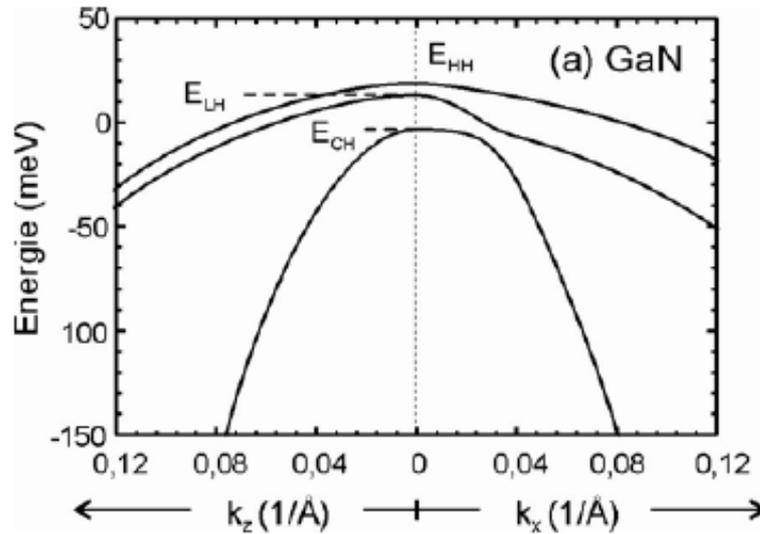


Figure I-4 : Détails de la bande de valence autour du point Γ pour le *GaN* [25].

I-3-2-2. Energie de la bande interdite

La valeur de la bande interdite E_g constitue un paramètre essentiel pour la fabrication de dispositifs. Les premières mesures de la bande interdite de *GaN* à basse température, qui datent des années 1970 [26, 27] ont donné des valeurs ~ 3.5 eV. Depuis, le gap des nitrides a été le sujet de nombreuses études [28 – 34]. La largeur de la bande interdite d' *AlN* correspond aux longueurs d'onde dans l'UV profond (6.2 eV où ~ 200 nm à 300K), tandis que celle du *GaN* correspond à des longueurs d'onde situées dans le proche ultraviolet (354 nm, 3.5 eV à 300K). Concernant le *InN*, il reste jusqu'à présent une incertitude sur sa valeur de l'énergie de gap, qui est actuellement estimée entre 0.65 et 1.2 eV [33, 34].

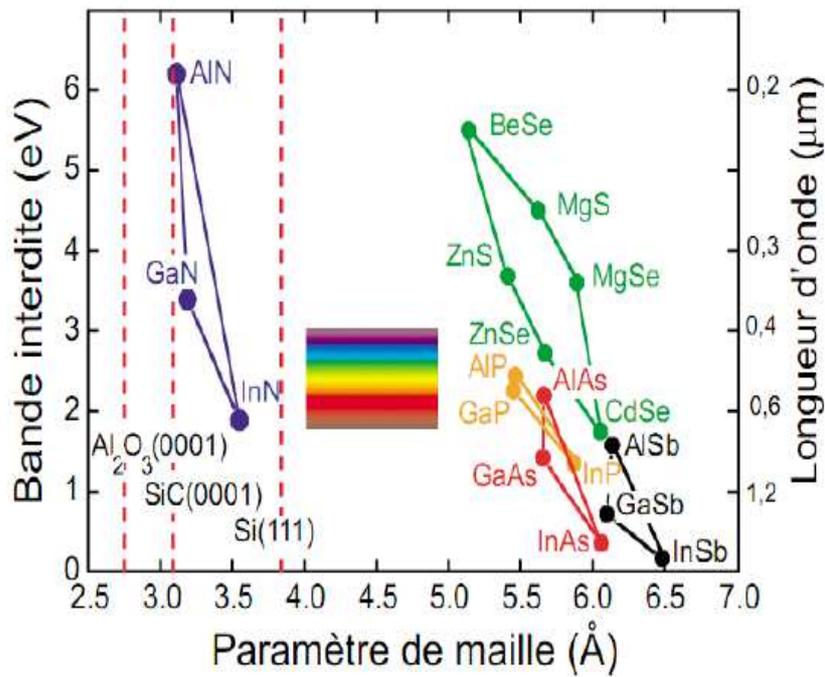


Figure I-5 : Bande interdite de divers semi-conducteurs en fonction de leur paramètre de maille [35].

La figure I-5 montre la valeur de l'énergie de la bande interdite des principaux semi-conducteurs binaires en fonction de leur paramètre de maille.

	<i>GaN</i>	<i>AlN</i>	<i>InN</i>
E_g à 0K (eV)	3.51 [36]	6.25 [36]	0.78 [36]
E_g à 300K (eV)	3.43 [37]	6.2 [37]	0.8 [37, 38]

Tableau I-3. Energie de gap des III-nitrides hexagonale.

I-3-2-3. Masse effective des porteurs

Les masses effectives des porteurs dans un semi-conducteur sont directement reliées à la structure de bande de celui-ci ; elles sont proportionnelles à l'inverse de la courbure des bandes. Il est intéressant de noter que la masse effective des électrons dans un semi-conducteur à gap direct varie peu avec la direction cristallographique, et représentera donc une valeur moyenne suivant les différentes directions. Il existe dans la littérature de nombreuses valeurs issues de calculs ou de mesures expérimentales des masses effectives électroniques dans le *GaN* hexagonal : la communauté des nitrides s'accorde aujourd'hui sur la valeur de $0.20 m_0 \pm 0.02$.

En ce qui concerne les valeurs des masses effectives des trous dans les nitrides ; les choses sont plus compliquées que pour les électrons car d'après les résultats théoriques, ces masses effectives sont fortement dépendantes de la direction cristallographique. Nous répertorions dans le tableau suivant les valeurs afférentes aux masses effectives des trous et des électrons des binaires *GaN*, *AlN*, *InN*.

	<i>GaN</i>	<i>AlN</i>	<i>InN</i>
m_e^*/m_0	0.2	0.3	0.07
m_{hh}^*/m_0	0.61 – 1	1.14	1.63

Tableau I-4. Masse effective des électrons [16] et des trous [39].

I-3-2-4. Polarisation interne et piézoélectricité

A cause de la nature ionique de la liaison métal-azote et de l'absence de centre d'inversion, les nitrides en phase wurtzite sont caractérisés par la présence d'une polarisation interne intense qui consiste en deux contributions : la polarisation spontanée et la polarisation piézoélectrique.

Les barycentres des charges positives (portées par les atomes de métal) et négatives (portées par les atomes d'azote) ne superposent pas dans la cellule élémentaire de wurtzite et forment un ensemble de dipôles électriques orientés selon l'axe *c*. Ainsi, une polarisation électrique macroscopique apparaît et cela même dans une structure idéale [40]. Bernardini et al. [41] montrent que la polarisation spontanée dans les nitrides est élevée. Cette polarisation se

manifeste aux interfaces du matériau avec le vide où avec un autre matériau de nature différente.

Outre la polarisation interne (spontanée), les nitrures III possèdent également un caractère piézoélectrique, qui apparaît lors de l'application d'une contrainte qui fait varier la distance entre les barycentres de charges positives et négatives dans la maille élémentaire.

En l'absence de polarisation externe, la polarisation des matériaux à structure wurtzite, P est donnée par la sommation de la polarisation interne P_{sp} et la polarisation piézoélectrique induite par les déformations présentes dans le matériau $P_{piézo}$:

$$P = P_{sp} + P_{piézo} \quad (\text{I-1})$$

La polarisation piézoélectrique peut s'exprimer sous la forme :

$$P_{piézo} = e_{33}\varepsilon_{zz} + e_{31}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \quad (\text{I-2})$$

Avec

e_{33} et e_{31} : les coefficients piézoélectriques du matériau ($C \cdot m^{-2}$),

ε_{xx} : la déformation dans le plan définie par $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = (a - a_0)/a_0$,

ε_{zz} : la déformation selon l'axe c , définie par $\varepsilon_{zz} = (c - c_0)/c_0$,

a_0 et c_0 : les paramètres de maille à l'équilibre (Å).

	<i>GaN</i>	<i>AlN</i>	<i>InN</i>
$e_{31}(C/m^2)$	-0.35	-0.5	-0.57
$e_{33}(C/m^2)$	1.27	1.79	1.97
$P_{sp}(C/m^2)$	-0.029	-0.081	-0.032

Tableau I-5. Constantes piézoélectriques et valeurs de la polarisation spontanée [16].

I-3-3. Propriétés élastiques

Les propriétés des semi-conducteurs dépendent dans une large mesure de leur état de contrainte et des déformations du réseau cristallin. En effet, toute déformation entraîne une modification des positions relatives des atomes les uns par rapport aux autres.

Dans le domaine de l'élasticité, contraintes et déformations sont reliées par la loi de Hooke :

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl} \quad (\text{I-3})$$

Où σ_{ij} , C_{ijkl} , ε_{kl} sont les tenseurs respectifs de contrainte, de déformation et d'élasticité. Ce dernier se simplifie, dans la wurtzite en une matrice 6x6 des constantes élastiques C_{ij} .

Cette matrice comporte six éléments non nuls dont cinq indépendants : C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} , C_{44} , C_{66} . La relation entre tenseurs de contraintes d'élasticité et de déformation devient :

$$\bar{\sigma} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} \bar{\varepsilon} \quad (\text{I-4})$$

L'axe polaire c étant choisi comme axe z . Dans le cas d'une contrainte biaxiale, seuls les éléments diagonaux de $\bar{\varepsilon}$ sont conservés, et on obtient :

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{\perp} = \frac{a-a_0}{a_0} \quad (\text{I-5})$$

$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{\parallel} = \frac{c-c_0}{c_0} \quad (\text{I-6})$$

Où a et c , a_0 et c_0 , sont les paramètres de maille du réseau respectivement avec et sans contraintes. Les deux composantes restantes du tenseur des déformations sont reliées par la relation :

$$\varepsilon_{\parallel} = -2 \frac{C_{13}}{C_{33}} \cdot \varepsilon_{\perp} \quad (\text{I-7})$$

Les coefficients d'élasticité font encore l'objet de controverses et les différentes mesures expérimentales donnent des résultats très différents.

	<i>GaN</i>	<i>AlN</i>	<i>InN</i>
C_{11} (Gpa)	390	396	223
	396	398	271
C_{12} (Gpa)	145	137	115
	144	140	124
C_{13} (Gpa)	106	108	92
	100	127	94
C_{33} (Gpa)	398	373	224
	392	382	200
C_{44} (Gpa)	105	116	48
	91	96	46
Références	[16, 41, 43]	[16, 43, 44]	

Tableau I-6. Coefficients élastiques des III-nitrides en phase hexagonale.

I-4. Propriétés des alliages ternaires $InGaN$ et $AlGaN$

I-4-1. Energie de bande interdite

Dans le cas des alliages ternaires, l'énergie de la bande interdite est calculée à partir de la formule suivante [45]:

$$E_g^{A_xB_{1-x}N} = x.E_g^{AN} + (1-x).E_g^{BN} - x(1-x).b^{A_xB_{1-x}N} \quad (I-8)$$

Où $b^{A_xB_{1-x}N}$ est le terme de non-linéarité de l'énergie de la bande interdite, plus connu sous le nom de paramètre de courbure (*bowing*).

$b = 1.6$ pour le $InGaN$ et $b = 0.7$ pour le $AlGaN$ [46].

Les équations de variation de l'énergie de gap des deux alliages s'écrivent :

$$E_g(In_xGa_{1-x}N) = 1.6.x^2 - 4.33x + 3.51 \quad (I-9)$$

$$E_g(Al_xGa_{1-x}N) = 0.7.x^2 + 2.04x + 3.51 \quad (I-10)$$

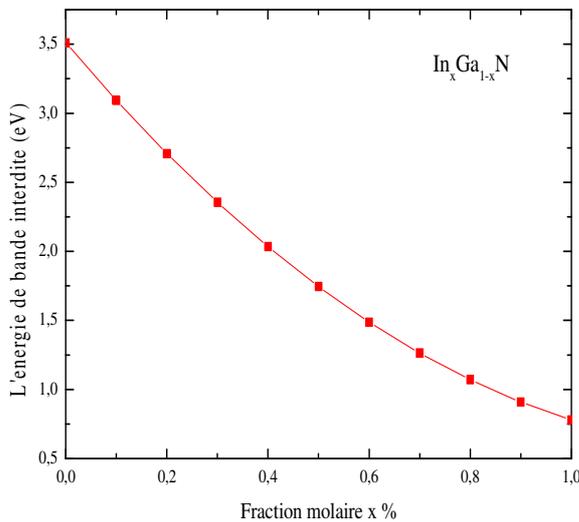


Figure I-6 : Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la fraction molaire de l'Indium dans $In_xGa_{1-x}N$.

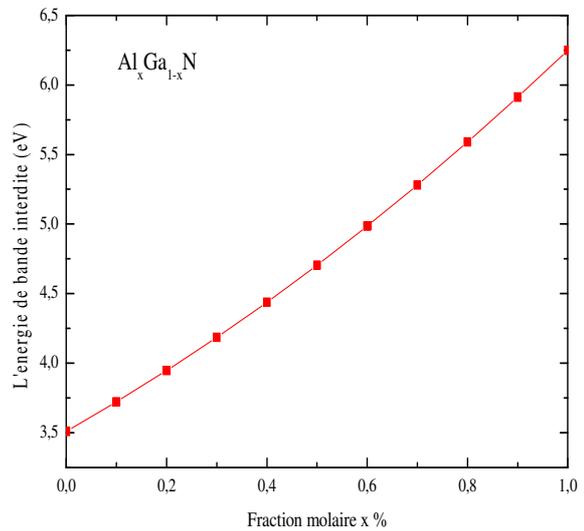


Figure I-7 : Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la fraction molaire de l'Aluminium dans $Al_xGa_{1-x}N$.

I-4-2. Variation du gap en fonction de la température

L'énergie de la bande interdite des composées nitrides dépend de la température selon l'équation de Varshni :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha.T^2}{(\beta+T)} \quad (\text{I-11})$$

Où $E_g(0)$ est l'énergie du gap à 0 K, et α et β sont des constantes déterminées à partir de mesures de photoluminescence, d'absorption ou encore d'ellipsométrie [47, 48]. Les valeurs rapportées dans la littérature sont regroupées dans le tableau I-7.

	<i>GaN</i>	<i>AlN</i>	<i>InN</i>
$\alpha\left(\frac{\text{meV}}{\text{K}}\right)$	0.909	1.799	0.245
$\beta(\text{K})$	830	1462	624

Tableau I-7. Coefficients de Varshni des III-nitrides en phase hexagonale [16].

Les coefficients de Varshni des alliages $Al_xGa_{1-x}N$, $In_xGa_{1-x}N$ peuvent souvent être approximés par interpolation linéaire (loi de Vegard) des coefficients de *GaN*, *AlN* et *InN* selon l'expression suivante :

$$\alpha_{A_xB_{1-x}C} = x\alpha_{AC} + (1-x)\alpha_{BC} \quad (\text{I-12})$$

Avec

x : Fraction molaire de la composante *A* .

α_{ij} : Paramètres de coefficients binaires.

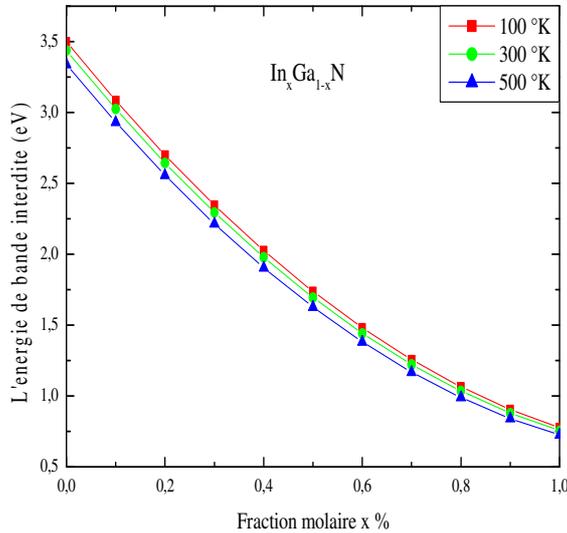


Figure I-8 : Influence de la température sur la variation de l'énergie de bande interdite en fonction de la fraction molaire de l'Indium.

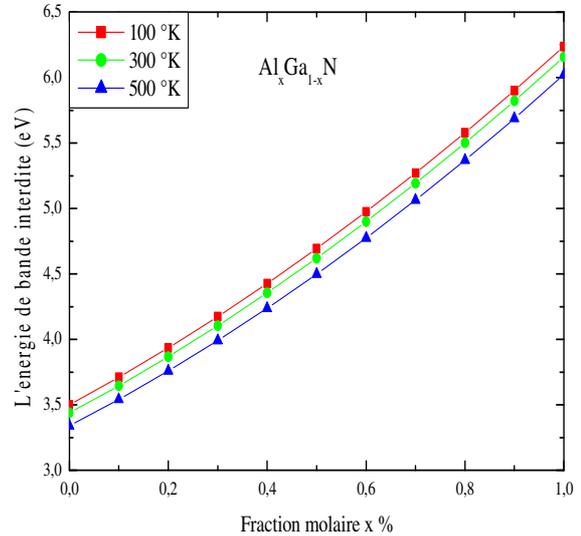


Figure I-9 : Influence de la température sur la variation de l'énergie de bande interdite en fonction de la fraction molaire de l'Aluminium.

I-4-3. Paramètres de maille

Nous avons utilisé la loi de Vegard pour les paramètres de maille a et c des alliages $In_xGa_{1-x}N$ et $Al_xGa_{1-x}N$.

- Pour $In_xGa_{1-x}N$:

$$a(In_xGa_{1-x}N) = 3.189 \cdot (1 - x) + 3.545 \cdot x \quad (I-13)$$

$$c(In_xGa_{1-x}N) = 5.185 \cdot (1 - x) + 5.703 \cdot x \quad (I-14)$$

- Pour $Al_xGa_{1-x}N$:

$$a(Al_xGa_{1-x}N) = 3.189 \cdot (1 - x) + 3.112 \cdot x \quad (I-15)$$

$$c(Al_xGa_{1-x}N) = 5.185 \cdot (1 - x) + 4.982 \cdot x \quad (I-16)$$

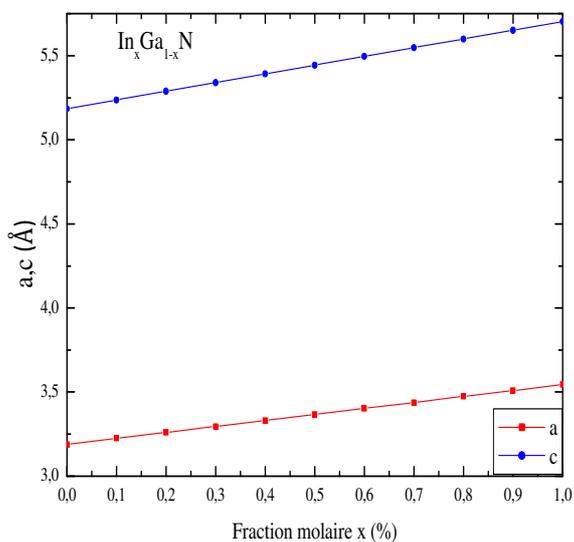


Figure I-10 : Variation des paramètres de maille en fonction de la fraction molaire de l'Indium dans $In_xGa_{1-x}N$.

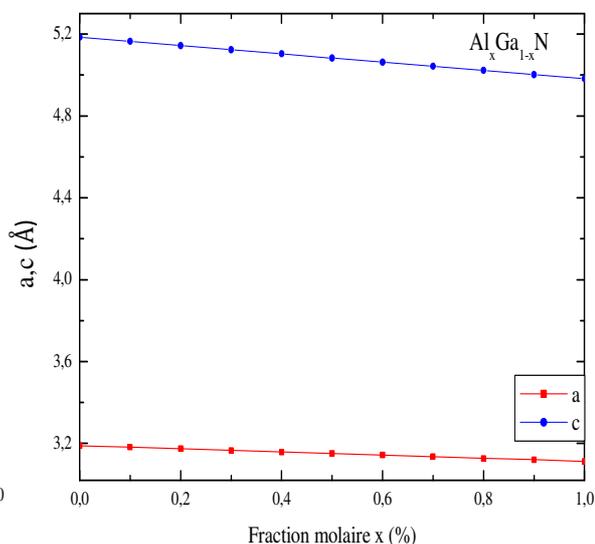


Figure I-11 : Variation des paramètres de maille en fonction de la fraction molaire de l'Aluminium dans $Al_xGa_{1-x}N$.

I-4-4. Indice de réfraction

La connaissance de l'indice de réfraction est utile lorsque l'on étudie des structures laser car le confinement optique, et donc la propagation des photons dans le guide d'onde, en dépendent. Les propriétés optiques des nitrures en phase hexagonale sont anisotropes, ce qui se traduit par une biréfringence uniaxiale. Il y a donc deux indices de réfraction : un indice ordinaire correspondant à une polarisation parallèle à l'axe [0001] et un indice extraordinaire correspondant à une polarisation dans le plan (0001). Toutefois, on pourra en première approximation négliger l'anisotropie et ne considérer que l'indice ordinaire [49] illustré dans les figures I-12, I-13.

Le tableau suivant représente les valeurs d'indice de réfraction des nitrures binaires GaN , AlN et InN .

	GaN	AlN	InN
n	2.67	2.03	3.05

Tableau I-8. Indice de réfraction des III-nitrures en phase hexagonale [50].

Encore, avec l'utilisation de la loi de Vegard, nous trouvons pour les alliages ternaires :

$$n(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = 0.38.x + 2.67 \quad (\text{I-17})$$

$$n(\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) = -0.64.x + 2.67 \quad (\text{I-18})$$

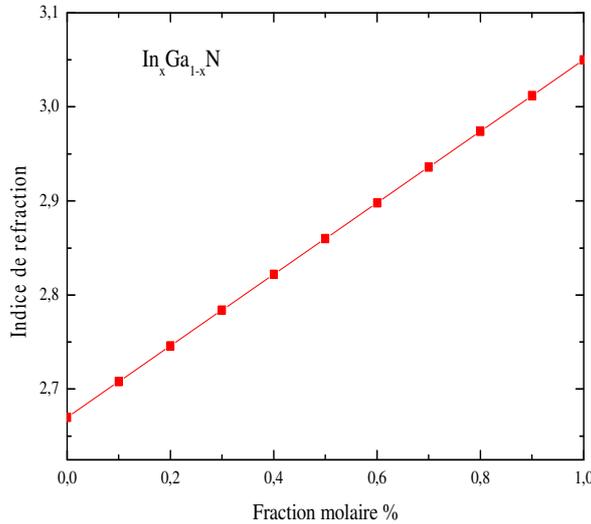


Figure I-12 : Variation de l'indice de réfraction en fonction de la fraction molaire de l'Indium dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

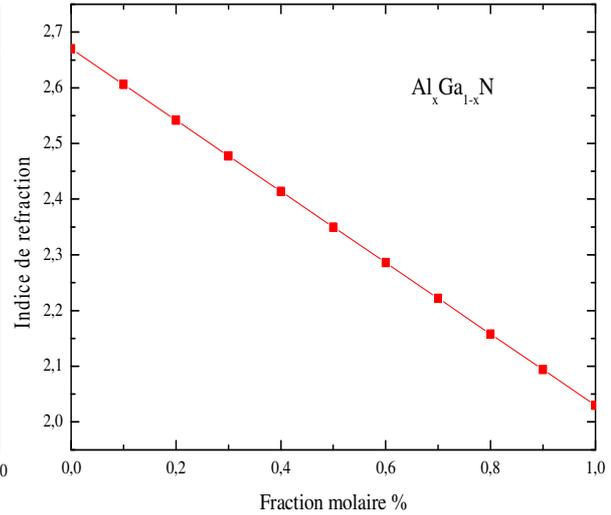


Figure I-13 : Variation de l'indice de réfraction en fonction de la fraction molaire de l'Aluminium dans $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

La variation en fonction de la longueur d'onde de l'indice de réfraction ordinaire dans la gamme de transparence est décrite par une loi de type Sellmeier :

$$n(\lambda) = \sqrt{a + \frac{b\lambda^2}{\lambda^2 - c^2}} \quad (\text{I-19})$$

	<i>GaN</i>	<i>AlN</i>
Domaine de longueurs d'onde	364 – 600 nm	300 – 600 nm
<i>a</i>	5.15	1.00
<i>b</i>	0.35	3.12
<i>c (nm)</i>	339.8	138.0

Tableau I-9. Coefficients de Sellmeier pour l'indice de réfraction ordinaire dans les III-nitrides en phase hexagonale (d'après [49]).

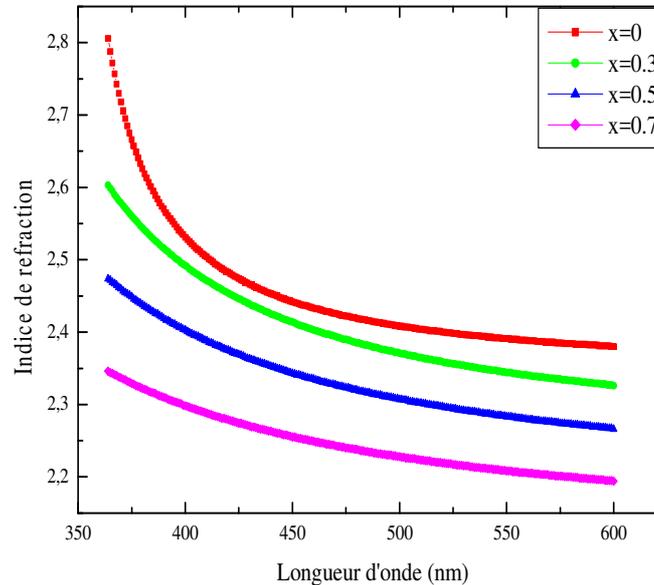


Figure I-14 : Variation de l'indice de réfraction en fonction de la longueur d'onde et fraction molaire de l'Aluminium dans $Al_xGa_{1-x}N$.

I-5. Les techniques de croissance

Les principales techniques actuellement utilisées pour la fabrication des nitrides sont l'épitanie en phase vapeur par la méthode des halogénures (EPVH), l'épitanie en phase vapeur par pyrolyse d'organo-métallique (EPVOM), et l'épitanie par jets moléculaires (EJM). L'EPVH a été historiquement la première technique de croissance de GaN . En 1969, Maruska et al ont fabriqué les premiers monocristaux de GaN [51]. La qualité cristalline de ces premières couches était mauvaise et la concentration résiduelle d'électrons élevée.

A l'heure actuelle la principale technique industrielle utilisée pour la croissance des hétérostructures des nitrides est l'EPVOM. Cette technique permet la réalisation des couches d' AlN , GaN , InN ainsi que les alliages ternaires ($AlGaN$ et $InGaN$) avec de bonnes caractéristiques en termes de qualité cristalline, dopage résiduel et mobilité électronique [52]. En ce qui concerne les hétéro-structures, les systèmes les plus largement étudiés sont les puits

quantiques $InGaN/GaN$ qui sont à la base des diodes électroluminescentes bleues actuellement commercialisées [53].

En raison du fort désaccord de maille entre GaN et AlN (2.5 %), initialement, beaucoup de travaux ont porté sur les hétéro-structures de $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ à faible concentration d' Al . La croissance des hétéro-structures et des puits quantiques à haute concentration d'aluminium de bonne qualité a été réalisée récemment par EPVOM [54].

La croissance par MOCVD des quaternaires $AlGaInN$ a aussi été rapportée [55]. Cet alliage présente la possibilité d'ajuster à la fois la bande interdite et le paramètre de maille pour minimiser la contrainte ou obtenir la croissance accordée en maille sur le GaN .

Les vitesses de croissance dans la technique EJM sont généralement plus faibles qu'en EPVOM [52]. Ceci peut se révéler avantageux pour obtenir des interfaces abruptes et pour contrôler l'épaisseur à l'échelle de la monocouche [56]. Cette technique offre en outre la possibilité du contrôle *in situ* grâce à l'environnement ultra-vide dans l'enceinte de croissance. La réflectométrie laser permet d'obtenir des informations sur la vitesse de croissance et la rugosité de la surface mais avec une précision plus faible que le RHEED [57]. On peut distinguer, selon la source d'azote utilisée, l'EJM par craquage d'ammoniac [58], et l'EJM sous plasma d'azote [59]. La qualité des couches est comparable, mais les conditions de croissance telles que le rapport des éléments N/III et la température varient [60]. Comme pour l'EPVOM, une grande partie des études de croissance EJM est consacrée aux hétéro-structures de $InGaN/GaN$ et de $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ avec $x < 30$ % [61].

L'EJM a permis récemment la fabrication des hétéro-structures d' $Al_xGa_{1-x}N$ avec une forte teneur en Al de bonne qualité. Le problème principal reste l'apparition des "cracks" dus à la contrainte en tension des couches d' $AlGaN$ sur GaN . La croissance de puits isolés et de super-réseaux $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ avec $x = 0.45 - 0.85$ [62], ainsi que d' AlN/GaN a été rapportée [63]. Les hétéro-structures de GaN/AlN ont été aussi fabriquées par Atomic Layer Epitaxy [64]. Cette technique consiste à déposer en alternance une couche de gallium (aluminium) puis de l'azote pour former le composé binaire. Les précurseurs réagissent à la surface de croissance en formant une couche atomique de GaN (AlN) par cycle. Il est possible d'obtenir ainsi des couches ultraminces avec un excellent contrôle des épaisseurs. Les super-réseaux de GaN/AlN ont été aussi préparés par la technique Hot Wall Epitaxy [65].

L'étape décisive nécessaire à la fabrication de dispositifs, était le contrôle du dopage. Le dopage résiduel dans GaN est de type N . Son origine et sa concentration (de l'ordre de $10^{16} - 10^{17} cm^{-3}$) dépendent fortement de la technique de croissance utilisée [66]. Le dopage contrôlé de type- N est le plus souvent réalisé par le silicium qui, en se positionnant en sites substitutionnels de Ga , est un donneur. La concentration de $10^{19} cm^{-3}$ est facilement atteinte avec les différentes techniques de croissance [67].

Le dopage de type- N d' AlN et des alliages $AlGaN$ à haute concentration d' Al est plus difficile à maîtriser [68]. A cause de l'augmentation du gap avec la teneur d' Al , les niveaux de donneur se trouvent de plus en plus en profondeur dans la bande interdite. De plus, les mécanismes de compensation entrent en jeu pour des concentrations du silicium à $3 - 6 \cdot 10^{19} cm^{-3}$, ce qui donne des concentrations de porteurs maximales de l'ordre de $4.5 \cdot 10^{18} cm^{-3}$ dans le $Al_{0.48}Ga_{0.52}N$, et seulement $9.5 \cdot 10^{16} cm^{-3}$ dans l' AlN [69]. Le dopage de type P du GaN a été réalisé pour la première fois en 1988, en utilisant du magnésium [70]. Le magnésium est aussi utilisé comme accepteur pour les alliages d' $AlGaN$ et d' $InGaN$ [66].

En parallèle avec le développement de la croissance des couches épaisses, des hétéro-interfaces et des puits quantiques, les systèmes des boîtes quantiques $InGaN/GaN$ et GaN/AlN ont été largement étudiés [71]. A l'heure actuelle, un excellent contrôle de la taille et de la densité des nanostructures a été obtenu aussi bien par MOCVD [72] que par EJM [73].

I-6. Substrats pour le dépôt de nitrures

La croissance des couches hexagonales de bonne qualité est conditionnée par le choix du substrat. En effet, le principal problème rencontré pour l'épitaxie du Nitrure de Gallium est qu'il n'existe pas de substrat accordé en maille pour ces matériaux. Les candidats susceptibles d'être utilisés sont le saphir (Al_2O_3), le silicium Si et le carbure de silicium (SiC de type $4H$).

I-6-1. Substrat GaN massif pour l'homo-épitaxie

L'équipe polonaise d'UNIPRESS à Varsovie est l'une des seules à maîtriser suffisamment la croissance des monocristaux de GaN de $1 - 2 cm$ de diamètre et d'environ

50 μm d'épaisseur à très haute pression et haute température (12 – 20 Kbar de pression d'azote, 1400 – 1700 $^{\circ}\text{C}$ [74]).

Actuellement, ces derniers ne sont pas commercialisés à cause de leur coût de réalisation élevé et leur taille limitée. Cependant avec une densité de défauts de seulement de quelques 10^2cm^{-2} , ils servent de référence pour déterminer les propriétés optiques et électroniques de GaN intrinsèque.

