

Etude de l'émission spontanée dans des structures àcascade quantique en microcavité métallique

Yanko Todorov

► To cite this version:

Yanko Todorov. Etude de l'émission spontanée dans des structures àcascade quantique en microcavité métallique. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2006. Français. NNT : . tel-00125437

HAL Id: tel-00125437 https://theses.hal.science/tel-00125437

Submitted on 19 Jan2007

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.





Université Pierre et Marie Curie

Etude de l'émission spontanée dans des structures à cascades quantiques en microcavité métallique

THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS 6 (Spécialité: Physique Quantique)

présentée par

Yanko TODOROV

pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université Paris 6

soutenue le 24 Novembre, 2006

devant le jury composé de :

<i>Président</i> :	Claude FABRE
Rapporteurs :	Philippe LALANNE Carlo SIRTORI
Examinateurs :	Jean-Louis COUTAZ Christophe MINOT

Directeur de thèse : Izo ABRAM

Laboratoire de Photonique et de Nanostructures — UPR 20



Mis en page avec les classes thloria et thlpn.

A mes parents. A mon frère Vassil. ii

Remerciements

C'est un vrai privilège pour moi d'avoir effectué ma thèse dans l'endroit exceptionnel qui est le Laboratoire de Photonique et Nanostructures (LPN) du CNRS. Je remercie Monsieur Jean-Yves Marzin et Monsieur Marcel Benssousan pour cette opportunité, ainsi que le Ministère de l'Education Nationale et l'Université Pierre et Marie Curie Paris VI qui ont assuré financièrement cette entreprise.

Je remercie Monsieur Claude Fabre d'avoir accepté de présider le jury. Je remercie Monsieur Philippe Lalanne et Monsieur Carlo Sirtori pour avoir accepté de remplir le rôle de rapporteurs, et également Monsieur Jean-Yves Coutaz pour l'honneur d'avoir fait part de jury.

Je remercie à Iso Abram, mon directeur de thèse, pour m'avoir confié ce sujet de thèse fort intéressant. Je n'aurais jamais assez de mots pour remercier à Christophe Minot, qui m'a accompagné tout le long de ma thèse, avec beaucoup de compétence et disponibilité.

Je remercie très spécialement Isabelle Sagnes qui a jouée un rôle très important pour ce travail et au delà. Sans ses nombreux échantillons MOCVD de plus en plus meilleurs ce travail n'aurait jamais été achevé. Son énergie, son persévérance et son générosité ont été exemplaires.

Je remercie également Ulf Gennser et Aristide Lemaître pour les échantillons MBE. Je remercie Gilles Patriarches pour les caractérisations TEM, Ludovic Largeau et Olivia Manguin pour les caractérisation en rayon X des échantillons.

Je tient à remercier Stéphane Collin et Fabris Pardo, pour leur guidage précieux sur les calculs électromagnétique au début de ma thèse. Je remercie Lorenzo Bernardi pour ces conseils en son aide à nombreuses reprises pour la programmation en C++.

Ce travail n'aurait pas été possible sans le soutient de la centrale technologique du LPN, entretenue par Ali Madouri et Audray Duphil. Les personnes suivantes : Edmond Cambril, Luc Le Gratiet, Christophe Dupuis, Nathalie Bardou, Jean-Claude Esnault, Kamel Merghem, Leticia Leroy, Laurent Couraud, Laurence Ferlazzo, Stéphane Guillet, Xavier Lafosse et David Chauteau ont été indispensables pour ce projet. Merci à Partrick Hisope pour les nombreuses fournitures d'hélium et à Laurent Merzeau et Gibert Chanconie pour les nombreuses bricolages dans l'atelier mécanique.

Ce travail à été effectué à l'aide des nombreux collaborateurs externes. Je voudrais avant tous remercier à Giacomo Scalari de l'Université de Neuchâtel pour les excellents mésures spectrales sur nos échantillons, ainsi qu'à Noël Coron de l'Institut d'Astrophysique Spatiale d'Orsay pour nous avoir fournit le détecteur barométrique, peut être l'appareil le plus important pour les mesures. Je tient à remercier très chaleureusement Suchky Dhillon de l'équipe de Carlo Sirtori à l'Université Paris VII et Nina Diakonova de l'équipe de Woijtek Knap de l'Université Montpelier II pour tous les efforts qui ont fourni et leur disponibilité sur la mesure de nos échantillons. Je remercie également Monsieur Jean-Yves Coutaz de l'Université de Savoie pour les excellents mesures en transmission THz résolues temporairement.

Enfin, je voudrais remercié ma famille pour leurs soutient inconditionnel et à Monsieur Minko Balkanski, sans qui je ne serais pas là aujourd'hui.

Et ma dernière phrase s'adresse à tous mes collègues et amis qui ont marqué ma vie avant et pendant ces quatres années de thèse : Je ne vous oublierai jamais.

Table des matières

	R	emer	cieme	nts	iii
	In	ntrod	uction	générale	1
		1	L'élec	trodynamique quantique en cavité et le domaine THz	1
		2	Organ	uisation du manuscrit	3
Ι	E	tude	e théc	orique du taux de l'émission spontanée dans les mi-	
cr	oca	avite	és mé	talliques complexes. Propriétés de dispersion	7
	1	${ m Th} \epsilon$	èorie d	e l'émission spontanée	9
		1.1	Introd	luction	9
		1.2	Théor	ie quantique de l'émission spontanée	11
			1.2.1	Hamiltonien quantique d'un système en cavité	11
			1.2.2	Evolution d'un système à 2 niveaux couplé au champ	13
			1.2.3	Taux d'émission spontanée dans le cadre de la théorie de la	
				réponse linéaire	19
		1.3	Appro	oche classique : champ rétro-réfléchi	20
			1.3.1	Taux d'amortissement d'un dipôle classique	20
			1.3.2	Champ rétro-réfléchi	22
			1.3.3	Rayonnement d'un dipôle classique dans un diélectrique homo-	
				gène et infini	23
		1.4	Comp	atibilité entre les points de vue classique et quantique	26
			1.4.1	Cas d'une cavité métallique planaire	26
			1.4.2	Voie de désexcitation par absorption	30
			1.4.3	Compatibilité entre les visions classique et quantique en cou-	
				plage faible	32

	1.5	Emissi	on spontanée dans le domaine THz	33		
		1.5.1	Sources à cascades quantiques pour le domaine THz	33		
		1.5.2	Ordres de grandeur	34		
2	Sou	rce da	ns une microcavité planaire	37		
	2.1	Généra	alités	37		
		2.1.1	Cavité planaire dans le domaine THz	37		
		2.1.2	$Dispositif \ \acute{e}tudi\acute{e}: \ modèle \ \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . $	38		
	2.2	Modes	dans une cavité planaire	38		
		2.2.1	Constantes diélectriques des différentes couches $\ldots \ldots \ldots$	38		
		2.2.2	Système multicouche	41		
		2.2.3	Relation de dispersion et modes dans les systèmes multi-couches	43		
		2.2.4	Modes et absorption dans le mode fondamental de la cavité $\ . \ .$	44		
	2.3	Dipôle	e dans une cavité métallique avec couches de contact dopées $\ . \ .$	49		
		2.3.1	Champ rétro-réfléchi sur le site du dipôle	49		
		2.3.2	Couplage résonant avec le plasmon des couches dopées $\ . \ . \ .$	52		
		2.3.3	Taux d'émission spontanée modal	54		
	2.4	Variat	ions de l'émission spontanée avec les paramètres de la cavité pla-			
		naire		58		
		2.4.1	Taux d'émission global et taux d'émission dans le mode fonda-			
			mental	58		
		2.4.2	Puissance extraite de la cavité	61		
		2.4.3	Cas d'une cavité sans confinement	63		
3	Diff	Diffraction sur un réseau de fentes métalliques 6				
	3.1	But de	e cette étude	67		
	3.2	Diffrac	etion en incidence arbitraire	68		
		3.2.1	Méthode modale	68		
		3.2.2	Décomposition modale du champ	71		
		3.2.3	Equation pour les amplitudes diffractées	76		
		3.2.4	Réflexion et transmission sur le réseau	84		
	3.3	Modes	propres de la cavité complexe	86		
		3.3.1	Equation pour les modes propres	86		
		3.3.2	Transmission extraordinaire de la lumière $\ldots \ldots \ldots \ldots$	87		
		3.3.3	Modèle simple avec un seul mode guidé TM $\ . \ . \ . \ . \ .$.	90		

	3.4	Diffra	ction d'un mode de cavité par le réseau	92
	3.5	Vérific	cation expérimentale dans le domaine THz	95
4	Sou	urce en microcavité complexe		
	4.1	Rétrospective des travaux existant dans la littérature		
	4.2	Position du problème		103
	4.3	Dipôle vertical en cavité complexe		105
		4.3.1	Décomposition en sources quasi-périodiques $\ldots \ldots \ldots \ldots$	105
		4.3.2	Équation pour les amplitudes diffractées $\ . \ . \ . \ . \ . \ . \ .$	106
		4.3.3	Champ rayonné à l'extérieur de la cavité	107
		4.3.4	Champ rétro-réfléchi	110
	4.4	4 Discussion des résultats numériques		111
		4.4.1	Comportement spectral de la puissance	112
		4.4.2	Puissance récoltée en fonction de la position du dipôle	115
		4.4.3	Diagrammes de rayonnement pour le champ lointain	119
		4.4.4	Diagramme Puissance-Période	122
		4.4.5	Champ rétro-réfléchi et interprétation des résultats	125

IIRéalisation technologique et mesures sur les cascades quan-tiques en microcavités131

5	Sources à cascade quantique1			133
	5.1	Effet	tunnel résonnant; super-réseaux	. 133
		5.1.1	Illustration de l'effet tunnel résonnant	. 133
		5.1.2	Quelques notes sur la physique des super-réseaux	. 135
	5.2	Les so	ources à cascades quantiques	. 140
		5.2.1	Principe de fonctionnement des cascades quantiques; la struc-	
			ture à quatre puits	. 140
		5.2.2	Processus de désexcitation non-radiatif des niveaux électronique	≈ 143
		5.2.3	Equations de bilan pour les populations ; puissance émise	. 145
6	Fab	ricatio	on et caractérisation des dispositifs	147
	6.1 Fabrication des dispositifs			. 147
		6.1.1	Croissance épitaxiale	. 147

		6.1.2	Report du substrat. Collage métallique Au-In	. 156
		6.1.3	$Mise en forme finale \ldots \ldots$. 158
	6.2	Caractérisation électrique des dispositifs		
		6.2.1	Schéma expérimental	. 162
		6.2.2	Évolution de la courbe I-V avec les paramètres de croissance .	. 163
		6.2.3	Contact Schottky	. 168
7	Rés	ultats	expérimentaux	171
	7.1	Dispos	sitif expérimental	. 171
		7.1.1	Schéma électrique	. 171
		7.1.2	Cône de Winston \ldots	. 172
		7.1.3	Détecteur bolométrique	. 174
	7.2	Diagra	amme puissance-période expérimental	. 175
		7.2.1	Extraction du taux d'émission spontanée	. 175
		7.2.2	Réduction de l'épaisseur de la cascade	. 179
		7.2.3	Diagramme puissance-période	. 181
		7.2.4	Mesures résolues spectralement	. 185
Co	onclu	ision g	énérale	189
Aı	nnex	es		189
A	Cal	cul dét	aillé du taux d'émission dans les modes liés	193
в	B Calcul du coefficient d'extraction d'une cavité planaire 197			197
С	C Puissance rayonnée à l'extérieur de la cavité complexe 203			
D	D Champ rayonné par un dipôle horizontal 207			
\mathbf{E}	E Calcul numérique des intégrales 209			
\mathbf{F}	F Procédure de fabrication des diodes QC en cavité métallique 215			
\mathbf{G}	G Équilibre ionique des espèces Si, C et O dans des couches $MOCVD219$			

Introduction générale

1 L'électrodynamique quantique en cavité et le domaine THz

Ce travail de thèse, effectué pendant quatre ans au sein du Laboratoire de Photonique et Nanostructures (LPN) explore les effets d'électrodynamique quantique en cavité dans le domaine THz. Notamment, le contrôle de l'émission spontanée par le confinement optique des modes d'une cavité métallique, de géométrie planaire ou plus complexe, y est abordé.

Purcell fut le premier à remarquer en 1946 que l'émission spontanée n'est pas une caractéristique intrinsèque de la source de rayonnement électromagnétique, mais dépend de l'environnement de la source [1]. Ainsi, le temps d'émission spontanée et la distribution angulaire du rayonnement, qui sont les deux caractéristiques quantitatives de ce phénomène, peuvent être altérés, parfois de façon spectaculaire, par une conception judicieuse de l'ensemble des conditions aux limites imposées sur le champ électromagnétique rayonné par la source, ensemble couramment désigné comme "cavité". En se référant à la nature intrinsèquement quantique de l'émission spontanée, on parle alors d'effets d'Électrodynamique Quantique en Cavité (EDQC).

Les premières véritables expériences d'EDQC sont apparues dans les années 70. Elles étaient menées par Drexhage, qui utilisa des rangées de molécules organiques comme sources [2], [3], la "cavité" étant un miroir diélectrique ou métallique. Aujourd'hui, comme suite des expériences de Drexhage, les phénomènes EDQC sont exploités dans le domaine des biotechnologies [4]. Dans les années 80 l'étude d'atomes de Rydberg isolées, menée par l'équipe de S. Haroche à l'École Normale, et également d'autres équipes dans le monde, a démontré de manière spectaculaire de nombreux phénomènes EDQC dans le domaine des micro-ondes, notamment une altération considérable du temps de l'émission spontanée [5], [6], ainsi que le régime du couplage fort [7], que nous discutons dans le premier chapitre du manuscrit.

Motivés par les applications potentielles de l'EDQC pour améliorer l'efficacité, la rapidité et la stabilité des composants optoélectroniques [8], dès les années 90 les physiciens des sémiconducteurs ont commencé a "rattraper" les opticiens. Le régime de couplage fort fut le premier à être abordé [9]. L'émergence de boîtes quantiques comme sources à l'état solide pour des longueurs d'onde optiques, analogues aux atomes isolés [10], a permis des expériences de modification de la dynamiques des sources, menées entre autre au sein de notre laboratoire par J.-M. Gérard [11], [12]. Dans ces travaux les cavités étaient des micropilliers avec des miroirs de Bragg. D'autres travaux, également menés au LPN, ont fait usage de cavités planaires avec des miroirs métallique [13], [14], [15], [16], les sources étant des puits quantiques. Plus récemment, des cristaux photoniques ont été utilisés en tant que cavités de très grands facteurs de qualité [17].

Actuellement, les effets EDQC sont exploités dans le domaine optique pour la fabrication d'une nouvelle génération des sources à semiconducteur, telles que les sources à un seul photon [18], ou des photons intriqués [19], qui ouvrent la perspective pour de nombreuses expériences d'optique quantique.

Toutes les expériences d'EDQC possèdent une même contrainte commune : pour que les effets d'EDQC deviennent non-négligeables, il faut que le champ électromagnétique soit confiné par la cavité à une échelle comparable à la longueur d'onde rayonnée par la source. Dans le domaine optique, en raison des longueurs d'ondes assez courtes ($\approx 1 \ \mu m$), la fabrication des cavités appropriées est une épreuve pour les limites de la technologie actuelle. L'émergence des sources semiconducteur de rayonnement THz, comme les cascades quantiques, de longueur d'onde beaucoup plus élevée ($\lambda \approx 100 \ \mu m$), suggère l'idée de tenter des expériences EDQC pour ce domaine de fréquence, qui est l'idée inspirant ce travail de thèse.

Le domaine THz est le domaine de fréquences qui se situe, approximativement, entre 300 GHz et 30 THz (figure 1), ce qui donne des longueurs d'onde typiques entre 10 μm et 1000 μm . Cette région est couramment nommée en anglais "THz gap", en sous-entendant qu'il y a une dizaine d'années encore, elle était considérée comme la partie du spectre électromagnétique la plus faiblement explorée [20].



FIG. 1 – Le domaine THz

Il est actuellement largement reconnu que la région THz et porteuse d'un grand potentiel pour de nombreuses innovations dans les domaines de l'imagerie médicale et la biologie [21], [22], de la spectroscopie avec des applications militaire ou civiles [23]. Cependant, l'exploitation de ce domaine de fréquence a été longtemps freinée par l'absence de sources convenables, à la fois compactes est délivrant suffisamment de puissance, analogues aux diodes laser à l'état solide qui sont actuellement largement utilisées pour les communications optiques. Historiquement, les premières sources pratiques ont été les lasers à gaz [24] et le laser à electrons libres [25]. La première source à l'état solide est le laser Ge de type p [26], d'utilisation délicate, car demandant des basses températures et des champs magnétiques forts.

Aujourd'hui, dans le but d'obtenir des sources compactes à l'état solide, le domaine THz est abordé par de ses deux frontières. Du côté des basses fréquences, on propose des conceptions de nano-transistors à haute mobilité, le rayonnement THz étant produit par les oscillations de plasma d'un gaz d'électrons 2D [27]. Du côté des fréquences optiques, le concept du laser à cascade quantique a considérablement progressé ces dernières années, en recouvrant tous le spectre du proche infrarouge et le domaine THz [28], [29], [30]. Ces sources sont des dispositifs à semiconducteurs unipolaires (un seul type de porteurs, les electrons le plus souvent), qui exploitent les transitions inter-sous-bandes (dans la bande de conduction le plus souvent). Nous discutons les cascades quantiques en détails dans la partie II du manuscrit. Les lasers à cascade quantique sont considérés comme ayant un grande nombre de perspectives pour des applications à température ambiante.

Dans ce travail de thèse on aborde les sources de rayonnement THz à cascade quantique à la lumière de l'électrodynamique de cavité. Une caractéristique de ces dispositifs est le faible rendement quantique. En effet, les transitions non-radiatives ont des temps caractéristiques à l'échelle de la picoseconde, alors que le temps caractéristique de l'émission spontanée de la transition inter-sous-bande est à l'échelle de la microseconde, ce qui donné une efficacité quantique $\approx 10^{-6}$. Le renforcecement de l'émission spontanée par des effets EDQC pourrait améliorer le rendement quantique, d'autant plus que la longueur d'onde de l'émission ($\lambda \approx 100 \ \mu m$) est supérieure de plusieurs ordres de grandeur à la taille de la source et des cavités technologiquement réalisables ($\approx 1 \ \mu m$). En outre, par leur nature unipolaire, les dispositifs inter-sous-bande sont libres de certains handicaps des dispositifs inter-bandes en optique, comme la recombinaison électron-trou sur les flancs de la cavité, qui nuisent considérablement aux performances des dispositifs [31].

Les grandes longueurs d'onde ont aussi un autre mérite : les phénomènes de champ proche sont plus facilement accessibles qu'en optique. Ces phénomènes sont déjà exploités dans les lasers THz, qui font usage des guides d'ondes à plasmon de surface pour le confinement du champ électromagnétique.

Ainsi, le domaine THz apparaît comme un champ de conception de divers dispositifs photoniques compacts nouveaux, inédits ou plus difficilement réalisables qu'en optique, qui exploitent à la fois l'altération de la dynamique d'émission par effets d'EDQC, et aussi une physique très riche du champ proche et de la plasmonique. Ce travail pourrait être considéré comme l'un des premiers pas dans cette direction.

2 Organisation du manuscrit

L'exposé qui suit est organisé en deux parties. La première partie est principalement une étude théorique des effets EDQC dans le domaine THz, et également un exposé sur les outils numériques développés pendant la thèse pour la modélisation électromagnétique des cavités métalliques qui nous ont servi pour les expériences. La seconde partie contient une description de la fabrication de nos dispositifs et les mesures effectuées, mettant en évidence les effets d'EDQC dans le domaine THz.

Le chapitre 1 est une introduction concise de la théorie de l'émission spontanée. Deux points de vue sur le phénomène sont exposés : le point de vue quantique et le point de vue classique. Dans l'approche quantique, plus fondamentale, on distingue le régime de couplage fort du régime de couplage faible, ce dernier étant l'arène des effets d'EDQC qu'on cherche à observer. La comparaison entre les visions classique et quantique amène à analyser les différentes voies de désexcitation de la source, une analyse qui s'avère pertinente pour les dispositifs THz. Finalement, en considérant une cavité métallique planaire simple, on démontre que pour les sources de rayonnement de polarisation TM, telles que les cascades quantiques, *le taux d'émission spontanée croît comme l'inverse de l'épaisseur de la cavité*, une idée qui sera exploitée tout le long du manuscrit.

En se basant sur les fondations théoriques exposées dans le chapitre 1, on entreprend dans le chapitre 2 une analyse quantitative des dispositifs planaires dans le domaine THz. La particularité est que ces dispositifs comportent des couches de contacts dopées, qui sont nécessaires pour l'injection de courant électrique dans les cascades. Ces couches dopées, comportant des électrons libres, ont une constante diélectriques complexe dans le domaine THz, et leur propriétés optiques ne peuvent pas être négligées. Afin de traiter les dispositifs dans leur intégralité, on a développé une approche mathématique adaptée aux systèmes multicouches planaires.

Finalement, dans la dernière partie du chapitre 2 on étudie les variations du taux d'émission spontanée avec les paramètres de la cavité, et notamment son épaisseur. On propose un moyen expérimental, par des mesures de la puissance extraite par la tranche de la cavité, pour mettre en évidence les effets EDQC. On y démontre en particulier que la puissance extraite par la tranche décroît sévèrement avec l'épaisseur de la cavité.

Aussi, un autre moyen plus efficace, pour l'extraction de l'électroluminescence THz des cascades quantiques est-il envisagé : la diffraction par un réseau métallique déposé sur la surface supérieure. Un dispositif photonique plus compliqué, la "cavité métallique complexe", est ainsi obtenu, qui demande un effort de modélisation supplémentaire.

Le chapitre 3 est la première étape dans cet effort. Dans ce chapitre, on traite, de manière générale, la diffraction d'une onde électromagnétique en incidence arbitraire sur un réseau métallique, posé sur un système multicouche planaire. Le traitement est basé sur la méthode modale et quelques approximations supplémentaires, comme l'approximation de l'impédance de surface, dont on discute la validité dans le domaine THz. Certains points supplémentaires, comme les modes propres photoniques du système et l'extraction d'un mode guidé par les couches planaires de la cavité, sont brièvement abordés. Finalement, on fournit une validation expérimentale du modèle dans le domaine THz.

Dans le chapitre 4 le problème d'une source dipolaire dans une cavité complexe est considéré. Après une brève description des aspects mathématiques, on présente des résultats de modélisation de cavités complexes, tant pour le champ proche, que pour le champ lointain. Notamment, on étudie les variations de la puissance émise en fonction des paramètres de la cavité complexe, et on précise comment on peut y trouver une empreinte des effets EDQC par la construction d'un diagramme puissance collectée - période du réseau métallique, en fonction de l'épaisseur de la cavité. L'influence du réseau sur la dynamique de l'émission spontanée est également discutée.

De la partie I théorique, on passe alors à la partie II expérimentale. Le chapitre 5, premier dans cette partie, est une introduction à la physique des cascades quantiques. Ce chapitre permet de mieux comprendre les sources utilisées dans nos expériences.

Le chapitre 6 est une description de la fabrication des cavités métalliques complexes avec des cascades quantiques. Le type de croissance épitaxiale (MOCVD) étant peu commune pour la fabrication des cascades quantiques THz, on y discute l'évolution des différents échantillons afin d'obtenir la structure finale, adaptée pour les expérience d'EDQC.

Finalement, dans le chapitre 7 on présente les résultats d'électroluminescence sur les cascades de différentes épaisseurs et le dispositif expérimental qui à été mis en place

au LPN pour les obtenir. Le diagramme puissance-période expérimental est construit, permettant de conclure sur les effets EDQC dans le domaine THz. A la fin du chapitre 7, on présenté des mesures d'électroluminescence résolues spectralement, qui ont été les dernières mesures à être effectués sur les échantillons. Les spectres ont été une confirmation des conclusions tirées des mesures sans résolution spectrale.

Un résumé de ce travail de thèse, et une description des perspectives, sont données dans la conclusion générale.