Les cristaux de GaN utilisés comme substrat sont très difficiles à produire, car ils nécessitent des conditions de température et de pression très élevées. Cependant, deux méthodes existent depuis la fin des années 1990 pour synthétiser du GaN massif. La première est la H.P.N.S.G. (High Pressure Nitrogen Solution Growth), et la seconde est la cristallogenèse de GaN utilisant un flux de sodium. Ces méthodes, permettent d'obtenir des cristaux de taille centimétrique, ne peuvent pour l'instant être utilisées à l'échelle industrielle en raison des conditions expérimentales mises en œuvre.

Afin de les simplifier, les travaux d'A. Denis [75] évaluent deux procédés, le premier s'inspirant de la cristallogenèse hydrothermale du quartz utilisant des enceintes à moyenne pression (50 à 200 Mpa), et le second à plus haute pression (1 à 2 Gpa) déroulant de la cristallogenèse du diamant.

Le procédé dérivant de celui développé pour le quartz aurait l'avantage de permettre la croissance de grands volumes. L'autre conduirait à des vitesses de croissance plus importantes. Une autre approche existe pour la fabrication de substrats GaN . Elle utilise la HVPE (Hydrid Vapor phase epitaxy). Cette approche consiste à faire croître une couche GaN sur un substrat, puis à la séparer de ce dernier.

Ce procédé permet de réaliser de GaN face-Ga ou face-N, des substrats en GaN de bonne qualité ont été fabriqués en utilisant le procédé de croissance de boucles de HVPE, avec des densités de dislocations de $5 \cdot 10^6$ à $1 \cdot 10^7\text{cm}^{-2}$. Des substrats en GaN sont déjà commercialisés, aussi les sociétés TDI (Technology and Devices International) produisent des substrats de 1.5 pouces, et pensent produire des substrats de 3 et 4 pouces dans un future proche. Une autre société spécialisée dans la fabrication des substrats en GaN qui est la société UNIPRESS (Pologne) [36]. Le GaN est naturellement de type N.

I-6-2. Substrats pour L'hétéro-épitaxie

I-6-2-1. Le saphir Al_2O_3

A l'origine des premières élaborations du matériau GaN , la majorité des couches élaborées étaient déposées sur substrat saphir. Ce substrat présente l'avantage d'un coût relativement faible, d'être facilement disponible, d'être semi-isolant et d'avoir une grande stabilité en température. Les inconvénients sont : sa faible conductivité thermique ($\sigma = 0.5 W/cm.K$) et un fort désaccord en maille. Ce désaccord en maille entre les plans de base du GaN hexagonale et du saphir est de 30%, cependant lors de l'épitaxie, la maille est tournée de 30° par rapport à la maille des atomes d'Aluminium du saphir et le désaccord réel est dans ces conditions inférieur à 15%. Malgré ce désaccord de maille important et une différence de coefficients de dilatation thermique de l'ordre de 35%, le saphir est néanmoins traditionnellement utilisé pour des raisons de coûts. Pour remédier au maximum à la formation de dislocation dans le GaN , on dépose tout d'abord une couche de nucléation d' AlN d'une dizaine à une centaine de nanomètre.

Le désaccord de maille résiduel entraîne cependant la présence d'une grande densité de dislocation de l'ordre de $10^{10} cm^{-2}$. Malgré cela, ce substrat a tout de même permis l'élaboration des dispositifs à base de GaN dans les domaines de l'optoélectronique et des hyperfréquences présentant de très bonnes performances. Cependant, ce matériau atteint aujourd'hui ses limites du fait de sa mauvaise conductivité thermique.

I-6-2-2. Carbure de silicium

Les polytypes hexagonaux de SiC les plus utilisés pour l'épitaxie des nitrides sont le $6H - SiC$, principalement, et le $4H - SiC$. Le désaccord de paramètre de maille dans le plan de base est faible et sa conductivité thermique élevée. Il est disponible de type N et P ou isolant. La croissance de GaN sur SiC nécessite un tampon d' AlN ou de $(Al, Ga)N$. Dans ce dernier cas, il se forme naturellement une fine couche de mouillage ($\leq 10 nm$) très riche en AlN , qui permet de réduire la contrainte interfaciale [76]. La polarité du substrat SiC influe sur celle de GaN : GaN épitaxié sur une face de polarité Si (respectivement C) est généralement de polarité Ga (respectivement N) [77]. D'une manière générale, la qualité cristalline et optoélectronique de GaN épitaxié sur SiC est similaire à celle de GaN épitaxié

sur saphir. Des DEL fonctionnant en injection verticale, à travers le substrat et en utilisant des tampons conducteurs en $(Al, Ga)N$ sont commercialisées.

I-6-2-3. Le silicium

Les avantages du substrat en silicium sont nombreux. Les substrats Si sont bon marché et disponibles en grand diamètre. De plus, la conductivité thermique offerte par le silicium est légèrement inférieure à celle du nitrure de gallium. Ceci signifie qu'une attention particulière devra être apportée au management thermique lors d'une conception. Des substrats de type N ou de type P , ou très résistifs sont disponibles. Une des principales raisons motivant les travaux sur les substrats silicium dans la filière GaN , malgré 17% de désaccord de maille entre ces deux matériaux, et la possibilité de réaliser sur une même puce des composants de puissance ou des composants optoélectroniques, couplés à des circuits en silicium performants. Les substrats en silicium doivent être orientés dans la direction $[111]$ [78]. En revanche, le procédé de fabrication des substrats de silicium est mûre puisqu'il est utilisé depuis des années dans l'univers de la RF.

I-7. Problèmes spécifiques des nitrides pour l'optoélectronique [79]

Les problèmes des nitrides pour l'optoélectronique sont dus aux :

I-7-1. Défauts de réseau

I-7-1-1. Défauts ponctuels

Il s'agit essentiellement de lacunes, atomes interstitiels et impuretés en substitution. Certains de ces défauts créent des niveaux profonds dans la bande interdite sur lesquels les porteurs peuvent se piéger et se recombiner. Lorsque cette recombinaison est radiative, elle donne des raies à basse énergie. C'est notamment le cas dans le GaN où il existe très souvent une émission centrée autour de 550 nm appelées bande jaune. Son origine est encore controversée mais elle pourrait être due à des lacunes d'azote ou de gallium, des complexes donneur-accepteur, donneur-donneur ou anti site azote-gallium interstitiel [80].

I-7-1-2. Défauts unidimensionnels

Lorsque l'on fait croître un matériau B sur un matériau A de paramètre de maille différent, la maille de B se déforme de manière à ce que ses paramètres dans le plan de croissance soient identiques à ceux de la maille de A. Au-delà d'une certaine épaisseur qualifiée de critique, le matériau B se relaxe, ce qui signifie qu'il retrouve ses paramètres de maille non contrainte. Cette relaxation s'accompagne de la création de nombreux défauts (dislocations de désaccord de maille) à l'interface entre les deux matériaux. De plus, si les deux ont de coefficients de dilatation thermique différents, le retour à la température ambiante après la croissance va générer des contraintes qui peuvent également se relaxer par création de défauts.

Ce problème est particulièrement important dans le cas des nitrides car il n'existe pas de substrat approprié pour la croissance. Ainsi, les densités de dislocations traversant dans *GaN* sont typiquement de l'ordre de 10^8 cm^{-2} (à comparer avec 10^4 cm^{-2} dans le *GaAs* homo-épitaxial). Cette densité très élevée constitue un handicap majeur pour les applications opto-électroniques. En effet, les dislocations agissent comme des centres de recombinaison non radiatifs pour les porteurs et réduisent donc considérablement le rendement radiatif. Par ailleurs, les dislocations facilitent la diffusion et la ségrégation des impuretés, ce qui diminue la durée de vie des dispositifs optoélectroniques.

I-7-1-3. Défauts bi-et tridimensionnels

Divers autres défauts sont également présents dans les matériaux nitridés. Les principaux défauts bidimensionnels sont les fautes d'empilement et les joints de grains (ensemble de dislocations) qui sont dus à la croissance colonnaire des nitrides (des colonnes se forment sur les différents sites de nucléation et finissent par coalescer en formant des joints de grain). Ces défauts sont également des centres de recombinaison non radiatifs. En ce qui concerne les défauts tridimensionnels, on peut notamment citer les domaines d'inversion qui sont des régions où la polarité est inversée par rapport au reste du réseau.

I-7-2. Solutions envisageables pour un matériau plus performant

Récemment, des progrès impressionnants ont été accomplis dans le développement des nitrides à large bande interdite, et ceci par l'amélioration de la qualité cristalline des

couches hexagonales. Le perfectionnement des procédés de croissance, tels que l'optimisation de la couche tampon ou la purification des sources de précurseurs de la croissance a notamment permis une forte réduction de la concentration des porteurs résiduels. Cependant, nous avons vu que les couches obtenues par les techniques de croissance classique présentaient encore de fortes concentrations de défauts structuraux et elles sont le siège de phénomène de compensation liés aux défauts ponctuels.

I-8. Conclusion

Au cour de ce chapitre, nous avons rappelé les principales propriétés des nitrides d'éléments III et plus particulièrement celles des binaires *GaN*, *AlN* et *InN* et leurs alliages cristallisant dans la structure hexagonale tant sur le plan structural, électronique, mécanique. Après avoir évoqué les paramètres structuraux des nitrides binaires (leurs structures cristallographiques, leurs paramètres de maille, la polarité,...), nous avons présenté les paramètres des alliages ternaires (*InGaN*, *AlGaN*) et leur variation avec la composition. Nous avons aussi décrit les techniques de croissance et les substrats disponibles pour leur réalisation en insistant sur le *6H - SiC* qui sera notre substrat de choix pour les diodes lasers à boîtes quantiques à base de nitrides. Enfin, nous avons cité quelques problèmes des nitrides dans le domaine de l'optoélectronique avec leurs solutions.

Références

- [1] Fichter, Uber Aluminium nitride, *Z. Anorg. Chem*, **54**, 322 (1907).
- [2] W. C. Johnson, J. B. Parsons and M. C. Crew, *J. Phys. Chem*, **36**, 2651(1932).
- [3] R. Juza and H. Hahn, *Z. Anorg. Allg. Chem*, **239**, 282 (1938).
- [4] P. Kung, *Opto-electronic devices: III-Nitrides*, ch. 2, Elsevier (2004).
- [5] H.P. Maruska, J. J. Tietjen, *Appl. Phys. Lett*, **15**, 327 (1969).
- [6] H. M. Manasevit, P. M. Erdmann, W. I. Simpson, *J. Electrochem. Soc*, **118** (11), 1864 – 1868 (1971).
- [7] I. Akasaki, I. Hayashi, *Ind. Sci. Technol*, **17**, 48 – 52 (1974).
- [8] R. Dingle, K. L. Shaklee , R. F. Leheny, R. B. Zetterstrom, *Appl. Phys. Lett*, **19**, 5 – 7 (1971).
- [9] S. Yoshida, S. Misawa, *A. Appl. Phys. Lett*, **26**, 461 – 462 (1975).
- [10] S. Yoshida, S. Misawa, S. Gonda,, *Appl. Phys. Lett*, **42**, 427 – 429 (1983).
- [11] H. Amano, N. Sawaki, I. Akasaki, Y. Toyoda, *Appl. Phys. Lett*, **48**, 353 – 355 (1986).
- [12] <http://www.nichia.co.jp/info/history.html>.
- [13] L. Akasaki, H. Amano, S. Sota, H. Sakai, T. Tanaka, M. Koike, *Jpn. J. Appl. Phys*, **34**, L1517 – L1519 (1995).
- [14] S. Nakamura, M. Senoh, S. I. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada , T. Matsushita, H. Kiyoku Y. Sugimoto, *Jpn. J. Appl. Phys*, **35**, L74 – L76 (1996).
- [15] J.L. Birman, *Phys. Rev*, **109**, 108 (1958).
- [16] I. Vurgaftman, J. R. Meyer *J. Appl. Phys*, **94**, 3675 (2003).
- [17] O. Ambacher, *J. Phys. D. Appl. Phys*, **31**, 2653 (1998).
- [18] R. R. Reeber and K. Wang, *Mat. Res. Soc, Symp*, 622, T6.35.1 (2000).
- [19] S. K. Pugh, D. J. Dugdale, S. Brand et R. A. Adram, *Semicond. Sci. Technol*, **14**, 23, (1999).
- [20] M. Goano, E. Bellotti, E. Ghilino, G. Ghione, et K. F. Brennan, *J. Appl. Phys*, **88**, 6467 (2000).
- [21] B. J. Min, C. T. Chan et K. M. Ho, *Phys. Rev. B*, **45**, 1159 (1992).
- [22] A. Rubio, J. L. Corkii, M. L. Cohen, E. L. Shirley et S. G. Louie, *Phy. Rev. B*, **48**, 11810 (1993).

- [23] J.M. Wagner et F. Bechstedt, Phys. Rev. B, **66**, 115202 (2002).
- [24] N. E. Christensen, et I. Gorczyca, Phys. Rev. B, **50**, 4397 (1994).
- [25] S. L. Chuang et C. S. Chang, Phys. Rev. B, **54**, 2491 (1996).
- [26] R. Dingle, D. D. Sell, S. E. Stokowski et M. Ilegems, Phys. Rev. B, **4**, 1211(1971).
- [27] M. Ilegems, R. dingle, R. A. Logan, J. Appl. Phys, **43**, 3797 (1972).
- [28] W. M. Yim, E. J. Stofko, P. J. Zanzucchi, J. I. Pankove, M. Ettenberg et S. L. Gilbert, J. Appl. Phys, **44**, 292 (1973).
- [29] Q. Guo et A. Yoshida, Jpn. J. Appl. Phys, **33**, 2453 (1994).
- [30] X. Tang, F. Hassain, K. Wongchotigul, M. Spencer, App. Phys. Lett, **72**, 1501, 1998.
- [31] T. L. Tansley et C. P. Foley, J. Appl. Phys, **59**, 3241 (1986).
- [32] T. Matsuoka, H. Okamoto, M. Nakao, H. Harima et E. Kurimoto, Appl. Phys. Lett, **81**, 1246 (2002).
- [33] J. Wu, W. Walukiewicz, K. M. Yu, J. W. Ager, E. E. Haller, H. Lu, W. J. Shaff, Y. Saito et Y. Nanishi, Appl. Phys. Lett, **80**, 3967 (2002).
- [34] V. Yu. Davydov, A. A. klochkhin, R. P. Seisyan, V. V. Emtsev, S. V. Ivanov, F. Bechstedt, J. Furthmuller, H. Harima, A. V. Murdryi, J. Aderhold, O. Semchinova et J. Graul, Phys. Stat. Sol. B, **203**, R4 (2002).
- [35] N. Grandjean, J. Massies, les nitrides d'éléments III : des semiconducteurs singuliers ? CRHEA, [www. CNRS.fr/publications/imagesdephysique/couv- pdf / idp01 / 07 .pdf](http://www.CNRS.fr/publications/imagesdephysique/couv-pdf/idp01..../07.pdf) . (s.d).
- [36] F. Enjalbert « Etude des hétérostructures semi-conductrice III-nitrides et application au laser UV par cathode à micropointes », thèse de doctorat, Université de Grenoble 1, France (2004).
- [37] J. M. Bethoux, « Relaxiation des contraintes dans les hétérostructures épaisses (Al, Ga) N : une piste originate pour la réalisation de diodes électroluminescentes à cavité résonante », thèse de doctorat, Université de Nice, France (2004)
- [38] A. Helman, « Puits et boites quantiques de *GaN/AlN* pour les applications en optoélectronique à $\lambda \approx 1.55\mu\text{m}$ », thèse de doctorat, Université d' Orsay, Paris, France (2004).

- [39] J. Simon, «Etude des propriétés optiques de nanostructures quantiques à base de nitrure d'éléments III », thèse de doctorat, Université Joseph Fourier , Grenoble 1, France (2001).
- [40] J. F. Nye, « Physical properties of crystals », Oxford Univ. Press, oxford (1985).
- [41] F. Bernardini, V. Fiorentini et D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B*, **56**, R100024 (1997).
- [42] A. Polian, M. Grimsditch and I. Grzegory, *J. Appl. Phys.*, **79**, 3343 (1996).
- [43] K. Kim, R. L. Walter and B. Segall, *Phys. Rev. B*, **53**(24), 16310 (1996).
- [44] A. F. Wright, *J. Appl. Phys.*, **82**, 2833 (1997).
- [45] J. A. Van Vechten et T. K. Bergstresser, *Phys. Rev. B*, **1**, 3351 (1970).
- [46] R. Collazo and N. Dietz, *The Group III-Nitride Material Class: from Preparation to Perspectives in Photoelectrocatalysis*, Preprint of book chapter 9 of "Photoelectrochemical Water Splitting: Issues and Perspectives," ed. H-J. Lewerenz and L.M. Peter, RSC Publishing, pp. 1-29, ISBN: tba 2013.
- [47] M. O Manasreh, *Phys. Rev. B*, **53**, 16425 (1996).
- [48] J. Petalas, S. Logothetidis, S. Boultadakis, M. Alouani, et J. M. Wills, *Phys. Rev. B*, **52**, 8082 (1995).
- [49] N. Antoine-Vincent, F. Natali, M. Mihailovic, A. Vasson, J. Leymarie, P. Disseix, D. Byrne, F. Semond, J. Massies, *J. Appl. Phys.* **93**, 5222 (2003).
- [50] R. Hui, S. Taherion, Y. Wan, J. Li, S. X. Jin, J. Y. Lin, et H. X. Jiang, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1326-8 (2003).
- [51] H. P. Maruska et J. J. Tietjen, *Appl. Phys. Lett.*, **15**, 327-9 (1969).
- [52] O. Ambacher, *J. of Phys. D Appl. Physics*, **31**, 2653-710 (1998).
- [55] S. Nakamura et G. Fasol, *The Blue Laser Diode* (Springer, Berlin, 1997).
- [54] S. Yamaguchi, Y. Iwamura, Y. Watanabe, M. Kosaki, Y. Yukawa, S. Nitta, S. Kamiyama, H. Amano, et I. Akasaki, *Appl. Phys. Lett.*, **80**, 802- 4 (2002).
- [55] M. E. Aumer, S. F. LeBoeuf, F. G. McIntosh and S. M. Bedair, *Appl. Phys. Lett.*, **75**, 3315 -17 (1999).
- [56] N. Grandjean, J. Massies, *Appl. Phys. Lett.*, **73**, 1260-2 (1998).
- [57] B. Damilano, Thèse de doctorat, Université de Nice-Sophia Antipolis, France (2001).
- [58] W. Kim, O. Aktas, A. E. Botchkarev, A. Salvador, S. N. Mohammad, H. Morkoc, *J. Appl. Phys.*, **79**, 7657-66 (1996).

- [59] G. Popovici, H. Morkoc, et S. N. Mohammad, *Physics and Applications*, Ed. B. Gil (Clarendon Press, Oxford, 1998).
- [60] N. Grandjean, M. Leroux, J. Massies, M. Mesrine, et P. Lorenzini, (*Mater. Res. Soc*, Warrendale, PA, USA), p. xiii+565 (1998).
- [61] H. Morkoc, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, **12**, 677- 95 (2001).
- [62] H. M. Ng, C. Gmachl, S. N. G. Chu, et A. Y. Cho, *J. Cryst. Growth*, **220**, 432-8 (2000).
- [63] Z. Sitar, M. J. Paisley, B. Yan, J. Ruan, W. J. Choyke, et R. F. Davis, *Journal of Vacuum Science & Technology B Microelectronics Processing and Phenomena*, **8**, 316-22 (1990).
- [64] C. Adelman, E. Martinez-Guerrero, J. Barjon, J. Brault, Le-Si-Dang, H. Mariette, G. Mula, et B. Daudin, *Phys. stat. Sol*, **A188**, 673-6 (2001).
- [65] A. Ishida, M. Kitano, T. Ose, H. Nagasawa, K. Ishino, Y. Inoue, H. Fujiyasu, H. Kan, H. Makino and T. Yao, *Physica E*, **13**, 1098-101 (2002).
- [66] S. C. Jain, M. Willander, J. Narayan, et R. Van-Overstraeten, *J. Appl. Phys*, **87**, 965-1006 (2000).
- [67] J. K. Sheu et G. C. Chi, *Journal of Physics: Condensed Matter*, **14**, R657-702 (2002).
- [68] K. B. Nam, J. Li, M. L. Nakarmi, J. Y. Lin, et H. X. Jiang, *Appl. Phys. Lett*, **81**, 1038-40 (2002).
- [69] Y. Taniyasu, M. Kasu, et N. Kobayashi, *Appl. Phys. Lett*, **81**, 1255-7, 2002.
- [70] H. Amano, I. Akasaki, T. Kozawa, K. Hiramatsu, N. Sawaki, K. Ikeda and Y. Ishii, *Journal of Luminescence*, **121**-2, 40-41 (1988).
- [71] Y. Arakawa, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron*, **8**, 823-32 (2002).
- [72] M. Miyamura, K. Tachibana, T. Someya, et Y. Arakawa, *J. Cryst. Growth*, 1316-**19**, 237-239, (2002).
- [73] J. Brown, F. Wu, P. M. Petroff, et J. S. Speck, *Appl. Phys. Lett*, **84**, 690-2 (2004).
- [74] M. Benaissa, Springer Science + Business Media B.V. (2008).
- [75] A. Denis, « Elaboration, cristallogenèse et caractérisations physico-chimiques des nitrides des éléments de la colonne III et en particulier *GaN* », thèse de doctorat, Université de Bordeaux, France (2003).

- [76] M. D. Bremser, W.G. Perry, T. Zheleva, N.V. Edwards, O. H. Nam, N. Parikh , D. E. Aspnes, R.F. Davis, Mrs Internet J. Nitride Semicond. Res, **1**, 8 (1996).
- [77] E. Hellmann, Mrs J. Internet J. Nitride Semicond. Res, **3**, 11 (1998).
- [78] L. Liu, J.H. Edgar. Materials Science and Engineering, R **37**, 112 (2002).
- [79] A. Joti, « Optimisation des processus technologiques des couches GaN et du GaAs nitruré et réalisation de composants électroniques sur ces matériaux », thèse de doctorat, Université Djilali Liabes de Sidi Bel Abbès, Algérie (2007).
- [80] S. C. Jain, M. Willmänder, J. Naryan, R. Van overstraeten , J. Appl. Phys, **87**, 965(2000).

CHAPITRE II

Principes des lasers à boîtes quantiques

Chapitre II

Principes des lasers à boîtes quantiques

II-1.	Introduction.....	41
II-2.	Généralités sur les lasers.....	41
	II-2-1. Interactions matière-rayonnement.....	41
	II-2-2. Inversion de population.....	44
	II-2-3. Les «ingrédients» du laser.....	47
	II-2-4. Les différents types de pompage.....	48
	II-2-5. Les pertes optiques internes.....	49
II-3.	Théorie de laser à semi conducteur.....	50
	II-3-1. Discontinuité des bandes aux interfaces des hétéro-structures.....	51
	II-3-2. La densité d'état	52
	II-3-3. Effet des contraintes mécaniques sur la structure de bandes	54
	II-3-4. Confinement quantique.....	55
II-4.	Propriétés des boîtes quantiques.....	59
	II-4-1. Confinement des porteurs.....	59
	II-4-2. Les dimensions caractéristiques des boîtes quantiques.	60
	II-4-3. Transitions entre états confinés	61
	II-4-4. Le schéma électronique d'une structure à BQ.....	62
	II-4-5. Largeurs homogène et inhomogène des boîtes quantiques.....	63
II-5.	Fabrication des boîtes quantiques.....	65
	II-5-1. Lithographie.....	65
	II-5-2. Technique par croissance épitaxiale.....	66
II-6.	Conclusion.....	69
	Références.....	70

II-1. Introduction

Depuis plusieurs décennies, on assiste à un intérêt croissant pour les structures à semi-conducteurs. Utiles pour la réalisation de lasers ou d'amplificateurs optiques. Ainsi, le développement des procédés de croissance des matériaux à travers des techniques d'épitaxie a introduit une nouvelle notion : les matériaux de "basse dimensionnalité". Dans ces matériaux, il existe une ou plusieurs directions de l'espace où ces porteurs vont subir des variations de potentiels sur de si faibles dimensions, que les électrons (et les trous) vont alors connaître un effet de confinement. Les propriétés du matériau sont alors différentes de celles d'un matériau massif.

Après une introduction décrivant les notions fondamentales des lasers qui permettront de comprendre la suite de notre travail, nous verrons comment la réduction de la dimensionnalité du système modifie la densité d'états. Finalement, nous exposerons les propriétés générales des boîtes quantiques en tant que milieu optiquement actif d'un composant optoélectronique semi-conducteur (laser à boîte quantique) avec un petit rappel sur les techniques de fabrication.

II-2. Généralités sur les lasers

II-2-1. Interactions matière-rayonnement

Einstein [1] mit en évidence en 1917 les trois processus d'interaction possibles entre un atome qu'il considèrera « à deux niveaux d'énergie » et un rayonnement électromagnétique. Ces processus sont désignés par les termes d'absorption, d'émission spontanée et d'émission stimulée. Ces différents types d'interaction se déroulent au sein d'un milieu pouvant être atomique, ionique ou moléculaire, constitué de deux niveaux d'énergie possibles E_1 et E_2 ($E_1 < E_2$) pour les atomes constituant ce milieu. Nous pourrions désigner le niveau 1 par le terme de « niveau fondamental » et le niveau 2 par celui de « niveau excité ».

II-2-1-1. L'absorption

Un photon d'énergie $h\nu = \Delta E = E_2 - E_1$ peut être absorbé par un électron dans l'état fondamental E_1 qui passe dans l'état excité E_2 (figure II-1(a)). Le processus est proportionnel à la densité N_1 (population de l'état E_1) et à la densité spectrale d'énergie de radiation $\rho(h\nu)$ à la fréquence ν . Le taux de transition est donné par :

$$R_{abs}(\nu) = B_{12} \cdot N_1 \cdot \rho(h\nu) \quad (\text{II-1})$$

Où B_{12} est le coefficient d'absorption d'Einstein [2].

II-2-1-2. L'émission spontanée

L'émission spontanée consiste en une désexcitation du milieu considéré par passage d'un électron du niveau 2 vers le niveau 1 (figure II-1(b)). Le milieu va donc perdre une quantité d'énergie égale à $\Delta E = E_2 - E_1$ entraînant ainsi la création d'un photon d'énergie ΔE . Le taux de cette émission est proportionnel à la densité d'électrons dans l'état excité et peut être écrit sous la forme suivante :

$$R_{spont}(\nu) = A_{21} \cdot N_2 \quad (\text{II-2})$$

Où A_{21} est le coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée [2].

II-2-1-3. L'émission stimulée

Cette émission produit une radiation cohérente. Elle est initiée par un photon à la fréquence ν qui interagit avec un électron dans l'état excité E_2 causant son retour à l'état fondamental E_1 avec émission d'un second photon de même énergie, polarisation et direction de propagation (figure II-1(c)). Le taux d'émission stimulée est donné par :

$$R_{stim}(\nu) = B_{21} \cdot N_2 \cdot \rho(h\nu) \quad (\text{II-3})$$

Où B_{21} est le coefficient d'Einstein d'émission stimulée [2].

A l'équilibre thermodynamique, le taux d'absorption est égale la somme des deux taux d'émission stimulée et spontanée :

$$B_{12} \cdot N_1 \cdot \rho(h\nu) = A_{21} \cdot N_2 + B_{21} \cdot N_2 \cdot \rho(h\nu) \tag{II-4}$$

L'énergie de photon $\rho(h\nu)$ défini par la loi de Planck est donnée par la relation [2]:

$$\rho(h\nu) = \frac{8\pi n^3 (h\nu)^3}{h^2 c^3} \cdot \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \tag{II-5}$$

Avec n l'indice de réfraction, c la vitesse du vide.

Le gain optique est défini par la différence entre le taux d'émission stimulée et l'absorption, et est donné par :

$$G = B_{21} \rho(h\nu) (N_2 - N_1) \tag{II-6}$$

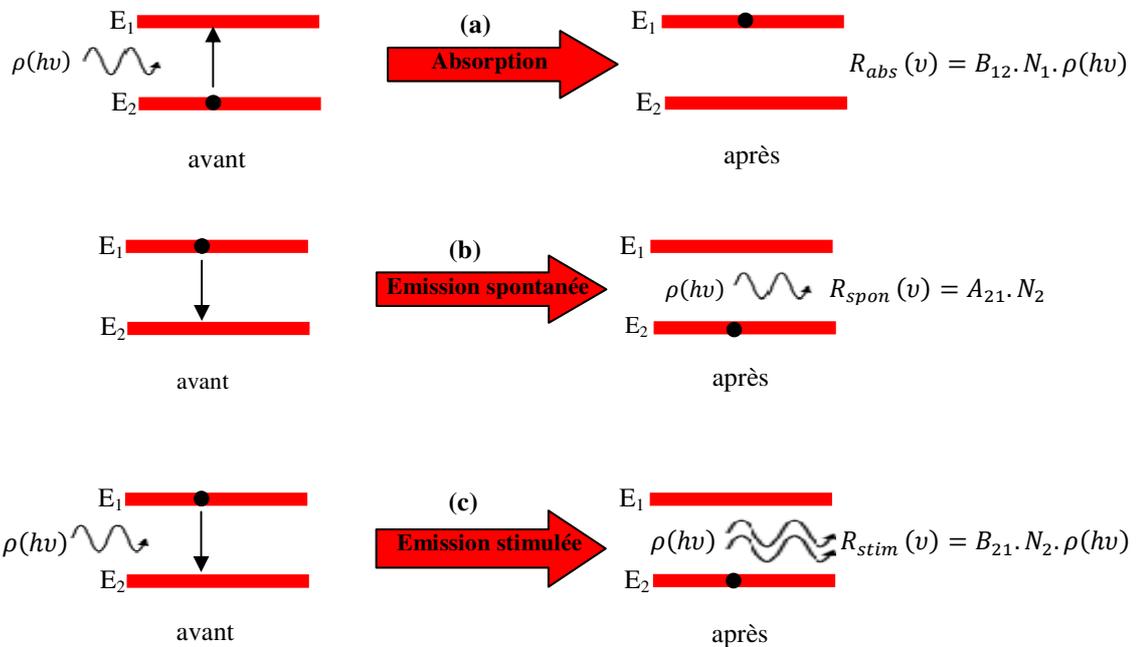


Figure II-1 : Représentation schématique des transitions électroniques possibles dans un modèle à deux niveaux [2].

Ces trois interactions se trouvent dans un semi-conducteur. Mais à la place de deux niveaux discrets, il existe une bande (continuum d'énergie) de valence et une bande de conduction séparées par une bande d'énergie interdite $E_c - E_v$.

II-2-2. Inversion de population

Dans un semi-conducteur, les transitions ont lieu entre les états de la bande de conduction et ceux de la bande de valence.

Le taux d'occupation d'un état E_2 de la bande de conduction par un électron est donné par la statistique de Fermi-Dirac [3] :

$$f_c(E_2) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_2 - E_{fc}}{kT}\right)} \quad (\text{II-7})$$

De même le taux d'occupation d'un état E_1 de la bande de valence par un trou est :

$$f_v(E_1) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_1 - E_{fv}}{kT}\right)} \quad (\text{II-8})$$

Avec

E_{fc}, E_{fv} : quasi-niveaux de Fermi des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence.

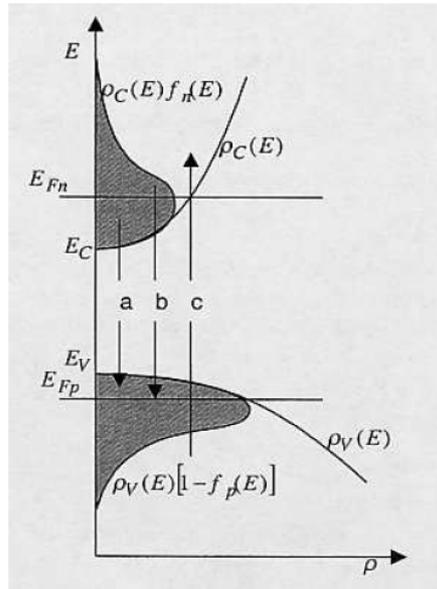


Figure II-2 : Transitions possibles suivant la statistique de Fermi-Dirac.

Transitions possibles : a) émission stimulée ou émission spontanée, b) émission spontanée, c) absorption. La zone grisée donne la zone où se trouvent les électrons dans la bande de conduction et les trous dans la bande de valence [4].