Introduction générale

Première partie

Etude théorique du taux de l'émission spontanée dans les microcavités métalliques complexes. Propriétés de dispersion

Chapitre 1

Théorie de l'émission spontanée

1.1 Introduction

L'émission spontanée est une manifestation fondamentale de l'interaction entre la matière et le champ électromagnétique. Expérimentalement, elle se manifeste comme la perte de l'énergie des systèmes élémentaires (comme molécules, atomes ou autres) portés à un niveau énergétique au-dessus de leur état fondamental, sous forme de rayonnement électromagnétique (photons). Ce phénomène intervient dans un nombre incalculable de situations physiques : désintégrations radioactives des noyaux atomiques (rayonnement gamma), transitions radiatifs dans les cortèges électroniques des atomes et molécules, ou bien les transitions dans les bandes énergétiques des solides, en passant par les dispositifs opto-électroniques actuels comme les lasers, amplificateurs etc.

Un système modèle pour l'étude de l'émission spontanée, qui entre autre rend compte d'une grande partie des situations expérimentales, est le système à deux niveaux quantiques : fondamental $|a\rangle$ et excité $|b\rangle$, de séparation énergétique $E = \hbar \omega$ avec \hbar la constante de Planck. Il s'agit plus précisément d'un électron évoluant entre deux états liés d'un atome, molecule ou bien une hétérostructure semiconductrice. Au niveau classique, ce système est l'analogue d'un moment dipolaire $\langle \mathbf{p} \rangle = -e \langle a | \mathbf{r} | b \rangle$ oscillant à la fréquence ω (ici \mathbf{r} est l'opérateur position de l'électron, et *e* sa charge).

Dans la majorité des cas, et en particulier dans le contexte du travail décrit dans ce manuscrit de thèse, l'émission spontanée se manifeste comme un phénomène de dynamique irréversible. Supposons pour l'instant que le système est "isolé" et n'est couplé qu'au champ électromagnétique. Alors la probabilité P(t) pour que le système reste dans l'état excité $|b\rangle$ décroît dans le temps selon une loi exponentielle :

$$P(t) = e^{-\Gamma t} \tag{1.1}$$

La grandeur Γ introduite par cette équation est une caractéristique quantitative du phénomène appelée **taux de l'émission spontanée**. Son inverse, homogène à un temps, fait intervenir une durée caractéristique du phénomène :

$$\tau = \frac{1}{\Gamma} \tag{1.2}$$

qui n'est rien d'autre que la durée moyenne au bout de laquelle un photon sera émis, et le système retombera dans son état fondamental.

Le phénomène de l'émission spontanée est relié aux notions d'origine profondément quantique comme le vide du champ électromagnétique. Sa description physique ne peut être satisfaisante que dans le cadre d'une **théorie quantique**. Cette théorie sera décrite brièvement dans la partie 1.2 de ce chapitre. Du point de vue quantique, le champ électromagnétique constitue un ensemble de **modes**; à chaque mode correspondant un oscillateur harmonique quantique. L'émission spontanée apparaît naturellement dans la dynamique de couplage d'un niveau énergétique discret avec un continuum de modes électromagnétiques. Nous allons montrer comment la dynamique de la source dépend de la structure du continuum des modes. Cette dépendance apparaît à deux niveaux :

- Lorsque le continuum des modes est suffisamment dispersé en énergie, la dynamique du système est bien décrite par l'équation (1.1), mais la valeur du taux Γ depend de l'environnement électromagnétique du système. L'environnement est souvent conditionné par la présence d'une cavité autour de la source. Cette situation est référée comme "**couplage faible**" avec le rayonnement.

- On montrera que la dynamique irréversible décrite par l'équation (1.1) n'est pas intrinsèque au phénomène et dans certaines situations on peut même observer une évolution réversible ("oscillations de Rabi"). Dans ce cas on parle de "**couplage fort**" entre l'émetteur et le champ. On précisera également le domaine de validité de la loi exponentielle (1.1).

On conclura la théorie quantique en couplage faible avec une interprétation des résultats dans le cadre de **la théorie de la réponse linéaire**. Ces remarques seront utiles pour comprendre la compatibilité entre les approches classiques et quantiques.

Dans la partie suivante (section 1.3) une approche de l'émission spontanée sera donnée dans un contexte **classique**, en termes de **réaction de rayonnement**. Le résultat central de cette partie est le lien entre le taux de l'émission spontanée Γ d'un dipôle classique oscillant **p** et la partie imaginaire du **champ rétro-réfléchi** sur le dipôle. On précisera également le lien entre Γ et la puissance rayonnée par le dipôle. L'avantage de l'approche classique repose sur la possibilité d'utiliser les équations de Maxwell pour le calcul du champ retro-réfléchi, et donc de la valeur de Γ , ce qui apporte des grandes simplifications lorsqu'il s'agit des cavités dont la géométrie est compliquée, comme celles qui seront abordées dans les chapitres 3 et 4. Enfin, on donnera la décomposition du champ rayonné par un dipôle classique en ondes planes, qui non seulement sera utile du point de vue calculatoire, mais aussi fournira une image simple pour comprendre un certain nombre des phénomènes, rencontrés dans la physique des cavités complexes.

Dans la partie 1.4 on va confronter les visions classique et quantique développées dans les paragraphes précédents. On va d'abord considérer un exemple numérique d'un dipôle avec une orientation particulière à l'intérieur d'une cavité métallique planaire. Cet exemple est un précurseur d'une étude sur un dispositif expérimental multi-couche plus compliqué qui sera présenté dans les chapitres suivants. Sur cet exemple simple on introduira des idées qui seront récurrentes pour la suite. On démontrera en particulier que, *lorsque l'épaisseur de la cavité est plus faible que la longueur d'onde rayonnée, alors le taux d'émission spontanée augmente comme l'inverse de l'épaisseur* : résultat qui sera un fil conducteur le long de ce manuscrit de thèse.

1.2. Théorie quantique de l'émission spontanée

On donnera ensuite (paragraphe 1.4.2) une analyse de la voie supplémentaire de désexcitation du dipôle associée à l'absorption, et le problème du champ proche du dipôle sera soulevé. On verra dans les chapitres suivants que cette analyse est pertinente dans le domaine THz, à cause de la présence des couches dopées absorbantes dans les dispositifs réels. On conclura en expliquant la compatibilité entre les points de vue classique et quantique en régime de couplage faible.

Finalement, dans la partie 1.5 on présentera les sources du rayonnement électromagnétique dans le domaine THz que sont les transitions intersubbandes dans les cascades quantiques et on fournira quelques ordres de grandeur.

Dans tout le manuscrit les grandeurs oscillantes à la fréquence ω dépendent du temps selon la loi $e^{-i\omega t}$.

1.2 Théorie quantique de l'émission spontanée

1.2.1 Hamiltonien quantique d'un système en cavité

Rappelons très brièvement la quantification du champ électromagnétique en interaction avec un système de particules chargées à l'intérieur d'une cavité.

De manière générale, on a affaire à une "cavité" dès que le système atomique se trouve au voisinage des interfaces diélectriques ou métalliques qui imposent des conditions aux limites confinantes pour le champ électromagnétique. L'espace libre serait alors un cas particulier d'une cavité. Nous allons supposer ici que la partie de l'espace occupé par le système atomique, délimité par les parois de la cavité, est le vide.

D'après les propriétés générales des équations de Maxwell, le champ électrique \mathbf{E} et magnétique \mathbf{H} dans la cavité s'expriment en fonction d'un potentiel vecteur \mathbf{A} et un potentiel scalaire V:

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \operatorname{grad} V, \qquad \mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$$
(1.3)

Le choix du couple (\mathbf{A}, V) n'est pas unique ; il est fixé par une condition de jauge. Pour les problèmes non-relativistes, le choix de jauge le plus utilisé est la jauge de Coulomb :

div
$$\mathbf{A} = 0$$
, de sorte que $\Delta V = -\rho(\mathbf{r})/\varepsilon_0$. (1.4)

Ici Δ est l'opérateur de Laplace et $\rho(\mathbf{r})$ la distribution de la densité de charge dans l'espace. Nous allons supposer que cette distribution est créée par un ensemble de particules chargées q_{α} , de masses m_{α} et dont les vecteurs positions sont \mathbf{r}_{α} .

Avec ce choix, le champ électrique \mathbf{E} se sépare d'après (1.3) en une partie transverse \mathbf{E}_T , qui ne dépend que du potentiel vecteur \mathbf{A} et qui satisfait div $\mathbf{E}_T = 0$ et une partie longitudinale \mathbf{E}_L satisfaisant rot $\mathbf{E}_L = \mathbf{0}$, qui n'est rien d'autre que le champ statique crée par la distribution $\rho(\mathbf{r})$.

Lorsqu'on quantifie le champ électromagnétique dans la jauge de Coulomb [32], le potentiel vecteur **A** ainsi que les positions \mathbf{r}_{α} et les impulsions \mathbf{P}_{α} deviennent des obser-

vables (opérateurs) quantiques indépendants ¹. On montre [33] que le potentiel vecteur s'exprime comme une somme sur *les modes normaux* de la cavité, en fonction des opérateurs de création a^{\dagger}_{μ} et d'anhibitation des particules a_{μ} dans le mode μ :

$$\mathbf{A} = \sum_{\mu} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 \omega_{\mu}}} [a_{\mu} \alpha_{\mu}(\mathbf{r}) + a_{\mu}^{\dagger} \alpha_{\mu}^*(\mathbf{r})]$$
(1.5)

Ici ω_{μ} sont les fréquences propres des modes. Les quantités $\alpha_{\mu}(\mathbf{r})$ qui ne sont rien d'autre que les distributions normalisées du champ électrique (transverse) pour chaque mode satisfont :

$$\Delta \alpha_{\mu}(\mathbf{r}) + \frac{\omega_{\mu}^{2}}{c^{2}} \alpha_{\mu}(\mathbf{r}) = 0, \qquad \int_{cavite} \alpha_{\mu}^{*}(\mathbf{r}) \alpha_{\nu}(\mathbf{r}) \mathrm{d}^{3}\mathbf{r} = \delta_{\mu\nu}.$$
(1.6)

Rappelons que les opérateurs a^{\dagger}_{μ} et a_{μ} satisfont la relation de commutation :

$$[a_{\mu}, a_{\nu}^{\dagger}] = \delta_{\mu\nu} \tag{1.7}$$

Respectivement, on peut exprimer le champ électrique transverse \mathbf{E}_T et le champ magnétique \mathbf{B} en fonction d'opérateurs a^{\dagger}_{μ} et a_{μ} , l'hamiltonien du champ dans la cavité en absence des charges peut alors être évalué :

$$H_{champ} = \frac{1}{2} \int_{cavite} \mathrm{d}^3 \mathbf{r} (\varepsilon_0 |\mathbf{E}_T|^2 + \mu_0 |\mathbf{H}|^2) = \sum_{\mu} \hbar \omega_\mu (a_\mu^{\dagger} a_\mu + \frac{1}{2})$$
(1.8)

Le champ électromagnétique quantique libre apparaît ainsi comme un ensemble des oscillateurs harmoniques quantiques, un pour chaque mode μ . Une base d'états du champ libre est alors est formée par les kets :

$$|n_1, n_2, \dots, n_{\mu}, \dots\rangle \tag{1.9}$$

Cette formule exprime le fait qu'on a crée n_{μ} excitations élémentaires, ou encore des *photons*, dans le mode μ (les états de type (1.9) sont appelées des états de Fock). Pour un mode μ donné, contenant n_{μ} photons, l'énergie doit être égale à $(n_{\mu} + 1/2)\hbar\omega_{\mu}$, d'où la normalisation du potentiel vecteur (1.5).

L'état fondamental du système, ou encore *le vide*, est un état qui ne contient aucun photon :

$$|0\rangle = |0_1, 0_2, \dots, 0_{\mu}, \dots\rangle$$
 (1.10)

L'énergie du fondamental est infinie, mais seules les différences d'énergie ont un sens physique. Nous ne nous attarderons pas ici d'avantage sur les effets quantiques fort intéressants liés au vide (forces de Casimir, fluctuations des signaux de photodétection en optique quantique ...), en nous focalisant sur celui qui sera le plus utile pour cet exposé : l'émission spontanée.