Le taux d'émission spontanée est proportionnel au coefficient d'Einstein A_{21} , à la probabilité $f_c(E_2)$ que le niveau E_2 soit occupé et à la probabilité $1 - f_v(E_1)$ que le niveau E_1 soit vide :

$$S_{21(\text{spon})} = A_{21} \cdot f_c(E_2) \cdot (1 - f_v(E_1)) \quad (\text{II-9})$$

Le taux d'émission stimulée entre E_2 et E_1 est proportionnel au coefficient d'Einstein B_{21} , à la densité d'énergie $\rho(h\nu)$ avec $h\nu = \Delta E = E_2 - E_1$, à la probabilité $f_c(E_2)$ que le niveau E_2 soit occupé et à la probabilité $1 - f_v(E_1)$ que le niveau E_1 soit vide :

$$S_{21(\text{stim})} = B_{21} \cdot f_c(E_2) \cdot (1 - f_v(E_1)) \cdot \rho(h\nu) \quad (\text{II-10})$$

Le taux d'absorption entre E_2 et E_1 est proportionnel au coefficient d'Einstein B_{12} , à la densité d'énergie $\rho(h\nu)$ avec $h\nu = \Delta E = E_2 - E_1$, à la probabilité $1 - f_c(E_2)$ que le niveau E_2 soit vide et à la probabilité $f_v(E_1)$ que le niveau E_1 soit occupé :

$$S_{21(abs)} = B_{12} \cdot f_v(E_1) \cdot (1 - f_c(E_2)) \cdot \rho(h\nu) \quad (\text{II-11})$$

Un bilan du système à l'état stationnaire peut s'écrire :

$$-S_{21(stim)} - S_{21(spon)} + S_{12(abs)} = 0 \quad (\text{II-12})$$

Et sous l'hypothèse que le système est à l'équilibre thermodynamique, nous pouvons écrire les coefficients d'Einstein selon :

$$B_{21} = B_{12} \quad (\text{II-13})$$

$$\frac{A_{21}}{B_{21}} = \frac{n_r^3 \cdot E_{21}^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3}$$

La condition d'émission stimulée, c'est-à-dire l'inversion de population, est obtenue lorsque $S_{21} > S_{12}$, par conséquent, avec $B_{12} = B_{21} = B$, on a :

$$f_c(E_2) \cdot (1 - f_v(E_1)) > (1 - f_c(E_2)) \cdot f_v(E_1) \quad (\text{II-14})$$

qui équivaut à :

$$E_{fc} - E_{fv} > E_2 - E_1 \quad (\text{II-15})$$

Cette relation est dite condition de Bernard et Duraffourg.

Du fait qu'il n'existe pas d'état dans la bande interdite, l'émission stimulée est telle que :

$$E_g < h\nu < E_{fc} - E_{fv} \quad (\text{II-16})$$

L'émission stimulée a lieu entre l'énergie de la bande interdite et la différence d'énergie de niveaux de Fermi. Il y a donc absorption pour les photons d'énergie supérieure à $E_{fc} - E_{fv}$. Ceci veut donc dire que l'ensemble des paires électrons-trous ne pourront contribuer au gain et donc participer à l'effet laser. L'inconvénient des lasers à semi-conducteurs vient du nombre important d'états dans la bande de conduction et de valence. Les porteurs injectés se répartiront sur différents états. Certains ne participeront pas à l'effet laser comme le montre la condition de Bernard et Duraffourg. Les autres se recombineront sur plusieurs transitions possibles d'énergies entre la bande de conduction et de valence. Ceci a des conséquences aussi bien sur le gain, le courant de seuil ou la réponse dynamique du milieu [5]. L'objectif du confinement a alors été de diminuer le nombre d'états possibles dans les structures à semi-conducteurs.

II-2-3. Les « ingrédients » du laser

Tout laser est constitué de trois éléments comme représenté sur la figure II-3.

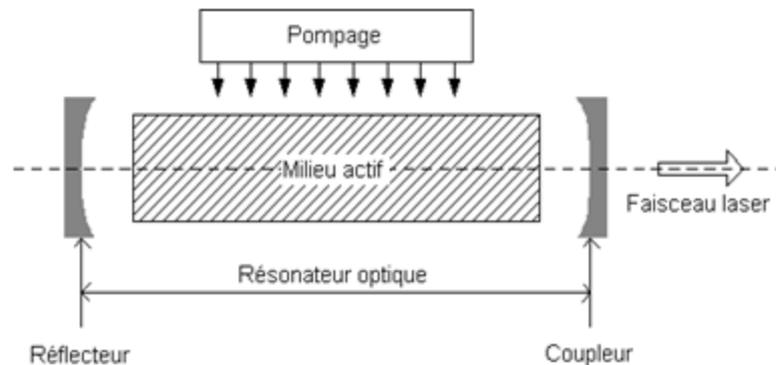


Figure II-3: Schéma d'un système laser.

- Un milieu amplificateur où l'inversion de population et l'amplification de nombre de photons grâce au phénomène d'émission stimulée s'y produit, ce milieu peut être : solide, liquide ou gazeux, mais dans notre cas, c'est un matériau semi-conducteur.
- Un processus de pompage permettant d'amener les atomes du niveau fondamental sur le niveau d'énergie excité.

- Une cavité résonante généralement constituée de deux miroirs parallèles entre lesquels est placé le milieu actif. Ceux-ci permettent de réintroduire le faisceau lumineux dans l'amplificateur et de réaliser une sélection spectrale des fréquences pouvant être générées: seules les fréquences présentant un retour en phase après un aller-retour dans la cavité seront sélectionnées.

L'effet laser se produit lorsque, d'une part, l'émission stimulée devient prépondérante par rapport à l'émission spontanée (inversion de population), et d'autre part, le gain dans le milieu amplificateur devient supérieur aux pertes optiques dans la cavité (pertes par absorption, pertes par propagation et pertes par réflexions sur les miroirs). On appelle *seuil d'émission laser* la densité de puissance de pompage nécessaire pour réaliser ces deux conditions.

II-2-4. Les différents types de pompage

Dans le cas d'un laser solide ou d'un laser à semi-conducteurs, il existe trois types de pompage couramment utilisés :

II-2-4-1. Le pompage optique

Le matériau laser est pompé par une excitation optique : soit un flash lumineux très intense soit un autre laser de longueur d'onde plus courte appelé laser de pompe. C'est la technique utilisée dans le premier laser fabriqué en 1960 (laser à rubis) [6].

II-2-4-2. Le pompage par injection électrique

C'est la technique standard utilisée dans les diodes lasers. L'excitation se fait par un courant électrique circulant entre des régions dopées N et P de la diode laser. En plus de la maîtrise du dopage du matériau, ce type de pompage nécessite la réalisation de contacts ohmiques de qualité. Le premier laser semi-conducteur fonctionnant par injection de courant a été réalisé en 1962. Il s'agissait d'une jonction $P-N$ en $GaAs$ [7].

II-2-4-3. Le pompage électronique

Ce type de pompage est basé sur le même principe que la cathodoluminescence : un faisceau d'électrons accélérés sous une tension de l'ordre d'une dizaine de kilovolts est utilisé

pour exciter le milieu actif. Le premier laser fonctionnant sur ce principe a été mis au point en 1964 par les chercheurs soviétiques Bassov, Bogdankevitch et Deviatkov. On trouvera des références à ces travaux dans la publication [8].

II-2-5. Les pertes optiques internes

Le coefficient de pertes internes α_i additionne tous les processus qui conduisent à la disparition d'un photon du mode laser se propageant le long de la cavité, à l'exception du processus d'absorption bande à bande dans la zone active, pris en compte dans le coefficient de gain.

Ces processus sont des pertes dues à l'absorption par les porteurs libres α_{pl} , des pertes par diffusion α_d et des pertes par couplage α_c où :

$$\alpha_i = \alpha_{pl} + \alpha_d + \alpha_c \quad (\text{II-17})$$

L'absorption par les porteurs libres comprend surtout des processus intra-bandes comme la diffusion entre deux porteurs ou la diffusion entre un phonon et un porteur.

Les pertes par diffusion sont souvent occasionnées par le fait que les interfaces qui constituent le guide d'onde ne sont pas planes. Plus généralement, l'onde électromagnétique peut être diffusée par toutes les imperfections qui se situent le long du guide d'onde lui permettant ainsi de quitter le cristal dans une autre direction (rugosité des interfaces, variations locales de l'indice de réfraction, réseaux de dislocations).

Les pertes par couplage sont provoquées par l'interaction du mode optique avec toutes les couches non émettrices - donc absorbantes- de la structure. Un photon peut par exemple être absorbé pour exciter un niveau profond du matériau constituant le guide optique. On inclut également dans ce terme (pertes par couplage) les fuites de lumière provoquées par le couplage du mode optique avec une couche d'indice élevé (souvent le substrat) insuffisamment éloignée de la zone active.

II-3. Théorie de laser à semi-conducteur

Dans les matériaux semi-conducteurs, l'état d'un électron peut être identifié par son vecteur de moment k et le composant z de son état de spin s_z . La solution de l'équation de Schrödinger de l'interaction d'un électron avec un réseau régulière d'ions donne l'état d'énergie permis.

La structure de bande d'énergie dans une zone de Brillouin peut être calculée en résolvant l'équation de Schrödinger pour un électron dans un potentiel périodique. La solution est un ensemble de bandes continues avec des énergies permises et des zones interdites. La propriété typique des semi-conducteurs est l'existence d'une bande interdite (gap) entre le niveau d'énergie occupé le plus haut et le niveau d'énergie non occupé le plus bas. La figure II-4 montre une illustration de la solution de l'équation de Schrödinger des semi-conducteurs pour différents groupes de symétrie. Quand la bande d'énergie interdite entre deux bandes de valences tend vers zéro, la forme de ces bandes change. La dégénérescence change les masses effectives des trous des deux bandes : la bande avec les trous moins lourds présentant la courbure la plus importante, est appelée la bande des trous légers, et la bande avec les masses les plus lourdes est appelée la bande des trous lourds.

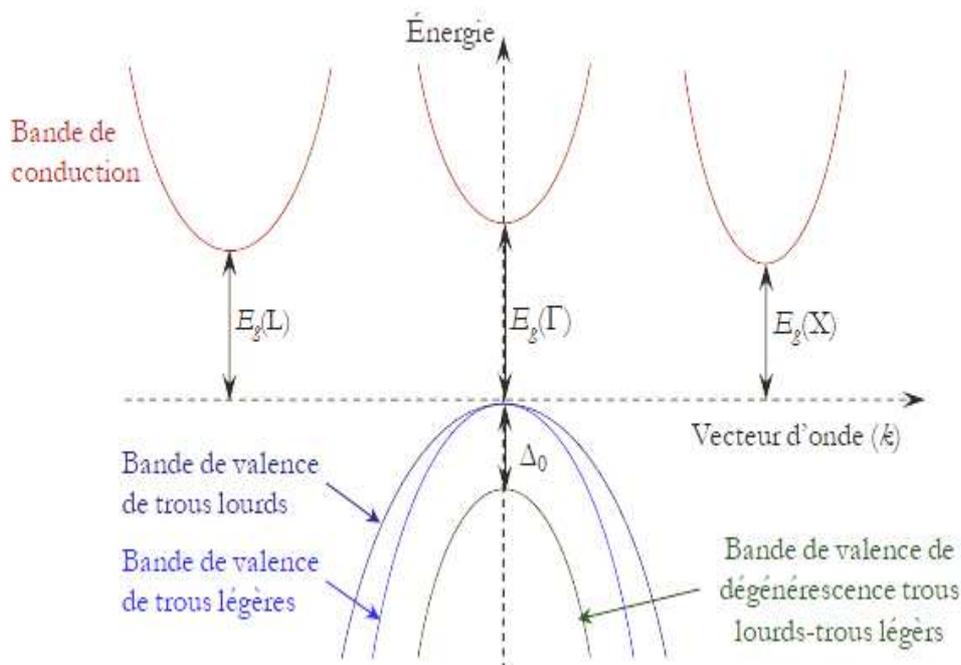


Figure II-4 : Illustration des bandes d'énergie et les gaps d'énergie, pour un gap direct et indirect suivant les groupes de symétries.

II-3-1. Discontinuité des bandes aux interfaces des hétéro-structures

Une caractéristique importante des hétéro-structures est la différence des bandes interdites entre les semi-conducteurs existant dans la structure : l'énergie des porteurs change pendant le passage par une hétéro-interface. Généralement, il y a une discontinuité dans les bandes de conduction et de valence. Ces discontinuités sont à l'origine des propriétés utiles des hétéro-structures. La clé pour comprendre le comportement des hétéro-structures à semi-conducteur se trouve dans le profil des bandes d'énergie. Ce profil présente des variations de l'énergie de la bande de valence et la bande de conduction, dans la zone d'interface entre deux semi-conducteurs. Les différents paramètres pour décrire l'alignement des bandes d'une hétéro-interface sont présentés dans la figure II-5.

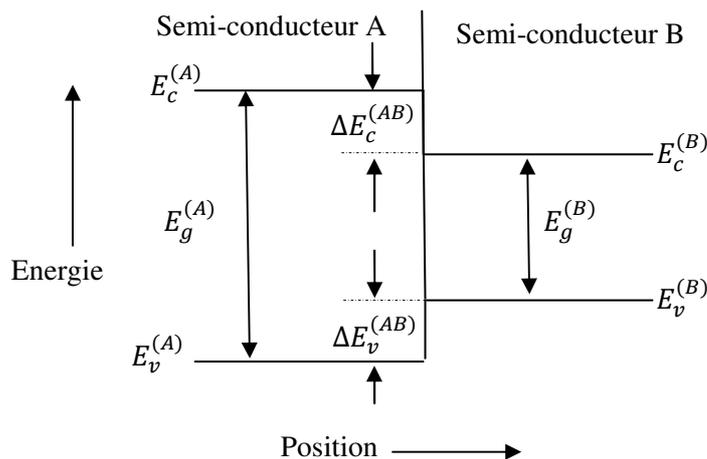


Figure II-5 : Les différents paramètres d'une hétéro-interface, de type-I.

Le paramètre bien défini est la discontinuité du gap :

$$\Delta E_g = E_g^{(B)} - E_g^{(A)} \quad (\text{II-18})$$

Où $E_g^{(A)}$ et $E_g^{(B)}$ sont les énergies du gap des matériaux A et B respectivement.

La discontinuité totale est divisée entre la discontinuité dans la bande de valence et la discontinuité dans la bande de conduction, définies par :

$$\Delta E_c^{(AB)} = E_c^{(B)} - E_c^{(A)} \text{ et } \Delta E_v^{(AB)} = E_v^{(B)} - E_v^{(A)} \quad (\text{II-19})$$

Il est important de savoir comment ces discontinuités sont distribuées entre la bande de conduction et la bande valence.

L'hétéro-structure de type-I est la plus connue (généralement considérée normale), et présentée dans la figure II-5, où la bande interdite du matériau de petit gap est complètement entourée par celle du matériau de grand gap ($E_g^{(A)} > E_g^{(B)}$).

Les relations entre les bandes de conduction, valence et les gaps peuvent être écrites :

$$\Delta E_c^{(AB)} = E_c^{(B)} - E_c^{(A)} = f(E_g^{(B)} - E_g^{(A)}) = f \cdot \Delta E_g \quad (\text{II-20})$$

$$\Delta E_v^{(AB)} = E_v^{(B)} - E_v^{(A)} = (1 - f)(E_g^{(B)} - E_g^{(A)}) = (1 - f) \cdot \Delta E_g \quad (\text{II-21})$$

Où le facteur f donne la proportion ($\Delta E_c / \Delta E_g$). Il dépend des paires de semi-conducteurs, et varie entre 0 et 1. Ce facteur est le facteur de décalage des bandes. Les électrons et les trous sont confinés dans le semi-conducteur de gap le plus petit. L'hétéro-structure *InGaN/AlGaN*, que nous allons utiliser dans ce travail est de type-I, les autres types (Type-II, Type-III) [9, 10] ne sont pas utilisés dans la présente étude.

II-3-2. La densité d'état

Dans un cristal à trois dimensions, la densité d'états $\rho(E)$ est définie comme le nombre d'états électroniques disponibles par unité de volume dans un intervalle infinitésimal d'énergie dE centré en E . Dans l'approximation parabolique, l'énergie d'un électron dans une bande s'écrit :

$$E_c(k) = E_c(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (\text{II-22})$$

Où k est la norme du vecteur \vec{k} et $E_c(0)$ est l'énergie du bas de la bande de conduction.

La densité d'états dans l'espace des k est le nombre infinitésimal d'états $d^3N = \rho(k)d^3k$ situé dans le volume d^3k :

$$\rho(k) = \frac{V}{8\pi^3} \quad (\text{II-23})$$

Le nombre d'états dN situés dans un volume compris entre deux couronnes sphériques de rayons k et $k + dk$ est donné par :

$$dN = \frac{V}{8\pi^3} 4\pi k^2 dk = \frac{V}{2\pi^2} k^2 dk \quad (\text{II-24})$$

A ce volume élémentaire $4\pi k^2 dk$ dans l'espace des k correspond un volume élémentaire dans l'espace des énergies donné par la différentiation de l'équation (II-22) :

$$k^2 dk = 2^{1/2} \left(\frac{m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} . dE \quad (\text{II-25})$$

La densité d'états en énergie $\rho_{3D}(E) = \frac{dN}{dE}$ est le nombre d'états situés entre les énergies E et $+dE$. Pour trouver ce nombre d'états, il suffit maintenant de reporter l'expression (II-25) dans (II-24) en tenant compte des deux états de spin. Il faut donc multiplier l'expression finale par 2, d'où :

$$\rho_{3D}(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_c)^{1/2} \quad (\text{II-26})$$

La densité d'états est donc proportionnelle à la racine carrée de l'énergie : Plus on monte en énergie plus le nombre d'états par unité d'énergie est grand. La figure II-7 résume la densité d'état d'une structure : 3D (matériau massif), 2D (Puits quantiques), 1D (fils quantiques) et 0D (boîtes quantiques).

Si nous connaissons la densité d'état d'un solide, nous pouvons calculer :

- La densité d'électrons n (exprimée généralement en cm^{-3}) dans la bande de conduction qui est obtenue en sommant sur toute la plage d'énergie couverte par cette bande, le produit de la densité d'états par le rapport au nombre d'états occupés sur le nombre d'états qui est censé être occupé [3]:

$$n = \int_{E_c}^{+\infty} \rho_c(E) \cdot f_c(E) \cdot dE \quad (\text{II-27})$$

$\rho_c(E)$ représente la densité d'état dans la bande de conduction.

- la densité des trous p (exprimée généralement en cm^{-3}) dans la bande de valence, la probabilité d'avoir un trou étant $1 - f_c(E)$, on a [3]:

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} \rho_v(E) \cdot (1 - f_c(E)) \cdot dE \quad (\text{II-28})$$

$\rho_v(E)$ représente la densité d'état dans la bande de valence.

II-3-3. Effet des contraintes mécaniques sur la structure de bandes

L'application d'une contrainte mécanique modifie la structure de bande d'énergie des matériaux semi-conducteur [11]. Cette contrainte peut se décomposer en deux parties :

- Contrainte hydrostatique modifiant l'écart entre la bande de conduction et la bande de valence.
- Contrainte en cisaillement levant la dégénérescence entre les sous-bandes de trous lourds (heavy-holes où hh) et celles des trous légers (light-holes où lh).

La position relative des sous-bandes de trous est différente selon le type de contrainte appliquée : en tension ou en compression (figure II-6). L'effet des contraintes domine, en particulier, sur la bande de trous légers qui se trouve fortement affectée par rapport aux autres bandes dans les matériaux à bande interdite directe.

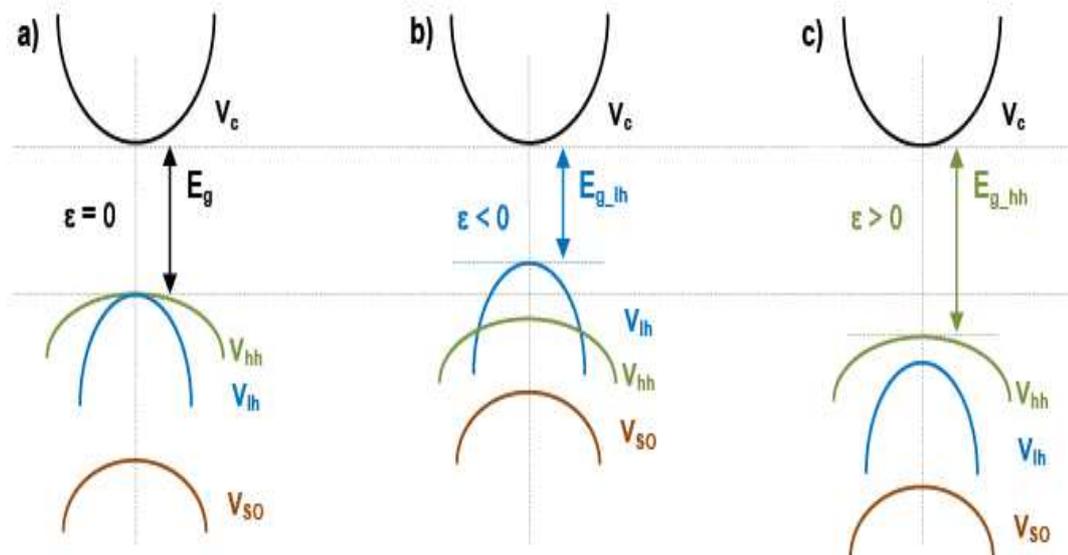


Figure II-6 : Représentation schématique de la structure de bande d'un matériau
 a) non contraint, soumis à une contrainte bi-axiale, b) en tension et c) en compression.

La contrainte en compression induit une diminution du niveau d'énergie des trous légers E_{lh} dans la bande de valence et augmente le niveau d'énergie de trous lourds E_{hh} contrairement à la contrainte en tension.

II-3-4. Confinement quantique

Lorsqu'un cristal de semi-conducteur est réduit, suivant une ou plusieurs directions de l'espace, à une dimension proche de la longueur d'onde de De Broglie (longueur d'onde de la fonction d'onde décrivant l'état d'un porteur), on parle de confinement quantique. Le mouvement des porteurs de charges est alors quantifié selon cette (ces) direction(s) de confinement. Ce phénomène a pour effet la discrétisation des niveaux d'énergie ainsi qu'un profond changement du profil de densité d'états électroniques en fonction de l'énergie. Selon que l'on perd un, deux ou trois de degrés de liberté, on a un puits quantique, un fil quantique ou une boîte quantique (BQ). (Le cas qui nous intéresse est celui des boîtes quantiques).

II-3-4-1. Le matériau massif

Dans un matériau massif, c'est à dire dans un cristal où l'ensemble des porteurs sont libres de se déplacer dans les trois directions de l'espace. Les bandes d'énergie peuplées par les électrons sont reliées au vecteur d'onde K (en ne tenant pas compte de l'énergie potentielle du cristal) par :

$$E(K) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \quad (\text{II-29})$$

A partir des conditions aux limites périodiques de Born-von Karman [12, 13], qui permettent une pseudo-quantification du vecteur K , la densité d'état s'exprime selon :

$$\rho_{3D} \propto (E - E_g)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II-30})$$

Où E_g est l'énergie de la bande interdite du matériau.

II-3-4-2. Les puits quantiques

Un puits quantique (quantum well en anglais) est ainsi réalisé en faisant croître une couche de cristal entre deux couches barrières. La discontinuité de la bande de conduction crée alors une barrière de potentiel permettant le confinement des porteurs selon une direction de l'espace. L'énergie dans un puits est alors défini par (en considérant le confinement selon z) [12] :

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(k_x^2 + k_y^2 + \left(\frac{n_z \pi}{L_z} \right)^2 \right) \quad (\text{II-31})$$

En confinant les porteurs, l'énergie est discrétisée selon une direction de l'espace (ici z), L_z correspond à la taille du puits. On peut par ailleurs noter que l'énergie résultant du confinement dépend de l'épaisseur de celui-ci. L'effet du confinement se manifeste aussi par une modification de la densité d'état comme le montre la figure II-7.

Cette densité d'état est couramment assimilée à des marches d'escalier :

$$\rho^{2D}(E) \propto \sum_{n_z} H\left(E - (E_g + E_{n_z})\right) \quad (\text{II-32})$$

II-3-4-3. Le fil quantique (1D)

Dans le cas d'un matériau 1D, il existe un confinement dans deux directions de l'espace (x et z par exemple). De la même manière que dans un puits, nous allons observer une discrétisation dans ces deux directions. L'énergie s'exprime alors selon :

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(k_y^2 + \left(\frac{n_x \pi}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{n_z \pi}{L_z} \right)^2 \right) \quad (\text{II-33})$$

Où L_z et L_x correspondent aux dimensions du confinement dans les deux directions de l'espace.

De même que dans un puits, la densité d'état est modifiée et prend la forme suivante comme présentée la figure II-7 :

$$\rho^{1D}(E) \propto \sum_{n_x, n_z} \sqrt{\frac{2m^*}{E - (E_g + E_{n_x, n_z})}} \quad (\text{II-34})$$

II-3-4-4. Les boîtes quantiques (0D)

Le résultat des effets cumulés du confinement des porteurs suivant les trois directions de l'espace, est la création d'un objet, dit boîte quantique. De la même façon que dans un puits quantique ou un fil quantique, on observe une discrétisation des niveaux d'énergie dans les trois directions de l'espace :

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\left(\frac{n_x \pi}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{n_z \pi}{L_z} \right)^2 \right) \quad (\text{II-35})$$

On a donc une discrétisation complète des niveaux d'énergie du semi-conducteur. On apparente alors souvent les boîtes quantiques à des "atomes artificiels".

La densité d'état est alors extrêmement modifiée, du fait de ces niveaux discrets. Elle s'exprime alors comme une somme de Dirac présentée dans la figure II-7.

$$\rho^{0D}(E) \propto \sum_{n_x, n_y, n_z} \delta \left(E - (E_g + E_{n_x, n_y, n_z}) \right) \quad (\text{II-36})$$

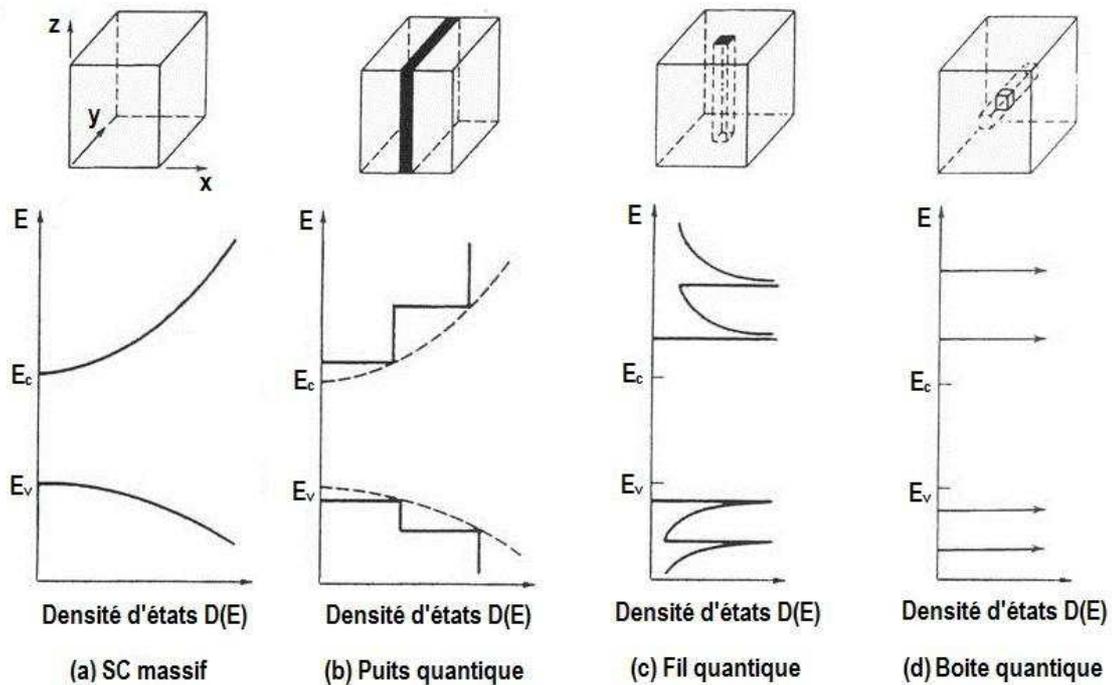


Figure II-7 : Représentation des différentes possibilités de confinement dans un SC et densités d'états électroniques $D(E)$ correspondantes dans le cas du SC massif (a), du puits quantique (b), du fil quantique (c) et de la boîte quantique (d).

II-4. Propriétés des boîtes quantiques

II-4-1. Confinement des porteurs

Pour obtenir des boîtes quantiques, il faut donc confiner les porteurs dans les trois directions de l'espace. Le principe consiste à piéger de petites inclusions d'un matériau semi-conducteur de petite bande interdite dans une matrice de bande interdite plus large [14]. Les états électroniques de bande de conduction (respectivement de bande de valence) sont situés à plus basse (respectivement plus haute) énergie que le continuum d'états du matériau semi-conducteur massif (voir Figure II-8). A cause de cette configuration de bande particulière, une boîte quantique est un puits de potentiel à la fois pour les électrons et les trous. Les niveaux d'énergie confinés dans les boîtes dépendent évidemment du choix du matériau semi-conducteur, de la géométrie et de la taille de la boîte mais aussi du matériau environnant qui joue sur la hauteur de barrière de potentiel.

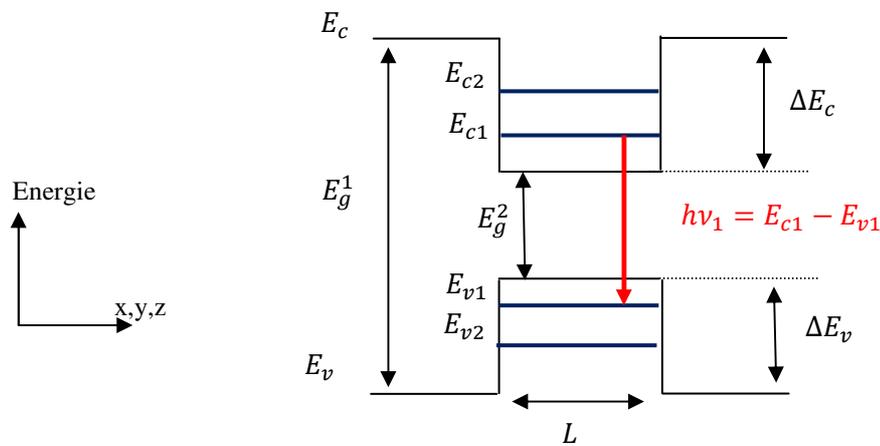


Figure II-8 : Diagramme de bande schématisé d'une boîte quantique semi-conductrice de bande interdite directe E_g^2 enterrée dans une matrice de plus grande bande interdite E_g^1 .

Les valeurs indiquées sont pour : la largeur du puits (L), la séparation entre la bande de valence et de conduction des deux matériaux (ΔE_c et ΔE_v), les niveaux d'énergie pour les électrons et les trous (E_c et E_v) dans la boîte quantique, la fréquence de transition optique du niveau fondamental (ν_0). [15]

II-4-2. Les dimensions caractéristiques des boîtes quantiques

Pour obtenir une quantification des niveaux énergétiques, il faut réduire le nombre de degrés de liberté des électrons, c'est-à-dire les confiner. Lorsque cette limitation est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde λ de De Broglie, le phénomène de quantification commence à apparaître pour les électrons et les trous. Cette longueur d'onde est égale à :

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e^*E}} \quad (\text{II-37})$$

Où E est l'énergie de l'électron et m_e^* la masse effective de l'électron qui a une valeur de 10 à 100 fois plus petite que sa masse libre. Par exemple, dans le cas de *GaN*, la masse effective vaut 0,20 fois la masse de l'électron libre.

Pour que les effets de confinement quantique soient mesurables, il faut que l'énergie E soit supérieure à l'énergie thermique kT dont la longueur d'onde associée est appelée longueur d'onde de De Broglie thermique, donnée par la relation :

$$\lambda_{th} = \frac{h}{\sqrt{2m_e^*kT}} \quad (\text{II-38})$$

Cette valeur est de l'ordre de 17 nm à température ambiante pour le *GaN*. Pour les semi-conducteurs usuels, cette valeur est de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres.

La condition imposée par la longueur d'onde de De Broglie n'est toutefois pas suffisante pour garantir un bon confinement des porteurs dans la boîte, et il existe deux autres limites, une inférieure et l'autre supérieure pour conserver ce confinement. Contrairement aux matériaux de grandes dimensions où l'énergie de luminescence correspond à l'énergie de la bande interdite, les structures confinées émettent à une énergie supérieure. Plus la structure est mince, plus l'énergie de luminescence de l'hétéro-structure sera importante et lorsque l'énergie de luminescence est supérieure à l'énergie de confinement, cela signifie qu'il n'y a plus de niveau électronique possible dans la boîte.

Cette limite est la limite inférieure pour la taille de la boîte. Elle est donnée par :

$$L_{inf} = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m_e^* \Delta E_c}} \quad (\text{II-39})$$

Avec ΔE_c le potentiel de confinement (qui est défini par la discontinuité de la bande de conduction pour une hétéro-structure de type-I) égale à 1.75 eV pour *GaN/AlN*. [16]

D'autre part, l'écart entre deux niveaux énergétiques diminue lorsque la taille de la boîte augmente. La boîte est considérée comme trop grande lorsque l'écart entre les niveaux énergétiques devient de l'ordre de grandeur de l'énergie thermique, ce qui entraîne le peuplement des niveaux supérieurs par effet thermique et la perte de l'effet de confinement quantique.

Par exemple, en tenant compte de ces limites, la taille des boîtes quantiques pour le système *GaN/AlN* doit être comprise entre 1 et 17 nm à 300 K.

II-4-3. Transitions entre états confinés

La quantification des états des porteurs en niveaux d'énergie discrets se répercute sur le spectre d'absorption sous forme de pics en remplacement du continuum dans le cas du semi-conducteur massif. Toutefois, les transitions entre états confinés de valence et de conduction doivent vérifier les règles de sélection découlant du recouvrement des fonctions d'ondes respectives de l'électron et du trou. Si l'intégrale de recouvrement est nulle, la transition est interdite. Dans le cas contraire, elle est permise. Concernant les BQ, la première transition autorisée est appelée « transition fondamentale » (figure II-9), les autres transitions étant appelées « transitions excitées ».

L'énergie de la transition fondamentale définit par la somme du gap du semi-conducteur massif et des énergies des premiers niveaux de confinement de l'électron et du trou : $(n_x, n_y, n_z) = (1, 1, 1)$

$$E_{tran} = \hbar\omega = E_g + E_{c1} + E_{v1} \quad (\text{II-40})$$

$$E_{tran} = E_g + \frac{3\pi^2\hbar^2}{2} \cdot \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_v^*} \right) \cdot \left(\frac{1}{L_x^2} + \frac{1}{L_y^2} + \frac{1}{L_z^2} \right) \quad (\text{II-41})$$

Cette équation montre que l'énergie de transition augmente lorsque la taille de la boîte diminue.

II-4-4. Le schéma électronique d'une structure à BQ

Pour obtenir des boîtes quantiques, il convient de réaliser de petits volumes d'un matériau, avec des dimensions d'une dizaine de nanomètres afin de bénéficier de la quantification 0D. En procédant à la croissance tridimensionnelle d'une couche contrainte en compression, il se forme de petits agrégats cohérents de matériaux, les îlots quantiques.

On parle de croissance de type Stranski-Krastanow. Ce que met en évidence la présence d'une couche "résiduelle". Elle est appelée "couche de mouillage" ou "Wetting Layer (WL)". Celle-ci s'apparente à un puits quantique et doit être pris en compte pour une meilleure compréhension de ces structures.

Le schéma électronique d'une boîte quantique devient alors celui présenté la figure II-9. Nous retrouvons les transitions discrètes propres aux boîtes quantiques (transition fondamentale et excitée) auxquelles viennent s'ajouter les transitions propres à la couche de mouillage.

La couche de mouillage intervient dans le fonctionnement des structures à base de boîtes quantiques. Ainsi, dans de nombreux modèles [17, 18], les porteurs sont directement injectés dans la couche de mouillage avant d'être capturés dans les boîtes quantiques. Rappelons que beaucoup des propriétés des structures à boîtes quantiques reposent sur l'efficacité de l'injection des porteurs. La présence d'une couche de mouillage est donc souvent considérée comme responsable des caractéristiques décevantes d'un composant. Ainsi dans un premier temps, les lasers à boîtes quantiques ont montré des caractéristiques dynamiques plus faibles que ce qui était attendu. Une des raisons invoquées est la dynamique de la couche de mouillage et du niveau excité plus lente que celle du niveau fondamental. Ces niveaux servant de réservoir de porteurs pour la transition fondamentale, leurs relatives lenteurs pénalisent le bon fonctionnement dynamique du laser. Des évolutions majeures, telles que le dopage P de la structure ou le couplage par effet tunnel entre le bas de bande d'un puits quantique et l'état fondamental des îlots sont des solutions prometteuses pour résoudre ce problème [19 – 21].

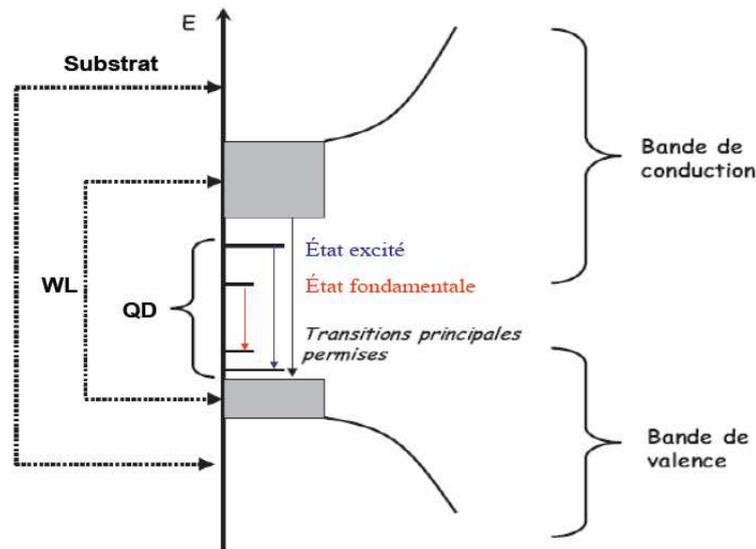


Figure II-9 : Schéma électronique d'un îlot quantique (QD), de sa couche de mouillage (WL) et du substrat [22].

II-4-5. Largeurs homogènes et inhomogènes des boîtes quantiques

Les boîtes quantiques ayant un spectre discret d'énergie, la largeur de raie d'une transition optique est faible. La durée de vie radiative des porteurs τ donne une limite inférieure pour la largeur de la raie d'émission Γ dite homogène, qui est donnée selon la relation d'incertitude d'Heisenberg par $\Gamma \approx \hbar/\tau$. Sachant que le temps radiatif typique dans une boîte quantique semi-conductrice est l'ordre de $\tau \sim 1 \text{ ns}$. La largeur homogène devrait être très faible $\Gamma \sim 1 \mu\text{eV}$.

Des études de spectroscopie optique de boîtes uniques isolées par des étapes technologiques sont confirmées la structure quasi-atomique des boîtes [23 – 25].

Un profil lorentzien et des largeurs de raies homogènes de quelques μeV ont en effet été obtenues à basse température (figure II-10. (a)). En supposant que ces largeurs de raie sont homogènes, leur valeur est faiblement perturbée par la dispersion de paires électron-trou avec les phonons acoustiques et optiques ou par des impuretés. Par contre, celle-ci augmente avec la température et avec la densité de porteurs jusqu'à atteindre quelques dizaines de meV à température ambiante (figure II-10. (b) et (c)).

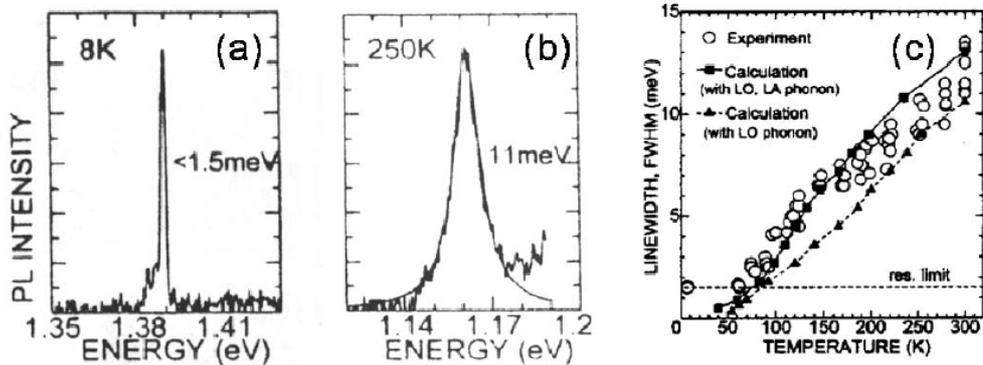


Figure II-10 : Spectres de photoluminescence d'une boîte quantique unique à différentes températures : (a) 8 K et (b) 250 K. (c) Evolution de la largeur à mi-hauteur des raies d'émission en fonction de la température. D'après [26]

Ce comportement en température est encore gouverné par le couplage des porteurs avec les modes de vibration du réseau cristallin environnant mais aussi par les effets d'interactions coulombiennes entre les porteurs dans les boîtes [27, 28]. Cet élargissement homogène important à haute température restreint donc le concept d'atome artificiel pour les boîtes quantiques.

Généralement, un grand nombre de boîtes quantiques est sondé et leur dispersion en taille conduit à un élargissement important des pics d'émission ou d'absorption. Cet élargissement a cette fois un profil gaussien et est qualifié d'inhomogène. Il dépend du nombre de boîtes, de leurs formes, de leurs dispersions et de la technique de fabrication. Une illustration expérimentale de l'élargissement inhomogène est présentée par des pics de photoluminescence d'un ensemble de boîte sur la figure II-11. La largeur à mi-hauteur du pic à basse température est de l'ordre de quelques dizaines de meV pour un ensemble de boîtes auto-assemblées comparée à quelques μeV pour une seule boîte.

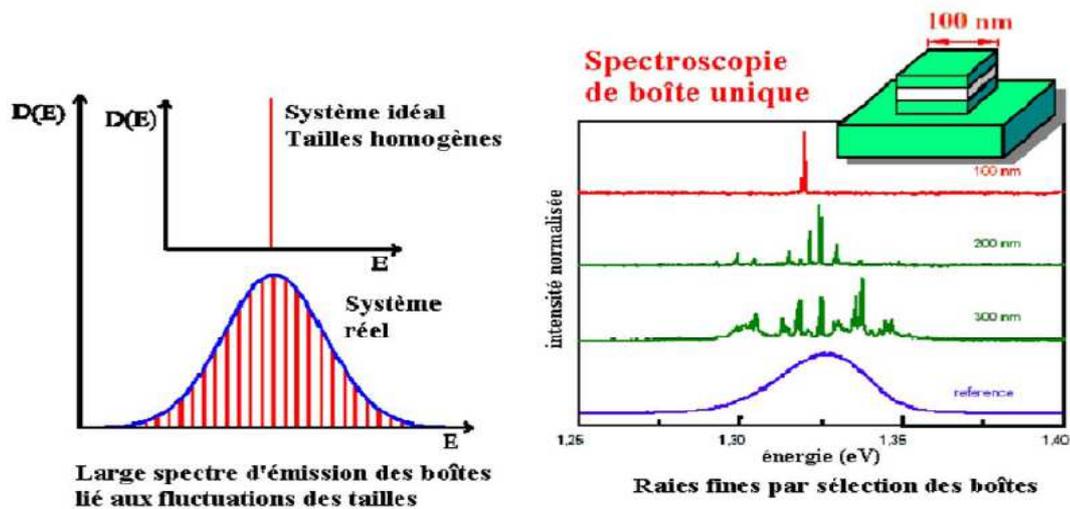


Figure II-11 : Spectres de photoluminescence à basses températures réalisés sur un nombre variable de boîtes quantiques jusqu'à une boîte unique. L'influence de la dispersion en taille des boîtes sur la largeur du spectre obtenu est mise en évidence [29].

II-5. Fabrication des boîtes quantiques

II-5-1. Lithographie

Il existe aujourd'hui de nombreuses techniques de fabrication de boîtes quantiques. La première technique étudiée au début des années quatre-vingt, a été la fabrication de boîtes par Lithographie et gravure de puits quantique.

Cette technique est intensivement étudiée car elle est compatible avec une production de masse à l'échelle industrielle. La procédure est complexe et s'effectue généralement en trois étapes :

- La première étape implique la fabrication d'un masque qui est une image des nanostructures à fabriquer.
- Ensuite, le masque sert à transférer l'image des nanostructures vers une résine déposée sur la surface à graver. Pour se faire, la résine subit une attaque chimique sélective, pour ensuite pouvoir attaquer le substrat au niveau des zones qui auraient été exposées ou non à un rayonnement UV.

- La troisième étape consiste à transférer le motif, imprimé dans la résine, au semi-conducteur par une gravure ionique.

Cette technique présente plusieurs inconvénients : il est difficile d'atteindre de faibles dimensions latérales ($< 20 \text{ nm}$) et leur surface souffre de nombreux défauts nuisibles pour les propriétés optiques. De plus, ce procédé est lourd à mettre en place, peu reproductibles et onéreux.

Pour atteindre des dimensions encore plus petites, plusieurs voies de recherche ont été développées :

- La lithographie utilisant les rayons X qui permet d'atteindre des dimensions plus petites. Cette technique est encore à l'état d'étude.
- La lithographie utilisant des faisceaux d'électrons [30], qui consiste à diriger le faisceau d'électron à la surface. Cette technique permet d'atteindre de résolutions d'une dizaine de nanomètres [31, 32]. La limite est fixée par la résine en raison de la longueur finie des molécules organiques et de la taille des grains.
- La lithographie avec des faisceaux d'ions. Due à la faible longueur d'onde de De Broglie des ions, la diffraction du faisceau d'ions est négligeable et à cause de la masse plus grande, le problème de rétro-diffusion est moins important que dans le faisceau d'électrons [33].

II-5-2. Technique par croissance épitaxiale

II-5-2-1. Modes de croissance cristalline

Aujourd'hui, la fabrication des boîtes de semi-conducteurs III-V se fait essentiellement par croissance épitaxiale selon le mode de croissance Stranski-Krastanov du nom des deux chercheurs ayant décrit ce mode de croissance en 1939 [34].

En réalité, la croissance cristalline sur un substrat par MBE (Molecular Beam Epitaxy) ou MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) peut se produire de trois manières

différentes comme le montre schématiquement la Figure II-12 : le mode Franck van der Merwe (FM), le mode Volmer Weber (VW) et enfin le mode Stranski-Krastanow (SK).

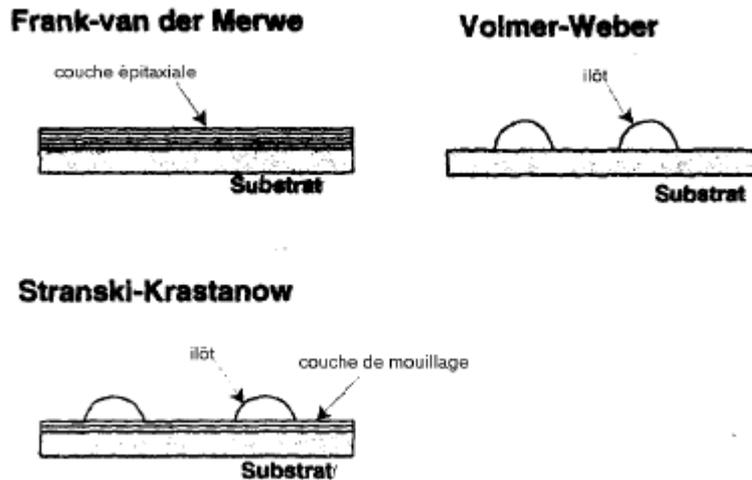


Figure II-12 : Trois modes de croissance sur un substrat : Franck van der Merwe (FM), Volmer-Weber (VW) et Stranski-Krastanow (SK). [35]

- Le mode de Frank Van der Merwe : La croissance est dite bidimensionnelle car réalisée couche par couche du fait de l'interaction favorable entre le film déposé et le substrat. Le dépôt d'une couche supérieure ne débute qu'au terme de la croissance de la couche inférieure.
- Le mode de croissance Volmer weber, où la croissance est immédiatement tri-dimensionnelle (3D), à partir de petits germes formés à la surface du substrat. Ceux-ci croissent pour former des boîtes qui coalescent ensuite pour donner une couche mince continue. Ce mode de croissance est habituellement favorisé lorsque les atomes formant la couche déposée sont plus fortement liés entre eux qu'avec le substrat, comme c'est le cas par exemple pour la croissance des métaux sur les isolants.
- Le troisième mode de croissance est le mode Stranski-Krastanov, où la croissance est une combinaison des deux modes précédents : après un début de croissance 2D, on observe une transition vers un mode croissance 3D avec l'apparition d'îlots 3D.

C'est ce mode qui est aujourd'hui essentiellement utilisé pour la fabrication des boîtes quantiques.

II-5-2-2. Eventail de nanostructures obtenues

Les premières nanostructures à base de nitrures ont été obtenues au début des années 1990, sous la forme de puits quantiques cristallisés dans la phase wurtzite selon la direction de croissance [0001]. Au fil des années, des boîtes quantiques, puis des nanofils, ont été obtenus dans la même orientation cristalline. A quelques exceptions près, aujourd'hui encore la majorité écrasante des études concerne la phase cristalline wurtzite, que ce soit selon un plan de croissance (0001), ou selon $(11\bar{2}0)$ plus récemment. Les deux paragraphes suivants reprennent les premières réalisations de puits quantiques, boîtes quantiques.

II-5-2-2-1. Puits quantiques

Dans l'orientation [0001] de la phase wurtzite, des puits quantiques de *GaN* dans *AlGaN* sont pour la première fois obtenus par MOCVD à basse pression [36]. Des super-réseaux de puits quantiques *GaN/AlGaN* sont obtenus par MOVPE [37], puis des puits quantiques d'*InGaN* de composition variable, par MOCVD [38]. Dans l'orientation $[11\bar{2}0]$, des puits quantiques *GaN/AlGaN* ont récemment été synthétisés par MBE [39].

II-5-2-2-2. Boîtes quantiques

Dans l'orientation [0001] de la phase wurtzite, des boîtes quantiques de *GaN* dans *AlGaN* sont pour la première fois obtenues par MOCVD [40]. Très rapidement, des boîtes de *GaN* sur *AlN* sont obtenues par MBE [41], puis des boîtes d'*InGaN* sur *GaN* par la même technique. Quelques années plus tard, la MOVPE est utilisée pour construire des boîtes quantiques d'*InN* sur *GaN*. [42], puis de *GaN* sur *AlN* [43]. Dans l'orientation $[11\bar{2}0]$, la croissance de boîtes quantiques *GaN* sur *AlN* par MBE, a récemment été démontrée [44]. Enfin, la croissance de boîtes quantiques, selon l'orientation [001] de la phase cubique de boîtes quantiques *GaN* sur *AlN*, par MBE, a été présentée il y a quelques années [45].

II-6. Conclusion

Dans ce deuxième chapitre, nous avons rappelé les bases théoriques de fonctionnement des diodes laser à semi-conducteur où nous avons envisagé les phénomènes participant à la création de la lumière laser. Ensuite, nous avons montré l'effet de la miniaturisation des dimensions sur la densité d'états des structures à semi-conducteur, avec l'introduction de la notion des boîtes quantiques et la présentation de leurs propriétés théoriques. Enfin, nous avons finalisé ce chapitre par la citation de quelques techniques d'élaboration des boîtes quantiques.

Références

- [1] Albert Einstein. « On the quantum mechanics of radiation », *Physikalische Zeitschrift*, **18**, 121–128 (1917).
- [2] J. Wilson, J. F. B. Hawkes, *Optoelectronics: an introduction*. 3^{ème} ed. Europe: Prentice Hall (1998).
- [3] L. A. Coldren, S. W. Corzine, *Diode lasers and photonic integrated circuits*. New Jersey: John Wiley & Sons. 1995.
- [4] Z. HAO, « Caractérisation de structures à base d'îlots et batonnets quantiques en terme de bruit, de non linéarité et d'injection optique », Thèse de doctorat, Université de Rennes, France (2013).
- [5] Y. Arakawa and H. Sakaki. *App. Phys. Lett*, **40** (11), 939–941 (1982).
- [6] T. H. Maiman, *Phys. Rev. Lett*, **4**, 564 (1960).
- [7] R. N. Hall, G. E. Fenner, J. D. Kingsley, T. J. Soltys, R. O. Carlson, *Phys. Rev. Lett*, **9**, 366 (1962).
- [8] O. V. Bogdankevich, *Quantum Electron*, **24**, 1031 (1994).
- [9] B. R. Nag, « *Physics of Quantum Well Devices* »: Kluwer Academic Publishers, **7**, (2000).
- [10] S. Hoogland, S. Dhanjal, A. C. Tropper, J. S. Roberts, R. Haring, R. Paschotta, F. Morier-Genoud and U. Keller, *IEEE Photon. Technol. Lett*, **12**, 1135-1137 (2000).
- [11] T. S. Moise, L. J. Guido and R. C. Barker, *Physical review B*, **47**, 6758-6761 (1993).
- [12] Mitsuru Sugawara. *Optical semiconductor device laboratory LTD. ATSUGI, Japan*.
- [13] E. Rosencher and B. Vinter, « *Optoélectronique* ». Masson, Paris (France), 1998.
- [14] P. M. Petroff, A. Lorke and A. Imamoglu. *Physics Today*, **54**, no. 5, 46–52 (2001).
- [15] E. Dupuy, « Croissance et spectroscopie de boîtes quantiques diluées d'InAs/InP (001) pour des applications nanophotoniques à 1,55 μm », thèse de doctorat, Université de Sherbrooke, Canada (2009).

-
- [16] M. Tchernycheva, L. Nevou, L. Doyennette, F. H. Julien, E. Warde, F. Guillot, E. Monroy, E. Bellet-Amalric, T. Remmele, et M. Albrecht, *Phys. Rev. B*, **73**, 125347 (2006).
- [17] A. V. Uskov and J. McInerney, F. Adler, H. Schweizer, and M. H. Pilkuhn, *Appl. Phys. Lett*, **72** (1), 5 (1998).
- [18] K. Veselinov, F. grillot, P. Miska, E. Homeyer, P. Caroff, C. Platz, J. Even, X. Marie, O. Dehaese, S. Loualiche and A. Ramdane, *Optical and Quantum Electronics*, **38**, 369-379 (2006).
- [19] Bhattacharya and Gosh, *Appl. Phys. Lett*, **80**, May (2002).
- [20] Bhattacharya, Gosh, Pradhan, Singh, Urayama, Kim and Norris, *IEEE Journal of Quantum Electronics*, **39**, (2003).
- [21] D. G. Deppe, H. Huang, O. B. Shchekin, *IEEE J. Quantum Electron*, **38**, 1587-1593 (2002).
- [22] C. M. Simon, « Contrôle optique de l'exciton dans des boîtes quantiques individuelles », thèse doctorat, Université de Toulouse, France (2010).
- [23] J. Y. Marzin, J. M. Gérard, A. Izraël, D. Barrier & G. Bastard. *Phys. Rev. Lett*, **73**, no. 5, 716–719 (1994).
- [24] M. Grundmann, J. Christen, N.N. Ledentsov, J. Bohrer, D. Bimberg, S.S. Ruvimov, P. Werner, U. Richter, U. Gosele, J. Heydenreich, V.M. Ustinov, A.Yu. Egorov, A.E. Zhukov, P.S. Kop'ev & Zh. I. Alferov, *Phys. Rev. Lett*, **74**, no. 20, 4043–6 (1995).
- [25] K. Matsuda, K. Ikeda, T. Saiki, H. Tsuchiya, H. Saito & K. Nishi, *Phys. Rev. B*, **63**, no. 12, 121304 (2001).
- [26] L. Besombes, K. Kheng, L. Marsal & H. Mariette. *Phys. Rev. B*, **63**, 155307–155307 (2001).
- [27] C. Kammerer, G. Cassabois, C. Voisin, C. Delalande, Ph. Roussignol, A. Lemaitre & J. M. Gerard, *Physical Review B*, **65**, no. 3, 033313 (2002).
- [28] P. Caroff, « Croissance de boîtes quantiques *InAs/InP* (113)B pour les applications en télécommunications optiques». Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Rennes, France (2005).

-
- [29] J. Y. Marzin, J-M. Gérard, A. Israel, D. Barrier and G. Bastard, Phys. Rev. Lett, **43**, 716 (1994).
- [30] A. Schere and H. G. Craighead , Appl. Phys. Lett, **49**, 1284-1286 (1986).
- [31] H.G. Craighead, R. E. Howard, L. D. Jakel and P. M. Mankievich, Appl. Phys. Lett, n°1, **42**, 38-40 (1983).
- [32] M. B. Stern, H. G. Craighead, P. F. Liao and P. M. Mankievich, , Appl. Phys. Lett, **45**, 410-412 (1984).
- [33] B. Salem, « Spectroscopie optique des ilots quantique d' *InAs/InP* (001) pour La réalisation de composants optoélectronique émettant a $1.55 \mu m$ », thèse de doctorat, INSA, Lyon, France (2003).
- [34] I. M. Stransky et L. Krastanov Akad. Wis. Lit Abh. Math. Naturwiss. K1. Iib, 146: 797 (1939).
- [35] S. Mitsuru « Semiconductors and semimetals 60 Self assembled *InGaAs/GaAs* Quantum dots », Chapitre 2, p119, (edition Academic Press 1999).
- [36] M. A. Khan, R. A. Skogman, J. M. Van Hove, S. Krishnankutty et R. m. Kolbas, App. Phys. Lett, **56** N° 13, 1257 (1990).
- [37] K. Itoh, T. Kawamoto, H. Amano, K. Hirmatsuet I. Akasaki, Jap. J of App. Phys, **30**, 1924 (1991).
- [38] S. Nakamura, T. Mukati, M. Senoh, S. I. Nagahama et N. Iwasa, J of App. Phys, **15**, N°74, 3911 (1993).
- [39] H. M. Ng, App. Phys. Lett, **80**, N° 23, 4369 (2002).
- [40] S. Tanaka, S. Iwai et Y. Aoyagi, App. Phys. Lett, **69**, N° 26, 4096 (1996).
- [41] B. Daudin, F. Widmann, G. Feuillet, Y. Samson, M. Arlery et J. L. Rouvière, Phys. Rev. B, **56**, 7069 (1997).
- [42] O. Briot, B. Maleyre and S. Ruffenach, App. Phys. Lett, **83**, N° 14, 2919 (2003).
- [43] D. Simeonov, E. J. F. Carlin Feltin, R. Butté, M. Ilegems and N. grand-Jean, J of App. Phys, **99**, 083509 (2006).
- [44] S. Founta, F. Rol, E. Bellet-Amalric, J. Bleuse, B. Daudin, B. Gayral, H. Murette and C. Moisson, App. Phys. Lett, **86**, 171901 (2005).
- [45] E. Martinez- Guerrero, C. Adelmann, F. Chabuel, J. Simon, N. T. Pelekanos, G. Mula, B. Daudin, G. Feuillet and H. Mariette, App. Phys. Lett, **77**, 809 (2000).
-

CHAPITRE III

*Approche physique et paramètres
de calcul*

Chapitre III

Approche physique et paramètres de calcul

III-1. Introduction.....	75
III-2. Niveaux d'énergie et fonction d'onde dans une boîte quantique.....	75
III-3. Élément de matrice de transition.....	79
III-4. Niveaux d'énergie d'une boîte quantique sous contrainte.....	80
III-5. La longueur d'onde d'émission dans les diodes lasers à boîtes quantiques.....	83
III-6. Notion de pseudo niveaux de Fermi.....	84
III-7. Emission et gain de la boîte quantique.....	85
III-7-1. Coefficients d'absorption et d'émission.....	85
III-7-2. Forme analytique du gain optique	87
III-7-3. Densité de porteurs à la transparence	87
III-7-4. Le gain différentiel	87
III-8. Le facteur de confinement optique	88
III-9. Gain modal.....	89
III-10. Condition de seuil, gain de seuil	90
III-11. La densité de courant.....	90
III-11-1. Le courant de seuil	90
III-11-2. Formule analytique du courant de seuil.....	92
III-11-3. Dépendance en température.....	94
III-12. Conclusion.....	95
Références.....	96

III-1. Introduction

Les diodes lasers à boîte quantique sont des dispositifs multicouches, réalisées en utilisant des supers-réseaux appelés Hétéro-structures. Une boîte quantique est une structure à couche mince semi-conductrice qui possède une énergie de gap donnée confinée entre deux couches de semi-conducteurs d'énergie de gap plus élevée où la couche active, de bande interdite inférieure à celle adjacentes, constitue un puits de potentiel pour les porteurs dans les trois directions. Dans une couche active d'épaisseur inférieure à quelques centaines d'Angströms, ceux-ci sont soumis à la quantification de leur mouvement. La modélisation de tels composants nécessite une analyse approfondie des phénomènes que seul un outil complet et puissant peut réaliser.

Dans ce chapitre, nous détaillerons la méthode de détermination du gain optique et des coefficients d'émission dans des structures à boîte quantique à base des matériaux nitrurés, afin d'en déduire les caractéristiques gain-courant des diodes laser.

Ceci nous permettra de mettre en place une méthodologie générale de détermination du fonctionnement au seuil des diodes laser à boîte quantique, en termes de densité de courant de seuil et de longueur d'onde d'émission.

III-2. Niveaux d'énergie et fonction d'onde dans une boîte quantique

Le calcul des niveaux d'énergie des électrons et des trous dans les bandes de conduction et de valence respectivement constitue la première étape de l'étude d'un système à boîte quantique, nous présentons dans cette partie la méthode de résolution théorique que nous appliquons au cas de la boîte quantique *GaN/AlGaN*.

On considère une particule dans une boîte de dimension L_x, L_y, L_z .

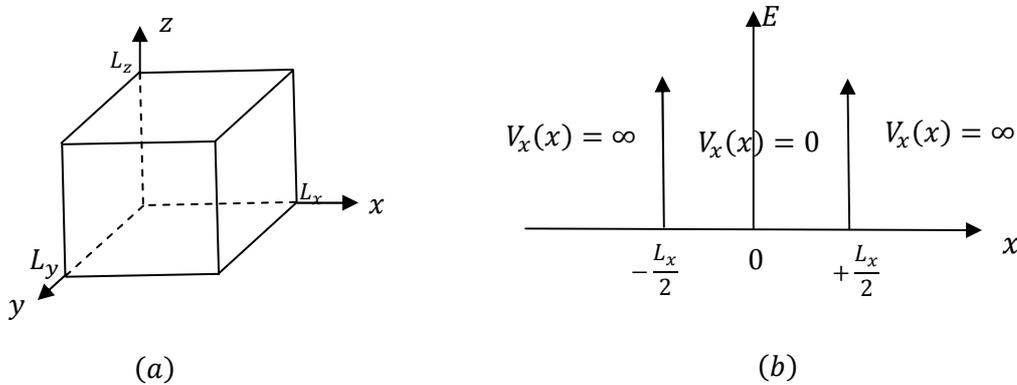


Figure III-1 : (a) : boîte quantique, (b) : représentation selon la direction x d'un puits de potentiel infini.

L'énergie potentielle $V(r)$ de ce système est donnée par [1] :

$$V(x, y, z) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z) \quad (\text{III-1})$$

Avec

$$V_x(x) = 0 \text{ si } |x| \leq \frac{L_x}{2} \quad \text{et} \quad V_x(x) = \infty \text{ ailleurs}$$

$$V_y(y) = 0 \text{ si } |y| \leq \frac{L_y}{2} \quad \text{et} \quad V_y(y) = \infty \text{ ailleurs}$$

$$V_z(z) = 0 \text{ si } |z| \leq \frac{L_z}{2} \quad \text{et} \quad V_z(z) = \infty \text{ ailleurs}$$

x, y, z des variables qui peuvent être séparés. Les valeurs propres et la fonction d'onde divisées en trois parties selon chaque axe, nous devons donc écrire :

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \cdot \psi_z(y) \quad (\text{III-2})$$

$$E = E_x + E_y + E_z \quad (\text{III-3})$$

Comme dans le cas unidimensionnel, les murs de potentiel infini empêchent la particule de quitter la boîte, et la fonction d'onde n'est non nulle que pour \vec{r} se trouvant à l'intérieur de la boîte.

L'équation de Schrödinger que nous devons résoudre est donc :

$$\Delta\psi + \frac{2m^*}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0 \quad (\text{III-4})$$

Ce qui donne pour la direction x :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} + V_x(x) \right] \psi_x(x) = E_x \psi_x(x) \quad (\text{III-5})$$

Des équations similaires pour les autres directions y et z .

La solution générale de l'équation (III-5) pour $x \leq \frac{L_x}{2}$ est donnée sous la forme :

$$\psi_x(x) = A \sin(k_x x) + B \cos(k_x x) \quad (\text{III-6})$$

En dehors de la boîte le potentiel est infini et la seule solution possible est $\psi = 0$.

Prenant l'origine au centre de la boîte cubique, la condition de continuité nous donne:

$$\psi_x\left(\pm \frac{L_x}{2}\right) = 0 \quad (\text{III-7})$$

Ce qui implique :

$$A = 0 \text{ et } k_x = \frac{\pi}{L_x} + \frac{2n\pi}{L_x}, n \in \mathbb{N}^* \quad (\text{III-8a})$$

Où

$$B = 0 \text{ et } k_x = \frac{2n\pi}{L_x}, n \in \mathbb{N}^* \quad (\text{III-8b})$$

Donc $k_x = \frac{n_x \pi}{L_x}$, n_x un entier strictement positif et :

$$E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \frac{n_x^2}{L_x^2} \quad (\text{III-9})$$

Au total, en sommant sur x, y et z , l'énergie d'un porteur confiné dans la boîte quantique résultant des contributions de son mouvement sur les trois axes de quantification x, y et z .