 $^{^1}$ Le potentiel scalaire V dépend des positions via l'équation de Poisson contenue dans la jauge de Coulomb (1.4) et n'est donc pas une observable indépendante

1.2. Théorie quantique de l'émission spontanée

L'inclusion standard de l'interaction avec les charges via le couplage minimal [32] mène à l'hamiltonien :

$$H = \sum_{\alpha} \frac{1}{2m_{\alpha}} [\mathbf{P}_{\alpha} - q_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha})]^2 + V_{coul}(\mathbf{r}_{\alpha}) + H_{champ}.$$
 (1.11)

Le terme d'interaction éléctrostatique entre les charges $V_{coul}(\mathbf{r}_{\alpha})$ ne provient que du champ longitudinal. Ainsi le terme de couplage entre la matière et le rayonnement, qu'on appellera H_{coupl} est le terme provenant de l'impulsion généralisée :

$$H_{coupl} = \sum_{\alpha} \left[-\frac{q_{\alpha}}{2m_{\alpha}} \mathbf{P}_{\alpha} \mathbf{A}(\mathbf{r}_{\alpha}) + \frac{q_{\alpha}^2 \mathbf{A}^2(\mathbf{r}_{\alpha})}{m_{\alpha}} \right]$$
(1.12)

L'approximation usuelle sur cet hamiltonien est celle dite "des grandes longueurs d'onde", selon laquelle la longueur d'onde du rayonnement interagissant avec les charges est beaucoup plus grande que l'extension de l'espace occupé par les charges. En plus, dans cette approximation on impose la condition que le système de particules soit globalement neutre : $\sum_{\alpha} q_{\alpha} = 0$. On introduit alors l'opérateur moment dipolaire :

$$\hat{\mathbf{p}} = \sum_{\alpha} q_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \tag{1.13}$$

et on néglige les variations spatiales dans le potentiel vecteur \mathbf{A}^2 . Une transformation unitaire [32] permet alors de réécrire le terme de couplage simplement comme :

$$H_{coupl} = \mathbf{\hat{p}} \mathbf{E}_{T}(0) = -i \sum_{\mu} \sqrt{\frac{\hbar \omega_{\mu}}{2\varepsilon_{0}}} \mathbf{p} [a_{\mu} \alpha_{\mu}(\mathbf{0}) - a_{\mu}^{\dagger} \alpha_{\mu}^{*}(\mathbf{0})]$$
(1.14)

avec $\mathbf{E}_T(0)$ l'opérateur champ électrique transverse, évalué sur la position moyenne de l'ensemble des charges. L'hamiltonien du système en interaction avec le champ peut s'écrire ainsi de manière générale :

$$H = H_{particules} + H_{coupl} + H_{champ} \tag{1.15}$$

Le terme H_{champ} est défini par (1.8). L'hamiltonien de particules $H_{particules}$ regroupe toutes les degrés de liberté relatives aux particules; il peut très bien décrire, par exemple, un électron de Bloch dans un cristal, ou un électron confiné dans une hétérostructure.

1.2.2 Evolution d'un système à 2 niveaux couplé au champ

Parmi la multiplicité des tous les niveaux possibles dans l'hamiltonien $H_{particules}$, on supposera qu'il y a deux niveaux $|a\rangle$ et $|b\rangle$ qui sont préférentiellement couplés avec le rayonnement, séparés par une énergie $E = \hbar \omega$. L'hamiltonien des particules s'écrira simplement $H_{particules} = \hbar \omega |b\rangle \langle b|$.

On s'intéressera à la situation où le système est initialement dans son état excité $|b\rangle$, et le champ électromagnétique est dans son état de vide $|0\rangle$. Les seuls états couplés avec

 $^{^{2}}$ Le terme quadratique \mathbf{A}^{2} n'est plus ainsi un terme de couplage dans cette approximation, ou encore, à cet ordre du développement multipolaire

le niveau $|b\rangle \otimes |0\rangle$ par l'hamiltonien dipolaire (1.14) sont les états $|a\rangle \otimes |\ldots 1_{\mu} \ldots \rangle$ avec un seul photon dans le mode μ . On les notera par :

$$|a\rangle \otimes |\dots 1_{\mu} \dots \rangle = |a:\mu\rangle \tag{1.16}$$

le paramètre μ pouvant prendre des valeurs discrètes ou continues selon la structure modale du champ dans la cavité. L'état général du système s'écrira alors :

$$|\psi(t)\rangle = b(t)e^{-i\omega t}|b:0\rangle + \int d\mu b(\mu,t)e^{-i\omega_{\mu}t}|a:\mu\rangle$$
(1.17)

On s'intéressera à l'évolution temporelle du système qui est fourni par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = H|\psi(t)\rangle \tag{1.18}$$

On peut montrer que dans cette situation (voir [34], complément D_{XIII}) l'équation de Schrödinger est equivalent à une équation intégro-différentielle pour le coefficient b(t) uniquement :

$$\frac{\mathrm{d}b(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\hbar^2} \int_0^t \mathrm{d}t' b(t') \int \mathrm{d}\mu |\langle b:0|H_{coupl}|a:\mu\rangle|^2 e^{i(\omega-\omega_\mu)(t-t')}$$
(1.19)

L'élément de matrice de l'hamiltonien provient du (1.14) :

$$|\langle b:0|H_{coupl}|a:\mu\rangle|^2 = \left(\frac{\hbar\omega_{\mu}}{2\varepsilon_0}\right)|\mathbf{p}\alpha_{\mu}|^2 \tag{1.20}$$

On a utilisé ici la définition du moment dipolaire en c-nombre : $\mathbf{p} = \langle a | \hat{\mathbf{p}} | b \rangle$. L'intégrale sur le paramètre μ peut être convertie en intégrale sur les énergies $\hbar \omega_{\mu}$ en introduisant *la densité d'états* $\rho(\hbar \omega_{\mu})$:

$$d\mu = \rho(\hbar\omega_{\mu})\hbar d\omega_{\mu} \tag{1.21}$$

Avec la densité d'état on obtient en définitive l'équation intégro-différentielle :

$$\frac{\mathrm{d}b(t)}{\mathrm{d}t} = \int_0^t \mathrm{d}t' b(t') G(\omega, t - t') \tag{1.22}$$

dont le noyau $G(\omega, t - t')$ s'écrit :

$$G(\omega, t - t') = -\frac{1}{\hbar} \int_0^\infty \mathrm{d}\omega_\mu \rho(\hbar\omega_\mu) |\langle b: 0|H_{coupl}|a:\mu\rangle|^2 e^{i(\omega-\omega_\mu)(t-t')}$$
(1.23)

La dynamique de dépopulation du niveau $|b\rangle$ dépend ainsi du noyau (1.23) qui apparaît comme une intégrale de la densité d'états sur les fréquences. Ce noyau exprime en quelque sorte la façon dont le système se "souvient" de son histoire aux instants précédents. Comme il depend de la densité d'états, la mémoire du système sera aussi dépendante de la structure modale de la cavité. On va examiner deux cas particuliers extrêmes.

Cas d'un continuum "large"

Supposons que le spectre de la cavité est constitué d'un continuum des modes, tel que le couplage dipolaire et la densité d'états sont des fonctions lentement variables en fonction de la fréquence ω_{μ} . Dans ce cas le noyau (1.23) n'a des valeurs significatives que lorsque $t - t' \approx 0$, et le système perd ainsi vite sa mémoire. La démarche (Weisskopf et Wigner [35]) consiste à remplacer b(t') par b(t) dans l'équation (1.22) et à le sortir de signe de l'intégration. L'intégrale sur le temps ne porte maintenant que sur le noyau $G(\omega, t - t')$; comme il décroît rapidement avec la différence t - t' on peut pousser la limite d'intégration vers l'infini. Avec l'identité suivante (transformée de Fourier de la fonction de Heaviside) :

$$\int_0^\infty e^{i(\omega-\omega_\mu)\tau} \mathrm{d}\tau = \pi\delta(\omega-\omega_\mu) + i\mathcal{P}(\frac{1}{\omega-\omega_\mu})$$
(1.24)

 $(\mathcal{P} \text{ est ici la valeur principale})$ l'équation (1.22) se ramène à l'équation différentielle du premier ordre :

$$\frac{\mathrm{d}b(t)}{\mathrm{d}t} = -\left(\frac{\Gamma}{2} + i\delta\omega\right)b(t) \tag{1.25}$$

Les coefficients $\delta \omega$ et Γ sont donnés par les formules :

$$\delta\omega = \frac{1}{\hbar} \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{\rho(\omega_\mu) \mathrm{d}\omega_\mu}{\omega - \omega_\mu} |\langle b: 0| H_{coupl} |a: \mu\rangle|^2 \tag{1.26}$$

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle b: 0|H_{coupl}|a:\mu\rangle|^2 \rho(\omega_\mu = \omega)$$
(1.27)

La solution de l'équation (1.24) est une exponentielle complexe; la probabilité de trouver le système à l'état excité $|b\rangle$ est donnée par la formule :

$$P(t) = |\langle b|\psi(t)\rangle|^2 = |b(t)|^2 = e^{-\Gamma t}$$
(1.28)

On trouve ainsi la désexcitation irréversible contenue dans l'équation (1.1). L'évolution temporelle du système est finalement gouvernée principalement par le coefficient Γ , fourni par l'expression (1.27), qui est encore connue sous le nom de **règle d'or de Fermi**. D'après cette formule, le taux de départ, ou le taux d'émission spontanée, est proportionnel à la densité d'états des modes électromagnétiques, prise à la fréquence rayonnée. Il contient ainsi l'effet de la structure modale de la cavité sur la dynamique (irréversible) de l'évolution du système.

Le coefficient $\delta\omega$ (1.26) renormalise l'énergie $\hbar\omega$ du système non couplé au rayonnement ("Lamb shift"); il aura des répercussions sur la répartition spectrale des photons rayonnés par le système [36].

Les résultats établies ici sont vrais sous l'hypothèse que le continuum des états est suffisamment "large". En terme de densité d'états, ceci signifie que l'étendue de la fonction $\rho(\omega_{\mu})$ est suffisamment grande. Une précision plus quantitative de cette hypothèse sera donnée un peu plus loin.



FIG. 1.1 – Diagramme de rayonnement d'un dipôle quantique. \mathbf{k} est la direction du rayonnement, \mathbf{e} est le vecteur de polarisation. La distance de la ligne rouge jusqu'au dipôle est proportionnelle aux taux d'émission dans la direction correspondante : $d\Gamma \propto \sin^2 \theta$.

Désormais on prêtera exclusivement attention au taux de l'émission spontanée Γ , comme fourni par la règle d'or de Fermi (1.27). En explicitant le couplage dipolaire électrique selon l'expression (1.14) la règle d'or de Fermi s'écrira :

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle b:0|\hat{\mathbf{p}}\mathbf{E}_T|a:\mu\rangle|^2 \rho(\omega_{mu}=\omega)$$
(1.29)

Cas de l'espace libre

Notre premier exemple de calcul de l'émission spontanée est le cas de d'une source dans l'espace libre. Les modes "propres", qui sont les solutions de l'équation de Helmholtz (1.6) sont des ondes planes. Les équations (1.6) exigent que ces solutions soient normalisables; on enferme alors le système dans une volume V fini qu'on fait tendre à l'infini à la fin du calcul, et on impose des conditions aux limites appropriées sur les frontières de la "cavité" ainsi obtenue. Pour les conditions aux limites périodiques de Von-Karman [37] on obtient les ondes planes :

$$\alpha(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{e}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{\sqrt{V}}, \qquad k = |\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c}$$
(1.30)

avec **e** le vecteur polarisation de l'onde, qui est perpendiculaire au vecteur d'onde **k** d'après la condition de transversalité : $\mathbf{e} \cdot \mathbf{k} = 0$. On a omis ici l'indice μ de l'état, dont le rôle est joué par le vecteur d'onde **k**.

Les ondes planes sont émises dans toutes les directions de l'espace. Considérons une direction particulière \mathbf{k} ; alors le nombre d'états dN dans un angle solide infinitésimal $d\Omega$ autour de cette direction est donné par :

$$dN = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3 \mathbf{k} = \frac{V}{(2\pi)^3} k^2 dk d\Omega$$
(1.31)

Le volume occupée par un état dans l'espace de phase étant $\frac{(2\pi)^3}{V}$, en utilisant la définition de la densité d'états $\rho(\omega) = dN/d(\hbar\omega)$ et la relation de dispersion linéaire

1.2. Théorie quantique de l'émission spontanée

 $k = \omega/c$ on obtient :

$$\rho(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{\omega^2}{\hbar c^3} \mathrm{d}\Omega \tag{1.32}$$

La densité d'états varie comme la carré de la fréquence $\rho(\omega) \sim \omega^2$. Il s'agit alors d'un "vrai" continuum d'états, donc les résultats sur l'évolution du système démontrés plus haut sont applicables ici. Ainsi, avec le règle d'or de Fermi (1.27) on obtient l'expression suivante pour le taux de l'émission spontanée dans l'angle solide d Ω :

$$\mathrm{d}\Gamma = \frac{(\langle b|\mathbf{p}|a\rangle \cdot \mathbf{e})^2 \omega^3}{8\pi^2 \varepsilon_0 \hbar c^3} \mathrm{d}\Omega \tag{1.33}$$

Le volume de quantification V disparaît ainsi de l'expression finale pour l'émission spontanée, cette expression est vraie aussi à la limite $V \to \infty$.