A l'expression que nous avons déjà donnée dans le chapitre II (Equation II-35) [2] :

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \quad (\text{III-10})$$

D'où n_x, n_y et n_z sont des nombres quantiques strictement positifs (dans la suite de notre travail, nous les remplacerons par l, n et m respectivement).

Par conséquent, l'énergie de confinement des électrons est donnée par :

$$E_{c l n m} = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\left(\frac{l\pi}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{n\pi}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{m\pi}{L_z} \right)^2 \right) \quad (\text{III-11})$$

Et pour les trous par :

$$E_{v, n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2}{2m_v^*} \left(\left(\frac{n_x \pi}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{n_z \pi}{L_z} \right)^2 \right) \quad (\text{III-12})$$

Avec

$m_{c,v}^*$: la masse effective de l'électron et du trou.

Ces équations nous permettent une approche analytique de la variation des premiers niveaux d'énergie dans des boîtes quantiques en fonction de leurs dimensions.

La figure III-2 représente la variation des premiers niveaux d'énergie de confinement avec l'énergie de transition électron-trou pour une boîte quantique cubique ($L_x = L_y = L_z = L$) à base de *GaN* en fonction du côté L du cube.

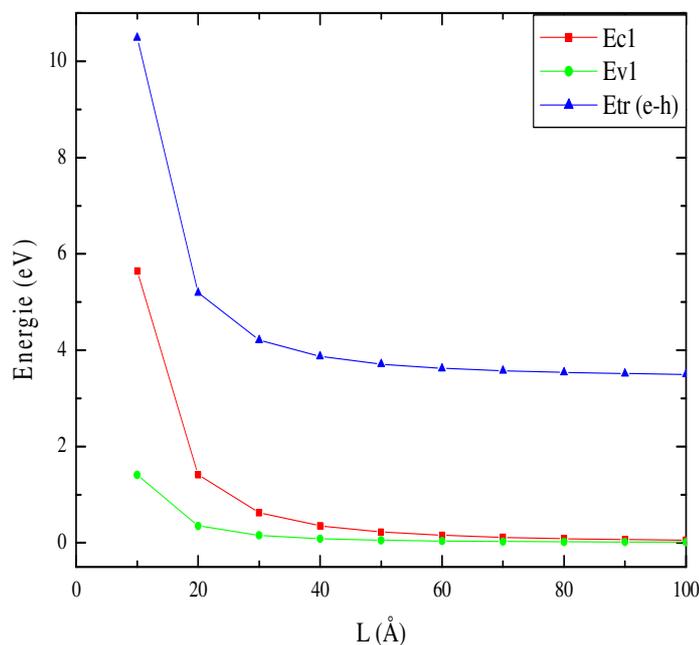


Figure III-2 : Variation du premier niveau d'énergie de confinement des électrons et des trous (E_{c1} et E_{v1}) et de transition E_{tr} (e-h) en fonction de la taille de la boîte quantique à base de GaN .

On remarque que les énergies des premiers niveaux de confinement et de transition diminuent avec l'augmentation de la largeur de la boîte quantique, c'est dû au resserrement des bandes quantiques.

III-3. Élément de la matrice de transition

L'élément de matrice de transition $|M_T|^2$ détermine la force d'interaction entre deux états, cette interaction peut être forte, négligeable ou nulle, tout dépend des fonctions d'onde qui décrivent les deux états des électrons et des trous. Il ne dépend pas de la direction des transitions entre bandes, il est le même pour l'émission stimulée et l'absorption.

Pour un matériau massif en utilisant toutes les valeurs de k possibles, l'élément de matrice de transition est isotrope :

$$|M_T|^2 = M_b^2 = \frac{m_0}{6} \left(\frac{m_0}{m_e^*} - 1 - 2F_b \right) \left(\frac{E_g(E_g + \Delta_0)}{E_g + \Delta_0/3} \right) \quad (\text{III-13})$$

Où F_b est un paramètre d'énergie de la matrice des moments M_b .

Pour les boîtes quantiques, l'élément de matrice du moment utilisé pour le calcul du gain est donnée par :

$$|M_T|^2 = \left(\frac{q\hbar}{2E_{cv}} \right)^2 \frac{1}{m_0} \left(\frac{m_0}{m_e^*} - 1 \right) \frac{E_g \cdot [(E_g + \Delta_1 + \Delta_2) \cdot (E_g + 2\Delta_2) - 2\Delta_3^2]}{(E_g + \Delta_1 + \Delta_2)(E_g + \Delta_2) - \Delta_3^2} \quad (\text{III-14})$$

$\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3$ sont les énergies de déplacement spin-orbit.

III-4. Niveaux d'énergie d'une boîte quantique sous contrainte

Nous allons décrire dans cette partie les équations utilisées pour calculer les niveaux d'énergies dans une boîte quantique sous contrainte pour calculer le gain dans ce cas. Alors, considérons, une couche de GaN crue le long de l'axe c (axe z) sur une couche de $Al_xGa_{1-x}N$. Le tenseur de la contrainte ε exprimé par les équations du premier chapitre (I-2, I-3) est exprimé par [3]:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a(AlGaN) - a(GaN)}{a(GaN)} \quad (\text{III-15})$$

$$\varepsilon_{zz} = -\frac{2C_{13}}{C_{33}} \cdot \varepsilon_{xx} \quad (\text{III-16})$$

$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0$$

Le décalage hydrostatique dans la bande de conduction est donné par [4] :

$$\delta E_c = a_{cz} \cdot \varepsilon_{zz} + a_{ct} \cdot (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \quad (\text{III-17})$$

a_{cz} et a_{ct} sont les potentiels de déformation de la bande de conduction parallèle et perpendiculaire à l'axe c .

Les énergies de la bande de valence peuvent être calculées par [5]:

$$E_{hh}(\varepsilon) = -\frac{\Delta_1 + 3\Delta_2}{2} + D_1 \varepsilon_{zz} + D_2 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + \frac{D_3 \varepsilon_{zz} + D_4 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})}{2} + \frac{1}{2} \cdot \sqrt{[\Delta_1 - \Delta_2 + D_3 \varepsilon_{zz} + D_4 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})]^2 + 8\Delta_3^2} \quad (\text{III-18})$$

$$E_{lh}(\varepsilon) = -\frac{\Delta_1 + 3\Delta_2}{2} + D_1 \varepsilon_{zz} + D_2 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) + \frac{D_3 \varepsilon_{zz} + D_4 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})}{2} - \frac{1}{2} \cdot \sqrt{[\Delta_1 - \Delta_2 + D_3 \varepsilon_{zz} + D_4 (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})]^2 + 8\Delta_3^2} \quad (\text{III-19})$$

$$E_{cc}(\varepsilon) = (D_1 + D_3) \varepsilon_{zz} + (D_2 + D_4) (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) \quad (\text{III-20})$$

Les paramètres D_j ($j = 1..4$): sont les potentiels de déformation pour les bandes de valence.

ε_{kl} : sont les composants du tenseur de déformation.

Δ_1 : est le paramètre pour le champ cristallin, et $\Delta_2 = \Delta_3$ les paramètres pour l'interaction spin-orbite.

Paramètres de calcul	<i>GaN</i>	<i>AlN</i>
Paramètres des énergies		
Δ_1 (eV)	0.01	-0.0227
$\Delta_2 = \Delta_3$ (eV)	0.00567	0.012
Potentiels de déformation		
(eV)		
a_{cz}	4.6	4.5
a_{ct}	4.6	4.5
D_1	-3.7	-17.1
D_2	4.5	7.9
D_3	8.2	8.8
D_4	-4.1	-3.9
Constantes d'élasticités		
(GPa)		
C_{13}	106	108
C_{33}	398	373

Tableau III-1. Paramètres des énergies et valeurs de potentiels de déformation et constantes d'élasticité de *GaN* et *AlN* [6, 7].

III-5. La longueur d'onde d'émission dans les diodes lasers à boîtes quantiques

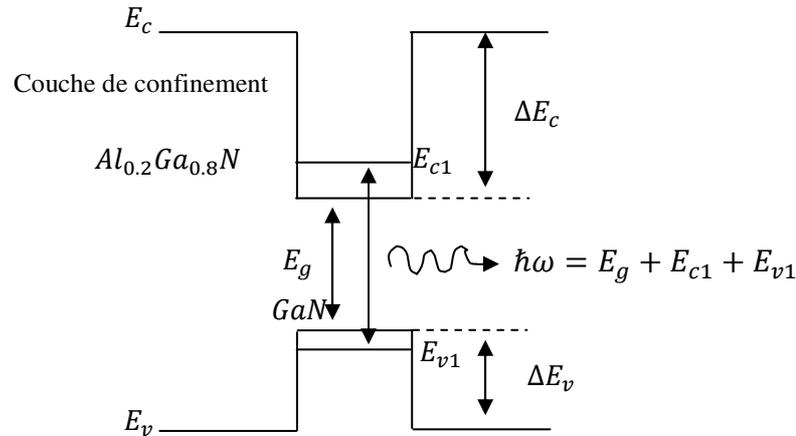


Figure III-3 : Diagramme de bande d'une boîte quantique à une direction $GaN/AlGaN$ utilisé dans le calcul.

La longueur d'onde d'émission est donnée en fonction de la bande interdite du matériau formant la boîte quantique et les premiers niveaux quantifiés de chaque bande (BC, BV) par :

$$\lambda(\mu m) = \frac{1.24}{\hbar\omega}$$

En rappel, l'émission de rayonnement dans les lasers à boîte quantique dépend des transitions entre les niveaux peuplés en électrons et en trous des bandes de conduction et des bandes de valence, elle est en général centrée autour de l'énergie: (donnée par l'équation (II-40)).

$$\hbar\omega = E_g + E_{c1} + E_{v1}$$

E_{c1} et E_{v1} sont les énergies de confinement de premiers niveaux quantifiés des électrons et des trous qui sont données par :

$$E_{c1} = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2m_e^*L^2}$$

$$E_{v1} = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2m_v^*L^2}$$

III-6. Notion de pseudo niveaux de Fermi

A l'équilibre thermodynamique, les densités d'états d'électrons et de trous dans le semi-conducteur sont caractérisées par un seul paramètre : le niveau de Fermi. Lorsque l'excitation extérieure modifie les densités de porteurs, le niveau de Fermi qui est un paramètre d'équilibre thermodynamique n'est plus défini. Les porteurs injectés dans le semi-conducteur ont des énergies souvent différentes des énergies E_c et E_v des extrema des bandes permises.

Ces porteurs, par leurs interactions avec le réseau cristallin perdent de l'énergie et se thermalisent dans les extrema des bandes permises. La durée de cette thermalisation est conditionnée par le temps de relaxation qui est de l'ordre de 10^{-13} à 10^{-12} s. D'un autre côté, la durée de vie des porteurs dans une bande est de l'ordre de 10^{-9} à 10^{-7} s. Il en résulte que les électrons se thermalisent respectivement dans la bande de conduction et dans la bande de valence avant de se recombiner. Il s'établit alors dans le semi-conducteur excité un régime de pseudo-équilibre dans chacune des bandes.

La population des électrons et des trous sont chacune en équilibre thermodynamique, mais indépendamment l'une de l'autre. Ce régime de pseudo-équilibre est défini par des pseudo-niveaux de Fermi E_{fc} et E_{fv} caractérisant les densités et les distributions des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence.

La distribution des porteurs dans une bande permise est régie par la statistique de Fermi-Dirac :

$$f_c = \frac{1}{1 + \exp(\varepsilon_{cn} - E_{fc})/kT} \quad (\text{III-21a})$$

$$f_v = \frac{1}{1 + \exp(\varepsilon_{vn} - E_{fv})/kT} \quad (\text{III-21b})$$

Où ε_{cn} et ε_{vn} sont les énergies totales des électrons et des trous dans les sous-bandes n .

Les quasi-niveaux de Fermi sont reliés aux densités des électrons et des trous injectés dans le point quantique par [8, 9]:

$$N = \sum_{nml} \frac{2}{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{cnml} - E_{fc}}{kT}\right)\right] L_x L_y L_z} \quad (\text{III-22a})$$

$$P = N$$

$$P = \sum_{nml} \frac{2}{\left[1 + \exp\left(\frac{E_{fv} - E_{vnml}}{kT}\right)\right] L_x L_y L_z} \quad (\text{III-22b})$$

Pour $n = 1$ et $L = L_x = L_y = L_z$,

$$N = \frac{2f_c(E_{c111})}{L^3}, \quad P = \frac{2(1-f_v(E_{v111}))}{L^3}$$

III-7. Emission et gain de la boîte quantique

L'injection de porteurs dans les structures à boîte quantique, activant le nombre d'interactions électron-trou, donne lieu aux phénomènes optiques détaillés dans le chapitre II : l'absorption, l'émission spontanée et l'émission stimulée entre deux niveaux des bandes de conduction et de valence.

III-7-1. Coefficients d'absorption et d'émission

L'équilibre de phénomènes d'absorption et d'émission spontanée et induite entre deux bandes d'énergies d'un semi-conducteur mène aux expressions classiques des coefficients d'absorption et d'émission spontanée en fonction des probabilités d'occupation et de transition [10].

Pour une radiation d'énergie E_{cv} , les coefficients d'absorption et d'émission dans les boîtes quantiques sont respectivement donnés par [9, 11] :

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{n_r} \cdot \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \sum_{lmn} \int_{E_g}^{\infty} \langle R_{cv}^2 \rangle \cdot \frac{\rho_{cv} \cdot f_v(E_1) [1 - f_c(E_2)] \cdot (\hbar/\tau_{in})}{(E_{cv} - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \cdot dE_{cv} \quad (\text{III-23})$$

$$e(\omega) = \frac{\omega}{n_r} \cdot \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \sum_{lmn} \int_{E_g}^{\infty} \langle R_{cv}^2 \rangle \cdot \frac{\rho_{cv} \cdot f_c(E_2) [1 - f_v(E_1)] \cdot (\hbar/\tau_{in})}{(E_{cv} - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \cdot dE_{cv} \quad (\text{III-24})$$

Où

ω : la fréquence angulaire de la lumière,

ε_0 et μ_0 sont la constante diélectrique et la perméabilité du vide,

n_r : l'indice de réfraction de la boîte quantique,

$f_c(E)$ et $f_v(E)$: les probabilités d'occupation suivant la statistique de Fermi-Dirac.

τ_{in} est le temps de relaxation interbande et ρ_{cv} est la densité d'états de paires électron-trou donnée par :

$$\rho_{cv} = \frac{2\delta(E_{cv} - E_{cnml} - E_{vnml} - E_g)}{L_x \cdot L_y \cdot L_z} \quad (\text{III-25})$$

Où L_x, L_y et L_z sont les dimensions de la boîte quantique suivant les directions x, y et z respectivement, δ est la fonction de Dirac, E_{cnml} et E_{vnml} sont les niveaux d'énergies quantifiés,

$\langle R_{cv}^2 \rangle$: est l'élément matrice du moment dipolaire.

Lorsque l'énergie du photon dépasse l'écart des pseudo-niveaux de Fermi, le matériau a une absorption positive : les créations de paires électron-trou l'emportent sur les recombinaisons radiatives. En revanche, lorsque la condition de Bernard et Duraffourg est vérifiée (Equation II-15), l'inversion de population a lieu et le milieu devient amplificateur, caractérisé par son net gain optique :

$$g(\omega) = \alpha(\omega) - e(\omega) \quad (\text{III-26})$$

III-7-2. Forme analytique du gain optique

Le gain optique dans une boîte quantique s'évalue de la même façon que dans le cas d'un puits quantique, c'est-à-dire pour un photon d'énergie $\hbar\omega$ supérieure à la bande interdite en intégrant sur tous les états possibles de la bande de conduction et de valence dont la différence d'énergie est égale à $\hbar\omega$, le produit du carré de l'élément de matrice dipolaire $\langle R_{cv}^2 \rangle$ et de la densité d'états de paires électron-trou ρ_{cv} par la différence des fonctions d'occupation (distribution de Fermi) $f_c - f_v$ des électrons dans chaque bande. Un tel calcul a été réalisé par Asada [8] qui a tenu compte de l'élargissement des états en introduisant un temps de relaxation intra-bande de 10^{-13} s.

Le gain est donné par l'expression suivante :

$$g(\omega) = \frac{\omega}{n_r} \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \sum_{lmn} \int_{E_g}^{\infty} \langle R_{cv}^2 \rangle \frac{g_{cv}(f_c - f_v) \hbar / \tau_{in}}{(E_{cv} - \hbar\omega)^2 + (\hbar / \tau_{in})^2} dE_{cv} \quad (\text{III-27})$$

III-7-3. Densité de porteurs à la transparence

Un paramètre important qui caractérise le gain d'un matériau est la densité de porteurs à la transparence N_{tr} au-delà de laquelle le gain lié à la longueur d'onde du gain maximal lié à l'émission stimulée l'emporte sur l'absorption bande à bande.

III-7-4. Le gain différentiel

Le gain différentiel est un paramètre fondamental, puisqu'il permet de déterminer les limites de modulation d'un laser. Effectivement, ce paramètre détermine le "temps de réponse" de la structure à une excitation. Plus ce gain différentiel est important (plus le gain varie vite avec la densité de porteurs), plus vite la structure répond à toute excitation, permettant ainsi de moduler directement le laser à de hautes fréquences.

Ce gain s'exprime par la variation du gain de matériaux en fonction du nombre N de porteurs injectés :

$$a = \frac{dg}{dN} \quad (\text{III-28})$$

Où N est la densité de porteurs (N exprime un nombre de porteurs par unité de volume). Sur cette base, a s'exprime en unité de surface.

Notons que le gain différentiel est une approximation liée à la variation linéaire de la courbe du gain par rapport au nombre de porteurs [2].

$$g = a(N - N_{tr}) \quad (\text{III-29})$$

Dans les boîtes quantiques, le nombre de porteurs par état quantique étant limité (à deux avec le spin sur l'état fondamental), a pourra être supérieur au gain des structures existantes grâce à un remplissage et une saturation des niveaux successifs des boîtes plus efficace. Cette amélioration est encore reliée à l'efficacité d'injection des porteurs comme l'amélioration du courant de seuil.

III-7. Le facteur de confinement optique

Dans une structure laser, il faut réaliser en plus du confinement électrique un confinement optique. Avec les valeurs usuelles de l'épaisseur de la région active du saut d'indice de réfraction, le guide d'onde ainsi constitué est monomode et le rayonnement électromagnétique est étroitement confiné dans la région active. L'efficacité de confinement est caractérisée par un paramètre appelé facteur de confinement. Dans le cas d'une boîte quantique, ce facteur est différent de celui d'un matériau massif ou un puits quantique. Il est composé de deux termes [12, 13]:

$$\Gamma = \Gamma_{xy} \cdot \Gamma_z \quad (\text{III-30})$$

Où Γ_{xy} présente le facteur de confinement latéral (appelé aussi facteur de confinement transverse) donné par :

$$\Gamma_{xy} = \frac{N_D \cdot A_D}{S} \quad (\text{III-31})$$

Avec N_D : nombre des boîtes quantiques par couche, A_D : la taille moyenne du plan des boîtes quantiques et S : surface de guide d'onde.

La composante longitudinale (verticale) du facteur de confinement Γ_z est donnée par le rapport de l'intensité de la lumière dans la couche active (QD), à l'intensité lumineuse totale dans l'ensemble de l'hétéro-structure. Ce rapport caractérise l'interaction verticale des boîtes quantiques et le mode optique.

$$\Gamma_z = \frac{1}{S} \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} |E(z)|^2 dz}{\int_{-\infty}^{+\infty} |E(z)|^2 dz} \quad (\text{III-32})$$

Le calcul du facteur de confinement Γ n'est pas très facile et nécessite une approche numérique. Il peut être exprimé approximativement par la simple formule suivante [14]:

$$\Gamma = \frac{V^2}{2+V^2} \quad (\text{III-33})$$

Avec
$$V^2 = \frac{4\pi d^2 (n_r^2 - n_c^2)}{\lambda^2}$$

Où d est l'épaisseur de la couche active, λ est la longueur d'onde d'émission, n_r , n_c sont les indices de réfraction de la couche active et de la couche de confinement respectivement.

III-9. Gain modal

Pour pouvoir effectuer une évaluation plus précise du maximum d'efficacité et de prédire le comportement du laser, il est nécessaire de calculer l'amplification réelle de l'onde. Le gain modal est le gain effectif dans une diode laser qui réalise un compromis entre le gain optique et l'habilité à regrouper (collectionner) les porteurs injectés de façon efficace (Γ).

Il est donné par le produit du gain matériau g par le facteur de confinement Γ :

$$g_m = \Gamma \cdot g \quad (\text{III-34})$$

III-10. Condition de seuil, gain au seuil

La condition de seuil est obtenue quand le gain modal dépasse l'ensemble des pertes subies par le mode laser, à savoir quand :

$$\Gamma \cdot g_{th} = \alpha_i + \alpha_{ext} \quad (\text{III-35})$$

Où g_{th} représente le gain au seuil et α_i représente les pertes optiques internes.

α_{ext} représente les pertes d'extrémités en cm^{-1} et qui sont supposées linéairement réparties dans la structure. Dans le cas d'un laser Fabry-Pérot, les pertes d'extrémités peuvent s'exprimer analytiquement sous la forme [13] :

$$\alpha_{ext} = \frac{1}{2L_c} \ln \left(\frac{1}{R_1 R_2} \right) \quad (\text{III-36})$$

Où R_1 et R_2 sont respectivement les réflectivités des miroirs avant et arrière de la cavité.

III-11. La densité de courant

En régime permanent, le courant injecté apporte exactement le nombre d'électrons par unité de temps nécessaire pour compenser leur recombinaison par différents processus radiatifs.

III-11-1. Le courant de seuil

Le courant de seuil d'un laser détermine la densité de porteurs qui permet d'atteindre la transparence (dans le cas idéal, en absence de pertes). C'est à dire le taux de pompage pour lequel le gain du milieu compense exactement l'absorption de celui-ci. A ce point de fonctionnement, le milieu émet autant de photons qu'il en absorbe. Il est donc transparent. Dans un cas réel, les pertes sont non nulles et l'on peut définir un seuil de transparence et un seuil laser. Ce dernier est supérieur au seuil de transparence et est atteint lorsque l'on

compense l'absorption plus les pertes en excès. La diminution de la dimension des structures a permis de baisser d'un facteur 4 ou 5 le seuil des lasers à semi-conducteurs lors du passage du massif au puits quantique [15, 16]. Les boîtes quantiques, de part leurs analogies avec un atome apportent un nouvel espoir vers des courants de seuil encore plus faibles.

La figure III-4 compare le remplissage des bandes d'une structure caractérisée par une densité d'état en marche d'escalier (puits quantique), avec une structure de bande caractérisée par une densité d'état en Diracs (boîtes quantiques). Le seuil à la transparence est représenté sur la figure III-4-a, il est atteint avec une seule paire électron-trou pour les boîtes quantiques, alors qu'un plus grand nombre de porteurs est nécessaire pour un puits quantique. Au-delà de la transparence, figure III-4-b, l'ensemble des paires électrons-trous créé dans les boîtes quantiques se retrouve en bas de la bande de conduction sur l'état fondamental. Elles sont prêtes à contribuer à l'émission stimulée (au gain) dans une bande spectrale réduite. En revanche, dans le cas des puits quantiques toutes les paires électrons-trous créées ne contribuent pas au gain. En effet, il n'y a du gain que pour les transitions qui remplissent la condition de Bernard et Duraffourg. Sur la figure III-4-b, seuls les niveaux les plus bas de la bande sont concernés, toutes les paires électrons-trous qui se situent au-dessus de la limite définie précédemment ne contribuent pas au gain. Un surplus d'énergie sera nécessaire pour créer les paires électrons-trous qui ne contribuent pas directement au gain. Dans le cas des boîtes quantiques, le rendement du pompage, paires électrons-trous "efficaces" par rapport aux paires électrons-trous créées, est donc plus grand que celui des puits quantiques. Pour ces raisons, nous obtenons une densité de courant de seuil plus faible dans les boîtes quantiques.

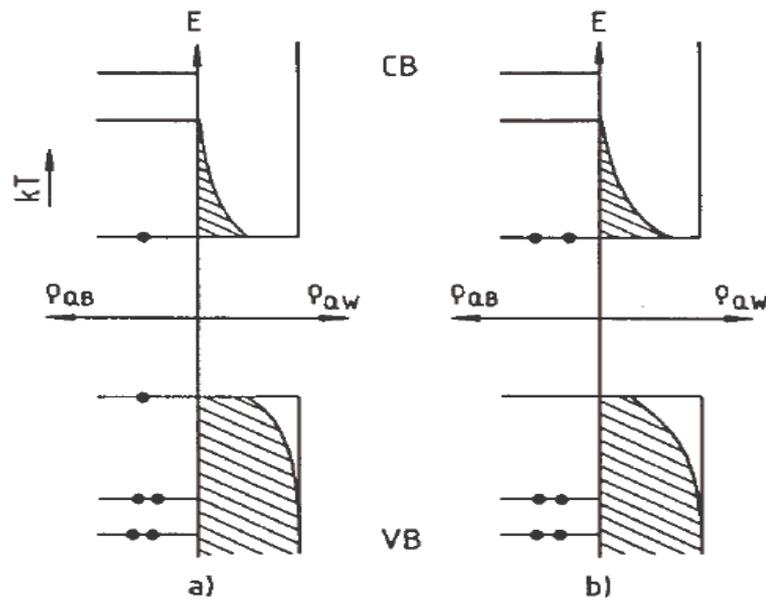


Figure III-4 : Densité d'états de la bande de conduction (CB) et de la bande de valence (VB) pour le système 2D idéal (PQs) et le système 0D idéal (BQs), et densité d'états occupés (zones hachurées et points noirs (électrons)) au seuil de transparence (a) , et au delà du seuil (b). [17].

III-11-2. Formule analytique du courant de seuil

Partons de la supposition que les boîtes quantiques sont de mêmes tailles disposées dans un plan perpendiculaire au courant d'injection comme représenté sur la figure III-5. La relation entre la densité de courant de seuil et la densité de porteurs à la transparence est exprimée par la formule suivante [18] :

$$J_{th} = \frac{I_{th}}{S} = \frac{qN_{th}V_{ac}}{S\tau_s\eta_i} \quad (\text{III-37})$$

Avec

N_{th} : la densité des porteurs au seuil, elle est reliée par le gain différentiel a et la densité à transparence N_{tr} par :

$$N_{th} = N_{tr} + \frac{1}{\Gamma a} \left(\alpha_i + \frac{1}{2L_c} \ln \left(\frac{1}{R_1 R_2} \right) \right) \quad (\text{III-38})$$

η_i : le rendement quantique interne.

V_{ac} : le volume de la couche (plan) active obtenu par la formule suivante:

$$V_{ac} = V_{QD} \cdot N_{QD} \cdot M_{QD} \quad (\text{III-39})$$

V_{QD} : le volume de la boîte quantique donné par le produit des trois dimensions de la boîte L_x, L_y, L_z ,

N_{QD} : le nombre effective des points quantiques par couches,

M_{QD} : le nombre des couches actives.

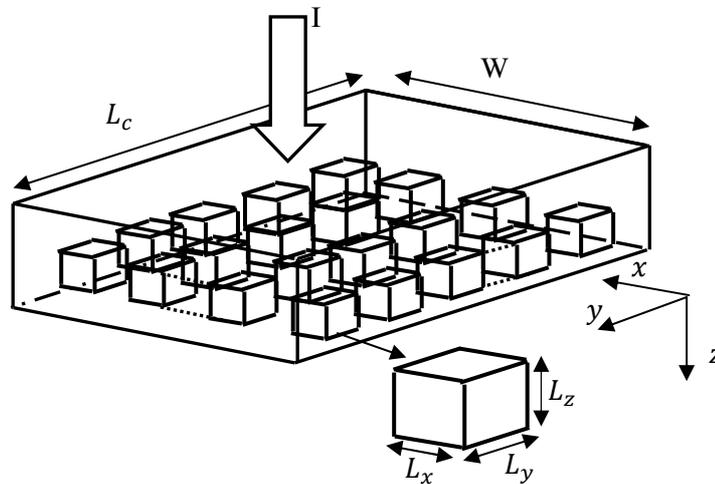


Figure III-5 : Schéma d'un plan de boîtes quantiques.

τ_s : la durée de vie du porteur, qui comprend les temps de recombinaison radiative et non radiative (τ_r et τ_{nr}).

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{1}{\tau_r} + \frac{1}{\tau_{nr}} \quad (\text{III-40})$$

La durée de vie radiative τ_r , est obtenu à partir du taux d'émission spontanée de la même façon que celle du matériau massif [8, 19], donnée par la formule suivante :

$$\tau_r = N / \left[\mu_0^{3/2} \varepsilon_0^{1/2} n_r / \pi \hbar^{-4} \cdot \sum_{nml} \int_{E_g}^{\infty} \langle R_{cv}^2 \rangle_{bulk} \cdot E_{cv}^3 f_c (1 - f_v) \rho_{cv} dE_{cv} \right] \quad (\text{III-41})$$

Où la sommation est faite en respectant la quantification des niveaux d'énergie, et le carré du moment dipolaire utilisé dans cette équation est évaluée comme étant la même que celle du matériau massif.

Dans la famille des matériaux émettant dans les longues longueurs d'onde, le processus non radiatif est considéré [8, 20], par contre il est négligeable dans les matériaux à courtes longueurs d'onde (large bande interdite) tels que *GaN/AlGaN* où le taux de recombinaisons non radiatives tels que l'effet Auger est beaucoup plus petit que celui de la recombinaison radiative. La durée de vie τ_s est approximativement égale au temps de recombinaison radiative τ_r .

III-11-3. Dépendance en température

En dehors des risques de dégradation de la diode laser à haute température, les conséquences de l'évolution de la température de la jonction sont nombreuses. Premièrement, la largeur de bande interdite du semi-conducteur diminue avec la température. En conséquence, la longueur d'onde d'émission va augmenter avec la température. De plus, le courant de seuil des lasers augmente avec la température. Cette augmentation, observée expérimentalement elle peut être traduite par une expression empirique qui définit la température caractéristique du laser, généralement notée T_0 :

$$J_{th} = J_{th0} \exp(T/T_0) \quad (\text{III-42})$$

Avec J_{th} : densité de courant de seuil (A/cm^2),

J_{th0} : densité de courant de seuil à $T = 0K$ (A/cm^2),

T, T_0 : température et température caractéristique respectivement (K).

Il est donc important d'avoir une température caractéristique T_0 la plus grande possible afin de réduire la sensibilité du laser à la température et ainsi d'éviter l'utilisation de régulateurs thermiques [21]. D'après les études théoriques d'Arakawa et al [22], l'abaissement de la dimensionnalité des matériaux permettrait d'augmenter la valeur de la température caractéristique T_0 du fait d'une moindre variation du courant de seuil laser avec la température.

Théoriquement, la diminution de la sensibilité du courant de seuil avec la température dans les boîtes quantiques a deux origines : la discrétisation des niveaux d'énergie et la localisation spatiale des porteurs qui limite l'effet de la température sur la durée de vie des porteurs.

Pour le cas des puits quantiques, les niveaux d'énergies sont formés par des sous bandes. De ce fait, les porteurs doivent se distribuer sur ces niveaux en fonction de la température, ce qui n'est pas le cas pour les boîtes quantiques. Par conséquent, d'un point de vue théorique, toutes les performances du laser à boîtes quantiques (gain, courant,...) sont peu sensibles à la température. Ce que nous allons le montrer dans le chapitre suivant.

III-12. Conclusion

Le but de ce chapitre a été de mettre en place à partir des concepts théoriques une méthodologie d'analyse des propriétés électroniques des diodes lasers à boîte quantique. Les conditions préalables à l'existence d'effets quantiques sont déjà définies pour le matériau *GaN/AlGaN* dans le chapitre précédent. Les niveaux d'énergie quantifiés sont déterminés ainsi que la densité d'états et la longueur d'onde ainsi que l'écart des pseudo-niveaux de Fermi ce qui nous a permis de déterminer le spectre du gain et la densité de courant.