Notons par θ l'angle entre la direction d'émission **k** et le vecteur du dipôle **p** (voir aussi figure 1.1). Alors $\langle a | \mathbf{p} \cdot \mathbf{e} | b \rangle = p_{ab} \sin \theta$, et le couplage dipôlaire varie en $\sin^2 \theta$ (on a noté $p_{ab} = \langle a | p | b \rangle$). Ceci est représenté à la figure 1.1 qui constitue en exemple de *diagramme de rayonnement* (d'autres exemples seront montrées ultérieurement). Le maximum de l'intensité est rayonné dans la direction perpendiculaire au vecteur du dipôle.

Finalement, en intégrant l'émission spontanée sur toutes les directions de l'espace, on trouve le taux de l'émission spontanée total dans l'espace libre :

$$\Gamma_0 = \frac{|p_{ab}|^2 \omega^3}{3\pi\varepsilon_0 \hbar c^3} \tag{1.34}$$

Le subscript "0" est rajouté car cette grandeur sera souvent utilisée comme référence pour la suite.

Cas d'un mode lorentzien couplé au champ; facteur de Purcell, couplage fort

Les cavités utilisées pour les expériences sur l'émission spontanée fournissent un vrai confinement du champ dans un volume fini. Plutôt que des ondes planes, leur modes propres sont véritablement localisés dans l'espace et en fréquence. De manière générale, la densité d'état d'un tel mode, qu'on supposera centré autour de la fréquence d'émission du système, a un profil lorentzien :

$$\rho(\omega_{\mu}) = \frac{1}{\hbar\pi} \frac{\Delta}{(\omega_{\mu} - \omega)^2 + \Delta^2}$$
(1.35)

 Δ est la largeur à la mi-hauteur de la lorentzienne, qui traduit le temps de vie fini des photons à l'intérieur de la cavité du à l'absorption ou aux pertes par radiation. La constante de Planck rétablit la dimensionalité de la densité d'états en inverse d'une énergie. Supposons aussi que l'élément de matrice du couplage (1.20) varie très peu avec la fréquence à l'échelle de Δ ; pour le quantifier on introduira une grandeur homogène à une fréquence :

$$\Omega_R = \frac{|\langle b: 0|H_{coupl}|a:\mu\rangle|}{\hbar} \tag{1.36}$$

appelée fréquence de Rabi. Le noyau (1.23) peut alors s'écrire, après une changement de variable :

$$G(\omega, t - t') = -\frac{\Delta\Omega_R^2}{\pi} \int_{-\omega}^{\infty} \frac{e^{-ix(t-t')}}{\Delta^2 + x^2} \mathrm{d}x$$
(1.37)

Pour des fréquences suffisamment élevées ($\omega \gg \Delta$) on peut pousser la limite inférieure de l'intégrale à l'infini. Le noyau s'évalue en forme fermée grâce au théorème des résidus :

$$G(\omega, t - t') \approx \Omega_R^2 e^{-\Delta(t - t')}$$
(1.38)

L'équation (1.22) est alors équivalente à l'équation différentielle de second ordre suivante :

$$\frac{\mathrm{d}^2 b(t)}{\mathrm{d}t^2} + \Delta \frac{\mathrm{d}b(t)}{\mathrm{d}t} + \Omega_R^2 b(t) = 0 \tag{1.39}$$

La solution générale de cette équation est :

$$b(t) = e^{-\frac{\Delta t}{2}} \left[A e^{t\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} - \Omega_R^2}} + B e^{-t\sqrt{\frac{\Delta^2}{4} - \Omega_R^2}} \right]$$
(1.40)

Deux régimes d'évolution temporelle sont alors possibles.

Dans le cas du couplage faible $\Omega_R < \Delta/2$ les solutions sont des exponentielles décroissantes. L'évolution du système est un peu plus compliquée que celle décrite par la formule (1.1), mais reste irréversible. Dans le cas de couplage très faible : $\Omega_R \ll \Delta/2$, elle est dominée par l'exponentielle la plus lente (la première dans l'équation (1.40)), que l'on peut développer au premier ordre en Ω_R^2 . L'evolution du système pour des temps suffisamment longs est donnée par :

$$b(t) \approx A e^{-\Gamma t/2}, \qquad \Gamma = \frac{2\Omega_R^2}{\Delta}$$
 (1.41)

mais ce n'est rien d'autre que le résultat qui découle de la règle d'or de Fermi (1.27). La conditions $\Omega_R \ll \Delta/2$ constitue le critère de pertinence pour l'application de la règle d'or de Fermi.

Explicitons ce résultat un peu plus. Notons par θ l'angle entre le champ électrique du mode et la direction du dipôle, on va en plus introduire le volume effectif du mode V_{eff} :

$$|\alpha_{\mu}(0)|^2 = \frac{1}{V_{eff}} \tag{1.42}$$

En tenant compte du (1.6), ainsi que du facteur de qualité du mode $Q = \omega/2\Delta$, le taux de l'émission spontanée s'écrit :

$$\Gamma = \frac{2\Omega_R^2}{\Delta} = \frac{2p^2 \cos^2 \theta}{\hbar \varepsilon_0 V_{eff}} Q$$
(1.43)

18

1.2. Théorie quantique de l'émission spontanée

Si cette grandeur est normalisée par le taux d'émission dans l'espace libre (1.34) pour rendre compte qualitativement des modifications apportées par la cavité, alors on obtient le fameux facteur de Purcell F_P [1]:

$$F_P = \frac{\Gamma}{\Gamma_0} = \frac{3Q\lambda^3}{4\pi^2 V_{eff}} \cos^2\theta \tag{1.44}$$

L'autre scénario pour l'évolution du système, qui découle de l'équation (1.40) est le cas du couplage fort : $\Omega_R > \Delta/2$. Dans ce cas l'equation (1.40) prédit un comportement oscillatoire à la fréquence $\sqrt{\Omega_R^2 - \Delta^2/4}$, d'autant plus amorti que le continuum est large. Lorsque l'amortissement du mode est très faible ($\Delta \ll \Omega_R$), la dynamique de l'émission spontanée devient tout à fait inhabituelle : la source émet et réabsorbe le photon périodiquement, de manière quasi-réversible.

Un autre exemple d'une dynamique inhabituelle est donné par un émetteur au voisinage d'une bande interdite photonique, située à une fréquence ω_{max} [38]. La dispersion des modes photonique s'écrit au voisinage de la bande interdite :

$$\omega = \omega_{max} + A(k - k_{max})^2 \tag{1.45}$$

Cette relation de dispersion mène à une densité d'état $\rho(\hbar\omega)$ singulière au voisinage de ω_{max} et une dynamique oscillatoire de l'émission spontanée similaire à celle du cas du couplage fort [38]. Nous ne rentrerons pas davantage dans ces sujets, on retiendra seulement que le régime de couplage faible n'est plus justifié au voisinage immédiat d'une bande photonique interdite; cas qui sera rencontré dans l'étude des cavités THz.

1.2.3 Taux d'émission spontanée dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire

L'approche quantique permet de comprendre le phénomène de l'émission spontanée au niveau fondamental, et est en principe applicable dans n'importe quelle situation rencontrée expérimentalement. En réalité, son application devient assez vite très délicate, surtout lorsque le système contient un très grand nombre des détails microscopiques. Notamment, dans les exemples qu'on vient de donner jusqu'ici il s'agit des cavités remplies de vides, en l'absence d'absorption, alors que les microcavités réelles utilisées dans les expériences d'optique quantique sont souvent constituées de diélectriques absorbants. La présence de l'absorption peut changer de manière radicale l'émission spontanée d'un émetteur, car elle ouvre une nouvelle voie de désexcitation (voir paragraphe 1.4.2).

En régime de couplage faible, une autre approche sur l'émission spontanée existe, fondée sur la théorie de la réponse linéaire. Cette approche a été développée pour la première fois par Wylie et Sipe en 1984 [39] et elle dépasse le cadre simple des modes sans absorption dans l'espace libre présenté jusqu'à maintenant.

Tout d'abord remarquons qu'on peut exprimer la densité d'état $\rho(\hbar\omega)$ introduite plus haut par l'intermédiaire de la fonction δ de Dirac :

$$\rho(\hbar\omega) = \sum_{I,F} \delta(E_F + \hbar\omega - E_I) \tag{1.46}$$

Ici $|I\rangle$ et $|F\rangle$ sont tous les états respectivement initial et final possibles pour le rayonnement et E_I et E_F sont les énergies correspondantes. La règle d'or de Fermi (1.29) devient dans ces notations :

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{I,F} |\langle I | \langle b | \hat{\mathbf{p}} \mathbf{E}_T | a \rangle | F \rangle|^2 \delta(E_F + \hbar\omega - E_I)$$
(1.47)

En exprimant la fonction δ comme une intégrale sur le temps, et en utilisant le relation de fermeture sur les états $|I\rangle$ et $|F\rangle$, on peut re-écrire l'équation (1.47) sous la forme :

$$\Gamma = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \langle E_{T\alpha}(t) E_{T\beta}(0) \rangle p_{\alpha}^{ba} p_{\beta}^{ab} e^{i\omega t}$$
(1.48)

Ici on a posé $p_{\alpha}^{ba} = \langle b | \hat{p} | a \rangle$, et les opérateurs de champ sont maintenant écrits dans le point de vue de Heisenberg [34]. La moyenne des opérateurs est prise sur les états finaux $|F\rangle$. On introduit maintenant le tenseur de corrélation du champ [39] :

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r},\mathbf{r}',t) = \frac{i}{\hbar} \langle [E_{T\alpha}(\mathbf{r},t), E_{T\beta}(\mathbf{r}',0)] \rangle \Theta(t)$$
(1.49)

avec $\Theta(t)$ la fonction de Heaviside. D'après la théorie de la réponse linéaire (voir par exemple [40]) le tenseur (1.49) est la susceptibilité linéaire du champ vis à vis de la perturbation introduite par le couplage dipolaire (1.14). En utilisant le théorème de fluctuation-dissipation [39], [40], on peut mettre la dernière formule sous la forme suivante :

$$\Gamma = \frac{2p_{\alpha}^{ba}p_{\beta}^{ab}}{\hbar} \text{Im}\widetilde{G}_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}, \omega)$$
(1.50)

avec **r** la position du dipôle, et $\widetilde{G}_{\alpha\beta}$ la transformée de Fourier de la grandeur $\widetilde{G}_{\alpha\beta}$. Ce résultat est très similaire au résultat classique qui sera établi dans la partie suivante. Il est plus général que les hypothèses dans lesquelles on a établi la règle d'or de Fermi (1.29), parce que les états du champ $|F\rangle$ sur lesquels est effectuée la moyenne peuvent être plus généraux que les états de Fock (1.9), comme indiqué dans la référence [39].

Ces dernières résultats nous serviront de point de départ pour la justification de l'approche classique (en couplage faible), exposée dans la partie suivante.

1.3 Approche classique : champ rétro-réfléchi

1.3.1 Taux d'amortissement d'un dipôle classique

L'approche classique a été développée dans le cadre d'expériences avec des molécules fluorescentes, effectuées par Drexhage dans les années 70 [2], [3]. Les sources moléculaires sont assimilées aux dipôles classiques, animés d'un mouvement sinusoïdal à la fréquence ω_0 . On peut supposer, comme c'est le cas du modèle de l'électron élastiquement lié, qu'il s'agit d'un électron lié à un noyau par une force de rappel élastique $\mathbf{F} = -m\omega_0^2 \mathbf{r}$. L'extension du dipôle ou de la "micro-antenne" ainsi formée est toujours supposée très faible par rapport à la longueur d'onde rayonnée $\lambda = 2\pi c/\omega_0$.

1.3. Approche classique : champ rétro-réfléchi

Dans un premier temps on supposera que le mouvement de la charge est imposé par une force extérieure. On peut alors obtenir le champ rayonné par l'électron à partir des potentiels retardés de Liénard Wiechert [41]. Le flux de Poynting s'écrit alors, dans le cas particulier d'un dipôle oscillant non-relativiste :

$$\mathbf{S} = \frac{p^2 \omega_0^2 \sin^2 \theta}{16\pi^2 \varepsilon_0 c^3 R^2} \mathbf{e}_{\mathbf{R}}$$
(1.51)

avec R la distance du dipôle jusqu'au point d'observation et \mathbf{e}_R le vecteur unitaire correspondant. On peut remarquer que la même distribution angulaire de la puissance rayonnée est prédite comme dans la théorie quantique (voir figure 1.1). En intégrant le flux de Poynting sur une sphère de rayon R on obtient la puissance totale P_{tot} rayonnée par le dipôle :

$$P_{tot} = \frac{\omega_0^4 p^2}{12\pi\varepsilon_0 c^3} \tag{1.52}$$

D'un autre côté, l'énergie mécanique E_m totale du dipôle est donnée par :

$$E_m = \frac{1}{2}m\omega_0^2 \frac{p^2}{e^2}$$
(1.53)

|p/e| étant l'amplitude du mouvement harmonique. On peut ainsi définir un taux d'amortissement $\Gamma_{0cl} = P_{tot}/E_m$ qui quantifie les pertes d'énergie par rayonnement :

$$\Gamma_{0cl} = \frac{e^2 \omega_0^2}{6\pi\varepsilon_0 mc^3} \tag{1.54}$$

Ainsi, si le dipôle oscillant était livré à lui-même il perdrait radiativement toute son énergie mécanique en un temps caractéristique $\tau = 1/\Gamma_{0cl}$. On peut conclure que la grandeur Γ_{0cl} est l'analogue classique du taux de l'émission spontanée discuté dans le paragraphe précédent.

Le résultat (1.54) est évidement différent du résultat quantique (1.34) pour le taux d'émission spontanée Γ_0 entre deux niveaux quantiques $|a\rangle$ et $|b\rangle$. Le rapport Γ_0/Γ_{0cl} est souvent appelé "force d'oscillateur" f_{ab} pour la transition $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$. On peut montrer que la force d'oscillateur obéit à la règle de somme suivante [34] :

$$\sum_{ab} f_{ab} = 1 \tag{1.55}$$

(la somme est effectuée sur toutes les transitions quantiques possibles). L'expression quantique (1.34) apparaît ainsi comme un taux classique pondéré par les propriétés de la transition quantique considérée.

Aux pertes radiatives décrites par la formule (1.52) on peut associer une force de freinage fictive $F_{ray} = -m\Gamma_{0cl}v$, proportionnelle à la vitesse du mouvement v et analogue à la force de frottement fluide en régime laminaire qui s'exerce sur une particule plongée dans un liquide. Cette force est un cas particulier de la *force du réaction du rayonnement* (voir [41]), qu'on peut définir pour un mouvement quelconque d'une particule chargée :

$$\mathbf{F}_{ray} = \frac{e^2}{6\pi^2 \varepsilon_0 c^3} \dot{\mathbf{a}} \tag{1.56}$$

avec **a** l'accélération de la particule. Cette force proviendrait de l'interaction entre la charge et son propre champ rayonné. Cependant, cette définition n'est pas autoconsistante en électrodynamique classique. Le domaine d'application de la notion de force de réaction du rayonnement est limité aux situations où cette force perturbe peu le mouvement des charges [42]. Néanmoins, cette notion permet de comprendre la théorie de Prock, Silbey et Chance [43] pour la fluorescence moléculaire, en excellent accord avec l'expérience, qui sera présentée dans le paragraphe suivant.

1.3.2 Champ rétro-réfléchi

Dans le modèle de Prock, Silbey et Chance [43] le mouvement du dipôle n'est plus imposé par l'extérieur, mais au contraire, le dipôle interagit avec son propre champ rayonné. Pour garder l'auto-consistence du modèle, il faut supposer que cette interaction soit une faible perturbation du mouvement harmonique de la charge. Dans l'équation du mouvement du dipôle il faut ajouter la force du Lorentz :

$$\frac{\mathrm{d}^2 \mathbf{p}}{\mathrm{d}t^2} + \omega_0^2 \mathbf{p} = \frac{e^2}{m} \mathbf{E}(t, \mathbf{r_0})$$
(1.57)

On a négligé la contribution du champ magnétique en supposant le mouvement du dipôle non-relativiste. L'approximation des grandes longueurs d'onde est également appliquée, car le champ électrique rayonné par le dipôle est pris sur sa position moyenne \mathbf{r}_0 . Le champ électrique est proportionnel au dipôle (linéarité des équation de Maxwell) et peut s'exprimer de la manière la plus générale comme :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \int_{-\infty}^{t} \mathbf{G}(\mathbf{r},\mathbf{r_0},t-t') \cdot \mathbf{p}(t') \mathrm{d}t'$$
(1.58)

Nous avons introduit ici le tenseur de Green $\mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0, t - t')^3$. La convolution (1.58) permet d'effectuer une transformée de Fourier sur l'équation du mouvement (1.57) pour une fréquence ω ; on obtient :

$$-\omega^{2} + \omega_{0}^{2} = \frac{e^{2}}{m} \mathbf{u} \cdot [\widetilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r_{0}}, \mathbf{r_{0}}, \omega) \cdot \mathbf{u}]$$
(1.59)

G est la transformée de Fourier du tenseur de Green, ou encore la susceptibilité linéaire du champ électromagnétique vis à vis de la source dipolaire, et **u** est le vecteur unitaire dans la direction du dipôle. L'équation (1.59) est une équation implicite pour la fréquence ω , à priori une quantité complexe. En supposant que la solution s'écarte peu de la fréquence libre ω_0 , on écrira :

$$\omega \approx \omega_0 + \Delta \omega - i\Gamma/2 \tag{1.60}$$

Ici les quantités $\Delta \omega$ et Γ sont supposées toutes les deux faibles par rapport à la fréquence ω_0 , ce qui constitue l'analogue classique de l'hypothèse de couplage faible avec le champ électromagnétique. La quantité $\Delta \omega$ renormalise la fréquence d'oscillation, alors

³Pour simplifier les notations, on utilisera des caractères gras pour les vecteurs et les tenseurs

que la quantité Γ peut être interprété comme le taux d'amortisement du mouvement dipolaire et s'exprime comme :

$$\Gamma = \frac{e^2}{m\omega_0} \operatorname{Im}[\mathbf{u} \cdot \widetilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r_0}, \mathbf{r_0}, \omega_0) \cdot \mathbf{u}]$$
(1.61)

Soit le dipôle oscillant dans l'espace libre. En régime harmonique, faiblement amorti, on peut déterminer le tenseur $\tilde{\mathbf{G}}_0(\omega \approx \omega_0)$ de l'espace libre à partir des solutions de Liénard Wiechert pour un dipôle oscillant à la fréquence ω_0 (Voir, par exemple la référence [44] pour des expressions explicites du tenseur de Green dans ce cas là). On peut aisément montrer que :

$$\lim_{\mathbf{r}\to\mathbf{r}_0}\mathrm{Im}\widetilde{\mathbf{G}}_0 = \frac{k_0^3\mathbf{I}}{6\pi\varepsilon_0} \tag{1.62}$$

Ici I est le tenseur unitaire. On retrouve ainsi le taux classique (1.54) d'émission dans l'espace libre.

Maintenant soit un dipôle enfermé dans une cavité. Le champ total rayonné par le dipôle se sépare naturellement en champ d'un dipôle libre et champ réfléchi sur les parois de la cavité. La même séparation se répercute sur le tenseur de Green $\tilde{\mathbf{G}}$ qu'on peut mettre sous la forme :

$$\widetilde{\mathbf{G}} = \widetilde{\mathbf{G}}_0 + \widetilde{\mathbf{G}}_{refl} \tag{1.63}$$

Le champ rétro-réfléchi sur le site du dipôle $\mathbf{E_{refl}}$ s'exprime simplement (en régime harmonique) par $\mathbf{E_{refl}} = \widetilde{\mathbf{G}}_{refl} \cdot \mathbf{p}$; normalisons en plus le taux Γ ainsi obtenu par le taux classique Γ_{0cl} . On obtient ainsi la formule suivante qui est le résultat central de la théorie de Prock, Silbey et Chance :

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_{0cl}} = 1 + \frac{6\pi\varepsilon_0}{pk_0^3} \text{Im}[\mathbf{u} \cdot \mathbf{E}_{refl}]$$
(1.64)

Cette formule relie la modification du taux de l'émission spontanée dans une cavité par rapport à sa valeur dans l'espace libre à la partie imaginaire de la composante du champ électrique rétro-réfléchie sur le site du dipôle. Le calcul de l'émission spontanée, dans le cadre des hypothèses évoquées plus haut, est ramené ainsi à un problème classique de résolution des équations de Maxwell pour un dipôle oscillant dans une cavité. Ce problème est beaucoup plus facile à mettre en oeuvre dans le cas des cavités complexes que les calculs quantiques évoqués dans la partie précédente. Nous allons discuter plus loin les conséquences de cette formule, ainsi que la compatibilité entre le point de vue quantique et classique.

1.3.3 Rayonnement d'un dipôle classique dans un diélectrique homogène et infini

A l'instar de la formule (1.64) notre but sera de calculer le champ électromagnétique rayonné par un dipôle classique dans des cavités de géométrie complexe. Le point de départ



FIG. 1.2 – (a) Représentation géométrique de la décomposition en ondes planes. Pour les ondes radiatives le sens de propagation est donné par le vecteur $n_1\mathbf{k}_0 = (\mathbf{k}_P, \gamma_1)$, et le champ électrique est porté par la direction perpendiculaire à la propagation, proportionnel à la projection du moment dipolaire dans cette direction : $e \propto p \sin \theta$. Par conséquent le flux de Poynting est proportionnel à $\sin^2 \theta$. Les ondes évanescentes $|\mathbf{k}_P| > n_1 k_0$ ne se propagent que dans le plan Oxy, leur amplitude étant exponentiellement décroissante à partir du site du dipôle. (b) La domaine d'intégration pour l'expression (1.66) se divise naturellement en un "cercle radiatif" ($|\mathbf{k}_P| < n_1 k_0$) et une zone correspondant aux ondes évanescentes émises par le dipôle.

pour les calculs qui seront présentés dans les chapitres suivants est la décomposition du champ rayonné par le dipôle sur une base d'ondes planes.

Soit le dipôle ponctuel **p** oscillant à la fréquence angulaire ω dans un milieu diélectrique infini et homogène de constante diélectrique ε_1 (et d'indice $n_1 = \sqrt{\varepsilon_1}$). Sa représentation en ondes planes est décrite dans les références [45] et [46]. Considérons d'abord un repère cartésien Oxyz, dans lequel chaque point de l'espace est repéré par le rayon vecteur :

$$\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}} = \mathbf{r}_p + z\hat{\mathbf{z}}$$
(1.65)

Nous avons privilégié les composantes du vecteur dans le plan Oxy, choix qui apparaîtra clair dans la suite. Soit le dipôle situé à l'origine des coordonnées, alors en tout point de l'espace son champ électrique \mathbf{E}_{dip} admet la décomposition suivante :

$$\mathbf{E}_{\mathbf{dip}}(x, y, z) = \Theta(z) \int \mathbf{e}^{\mathbf{u}}(\mathbf{k}_p) e^{i\mathbf{k}_p\mathbf{r}_p + i\gamma_1 z} \mathrm{d}\mathbf{k}_p +\Theta(-z) \int \mathbf{e}^{\mathbf{d}}(\mathbf{k}_p) e^{i\mathbf{k}_p\mathbf{r}_p - i\gamma_1 z} \mathrm{d}\mathbf{k}_p$$
(1.66)

 \mathbf{k}_p est la composante du vecteur d'onde $n_1\mathbf{k}_0$ dans le planOxy. La composante γ_1 du

vecteur d'onde selon Oz satisfait :

$$\gamma_1^2 + \mathbf{k}_p^2 = \varepsilon_1 k_0^2 \tag{1.67}$$

On choisira la racine carrée telle que $\operatorname{Re}\gamma_1 + \operatorname{Im}\gamma_1 > 0$. $\Theta(z)$ est la fonction de Heaviside. Les amplitudes $\mathbf{e}^{(\mathbf{u},\mathbf{d})}(\mathbf{k}_p)$ sont des fonctions connues du vecteur d'onde dans le plan \mathbf{k}_p , données par les expressions :

$$\mathbf{e}^{\mathbf{u}}(\mathbf{k}_{p}) = \frac{i\mu_{0}\omega^{2}}{8\pi^{2}\gamma_{1}}[\mathbf{p} - (\mathbf{p}\mathbf{k}^{+})\mathbf{k}^{+}]$$

$$\mathbf{e}^{\mathbf{d}}(\mathbf{k}_{p}) = \frac{i\mu_{0}\omega^{2}}{8\pi^{2}\gamma_{1}}[\mathbf{p} - (\mathbf{p}\mathbf{k}^{-})\mathbf{k}^{-}]$$

$$\mathbf{k}^{+} = \frac{1}{(\varepsilon_{1}k_{0}^{2})^{1/2}}(\mathbf{k}_{p} + \gamma_{1}\hat{\mathbf{z}})$$

$$\mathbf{k}^{-} = \frac{1}{(\varepsilon_{1}k_{0}^{2})^{1/2}}(\mathbf{k}_{p} - \gamma_{1}\hat{\mathbf{z}})$$
(1.68)

Des expressions analogues pour la décomposition du champ magnétique du dipôle \mathbf{H}_{dip} peuvent être établies à l'aide des équations de Maxwell.