Références

- [1] D. C. Mojica, « Modeling of the structural, electronic and optical properties of *GaN/AlN* nitride nanowires », thèse de doctorat, Université de Grenoble, France (2011).
- [2] M. Sugawara, Semiconductors and semimetals, **60**; (1999 Academic press).
- [3] B. Miljevic, « Characterisation of growth and real structure of nitride based Semi-conductor devices by use of synchrotron radiation », Phd thesis, Institut de technologie de Karlsruhe, Allemagne (2012) .
- [4] D. Pal, V.G. Stoleru, E. Towe and D. Firsov, Jpn. J. Appl. Phys, **41**, 482- 489 (2002).
- [5] H. Elghazi, A. Jorio and I. Zorkani, The African Review of Physics, 237-241 (2012).
- [6] M. Lolash, « Optimisation of optical characteristics of a strained nitride semiconductor based quantum well laser », Phd thesis, University of engineering Technology (BUET), Dhaka, Bangladesh (2015).
- [7] T. Hanad, Oxide and Nitride semiconductors, Processing, Properties and Application (2009).
- [8] M. Asada, Y. Miyamoto and Y. Suematsu, IEEE journal of Quantum Electron, Qe-**22**, N9, 1915-1921 (1986).
- [9] K. H. Al-Mossawi, Optics and Photonics Journal, **1**, 65-69 (2011).
- [10] H. C. Casey, M. B. Panish, Heterostructure lasers, part A, Academic Press, New York, USA (1978).
- [11] C. J. Wang, L. Y. Lin, B. A. Parviz, IEEE journal of selected Topics in Quantum Electronics, **11** N°2, (2005).
- [12] U. Zope, E. P samuel, D. S. Patil, Optoelectronics and Advanced Materials-Rapid communication, **2**, N°1, 4-9 (2008).
- [13] M. Grundmann, Nano science And Technology (2002).
- [14] F. Jian, ECE 5212 HW7, Laser-IDesignne SET,
[http// www.ee.uconn.edu/course-materials/crsdata/339hp07.doc](http://www.ee.uconn.edu/course-materials/crsdata/339hp07.doc)
- [15] C. Paranthoen. « Croissance et caractérisations des boites quantiques *InAs* sur substrat *InP* (113)B pour la réalisation d'un laser à 1,55 μm », thèse de doctorat, Insa Lens, France (2001).

- [16] G. Moreau, « Contribution à la caractérisation des propriétés optiques de guides planaires à boîtes *InAs/InP* (311) B émettant à $1,55 \mu\text{m}$ », thèse de doctorat, Université de Renne 1, France (2005).
- [17] J. M. Richard, new physics and applications, North Atlantic Treaty Organization (NATO), **340**, 357 (1995).
- [18] T. Amano, S. Aoki, T. Sugaya Kazuhiro Komori and Y Okada, IEEE journal of Selected Topics in quantum Electronics, **13**, N°5, (2007).
- [19] M. Yamada and H. Ishiguro, Japan. J. Appl. Phys, **20**, 1279-1288 (1981).
- [20] N. K. Dutta, « Physics of quantum well lasers », Chap, 13 (1987).
- [21] K. Klaime, « Laser à blocage de modes à base de boîtes quantiques *InAs/InP* pour les télécommunications optiques », thèse de doctorat, INSA de Rennes, France (2013).
- [22] Y. Arakawa, H. Sakaki, App. Phys. Lett, **40**, 11, 939 (1982).

CHAPITRE IV

Résultats et discussions

Chapitre IV

Résultats et discussions

IV-1. Introduction.....	100
IV-2. Organigramme de calcul.....	100
IV-3. La longueur d'onde d'émission dans les lasers à boîte quantique.....	102
IV-4. Modélisation du gain optique pour un laser à boîte quantique	103
IV-4-1. Spectre du gain d'émission.....	103
IV-4-2. Variation du gain optique en fonction de la densité de porteurs.....	106
IV-4-3. Variation du gain maximal en fonction de la densité de porteurs.....	108
IV-4-4. Variation du gain en fonction de la largeur de boîtes quantiques.....	109
IV-4-5. Variation du gain en fonction de la température.....	110
IV-4-6. Variation du gain max en fonction de la largeur des boîtes quantiques ...	111
IV-5. Le facteur de confinement.....	113
IV-5-1. Variation du facteur de confinement en fonction de la largeur de boîtes..	113
IV-5-2. Variation du facteur de confinement en fonction de la concentration d'Aluminium dans les couches de confinement.....	114
IV-6. Le gain modal	115
IV-6-1. Variation du gain modal en fonction de l'énergie d'émission.....	116
IV-6-2. Variation du gain modal maximal	116
IV-6-2-1. Pour différentes largeurs des boîtes quantiques	116
IV-6-2-2. Pour différentes valeurs de température.....	117
IV-6-3. Variation de gain modal maximal en fonction de nombre de plans des boîtes quantiques.....	119
IV-7. L'effet du dopage sur le gain.....	120
IV-8. L'effet de la contrainte sur le gain.....	122
IV-9. La densité de courant de seuil.....	124
IV-9-1. Gain modal maximal en fonction de densité de courant d'injection pour différentes largeurs des boîtes quantiques.....	125
IV-9-2. Influence de la largeur de boîte sur la densité de courant de seuil.....	126
IV-9-3. Influence de la longueur de cavité sur la densité de courant de seuil.....	127
IV-9-4. Influence de l'effet contrainte sur la densité de courant de seuil.....	128
IV-9-5. Influence de dopage sur la densité de courant de seuil.....	130
IV-10. Caractéristique d'une structure à boîte quantique optimale.....	131
Références.....	133

IV-1. Introduction

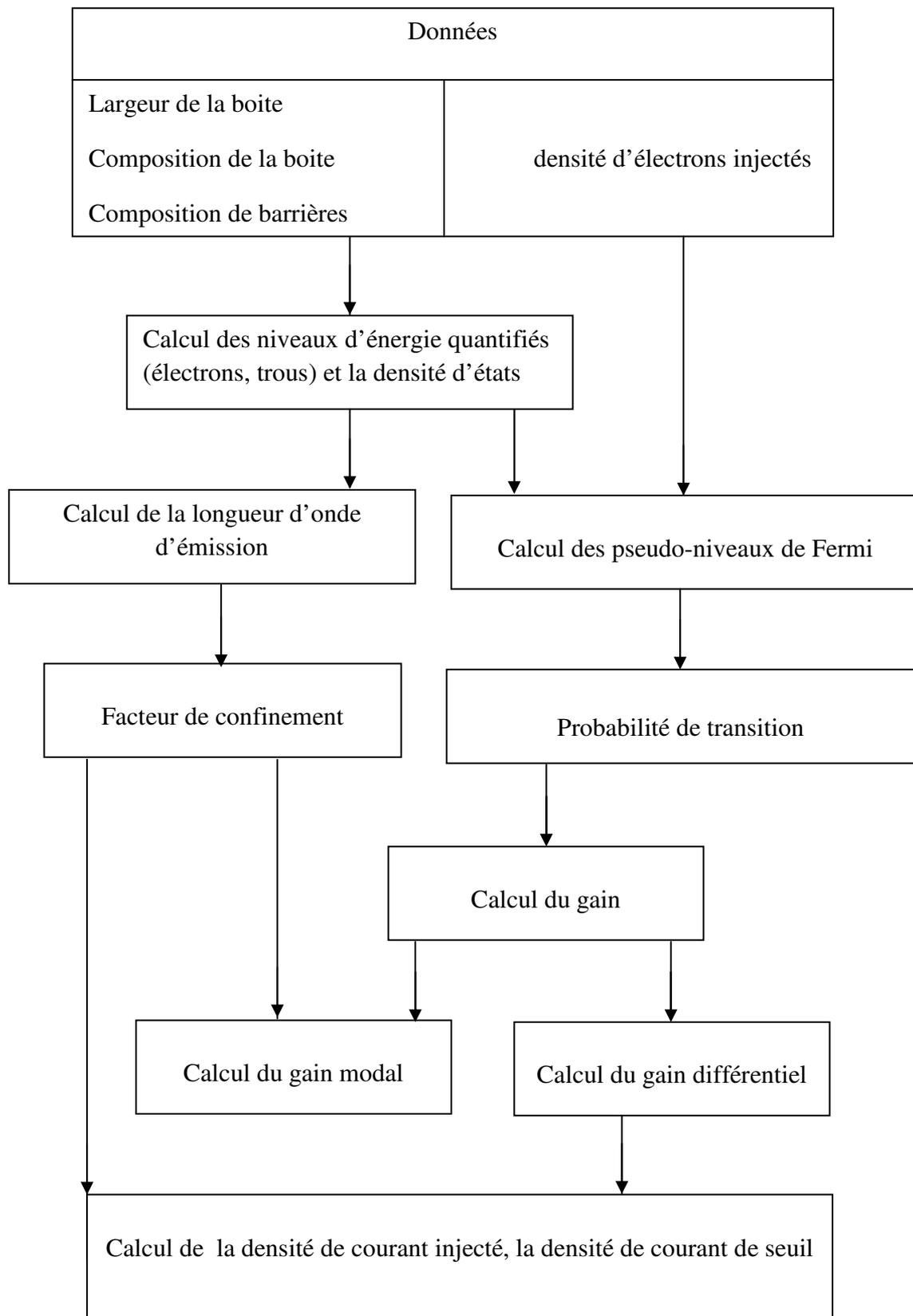
La mise en place dans le chapitre précédent d'un modèle complet de modélisation de diode laser à boîte quantique donne accès aux caractéristiques gain-courant traversant la structure et à la densité de courant de seuil en fonction de plusieurs paramètres des diodes lasers tel que : la largeur des boîtes, densité d'injection, la température, ...etc.

Dans ce chapitre, nous commençons à donner un résumé des étapes utilisés pour modéliser la structure de diode laser à boîte quantique *InGaN/AlGaN* sous forme d'un organigramme de calcul. Ensuite, nous présentons les résultats obtenus à partir de ce modèle. L'analyse comprend les résultats des principaux paramètres des diodes lasers tels que : la longueur d'onde d'émission, le spectre de gain, le gain modal et le courant de seuil. Ces paramètres représentent les paramètres fondamentaux qu'il faudra optimiser pour réaliser des diodes lasers plus performants. Nous avons utilisé la programmation sous *Mathcad*.

Nous avons opté en plus, à l'optimisation graphique pour déterminer, à partir des courbes, les valeurs optimales des paramètres fonctionnels d'un laser à boîte quantique *InGaN/AlGaN*.

IV-2. Organigramme de calcul

L'ensemble des relations présentées dans le chapitre précédent et leur enchainement sont résumés dans l'organigramme de la figure IV-1.

**Figure IV-1** : Organigramme de calcul suivi dans ce travail.

IV-3. La longueur d'onde d'émission dans les lasers à boîte quantique

Le calcul de la longueur d'onde donné pour le matériau $In_xGa_{1-x}N$ nous conduit aux figures suivantes :

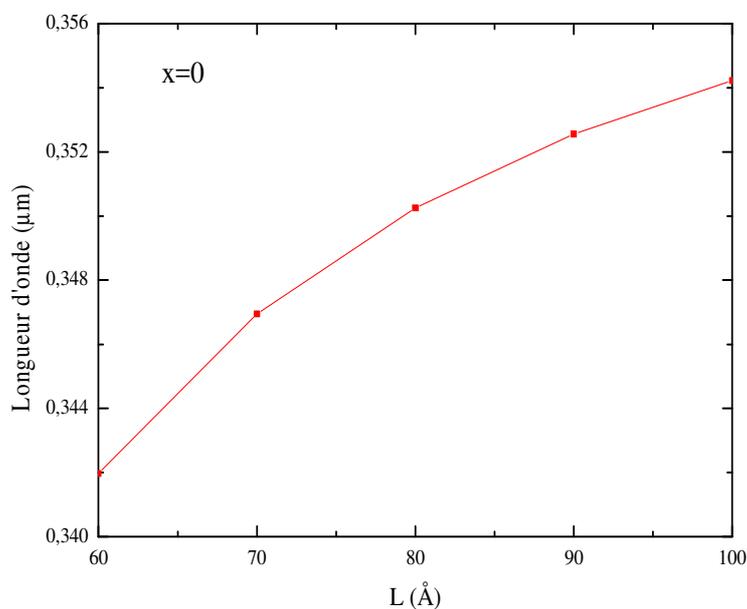


Figure IV-2 : Variation de la longueur d'onde d'émission du GaN en fonction de la taille de boîte quantique.

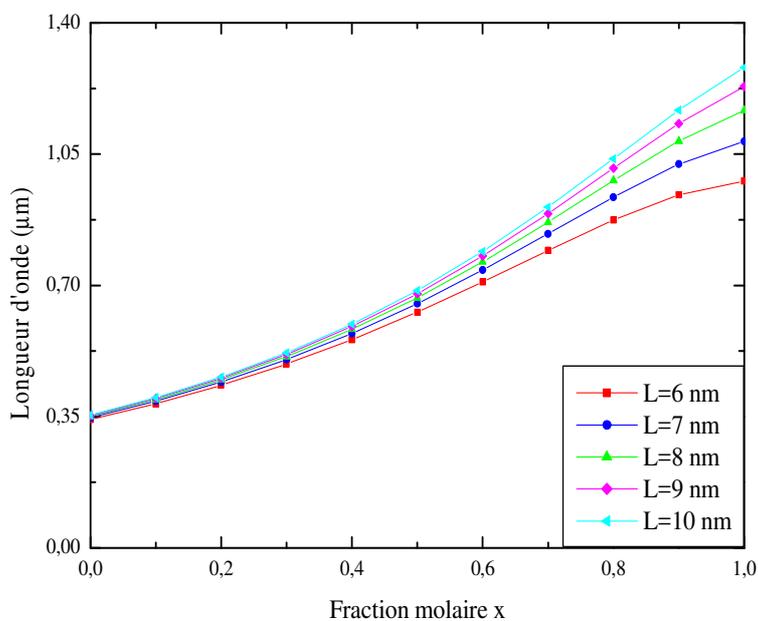


Figure IV-3 : Variation de la longueur d'onde d'émission du GaN en fonction de la fraction molaire de l'Indium dans la couche active.

D'après les figures IV-2 et IV-3, nous observons que :

- Plus la taille de la boîte est élevée plus la longueur d'onde augmente ce qui traduit par un large spectre d'émission en variant la taille des boîtes.
- La fraction molaire de l'alliage utilisé comme couche active a un effet remarquable sur la longueur d'onde du laser. Ce qui permet d'élargir l'usage de ces composants.

Suite à ces deux courbes, la longueur d'onde peut être ajustée au moyen de la fraction molaire x de l'alliage utilisé comme couche active et de la largeur de la boîte. Dans notre cas, nous avons utilisé l'alliage $In_xGa_{1-x}N$ comme couche active ce qui nous amène à travailler dans la gamme des longueurs d'onde $0.35 \leq \lambda(\mu m) \leq 0.62$ (fonctionnant du bleu vers l'UV).

IV-4. Modélisation du gain optique pour un laser à boîte quantique

La modélisation des diodes laser à boîte quantique nécessite la connaissance des paramètres physiques de sa couche active. Les étapes de calcul présentées dans l'organigramme de la figure IV-1 comme le calcul de certains paramètres à savoir : la densité d'états, la population en porteurs de charge, les niveaux d'énergie, etc... permettent la détermination du gain optique des boîtes quantiques sous l'effet de plusieurs paramètres intrinsèques et extrinsèques (dimensions de boîtes, température, dopage,..).

V-4-1. Spectre du gain d'émission

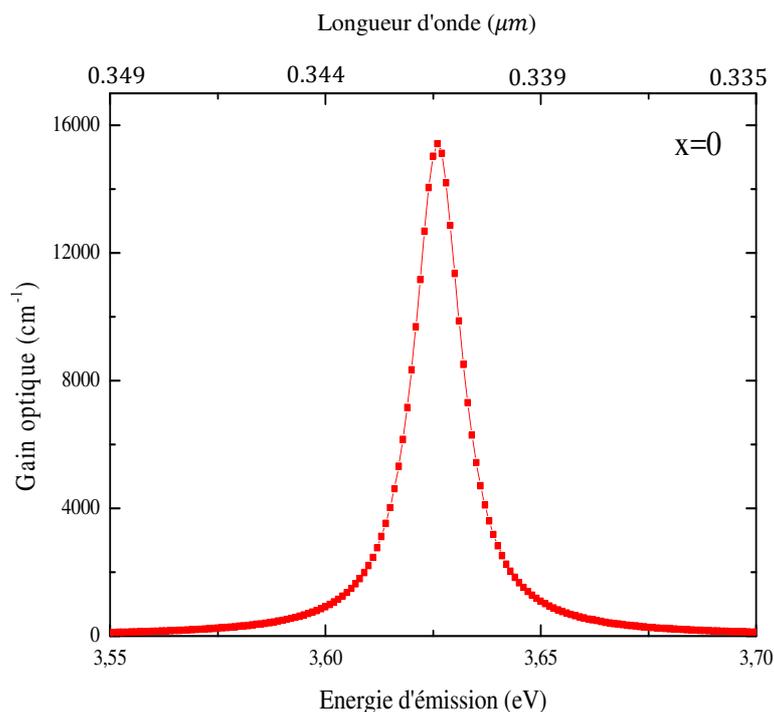
Les figures IV-4-a, IV-4-b, IV-4-c représentent le gain spectrale d'un laser à boîte quantique à base de $In_xGa_{1-x}N$ de taille de 60 \AA . La courbe correspond à l'évolution du gain optique en fonction de l'énergie de transition à une densité de porteurs fixée à $3.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et à température ambiante.

Nous remarquons le suivant :

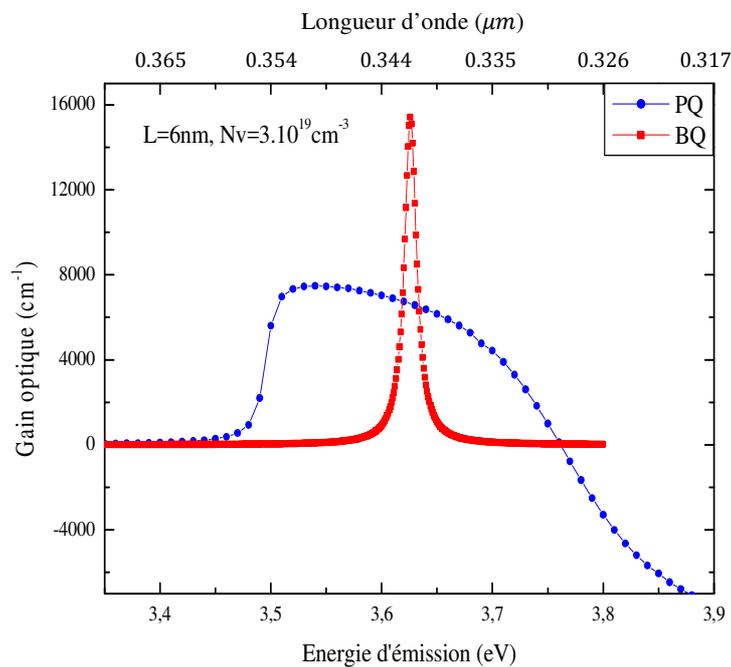
- La courbe IV-4-a : l'allure du gain est symétrique et centrée autour de l'énergie de transition et par conséquent autour de la longueur d'onde de transition fondamentale des boîtes quantiques. Le pic du gain est situé autour $h\omega = 3.6262 \text{ eV}$ ($\lambda = 0.341 \mu m$) qui correspond au proche ultraviolet, est de l'ordre de 15415 cm^{-1} .

- La courbe IV-4-b représente une comparaison du spectre du gain optique entre un puits et une boîte quantique à base de $In_xGa_{1-x}N$ comme couche active et pour les mêmes conditions de taille et densité de porteurs injectés. Il est bien clair que le gain des diodes laser à BQ est plus meilleur que celui du PQ. Dans ce dernier, le gain n'est que de 7429 cm^{-1} autour de 3.55 eV ($\lambda \simeq 0.35\text{ }\mu\text{m}$).
- La courbe IV-4-c représente l'effet de l'introduction des différentes concentrations d'indium du matériau constituant la boîte quantique. Nous remarquons que le gain devient plus important que la composition en indium augmente.

a)



b)



c)

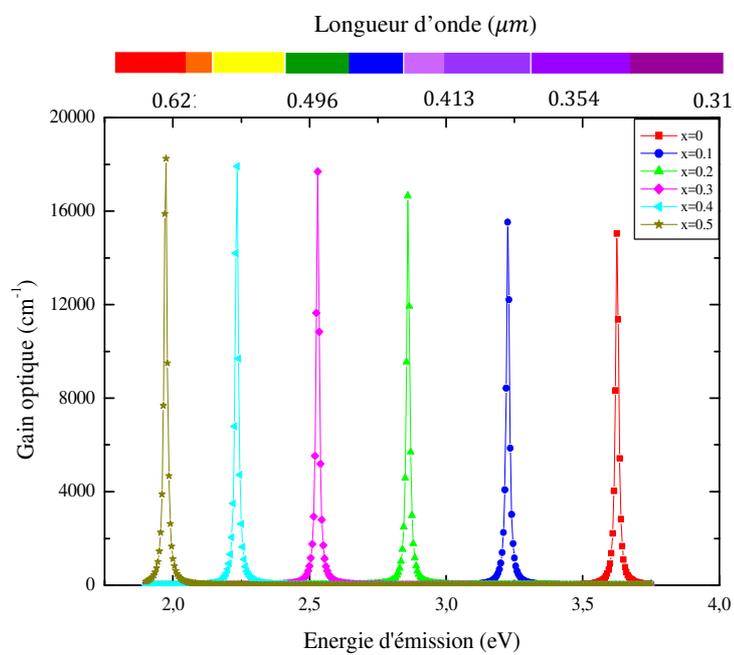


Figure IV-4 : Spectre du gain optique dans le $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

Fraction molaire x	Energie d'émission (eV)	Longueur d'onde (μm)	Gain max (cm^{-1})
0	3.6262	0.341	15415
0.1	3.227	0.384	15867
0.2	2.861	0.43	16852
0.3	2.53	0.49	17666
0.4	2.23	0.556	18586
0.5	1.973	0.628	19629

Tableau IV-1. Caractéristiques d'émission d'une structure laser à boîte quantique de $L = 60 \text{ \AA}$ à base de $In_xGa_{1-x}N$ pour différentes compositions d'Indium.

Comme remarqué en clair sur ce tableau, le gain est plus élevé pour $x = 0.5$ et le spectre d'émission s'élargit de l'ultra-violet ($\lambda = 0.34 \mu m$) jusqu'à émission rouge ($\lambda = 0.628 \mu m$) en utilisant le $In_{0.5}Ga_{0.5}N$ comme couche active.

IV-4-2. Variation du gain optique en fonction de la densité des porteurs

La figure IV-5 montre le spectre du gain optique d'une boîte quantique de largeur de 60 \AA à base de GaN en fonction de l'énergie de transition pour différentes densités de porteurs à température ambiante. Le pic du gain augmente avec la densité de porteurs. A noter aussi que l'émission pour toutes les densités de porteurs se produit autour de $3.6262 eV$ ($\lambda = 0.34 \mu m$). Les résultats du gain max sont donnés dans le tableau IV-2.

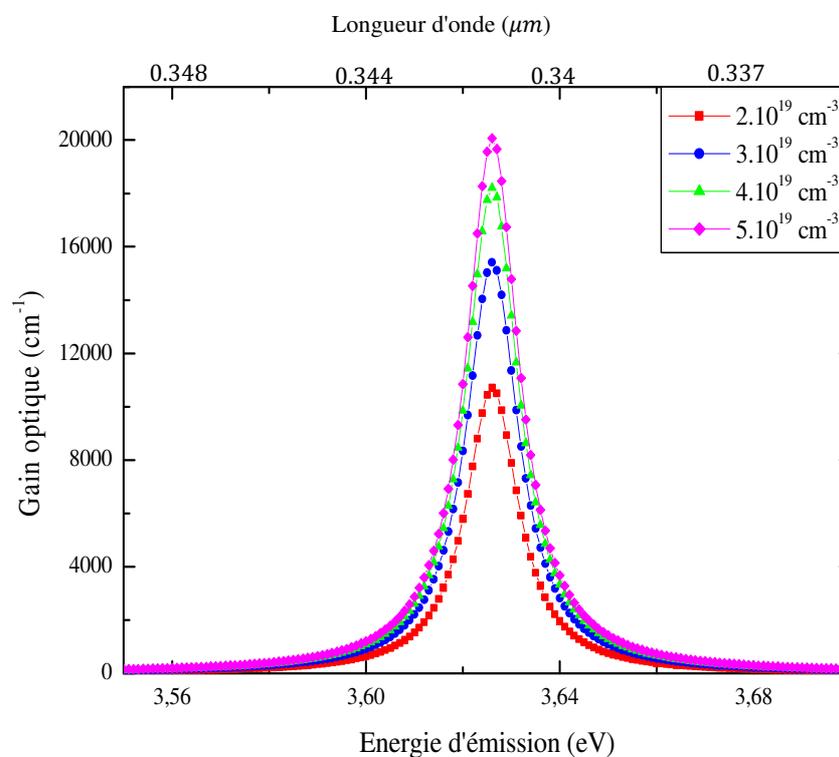


Figure IV-5 : Spectre du gain optique pour différentes densités de porteurs.

Densité de porteurs injectés (10^{19}cm^{-3})	Gain max (cm^{-1})
2	10909
3	15415
4	18209
5	20060

Tableau IV-2. Gain max pour différentes densités de porteurs.

IV-4-3. Variation du gain maximal en fonction de la densité des porteurs

Le gain maximal est atteint lorsque la probabilité de présence des électrons devient supérieure à celle des trous où sa détermination se fait par un simple prélèvement des énergies correspondantes aux maximums des gains.

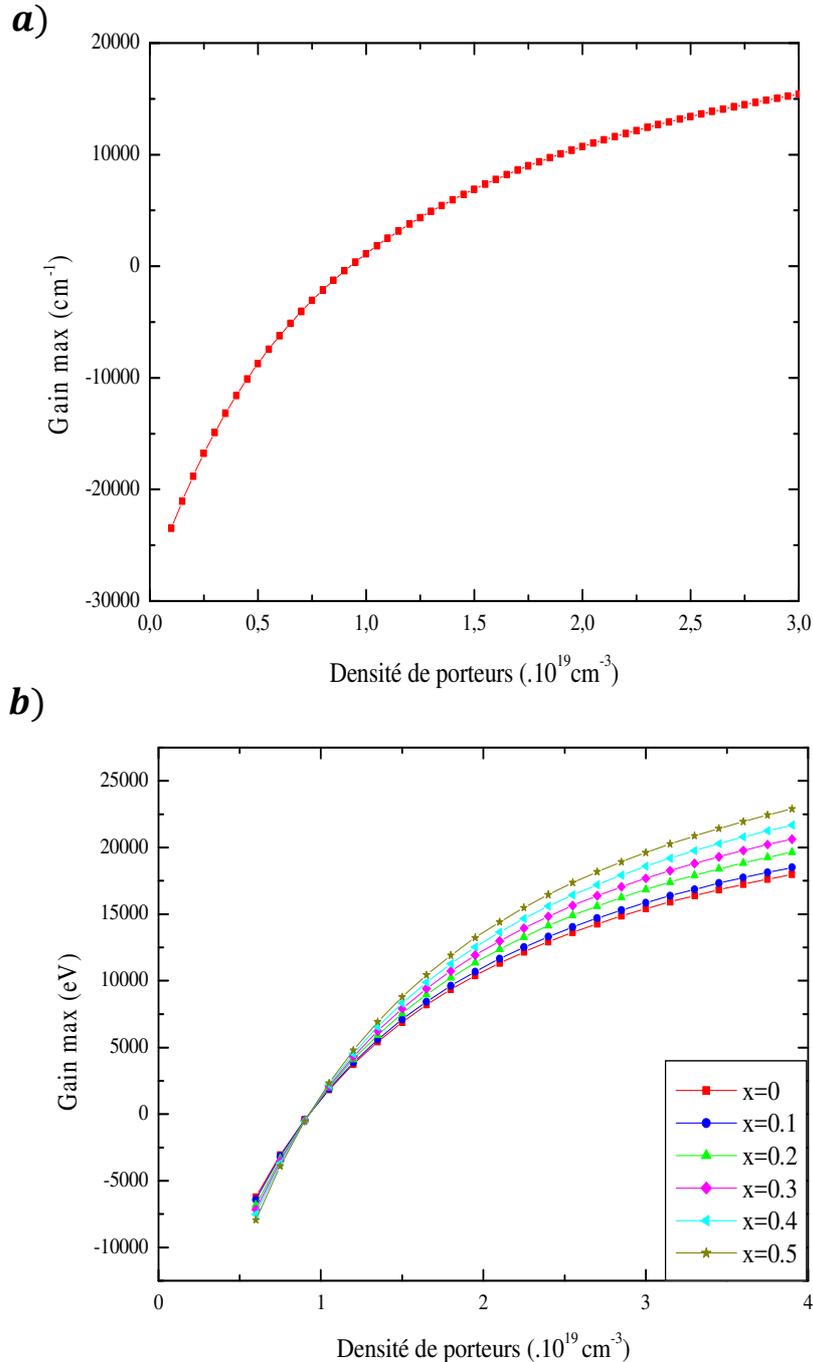


Figure IV-6 : Gain max en fonction de la densité de porteurs injectés dans le $In_xGa_{1-x}N$ de $L = 60 \text{ \AA}$: a) $x = 0$, b) pour différentes compositions d'Indium.

L'évolution du gain maximal en fonction des densités de porteurs injectés est donnée sur la figure IV-6, dans laquelle on remarque que le gain maximal augmente non seulement avec la densité de porteurs mais qu'il varie d'une façon exponentielle croissante. Et on distingue aussi qu'il y a deux régions : une région d'absorption où le gain est négatif c'est-à-dire qu'il ne compense pas les pertes interne et une région d'amplification où le gain devient positif à partir d'une densité de transparence qui correspond à un gain nul. Rappelez-vous le terme N_{tr} que nous avons introduit dans les notions des chapitres précédents.

IV-4-4. Variation du gain optique en fonction de la largeur de boîtes quantiques

Considérons les spectres du gain représentés sur la figure IV-7, obtenus pour différentes largeurs de boîtes à une température de $300K$ et une densité constante de porteurs injectés égale à $3 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$.

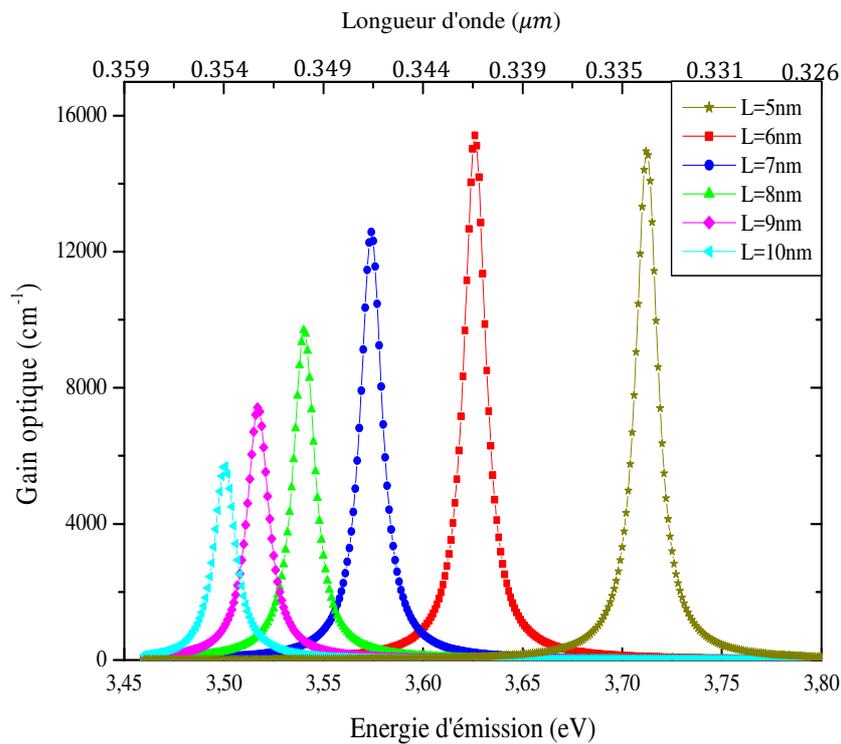


Figure IV-7 : Spectre du gain optique en fonction de la largeur de boîtes.

L'augmentation de la taille des boîtes de 6 nm à 10 nm se traduit par une diminution du gain et par un décalage spectral vers les courtes énergies d'émission due au fait que l'augmentation de la largeur de boîte augmente la longueur d'onde d'émission (figure IV-2). Il faut noter aussi, que ces courbes sont symétriques autour de leurs énergies de transition, et que le gain le plus élevé est obtenu pour une largeur de boîte de $L = 60 \text{ \AA}$.