On peut remarquer que le champ électrique est porté par la direction perpendiculaire au vecteur \mathbf{k}^{\pm} , et proportionnel à la projection du moment dipolaire sur cette direction (figure 1.2a). Il existe alors une analogie proche avec la figure 1.1.

Le champ du dipôle se décompose ainsi sur une infinité d'ondes planes, indexées par le vecteur \mathbf{k}_p . Lorsque $|\mathbf{k}_p| \leq \sqrt{\varepsilon_1} k_0$, la composante du vecteur d'onde selon Oz, γ_1 , est purement réelle et il s'agit des ondes propagatives, se propageant à partir du dipôle à l'infini. Plus précisément, le premier terme de la décomposition (1.66) contient les ondes qui se propagent dans le sens des Oz positif, et le seconde aux ondes se propageant dans le sens des Oz négatif. Ce sont ces ondes qui régissent le champ lointain du dipôle, et notamment le flux d'énergie rayonné à très grande distance (par rapport à la longueur d'onde) du dipôle. C'est pour ça qu'elles sont encore appelées ondes "radiatives". Dans l'espace des vecteurs d'onde, le cercle dans le plan $Ok_x k_y$ de rayon $\sqrt{\varepsilon_1} k_0$ contenant les vecteurs \mathbf{k}_p correspondants est appelé "cercle radiatif" (figure (1.2)b).

En revanche, lorsque $|\mathbf{k}_p| > \sqrt{\varepsilon_1} k_0$, la composante γ_1 est une quantité purement imaginaire et la dépendance en z dans la décomposition (1.66) devient une exponentielle réelle. On peut voir facilement qu'avec notre choix $\mathrm{Im}\gamma_1 > 0$ le champ décroît exponentiellement vers 0 lorsque $|z| \to \infty$ (figure (1.2)a). Il s'agit alors des ondes évanescentes localisées au voisinage du dipôle et qui régissent son champ proche. Pour un dipôle placé dans une microcavité planaire d'épaisseur faible par rapport à la longueur d'onde rayonnée, le champ proche du dipôle, ou encore le champ évanescent, va jouer un rôle important.

A partir des expressions (1.68) on peut obtenir le tenseur de Green **G** pour le champ rayonné dans le diélectrique de constante n_1 . On peut ensuite utiliser la formule (1.61) pour trouver le taux de l'émission spontanée à l'intérieur du milieu diélectrique :

$$\Gamma = n_1 \Gamma_{0cl} \tag{1.69}$$

Ainsi, le taux d'émission spontanée est n_1 fois plus fort dans un diélectrique d'indice n_1 par rapport au vide. Le même résultat est valable dans la théorie quantique. Remarquons
cependant qu'on a négligé les effets du champ local sur la source (voir ref.[47]). Par exemple, une correction de type Clausius-Mossotti apporte un facteur supplémentaire $(2n_1^2 + 1)/3n_1^2$. Cependant, comme nous nous intéresserons aux *variations* de l'émission spontanée avec les paramètres géométriques des dispositifs (i.e. épaisseur des dispositifs), ces corrections ne seront pas pertinents pour les résultats finaux.

Dans la suite nous nous intéresserons à la réponse électromagnétique linéaire des microcavités complexes au champ dipolaire. Avec la décomposition (1.66), notre stratégie sera d'examiner d'abord la réponse du système aux ondes planes (propagatives ou évanescentes) d'incidence arbitraire (ou d'une composante \mathbf{k}_P donnée). Cette réponse va s'exprimer en général comme un ensemble d'ondes planes réfléchies, transmises ou diffractées. Le résultat final s'exprimera comme une intégrale sur toutes les ondes incidentes, du type (1.66), pondérée par les amplitudes (1.68) qui décrivent la morphologie du champ incident. La mise en œuvre de cette démarche pour les dispositif qui nous intéressent fait l'objet des chapitres suivants de cette première partie.

1.4 Compatibilité entre les points de vue classique et quantique

Les approches quantique et classique fournissent des valeurs apparemment différentes pour le taux d'émission spontanée dans le vide, la différence étant le facteur appelé force d'oscillateur qui dépend des propriétés de la transitions atomique. Cependant, nous allons montrer que lorsqu'on s'intéresse à la modification du taux de l'émission spontanée d'une source placée en microcavité, les deux approches donnent des résultats concordants. Les grandeurs pertinentes seront alors les rapports Γ/Γ_0 et Γ/Γ_{0cl} fournis par les deux théories, avec Γ_0 étant respectivement la grandeur (1.34) et Γ_{0cl} la grandeur (1.54).

1.4.1 Cas d'une cavité métallique planaire

Le premier exemple qu'on va considérer est une cavité métallique planaire constituée de deux miroirs métalliques en or, supposés d'épaisseur infinie, qui enferment une couche d'indice de refraction $n_1 = 3.6$ (valeur pour GaAs) et d'épaisseur $L = 10 \ \mu m$. Cette cavité est représentée à la figure 1.3a. On va confronter les approches classique et quantique pour le calcul de la modification de l'émission spontanée d'un dipôle vertical (perpendiculaire aux miroirs de la cavité) placé à l'intérieur de la cavité.

La position du dipôle dans la cavité est repérée par la distance L_1 du miroir supérieur. Étant vertical, le dipôle n'est couplé qu'au modes de polarisation TM supportés par la cavité. Rappelons que contrairement aux modes TE, les modes TM ont une composante du champ électrique perpendiculaire aux miroirs [48]. Leur relation de dispersion est tracée à la figure 1.3b. Dans le chapitre 2 nous expliquons comment on peut l'obtenir numériquement. Avec une épaisseur de $L = 10\mu m$, les fréquences des modes tombent dans le domaine infrarouge moyen et lointain, où la réflectivité des métaux est proche de l'unité (comme dans le cas du métal parfait). Les relations de dispersion sont assez bien



FIG. 1.3 – (a) Cavité plane simple entre deux miroirs métalliques en or, enfermant une couche diélectrique d'épaisseur $L = 10 \ \mu m$ et d'indice $n_1 = 3.6$. Un dipôle vertical est placé dans la cavité. (b) Fréquence des 5 premiers modes TM en fonction du vecteur d'onde parallel k_P .

décrites par la formule :

$$\omega_m(k_p) = \frac{c}{n_1} \sqrt{\frac{\pi^2 m^2}{L^2} + k_p^2} \tag{1.70}$$

Ici *m* est l'entier qui compte le nombre des nœuds du champ électrique du mode. On peut noter que le mode fondamental TM_0 n'a pas de coupure dans la domaine des basses fréquences $\omega \to 0$.

Nous n'allons pas expliciter ici le calcul du taux d'émission spontanée dans les deux approches, qui sera détaillé dans le chapitre 2 dans un cadre plus général. On se contentera de fournir directement les résultats.

Ainsi, dans **l'approche classique** basée sur la théorie de Prock, Silbey et Chance (formule (1.64)) et la décomposition du rayonnement du dipôle en ondes planes on obtient :

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_{0cl}} = 1 + \frac{3}{4\pi n_1 k_0} \operatorname{Re} \int \int \frac{R^2 (e^{i\gamma_1 L_1} + e^{i\gamma_1 (L - L_1)})^2}{1 - R^2 e^{2i\gamma_1 L}} \frac{1 - \gamma_1^2}{\gamma_1} \mathrm{d}^2 \mathbf{k}_P \tag{1.71}$$

Ici R est la réfléctivité TM à l'interface or-diélectrique. L'intégrale est la composante z du champ rétro-réfléchi sur le site du dipôle, obtenue par resommation des ondes planes qui sont issues du dipôle après leur réflexion sur les miroirs métalliques.

Pour le calcul quantique, on commence par le calcul de la distribution du champ électrique pour chaque mode et on calcule la densité d'états du mode à partir des relation de dispersion (1.70) (les détails seront donnés dans le chapitre 2). L'énergie électromagnétique du mode est normalisée à une fluctuation du vide ⁴ :

$$\int_{cavite} \left\{ \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_1}{2} |\mathbf{E}|^2 + \frac{1}{2\mu_0} |\mathbf{H}|^2 \right\} \mathrm{d}V = \frac{\hbar\omega}{2}$$
(1.72)

⁴Cette normalisation découle de la normalisation de l'opérateur \mathbf{A} dans la partie (formule (1.5))



FIG. 1.4 – (a) Différents taux d'émission spontanée en fonction de la position du dipôle à l'intérieur de la cavité (paramètre L_1), pour une fréquence $\omega/2\pi = 20 \text{ THz}$. (b) Différents taux d'émission spontanée en fonction de la fréquence, la source étant placée au centre de la cavité.

1.4. Compatibilité entre les points de vue classique et quantique

On obtient ensuite le rapport Γ/Γ_0 pour chaque mode de la cavité à partir de la règle d'or de Fermi :

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_0} = \frac{6\pi\varepsilon_0\varepsilon_1}{pk_0^3} |E_z(z=L_1)|^2 \rho(\hbar\omega)$$
(1.73)

Avec $E_z(z = L_1)$ la composante selon z du champ électrique normalisé du mode, prise sur le site du dipôle.

A la figure 1.4a on a représenté les variations des différents taux en fonction de la position du dipôle par rapport aux miroirs pour une fréquence $\omega/2\pi = 20$ THz (longueur d'onde $\lambda = 15 \ \mu m$). Les cinq premiers modes sont alors présents dans la cavité. La ligne épaisse en rose est la somme de l'émission sur tous les modes. La ligne en noir est le calcul classique à partir de l'expression (1.71).

Conformément à l'expression (1.73) le taux d'émission dans chaque mode de la cavité suit la morphologie du champ électrique du mode. Ainsi, au centre de la cavité, l'émission vers les modes impairs est totalement inhibée à cause de la présence d'un nœud du champ à cet endroit.

La somme sur les taux d'émission dans les modes guidés dans la cavité est presque partout équivalente avec la courbe obtenue par le champ rétro-réfléchi. Cependant, le calcul classique diverge au voisinage immédiat des miroir. Nous allons voir plus loin que cette divergence est due à l'absorption dans les miroirs. On peut conclure donc sur cet exemple que les calculs classique et quantique de la modification de l'émission spontanée sont équivalents lorsque l'absorption des miroirs est négligeable.

Cette conclusion est confirmée par la figure 1.4b. Ici le dipôle est placé au centre de la cavité et on varie la fréquence de l'émission. A cet emplacement seulement les modes pairs contribuent à l'émission spontanée. Chaque fois qu'un nouveau mode apparaît, on observe un saut dans la courbe du calcul classique.

Ces figures illustrent aussi la différence qui existe entre les deux démarches. Le calcul classique fournit immédiatement une solution *globale* du problème (ici on obtient d'emblée *la somme* sur tous les modes), intégrant toutes les voies possibles de désexcitation de la source. Au contraire, pour mettre en ouvre le calcul quantique, il faut avoir une information détaillée sur le système (distribution du champ électrique dans chaque mode, propriétés de dispersion, etc.).