Lorsque la largeur de boîte diminue, la densité d'états augmente et entraîne une augmentation du gain. Il en faut noter que le facteur $f_c - f_v$ dans l'expression (III-27) a un effet contraire de la densité d'états et à partir d'une certaine valeur de L tend à diminuer le gain de nouveau. C'est ce qui se produit entre les deux spectres pour $L = 60 \text{ \AA}$ et $L = 50 \text{ \AA}$. Un niveau d'injection plus fort serait nécessaire pour maintenir la valeur du gain constante et à atteindre la saturation.

Les résultats obtenus sont regroupés dans le tableau suivant :

Largeur de boîte (\AA)	Energie d'émission (eV)	Longueur d'onde (μm)	Gain max (cm^{-1})
60	3.6262	0.341	15415
70	3.5741	0.347	12579
80	3.54	3.5	9688
90	3.5171	3.52	7422
100	3.5012	3.54	5666

Tableau IV-3. Caractéristiques d'émission d'une structure laser à boîte quantique à base de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ pour différentes largeurs de boîte et pour $x = 0$.

IV-4-5. Variation du gain optique en fonction de la température

La figure IV-8 illustre l'évolution du gain optique de BQ à base de GaN en fonction de la température, à densité de porteurs fixée ($N_v = 3.10^{19} \text{ cm}^{-3}$) et de largeur de $L = 60 \text{ \AA}$.

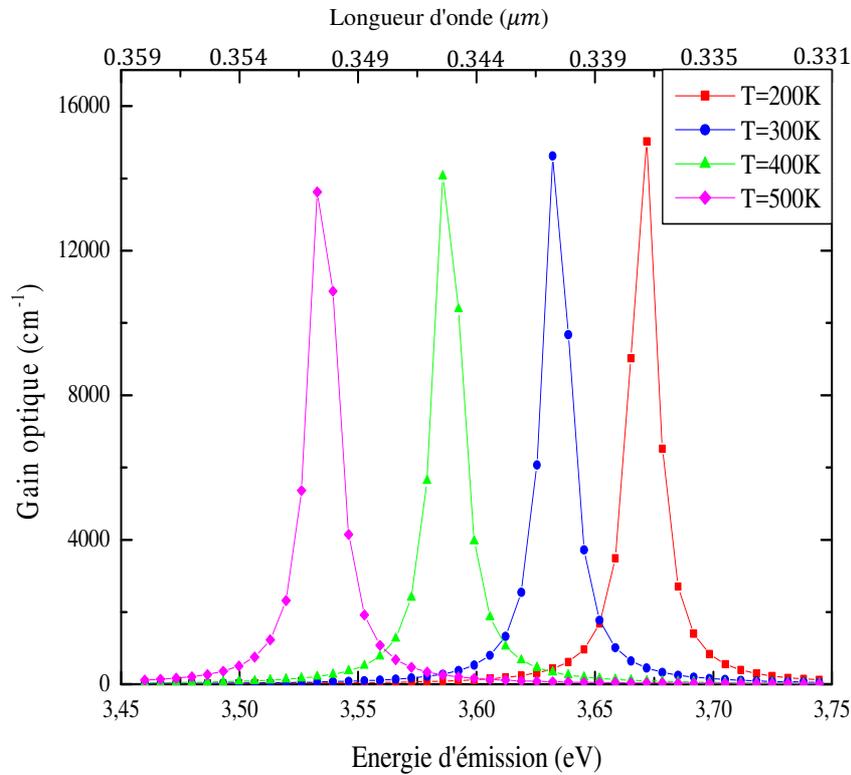


Figure IV-8 : Spectre du gain optique en fonction de la température.

Comme la différence entre les niveaux énergétiques est supérieure à l'agitation thermique dans les structures à boîte quantique, la densité de porteurs dans les niveaux d'énergies ne change pas. Alors le gain du laser est stable par rapport à la variation de la température et les performances du laser à boîte quantique restent insensibles à la variation de la température. Ce qui explique la figure IV-8 ci-dessus où l'augmentation de la température entraîne un très faible changement sur les valeurs des pics du gain. D'autre part, on observe un décalage vers les grandes longueurs d'onde due à la diminution de la largeur de la bande interdite avec l'augmentation de la température. Le tableau IV-4. indique en valeurs les résultats obtenus.

Température (K)	Energie d'émission (eV)	Longueur d'onde (μm)	Gain max (cm^{-1})
200	3.6728	0.337	15522
300	3.634	0.341	15104
400	3.5867	0.346	14583
500	3.5354	0.35	13958

Tableau IV-4. Caractéristiques d'émission d'une structure laser à boîte quantique de 60 \AA de GaN pour différentes valeurs de températures.

IV-4-6. Variation du gain max en fonction de la largeur des boîtes quantiques

La figure IV-9 montre les variations du gain maximal lorsque la densité de porteurs injectés varie, pour différentes largeurs de boîte. Il est constaté que le gain étant d'autant plus sensible à la densité de porteurs injectés que la taille des boîtes est étroite, ce qui vérifie que la densité de porteurs à la transparence augmente avec l'énergie de confinement lorsque la largeur de boîte diminue. Ce qui résulte que les boîtes étroites sont donc plus efficaces.

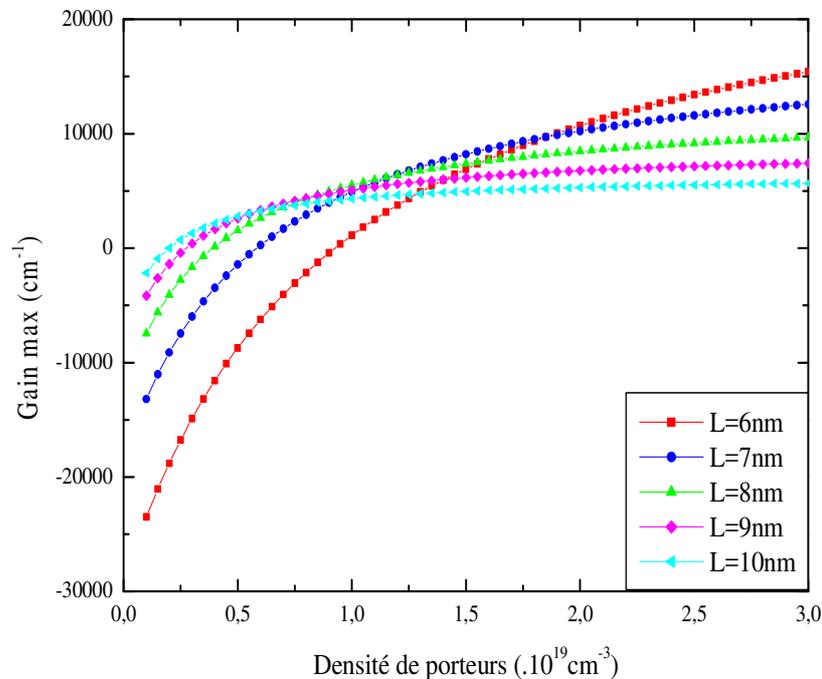


Figure IV-9 : Gain max en fonction de la densité de porteurs injectés dans le GaN pour différentes largeurs de boîte.

IV-5. Le facteur de confinement

Le facteur de confinement comme déjà mentionné dans le chapitre III évalue l'efficacité du recouvrement porteurs-photons. Ce facteur est principalement exprimé en fonction de plusieurs paramètres fondamentaux d'une structure laser tels que l'énergie d'émission, la largeur des boîtes, les indices de réfractifs de la zone active et les couches de confinement, etc... Il doit être élevé pour assurer un haut gain modal et pour que le guide soit performant. (le guide d'onde permet à l'onde électromagnétique de rester confinée dans le matériau qui présente le gain, c'est-à-dire la région active).

IV-5-1. Variation du facteur de confinement en fonction de la largeur des boîtes quantiques

La variation du facteur de confinement en fonction de l'énergie d'émission pour différentes largeurs de boîtes quantiques est donnée par la figure IV-10. Il est remarqué une augmentation du facteur de confinement avec l'augmentation de l'énergie d'émission et la largeur de boîtes. Où il est plus élevé pour une largeur plus grande à une longueur d'onde fixe.

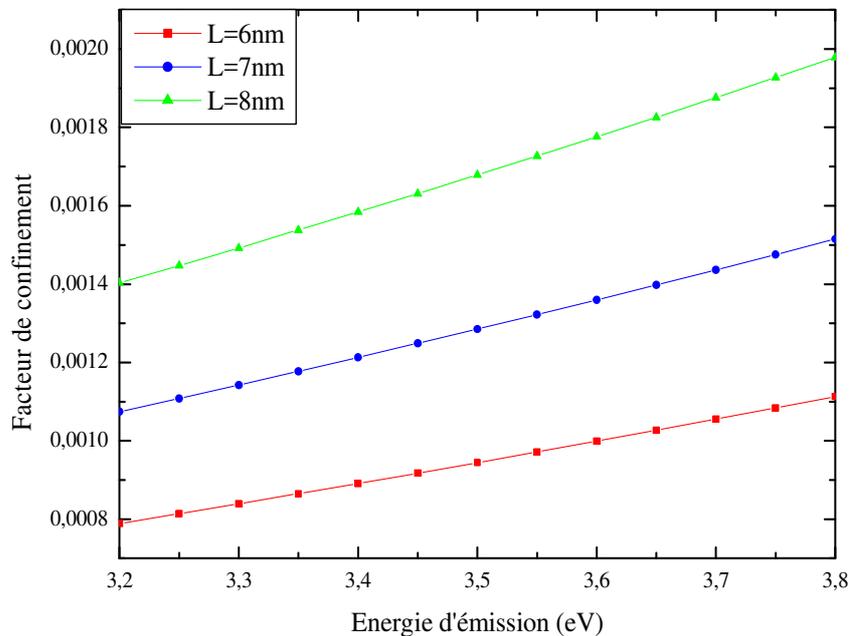


Figure IV-10 : Variation du facteur de confinement en fonction de l'énergie d'émission de la structure laser à boîte quantique (BQ) ($GaN/Al_{0,2}Ga_{0,8}N$) pour différentes largeurs.

Les résultats sont rassemblés dans le tableau suivant :

$L(\text{Å})$	Facteur de confinement optique à $\lambda = 0.32\mu m$	Facteur de confinement optique à $\lambda = 0.36\mu m$	Facteur de confinement optique à $\lambda = 0.43\mu m$
60	0.0011	0.0009	0.00065
70	0.0015	0.0012	0.0009
80	0.002	0.0016	0.0011

Tableau IV-5. Facteurs de confinement optique pour différentes largeurs de boîtes quantiques.

IV-5-2. Variation du facteur de confinement en fonction de la concentration d'Aluminium dans les couches de confinement

Pour une longueur d'onde fixe de l'ordre de $\lambda = 0.34\mu m$, la variation du facteur de confinement en fonction de la largeur des boîtes pour différentes concentrations en Aluminium de la couche de confinement est donnée sur la figure IV-11.

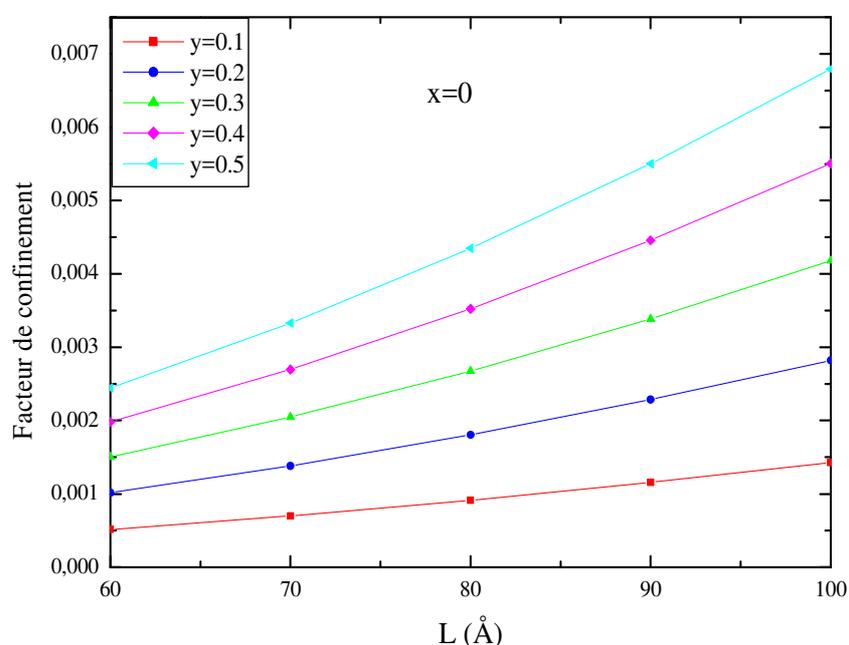


Figure IV-11 : Variation du facteur de confinement en fonction de la largeur de boîtes de la structure $(GaN/Al_yGa_{1-y}N)$ pour différentes compositions d'Aluminium.

Facteur de confinement optique à $\lambda = 0.34 \mu m$					
$L(\text{\AA}) \backslash y$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
70	0.0009	0.0013	0.002	0.0026	0.0033
100	0.0014	0.003	0.0041	0.0054	0.0067

Tableau IV-6. Valeurs des facteurs de confinements optiques de la structure $GaN/Al_yGa_{1-y}N$ pour $L = 70 \text{\AA}$ et $L = 100 \text{\AA}$.

Nous constatons que le facteur de confinement a pris de grandes valeurs dans le cas où l'on confine le GaN entre deux couches de $Al_yGa_{1-y}N$ possédant une concentration d'aluminium (y) plus grand. Ce qui assure un confinement de l'ordre de 0.33% et 0.67% pour $L = 70 \text{\AA}$ et $L = 100 \text{\AA}$ respectivement à une longueur d'onde fixe $\lambda = 0.34 \mu m$.

IV-6. Le gain modal

Nous avons vu au chapitre III que le gain modal d'une structure dépend du facteur de confinement optique et du gain optique du matériau. Par conséquent, l'optimisation du gain modal nécessite au préalable de superposer spectralement le facteur de confinement avec le gain du matériau.

La détermination de la densité de porteurs d'injection de seuil N_{th} ainsi que la densité de courant de seuil J_{th} impose la connaissance de l'évolution du gain modal en fonction de la densité de porteurs pour le premier paramètre N_{th} , et la variation du gain modal en fonction de la densité de courant d'injection pour le deuxième bien sûr après avoir déterminé la valeur du gain modal de seuil g_m .

V-6-1. Variation du gain modal en fonction de l'énergie d'émission

En faisant varier le gain modal en fonction de l'énergie d'émission pour différentes densités de porteurs injectés, il est remarqué que les spectres prennent les mêmes formes et allure que les spectres présentés dans la figure IV-12, à la seule différence la valeur du gain car il s'agit bien du gain modal réel et non optique. Ainsi, pour une densité de $3 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$ et au tour d'une longueur d'onde de $0.34 \mu\text{m}$, le gain modal est de l'ordre de 15.63cm^{-1} .

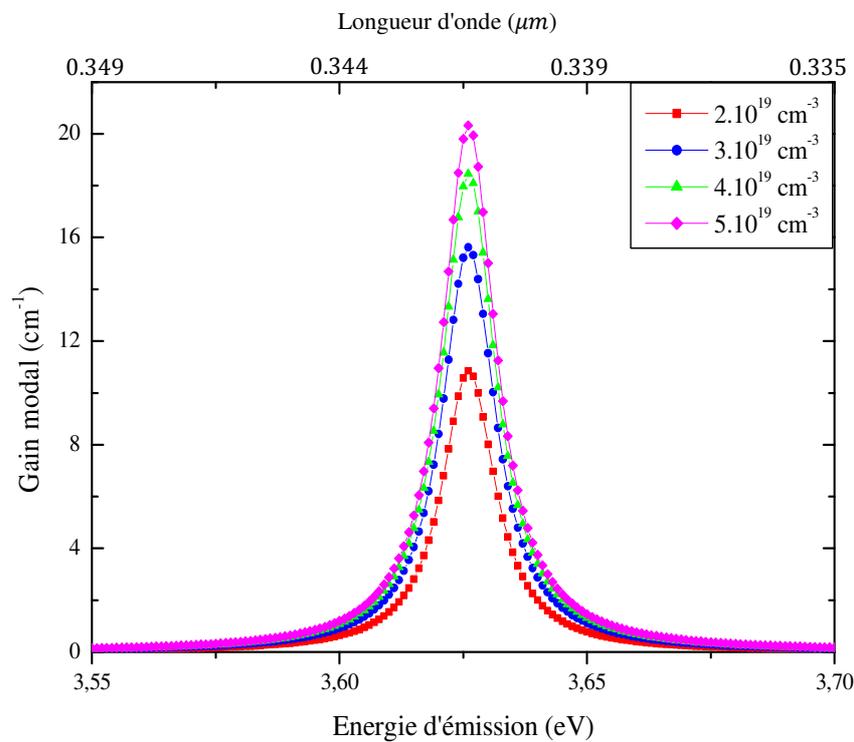


Figure IV-12 : Evolution du gain modal en fonction de l'énergie d'émission pour différentes densités des porteurs.

IV-6-2. Variation du gain modal maximal

IV-6-2-1. Pour différentes largeurs des boîtes quantiques

La figure IV-13 illustre la variation du gain modal maximal en fonction de la densité de porteurs pour $L = 60, 70, 80, 90, 100 \text{ \AA}$ de laser à BQ $\text{GaN}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$.

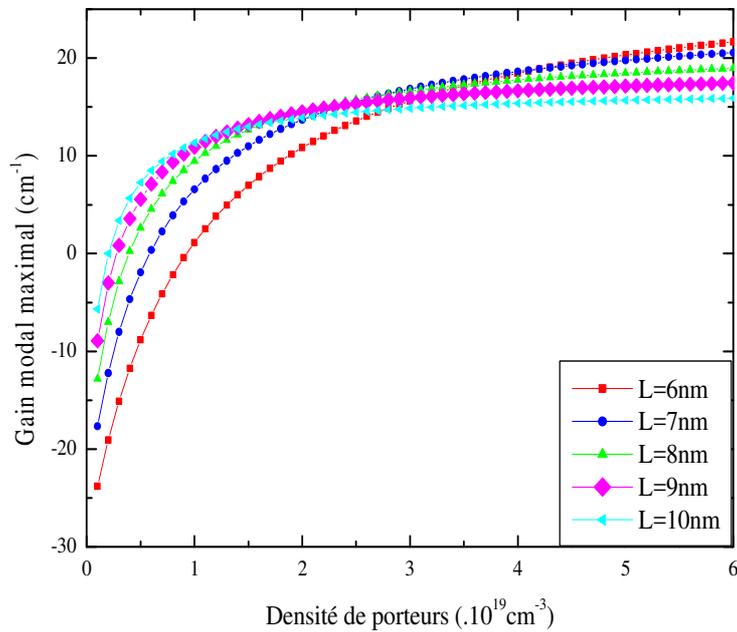


Figure IV-13 : Variation du gain modal maximal en fonction de la densité de porteurs d'injection pour différentes largeurs des boîtes quantiques.

Pour les petites largeurs, le gain modal max est faible dans la région de faible injection, lorsque L augmente les pentes des courbes diminuent de sorte que le gain soit sensible à la forte injection de porteurs dans les boîtes étroites que les boîtes larges. Il est aussi constaté que les densités de transparence correspondant au gain nul augmentent avec la diminution des largeurs des boîtes.

$L(\text{Å})$	60	70	80	90	100
$N_{tr} (.10^{19} \text{cm}^{-3})$	0.926	0.584	0.391	0.275	0.2

Tableau IV-7. Les valeurs de la densité de transparence de la structure $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ pour différentes largeurs de boîtes.

IV-6-2-2. Pour différentes valeurs de température

Comme déjà dit dans la partie (IV-4-5) qu'il n'y a pas un grand effet de la température sur les paramètres fonctionnels des boîtes quantiques à cause de la stabilité de la densité des porteurs avec la variation de la température. La figure IV-14 montre l'évolution du gain modal maximal en fonction de la densité de porteurs pour différentes valeurs de la température. On constate que la courbe prend l'allure usuelle du gain max en fonction de la densité de porteurs avec l'apparition de deux régions d'absorption et d'émission. On constate aussi qu'il y a une légère augmentation du gain avec la diminution de la température pour les hautes densités de porteurs injectés.

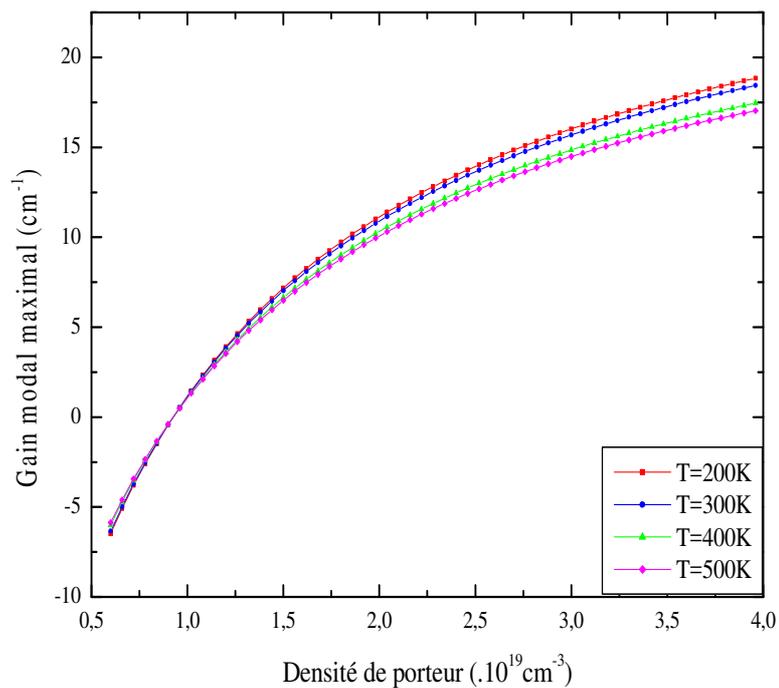


Figure IV-14 : Variation du gain modal maximal en fonction de la densité de porteurs d'injection pour différentes valeurs de températures de la structure $GaN/Al_{0,2}Ga_{0,8}N$ de largeur $L = 60 \text{ \AA}$.

IV-6-3. Variation du gain modal maximal en fonction du nombre de plans des boîtes quantiques

A partir de la figure IV-15, qui représente la variation du gain modal maximal en fonction de la densité du courant d'injection pour différents nombres de plans des boîtes quantiques, il est remarqué que la densité de courant de transparence pour laquelle le gain devient positif est faible pour une seule couche de boîte environ 33.4 A/cm^2 par rapport à celle obtenue pour sept couches (224 A/cm^2). Donc, il est clair que pour un bon gain, une forte densité de courant est indispensable.

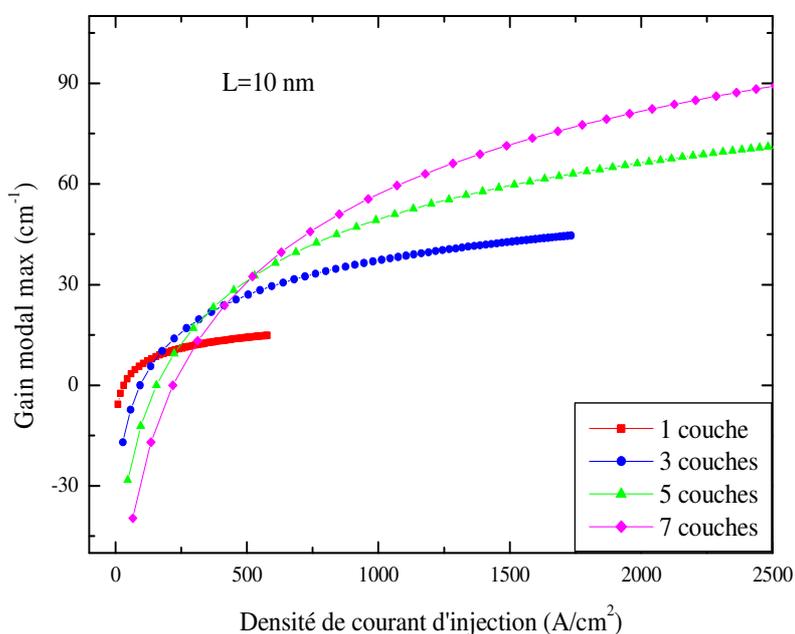


Figure IV-15 : Variation de gain modal maximal en fonction de la densité du courant d'injection pour différents nombres de plans des boîtes quantiques.

Nombre de plans	1	3	5	7
$J_{tr}(\text{A/cm}^2)$	34	98	159	224
Gain de saturation (cm^{-1})	15	43	79	106

Tableau IV-8. Valeurs de la densité de courant de seuil pour différents nombres de plans de boîte avec le gain de saturation correspondant.

Les lasers à boîtes quantiques à multi-plans peuvent atteindre des gains modaux plus élevés par rapport à des structures lasers à un seul plan mais par contre exigent des densités de courant d'injection plus élevés, ce qui impose que si les pertes dans un laser sont plus grandes, il faut avoir immédiatement un gain plus élevé et là les lasers à boîtes quantiques à multi-plan sont préférables.

IV-7. L'effet du dopage sur le gain

L'effet de dopage de type P et N sur le gain optique est illustré sur la figure IV-16 pour des densités d'accepteurs $N_a = 5 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$ et donneurs $N_d = 5 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$. La figure IV-17 montre similairement une comparaison du gain maximal des trois cas : GaN non dopé, dopé P et dopé N .

Le dopage de type P fait diminuer f_v puisque N augmente de $N + N_a$ entraînant une augmentation de $f_c - f_v$. Ce qui résulte que le dopage de type P augmente principalement la valeur max du gain par rapport au dopage de type N qui a une légère influence sur le pic du gain pour une augmentation $f_c - f_v$ lorsque N croit de $N + N_d$.

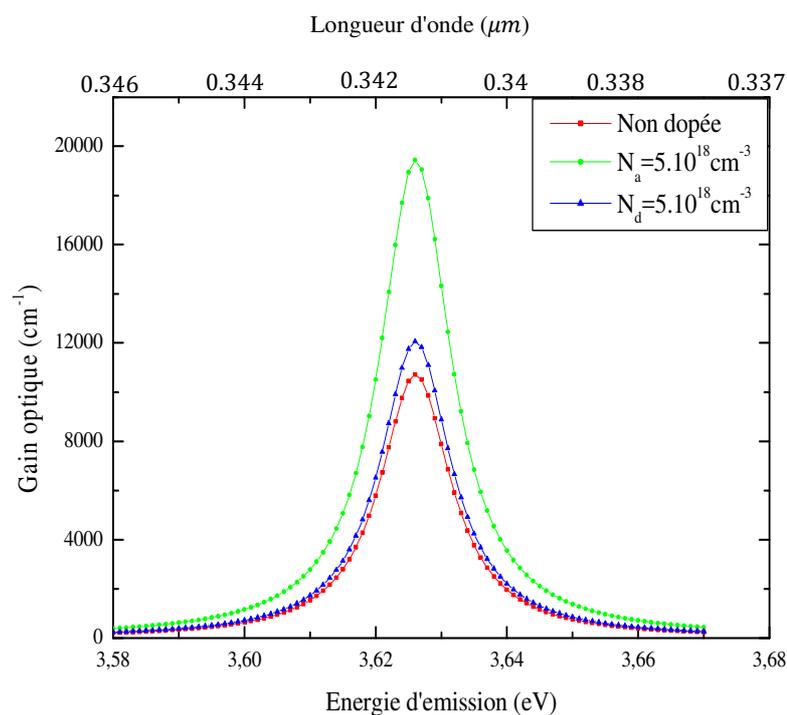


Figure IV-16: L'influence du dopage sur le spectre du gain optique d'une boîte quantique à base de GaN de largeur $L = 60 \text{ \AA}$.

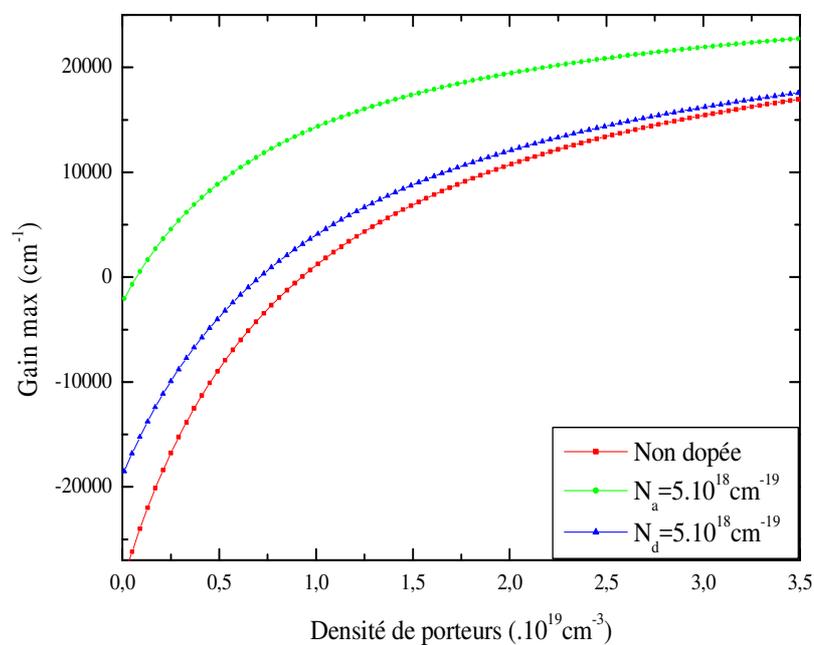


Figure IV-17 : Comparaison du gain max entre GaN dopé P et N .

Le tableau ci-dessus résume les résultats obtenus pour 60 Å de GaN en fonction du dopage à une concentration de porteurs de $2 \cdot 10^{19} cm^{-3}$.

Concentration de dopants ($\cdot 10^{18} cm^{-3}$)	0	P (5)	N (5)
Gain max (cm^{-1})	10909	19545	12500
Seuil d'émission	0.926	0.073	0.71
N_{tr} ($\cdot 10^{19} cm^{-3}$)			

Tableau IV-9. Caractéristiques d'émission pour 60 Å du laser à boîte quantique à base de $In_xGa_{1-x}N$ en fonction du dopage pour $x = 0$.

Le dopage de type P permet d'augmenter le pic du gain et d'atteindre un seuil d'émission pour des faibles concentrations de porteurs par rapport au cas non dopé, ou dopé de type N ce qui permet d'aboutir à des valeurs minimales de densités de courant de seuil.

IV-8. L'effet de la contrainte sur le gain

Dans les lasers à boîte quantique une autre complication influant les performances du laser s'ajoute, c'est l'effet de la contrainte, où un calcul des structures de bandes tenant compte des effets de contraintes est exigée pour calculer le gain. Pour mettre en évidence l'effet de la contrainte sur le gain, nous donnons les allures de variation de celui-ci en fonction de l'énergie de transition et la variation du gain max en fonction de la densité de porteurs telles qu'illustrent les figures IV-18, IV-19 respectivement.

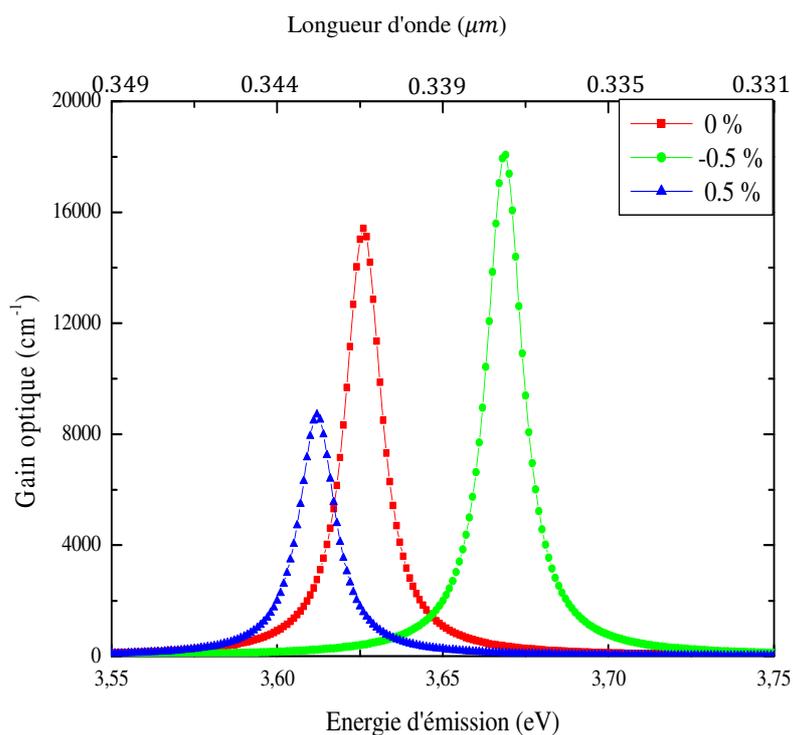


Figure IV-18 : Spectre du gain optique d'une structure laser à BQ $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ soumise à une contrainte de tension et une contrainte de compression.

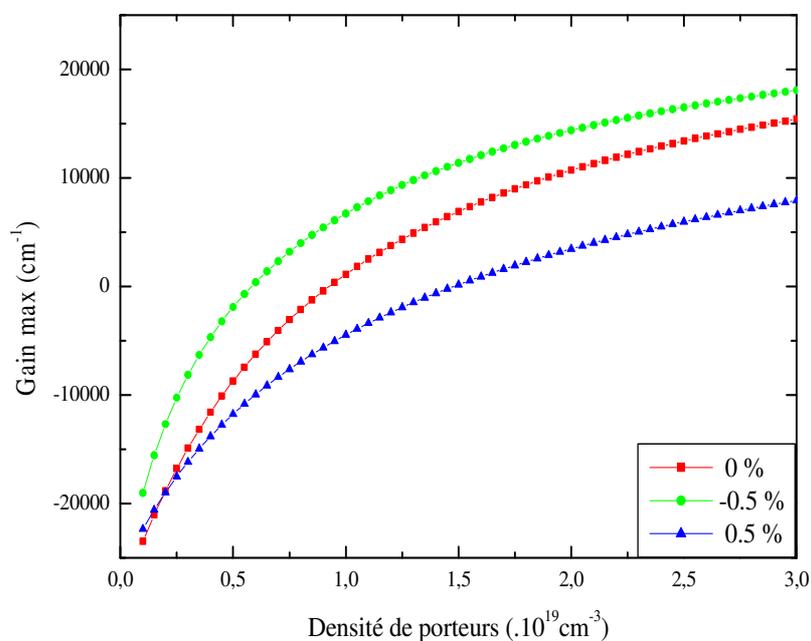


Figure IV-19 : Comparaison du gain maximal en fonction de la densité de porteurs pour une structure laser à boîte quantique $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ contrainte et non contrainte.

Nous observons à partir des courbes IV-18, IV-19 et le tableau ci-dessous que la structure, qui est soumise à une contrainte de compression, a un gain plus élevé et une densité de transparence plus faible par rapport au cas non contraint. Par contre, la structure qui est soumise à une contrainte de tension montre une diminution du gain et un niveau de transparence relativement plus grand par rapport au cas non contraint.

Contrainte	Gain max (cm^{-1})	Seuil d'émission $N_{tr}(\cdot 10^{19} cm^{-3})$	Energie de transition (eV)
0%	15415	0.926	3.6262
Contrainte de compression -0.5%	18421	0.58	3.669
Contrainte de tension 0.5%	9079	1.48	3.612

Tableau IV-10. Caractéristiques d'émission d'une structure laser à boîte quantique à base de $In_xGa_{1-x}N$ pour $L = 60 \text{ \AA}$ et pour $x = 0$ sous l'effet de contrainte.

IV-9. La densité de courant de seuil

La dernière étape dans la modélisation d'une diode laser à boîte quantique est la détermination de sa densité de courant de seuil qui peut être obtenue grâce à l'ensemble des outils de calcul que nous avons précédemment développé.

A partir d'un niveau d'injection, le gain maximum des boîtes quantiques et l'énergie de transition par conséquent la longueur d'onde qui lui sont associés sont déterminés. Ces valeurs sont introduites pour déterminer le gain modal. Ce dernier est comparé au gain au seuil de la cavité laser. Pour le niveau d'injection correspondant à cette égalité, la densité de courant de seuil est définie.

IV-9-1. Gain modal maximal en fonction de la densité de courant d'injection pour différentes largeurs des boîtes quantiques

Comme les dispositifs électroniques ont une caractéristique de transfert ; Intensité du courant en fonction de la tension $I(V)$ qui est importante, les lasers ont en une semblable qui est le gain modal en fonction de la densité de courant d'injection.

La figure IV-20 rassemble les résultats sur les paramètres d'intérêt : largeur de boîte, gain modal et densité de courant. Elle montre les variations du maximum du gain modal avec le courant d'injection et permet de comparer plusieurs boîtes entre elles. On remarque que la pente est d'autant plus forte que la boîte est étroite. Cette sensibilité à l'injection avait déjà été observée sur la figure IV-9.

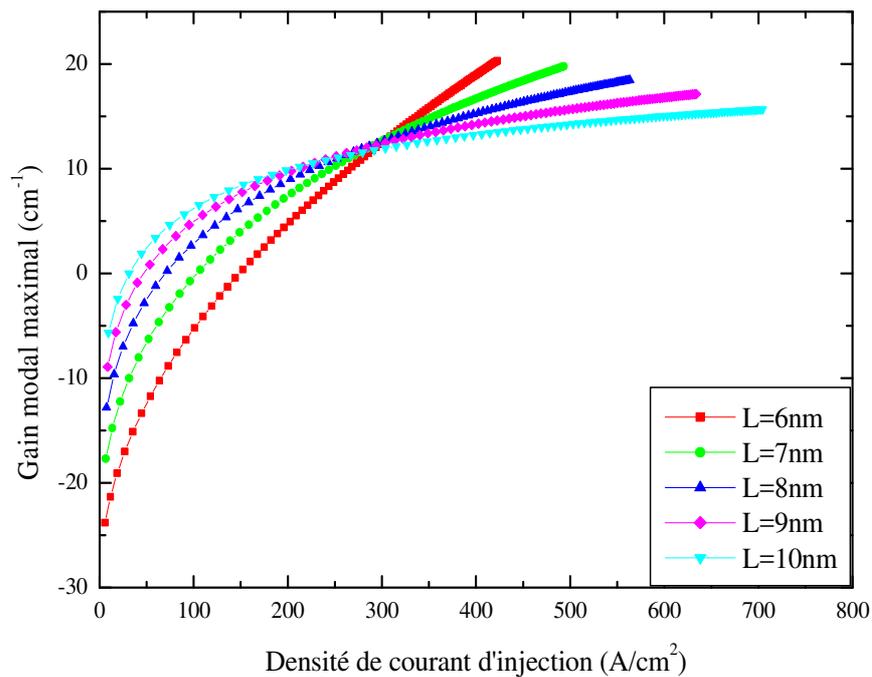


Figure IV-20 : Variation du gain modal maximal en fonction de la densité de courant d'injection pour différentes largeurs de boîtes.

Il est aussi intéressant de noter que le pied des courbes se déplace vers les faibles densités de courant lorsque L augmente. Le point d'intersection d'une courbe avec l'axe horizontal est le point de transparence, c'est-à-dire le point de fonctionnement pour lequel la structure n'est plus absorbante mais a un gain encore égal à zéro. Pour une densité de courant supérieure, la structure commence à avoir un gain. On voit que le point de transparence est d'autant plus vite atteint que la boîte est large. Il est plus facile d'avoir du gain dans une boîte de $L = 100 \text{ \AA}$ mais bien vite, une boîte plus étroite donnera un gain plus élevé.

D'après les figures IV-13 et IV-20, il y a un point intéressant à citer, c'est la saturation du gain pour les fortes densités d'injection de porteurs (à partir de $3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$). Il faut respecter cette limite et injecter des porteurs dont la concentration est inférieure ou égale à cette valeur.

$L(\text{\AA})$	60	70	80	90	100
$J_{tr}(\text{A/cm}^2)$	148.37	100.65	69.67	51.61	33.4

Tableau IV-11. Les valeurs de la densité courant de transparence de la structure $\text{GaN}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ pour différentes largeurs de boîtes.

IV-9-2. Influence de la largeur de boîte sur la densité de courant de seuil

Nous avons fixé plusieurs paramètres afin d'évaluer l'influence de la largeur des boîtes quantiques sur la densité de courant de seuil. Nous considérons une énergie de transition $hw = 3.55 \text{ eV}$ ($\lambda = 0.35 \mu\text{m}$) et $hw = 3.6 \text{ eV}$ ($\lambda = 0.34 \mu\text{m}$), une cavité laser de longueur $L_c = 1.8, 1.2, \text{ et } 0.8 \text{ mm}$ de technologie caractérisée par les valeurs communément retenues pour GaN ($\alpha_i = 5 \text{ cm}^{-1}$, $R_1 = R_2 = R = 0.3$).

La figure ci-dessous représente la variation de la densité de courant de seuil en fonction de la largeur des boîtes quantiques à des longueurs d'onde fixes de choix arbitraire, pour différentes valeurs de longueurs de cavité. Nous remarquons que :

- Les deux allures présentent un minimum pour des boîtes de largeur comprise entre 75 \AA et 78 \AA pour $\lambda \approx 0.35 \mu\text{m}$ et entre 63 \AA et 66 \AA pour $\lambda \approx 0.36 \mu\text{m}$. Si la couche

active est plus mince que 75 Å et 63 Å et plus grande que 78 Å et 66 Å pour les deux cas, les valeurs de la densité de courant de seuil augmentent rapidement.

- Les valeurs de la densité de courant de seuil augmentent avec la diminution de la longueur de la cavité à une largeur de boîte quantique fixe par exemple pour $L \approx 76.5 \text{ Å}$, $J_{th} \approx 181.63, 213.46, 254.73 \text{ A/cm}^2$ pour $L_c = 1.8, 1.2, 0.8 \text{ mm}$ respectivement.

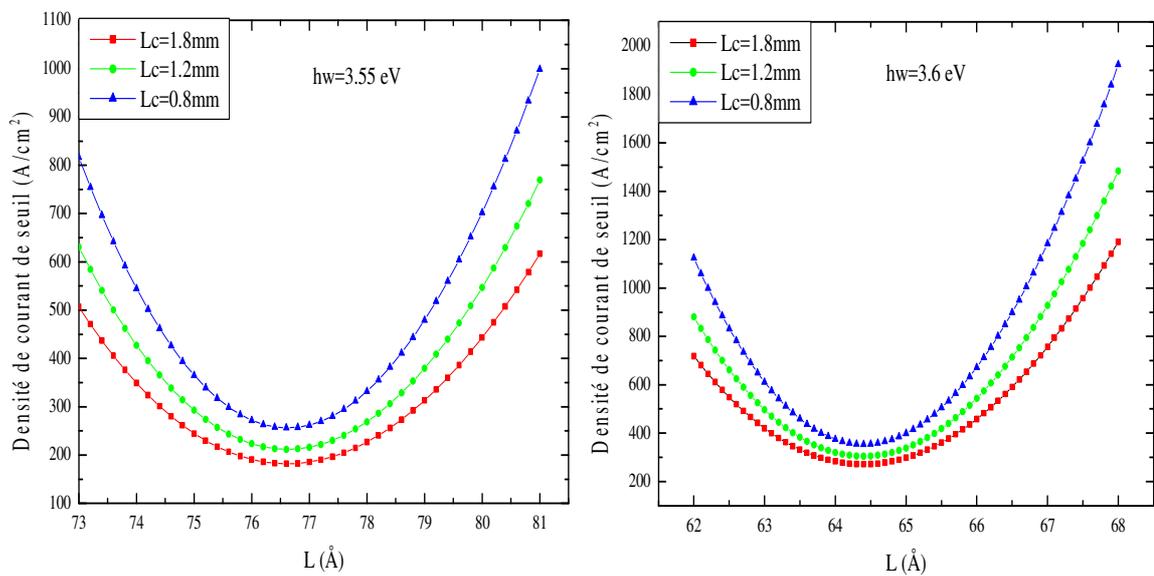


Figure IV-21 : Variation de la densité de courant en fonction de la largeur des boîtes quantiques.

IV-9-3. Influence de la longueur de cavité sur la densité de courant de seuil

La figure IV-22 illustre la variation de la densité de courant de seuil en fonction de la longueur de la cavité, où il est observé que la densité de courant de seuil diminue avec l'augmentation de la longueur de la cavité, ce qui se traduit par la diminution du gain modal et par conséquent la diminution des pertes totales dans les lasers à longue cavité, ce qui est déjà montré par les résultats précédents.

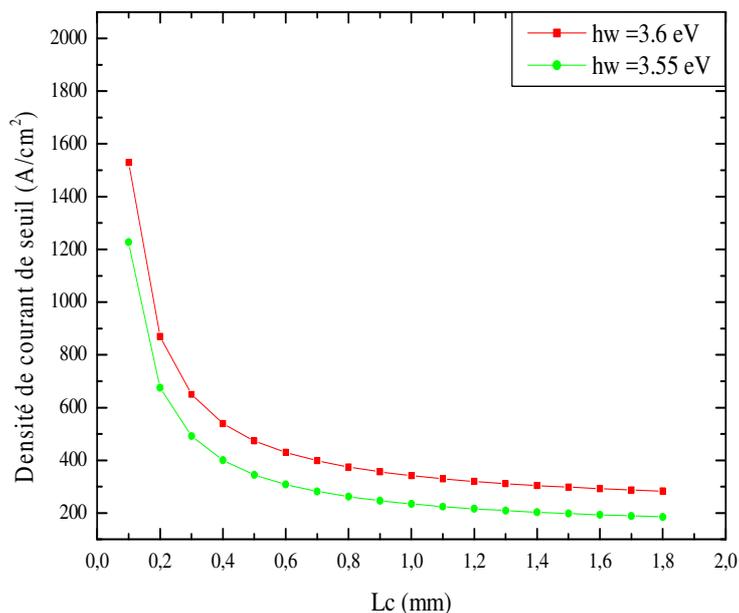


Figure IV-22: Variation de la densité de courant de seuil en fonction de la longueur de la cavité.

IV-9-4. Influence de l'effet de la contrainte sur la densité de courant de seuil

L'influence de l'effet de la contrainte sur la densité de courant de seuil est montrée sur la figure IV-23, où l'on remarque que la structure qui est soumise à une contrainte de compression présente des faibles valeurs de densité de courant de seuil par rapport à une structure soumise à une contrainte de tension. Les résultats obtenus pour un gain au seuil de 7.5 cm^{-1} et 12 cm^{-1} sont ainsi regroupés dans le tableau IV-12.

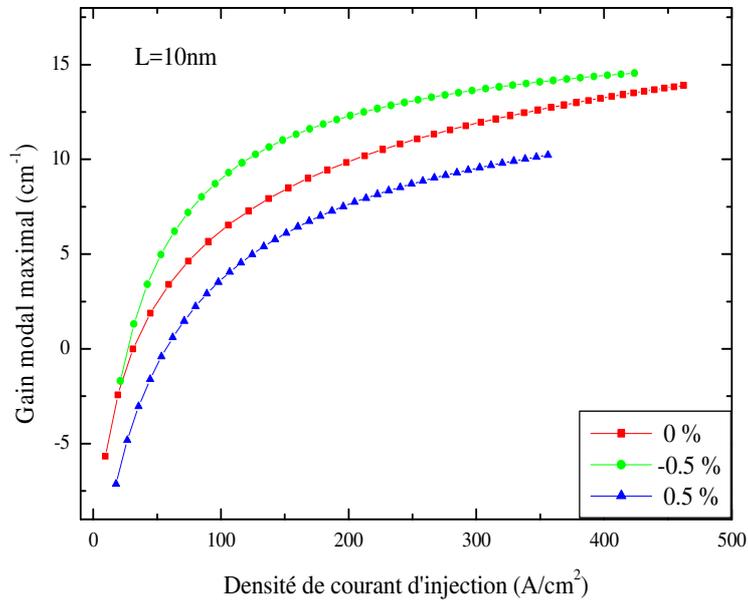


Figure IV-23 : Variation du gain modal max en fonction de la densité de courant d’injection d’une structure laser à boîte quantique $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ soumise à une contrainte de tension et une contrainte de compression.

		0%	Contrainte de compression -0.5%	Contrainte de tension 0.5%
$L = 100 \text{ \AA}$	$\alpha_T = 0 \text{ cm}^{-1} (J_{tr})$	33.4 A/cm^2	26.87 A/cm^2	57.11 A/cm^2
	$\alpha_T \approx 7.5 \text{ cm}^{-1}$	127.01 A/cm^2	79.08 A/cm^2	194.33 A/cm^2
	$\alpha_T \approx 12 \text{ cm}^{-1}$	302.1 A/cm^2	182.4 A/cm^2	-

Tableau IV-12. Valeurs de densité de courant de seuil d’une structure laser à boîte quantique $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ soumise à une contrainte de tension et une contrainte de compression pour $L = 100 \text{ \AA}$.

IV-9-5. Influence du dopage sur la densité de courant de seuil

La figure suivante présente la variation du gain modal en fonction de la densité de courant d'injection des structures lasers à boîte quantique $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ non dopées, dopées N et P . Dans ce cas, la structure non dopée présente des valeurs de densités de courant plus grandes que celles dopées P et N . Les résultats obtenus pour un gain au seuil de 7.5 cm^{-1} et 12 cm^{-1} sont ainsi regroupés dans le tableau IV-13.

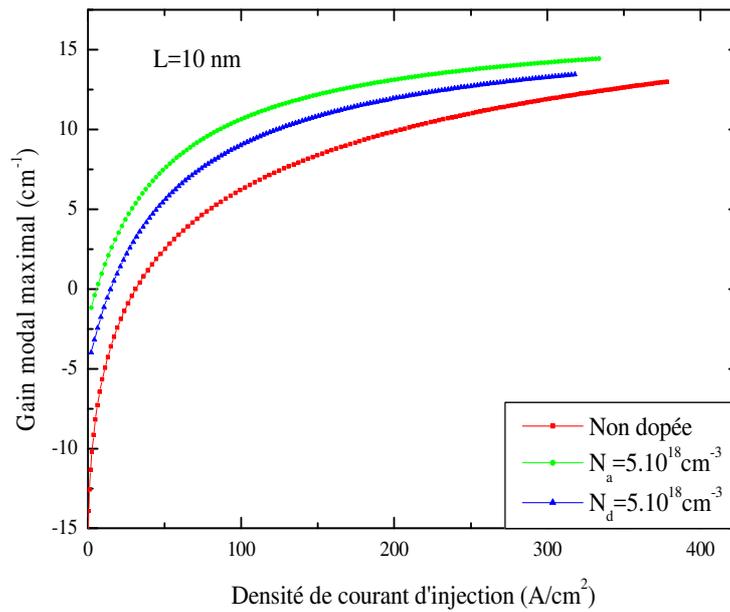


Figure IV-24: Variation du gain modal max en fonction de la densité de courant d'injection d'une structure laser à boîte quantique $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ non dopée et dopée N et P .

Concentration de dopants ($\cdot 10^{18}\text{cm}^{-3}$)	0	$P(5)$	$N(5)$
$\alpha_T = 0\text{ cm}^{-1} (J_{tr})$	33.4 A/cm^2	6.72 A/cm^2	15.58 A/cm^2
$L = 100\text{ \AA}$	$\alpha_T \approx 7.5\text{ cm}^{-1}$	127.01 A/cm^2	49.58 A/cm^2
	$\alpha_T \approx 12\text{ cm}^{-1}$	302.14 A/cm^2	505.32 A/cm^2

Tableau IV-13. Valeurs de densité de courant de seuil d'une structure laser à boîte quantique $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ non dopée et dopée N et P pour $L = 100\text{ \AA}$.

IV-10. Caractéristique d'une structure à boîte quantique optimale

La propriété souhaitable d'une diode laser à semi-conducteur serait d'avoir un gain optique élevé avec une densité de courant de seuil minimale. Et d'après les résultats obtenus dans ce travail, il est constaté deux comportements différents qui doivent être pris en considération lors de la recherche d'une structure optimale : la largeur de la structure et le niveau d'injection des porteurs appliqué.

A une grande largeur de boîte $L = 100 \text{ \AA}$ et une faible injection des porteurs, le gain est relativement faible (de l'ordre de 5666 cm^{-1}), mais raisonnable par rapport aux résultats indiqués dans les références [8, 13, 15], (pour un puits quantique de même largeur ; le gain max est de l'ordre de 5200 cm^{-1}) avec une densité de transparence faible, ce qui donne par la suite une densité de courant de seuil faible de l'ordre de 302.14 A/cm^2 (726 A/cm^2 pour un puits quantique [13]). Par contre, à faible largeur de boîte $L = 60 \text{ \AA}$ et une forte injection des porteurs, on constate un comportement différent, un gain élevé avec une densité de transparence plus grande que celle obtenue pour les grandes largeurs.

Pour cela, on a le choix entre deux cas :

- Soit un gain faible avec une faible densité des porteurs d'injection (faible densité de courant de seuil), et dans ce cas les boîtes quantiques à grande largeur sont les plus adaptées,
- Soit un gain élevé avec une grande densité de porteurs d'injection (grande densité de courant de seuil), et dans ce cas les boîtes quantiques à faible largeur sont préférables.

En réalité, le meilleur compromis est le premier cas, où un bon gain est atteint avec le minimum de porteurs d'injection, ce qui impose que la largeur optimale de la structure d'une diode laser à boîte quantique $In_xGa_{1-x}N/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ est autour de 100 \AA .

Il est à noter aussi que les propriétés optimales de la structure laser à boîte quantique dépendent aussi du gain au seuil de la cavité. Cette dernière quantité est fonction essentiellement de la qualité d'élaboration et de la qualité du composant. On conclue dans ce cas que les pertes totales générées par la cavité imposent d'autres conditions pour la structure optimale. Si les pertes totales sont faibles (moins de 12 cm^{-1}), la structure laser à $L = 100 \text{ \AA}$ possède une densité de courant de seuil de l'ordre de 302.14 A/cm^2 et pour les cas où les

perdes totales dépassent 12 cm^{-1} , les structures lasers à multi-plan sont la meilleure solution pour que le gain modal dépasse les pertes de la cavité.

Dans le tableau suivant, nous proposons des caractéristiques d'un résonateur à boîte quantique à base de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$. Nous avons trouvé que les caractéristiques sont meilleures pour $x = 0.5$.

Couche active	GaN	$\text{In}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}$	$\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$
Largeur de boîte (Å)	100	100	100
Spectre d'émission	UV	Vert	Rouge
Couches de confinement	$\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$	$\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$	$\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$
L'énergie de transition (eV)	3.5012	2.386	1.808
La longueur d'onde (nm)	354	519	685
Concentration des porteurs injectés (cm^{-3})	$3 \cdot 10^{19}$	$3 \cdot 10^{19}$	$3 \cdot 10^{19}$
Gain maximal (cm^{-1})	5666	6718	7666
Densité de courant de transparence (A/cm^2)	33.4	20.69	14.77
Densité de courant de seuil (A/cm^2)	302.14	153.69	150.25
Nombre de plans	1	1	1
Pertes totales (cm^{-1})	12	12	12
Réfectivités des faces ($R = R_1 = R_2$)	0.3	0.3	0.3
Largeur de la cavité (mm)	1.7	1.7	1.7

Tableau IV-14. Données et caractéristiques d'un résonateur à boîte quantique à base de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$.

Références

- [1] D. Bimberg, M. Grundmann and N. N. Ledentsov, Quantum Dot Heterostructures (Wiley, New York), 198 (1999).
- [2] M. Asada, Y. Miyamoto and Y. Suematsu, IEEE J. Quantum Electron. Qe-**22**, 1915 (1986).
- [3] E.O. Chukwuocha, M. C. Onyeaju, Int. J. Scientific. Technol. Res, **1**, 21(2012).
- [4] K. H. Al-Mossawi, Opt Photonics J, **1**, 65 (2011).
- [5] Y. Arakawa and H. Sasaki, App. Phys Lett, **40**, 939 (1982).
- [6] I. I. Mahmoud, M.B. El Mashade and M.S. El Tokhy, in International Conference of the 2008 on Computer Engineering & System of the IEEE (Cairo, Egypt) 166 (2008).
- [7] J. H. Davies, The Physics of low-Dimensional semiconductors: An introduction (Cambridge University Press, Cambridge), 391 1 (998).
- [8] B. Bouabdallah, B. Benichou, R. Menezla, K. Bousbahi, Physical and Chemical News, **33**, (2007).
- [9] F. Hadjaj, A. Belghachi, M. Belhadj, Elsevier Energy Procedia, **18**, 61 (2012).
- [10] A. Demir, Ph. D thesis, University of Central Florida, (2010).
- [11] T. Takahashi ,Y. Arakawa, Optoelectron-Devices, **3**, 155 (1988).
- [12] D. G. Nahri, H. Arabshahi and M. R. Rokn-Abadi, Amer. J. Phys, **3**, 138 (2010).
- [13] B. Bouabdallah, B. Benichou, R. Menezla, K. Bousbahi, S. Mansouri, Sci. Bull. Fac. Eng. Ain Shams Univ. Part II Electrical Engineering.(Egypt). **42**, N° 3, 771-790 (2007).
- [14] L. Deng, L. Han, X.Li and W.P. Huang, IEEE Photon. J, **4**, 1600 (2012).
- [15] B. Bouabdallah, « Modélisation d'un laser bleu à puits quantique au $GaInN/GaAlN$ », thèse de Magister, USTO d'Oran, Algérie (2000).
- [16] F. Hadjaj, « Modélisation des diodes laser à puits quantiques réalisées à partir de composant III-V », thèse de doctorat, Université de Béchar, Algérie (2017).
- [17] F. Chatenoud, « Conception et réalisation par épitaxie par JETs moléculaires de diodes laser à puits quantique $GaAs- AlGaAs$ à ruban nervure émettant dans le spectre visible », thèse de doctorat, Université Paul Sabatier de Toulouse, France (1988).

*CONCLUSION
GENERALE*

Conclusion Générale

De part leurs propriétés particulières, les diodes lasers à boîtes quantiques à base des matériaux nitrurés sont des candidats prometteurs pour les composants optoélectroniques émettant dans le spectre visible et UV, c'est-à-dire des composants qui couvrent les courtes longueurs d'onde. La description de fonctionnement de ces composants est très complexe, car ils possèdent deux types de propriétés physiques ; les premières engendrées en phénomène de quantification et les deuxièmes aux propriétés physiques aux lasers de semi-conducteurs (absorption, émission, condition de seuil, etc....).

L'objectif de notre travail a été d'étudier et d'optimiser les diodes laser à boîtes quantiques à base des matériaux nitrurés $In_xGa_{1-x}N/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$; en vue de proposer un résonateur à boîtes quantiques pour les constructeurs afin de réaliser des composants plus performants.

Le manuscrit est divisé en quatre chapitres. Le premier chapitre fournit une introduction aux propriétés fondamentales (structurales, électroniques, élastiques, etc....) des matériaux nitrurés binaires et ternaires dans la phase wurtzite. Les différents paramètres utilisés comme donné dans notre calcul sont déterminés par la loi de Vegard (paramètres de maille, masse effectives des électrons et trous et l'indice de réfraction).

Après avoir présenté le principe de fonctionnement des lasers, où nous nous sommes intéressés en particulier à celui des lasers à boîtes quantiques, en rappelant les conditions de l'apparition de l'effet quantique, dans le deuxième chapitre. Nous sommes passés, dans le troisième chapitre, à présenter une méthodologie générale avec des explications approfondies pour étudier les propriétés d'émission dans les boîtes quantiques et plus particulièrement la détermination du gain optique et les caractéristiques gain-courant dans les lasers à boîtes quantiques, partant de la détermination des longueurs d'onde d'émission jusqu'à la densité de courant de seuil.

Dans ce cadre, le gain optique est déterminé suivant le modèle d'Asada qui tient compte de l'effet de l'élargissement de la bande par le biais de relaxation intra-bande et dans lequel les transitions se font en respectant la règle de sélection du vecteur d'onde. Les caractéristiques de fonctionnement au seuil sont déterminées, en prenant compte des résultats du modèle appliqué (la détermination du gain optique) et les conditions d'oscillation de la cavité laser.

Enfin, le quatrième chapitre est consacré pour présenter nos résultats d'optimisation de la structure laser à base de $In_xGa_{1-x}N$ comme couche active. Pour déterminer les paramètres optimaux nécessaires, nous avons à réaliser le compromis d'avoir et un gain optique et un facteur de confinement élevés d'une part, et une faible densité de courant de seuil d'une autre part. L'évaluation de ces paramètres est basée sur l'effet de la largeur des boîtes quantiques, la densité des porteurs injectés, la fraction molaire d'Indium, la température, l'effet du dopage et de la contrainte. Nous avons mis aussi en évidence l'influence de la longueur et les pertes de la cavité, sur les performances de cette structure laser, et montrer qu'une large longueur de cavité conduit à une faible densité de courant de seuil.

Nous avons trouvé que l'utilisation d'un milieu amplificateur à base des boîtes quantiques cubiques dans un laser à montré plusieurs avantages potentiels :

- ✓ L'ajustement de la longueur d'onde d'émission par le choix des dimensions géométriques (la largeur des boîtes quantiques) de la structure quantique.
- ✓ L'utilisation des boîtes quantiques à base des matériaux nitrurés $In_xGa_{1-x}N$ nous a permis de couvrir tout le spectre visible et UV en variant la composition d'indium.
- ✓ Une compétitivité entre la largeur de la boîte quantique et la densité de porteurs d'injection pour obtenir une structure laser avec un bon gain et une faible densité de courant de seuil.
- ✓ L'insensibilité des paramètres (gain, gain max...) à la variation de la température, ce qui est en accord avec la prédiction d'Arakawa mentionnée dans le chapitre III.
- ✓ L'effet de saturation du gain limite l'influence de la densité de porteurs d'injection sur les caractéristiques de la structure laser.

- ✓ Le dopage de type *P* nous a permis d'augmenter le gain optique par contre, le dopage de type *N* n'a aucun vrai effet sur le gain.
- ✓ La structure contrainte en compression a permis d'enrichir le gain.
- ✓ L'incorporation d'Indium dans la couche active a mené à des meilleurs résultats par rapport à une structure laser à base de *GaN*.

A partir de ces résultats qui confirment les potentialités de ces diodes, notre choix s'est porté sur la structure laser à base de boîtes quantiques de forme cubique à base de $In_{0.5}Ga_{0.5}N$ comme couche active de largeur $L = 100 \text{ \AA}$ émettant dans le rouge. Cette dernière est confinée entre deux couches barrières de $Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ sur un substrat de *SiC*, qui se comporte comme un substrat laser par excellence due à son désaccord en maille avec *GaN*, qui est de l'ordre de 3.5%. La structure se caractérise par un gain maximal de 7665.37 cm^{-1} et une densité de courant de seuil de l'ordre de $J_{th} \approx 150.25 \text{ A/cm}^2$.

A l'état actuel, peu d'études ont été effectuées pour étudier les structures laser à boîtes quantiques de forme cubique et surtout à base des matériaux nitrurés, et comme il n'y a pas des résultats expérimentaux et théoriques publiés sur ce thème, nous avons comparé nos résultats avec les travaux effectués sur les diodes lasers à puits quantiques à base des matériaux nitrurés, où nous avons constaté que nos résultats restent dans les normes, ce qui permet de valider notre modèle de calcul. Pour cela, nous pensons que notre estimation théorique est le seul outil raisonnable pour obtenir une telle information importante et que les résultats calculés peuvent être un guide théorique pour les expérimentateurs.

Ces résultats ne constituent qu'une contribution scientifique pour ceux qui vont étudier les diodes laser à base des boîtes quantiques ultérieurement, et ou qui veulent passer à l'élaboration technologique. Au plan théorique, ce thème de recherche reste très vaste et il y'a beaucoup à faire pour bien cerner les phénomènes qui surgissent dans ces dispositifs, afin d'atteindre les meilleures performances. Il serait utile d'approfondir la description des phénomènes d'émission et des mécanismes de recombinaison non radiatifs, de prendre en considération toutes les transitions possibles (inter-bandes et intra-bandes), d'améliorer le modèle théorique pour expliquer physiquement comment le nombre des plans des boîtes quantiques vont servir pour diminuer la densité de courant de seuil.

Résumé

Les boîtes quantiques semi-conductrices ont fait l'objet d'une attention très considérable ces dernières décennies en raison de leurs propriétés remarquables par rapport au puits quantique, où les porteurs de charges sont confinés dans les trois directions de l'espace. Ce confinement leur confère un spectre en énergie discret. Ces structures ont fait l'objet d'un avantage dans les lasers où leur utilisation donne lieu à des gains plus élevés et des densités de courant de seuil faibles.

Dans cette thèse, nous présentons une étude théorique d'optimisation de composants optoélectroniques lasers à boîtes quantiques à base des nitrures, famille très intéressante de matériaux semi-conducteurs III-V à large gap pour les applications optoélectroniques, car ils couvrent un large domaine de longueurs d'ondes allant de l'infrarouge à l'ultraviolet. Au premier chapitre, nous rappelons les propriétés générales de ces matériaux binaires (GaN , AlN , InN) et leurs alliages ($InGaN$, $AlGaN$). Au deuxième chapitre, nous décrivons l'effet laser et nous donnons une description générale des boîtes quantiques. Dans le troisième chapitre, nous détaillons le modèle théorique suivi, pour aboutir aux caractéristiques des diodes lasers à boîtes quantiques. Au quatrième chapitre, nous présentons nos résultats de simulation et optimisation.

Mots clés : Lasers, Matériaux III-V, Boîte quantique, Gain optique.