Revenons sur la figure 1.4b. D'une part, le calcul classique tend vers la valeur asymptotique unité pour les grandes fréquences (longueurs d'ondes faibles, ou encore une cavité très large par rapport à la longueur d'onde). Cependant, une importante observation est que bien que le taux d'émission dans les modes supérieurs reste fini pour tous les longueurs d'onde, l'émission spontanée dans le fondamental TM_0 diverge pour les faibles fréquences (grandes longueurs d'onde).

Comment expliquer cette divergence? A l'aide de la relation de dispersion (1.70) on peut facilement montrer que la densité d'états de tous les modes reste finie, et même tend vers zéro pour les grandes longueurs d'onde. L'explication ne peut venir alors que du champ électrique normalisé dans le mode. En effet, on voit à la figure 1.4a que la distribution du champ du mode TM_0 est quasiment homogène. Alors le champ du mode normalisé, qui intervient dans là règle d'or de Fermi, peut être estimé à partir de (1.72)

$$E_z^2 \propto \frac{1}{L} \tag{1.74}$$

C'est donc *le confinement* de plus en plus accru du mode TM_0 dans les cavités sublongueur d'onde qui est responsable de la divergence. En plus, grâce à la formule (1.74), on peut affirmer que le taux d'émission spontanée croît comme l'inverse de l'épaisseur L de la cavité planaire.

Cette dernière conclusion est importante car c'est précisément cet effet qu'on cherchera à mettre en évidence tant théoriquement qu'expérimentalement dans les dispositifs THz étudiés dans ce travail de thèse.

Il reste à élucider la différence entre les calcul classique et quantique pour des faibles distances dipôle miroir ("faible" se référant ici à la longueur d'onde de l'émission). Une explication fait l'objet du paragraphe 1.4.2.

1.4.2 Voie de désexcitation par absorption

La différence entre les calculs classique et quantique pour des distances dipôle-miroir faibles s'explique par l'ouverture d'une nouvelle voie de désexcitation pour le dipôle. Pour comprendre son mécanisme il faut évoquer les ondes évanescentes rayonnées par le dipôle classique (voir paragraphe 1.3.3), ou encore le champ proche du dipôle.

Soit alors une onde évanescente du type $e^{k(z-z_0)}$, incidente sur une surface de réflectivité TM R(k)(figure 1.5(a)). Ici z_0 est le point où se situe la source de cette onde. L'onde réfléchie s'écrira alors $R(k)e^{-kz}$. Comme nous avons supposé la polarisation TM, le long de l'axe Oy, les champs magnétique H_y et électrique E_x s'écriront :

$$H_y = H_0 e^{-kz_0} (e^{kz} + R(k)e^{-kz})$$
(1.75)

$$E_x = -\frac{i\mu_0\omega}{k}H_0e^{-kz_0}(e^{kz} - R(k)e^{-kz})$$
(1.76)

Le flux de Poynting s'écrit alors :

$$S_z = \frac{1}{2} \operatorname{Re}(E_x H_y^*) = -\frac{\omega \mu_0 |H_0|^2}{k} \operatorname{Im} R(k) e^{-2kz_0}$$
(1.77)

Ainsi, bien qu'une onde évanescente seule ne puisse pas transporter de l'énergie, *l'in*terférence des deux ondes évanescentes contra-propageantes engendre un flux de Poynting non nul ⁵. Ce flux possède quelques propriétés singulières qui sont révélées par la formule (1.77):

- Pour une interface simple, les propriétés des coefficients de Frenel entraînent ImR(k) > 0 [49]⁶. Le signe "moins" signifie que le flux de Poynting est dirigé vers l'intérieur de la surface, donc il s'agit, en général, d'une absorption.

 $^{^5\}mathrm{L'effet}$ tunnel en mécanique quantique s'explique par le même mécanisme

 $^{^6\}mathrm{Pour}$ la convention sur les facteurs temporel mentionnée à la fin du paragraphe 1.1



FIG. 1.5 - (a) Onde évanescente incidente (rouge) et onde réfléchie (bleu) sur une surface de réflectivité R(k). La somme des deux ondes est un champ électromagnétique de vecteur de Poynting non nul, proportionnel à ImR(k) et pointant vers l'intérieur de la surface. L'onde incidente pourrait provenir d'un dipôle situé au point z_0 . (b) Illustration des deux voies de désexcitation d'un dipôle dans une cavité (la cavité est planaire sur cette figure). Une partie de l'énergie du dipôle est transférée aux modes propres de la cavité. Une autre partie est emportée par le flux de Poynting créé par l'interférence entre les ondes évanescentes incidentes (provenant du champ proche du dipôle) et réfléchies sur la surface de la cavité.

- La facteur e^{-2kz_0} montre que ce flux n'est significatif que si la source des ondes évanescentes est suffisamment proche de la surface. (Pour une longueur d'onde λ une onde est évanescente si $k > 2\pi\sqrt{\varepsilon}/\lambda$, il faut donc que $z_0 \ll \lambda$).

- Le facteur ImR(k) montre que pour avoir un flux non nul, la réflectivité de l'interface doit posséder une partie imaginaire non nulle. Ceci est bien le cas d'une interface avec un milieu *absorbant*. Plus généralement, une *relation de phase* doit exister entre les amplitudes de l'onde incidente et réfléchie. En particulier, si les deux amplitudes sont en phase (cas de surface sans absorption) le flux (1.77) est nul. En outre, la présence des modes électromagnétiques localisés sur la surface (comme des plasmons de surface ou bien des modes photoniques dus à la structuration de la surface) exalte le flux via ce facteur, car la réfléctivité R(k) possède aussi une partie imaginaire dans ce cas.

Comme on verra dans le chapitre 2 cette voie de désexcitation sera particulièrement efficace dans les dispositifs THz, qui contiennent des couches de contact fortement dopées exhibant une absorption importante dans ce domaine de fréquences. On y montrera également que ce mécanisme est explicitement contenu dans l'expression du taux d'émission spontanée classique, comme on le voit aussi sur la figure 1.4a.

Alors que ce mécanisme apparaît naturellement dans le calcul classique, son traitement du point de vue quantique reste possible bien que quelque peu compliqué. Un traitement microscopique du problème à été donné par Yeung et Gustafson en 1996 [50]. Dans cette référence le problème d'une source quantique au voisinage d'une interface vide-diélectrique absorbant est adressé. Les auteurs écrivent un hamiltonien dont les différents termes sont le hamiltonien du champ libre, un hamiltonien de type Hopfield [51] pour décrire un diélectrique non-absorbant, et un terme qui correspond à un réservoir d'oscillateurs harmoniques pour décrire l'absorption et la dissipation dans le diélectrique. Le résultat classique, sur lequel on donnera plus de détails dans le paragraphe 2.3.2 du chapitre 2, est ainsi retrouvé.

Or le taux d'émission spontanée calculé par l'intermédiaire du champ retro-réfléchi contient d'emblée toutes les voies possibles pour la désexcitation du dipôle. Cependant, dans le domaine THz, ainsi que plus généralement dans les problèmes d'optimisation du rayonnement des sources, seulement une partie de l'énergie est réellement utile ou accessible pour la mesure. Notre stratégie sera donc d'examiner l'émission dans les modes guidés de la cavité, fournie par la règle d'or de Fermi, pour avoir une information plus détaillée sur le système. A la figure 1.5(b) on a schématisé les différents mécanismes d'acheminement de l'énergie de l'émetteur dans une cavité planaire, qui seront étudiés quantitativement dans le chapitre 2 dans le cas des dispositifs THz.

1.4.3 Compatibilité entre les visions classique et quantique en couplage faible

Pour résumer nous avons montré numériquement sur un exemple concret, que dans le cas sans absorption les approches classique et quantique pour le calcul de *la modification* de taux d'émission d'une source donnent les mêmes résultats. Quitte à fournir un modèle microscopique pour l'absorption des interfaces métalliques ou diélectriques, on peut également retrouver cette équivalence dans les cas avec absorption, qui sont bien traités d'emblée dans le cadre classique.

En fait ces résultats sont beaucoup plus généraux et l'équivalence entre les deux points de vue en couplage faible est démontrée dans un cadre très large. La raison est que fondamentalement, les deux approches font intervenir la fonction de Green ou encore la fonction de *la susceptibilité linéaire du champ* vis à vis d'une excitation dipolaire (voir les paragraphes 1.2.3 et 1.3.2). Dans la théorie de la réponse linéaire [40] la définition de la susceptibilité linéaire implique des valeurs moyennes de champ, donc il s'agit d'une grandeur intrinsèquement classique [36]. De manière qualitative, la nature classique de cette grandeur est confirmée par le fait que la susceptibilité ne dépend pas de la nature des sources [44].

Il peut également paraître étonnant que du point de vue classique la modification du taux d'émission soit obtenue à partir de la force de réaction de rayonnement, alors que du point de vue quantique ce sont plutôt les fluctuations de vide qui sont responsables de l'émission spontanée (qui est vue alors comme une émission stimulée par les fluctuations quantiques du vide). Cette problématique peut être comprise par une analyse plus détaillée fondée sur le formalisme d'équation pilote [36]. Dans cet analyse le rayonnement est considéré comme un réservoir, c'est à dire un système d'un très grande nombre de degrés de liberté (ce qui est un autre façon de dire que le continuum des modes électromagnétiques est très dispersé en énergie). On démontre alors que la réaction de rayonnement et les fluctuations du vide contribuent à part égale dans le taux de l'émission spontanée à partir des niveaux excités du système quantique, avec le même signe. Par contre, pour l'état fondamental du système, les deux contribuent toujours à part égale, mais de signe opposé,



FIG. 1.6 – (a) Caractéristique courant-tension du dispositif. Dans l'inset : la structure à super-réseau sous un champ électrique [52]. (b) Le dispositif expérimental utilisé par Helm en 1988 pour mettre en évidence l'électroluminescence inter-sous-bande [53].

ce qui explique la stabilité de l'état fondamental⁷.

1.5 Emission spontanée dans le domaine THz

1.5.1 Sources à cascades quantiques pour le domaine THz

Dans ce paragraphe on va discuter brièvement le fonctionnement des dispositifs qu'on utilise pour générer du rayonnement THz. Plus de détails seront donnés dans la partie II de ce manuscrit.

La première structure électroluminescente dans le domaine THz ($\lambda \approx 100 \ \mu m$) à été démontrée par Manfred Helm en 1988 [53], [52]. La structure était un super-réseau à base de sémiconducteur ternaire AlGaAs. Les transitions entre les différents niveaux du super-réseau, appelées encore des "sous-bandes" [54], sont induites par l'application d'un champ électrique le long de la structure (voir figure 1.6(a)). Les règles de sélection pour les transitions entre les niveaux (transitions "inter-sous-bandes") font qu'on peut modéliser ces transitions par un dipôle vertical, i.e. parallèle à l'axe de la structure, ou encore perpendiculaire aux couches épitaxiales.

Le dispositif expérimental est montré à la figure 1.6(b). Des électrodes métalliques sont déposées sur la structure pour permettre d'appliquer un champ électrique et faire passer du courant. Un réseau métallique en or est également déposé sur la surface pour coupler le rayonnement vers l'extérieur.

Grâce à l'introduction du concept de "cascade quantique", qui sera détaillé dans la seconde partie de ce manuscrit, des sources de rayonnement plus performantes ont apparues ces dernières années, dans le domaine de l'infrarouge lointain. Dans nos expériences, on a couramment utilisé les sources décrites dans [55], [56], émettant à une longueur d'onde

⁷Du point de vue mathématique, cette compensation est liée à la conservation des relations de commutation des variables conjuguées.

de $\lambda = 88 \ \mu m$. Pour les modélisations qui vont suivre, il faut retenir qu'une cascade quantique est un ensemble de N couches fines équivalentes (qui sont des séquences de puits quantiques). L'épaisseur d'une couche D, appelée "période de la cascade", est de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres. Chacune des couches peut être modélisée par un ensemble des dipôles verticaux (perpendiculaires à la couche), répartis de manière homogène à l'intérieur de la couche. Le nombre de dipôles excités par unité de temps est proportionnel au courant électrique traversant la couche de la cascade.

1.5.2 Ordres de grandeur

Le taux d'émission spontanée associé à la transition inter-sous-bande peut être estimé à partir de l'expression (1.34) et en utilisant le résultat (1.69). Avec l'élément de moment dipolaire $\langle p_z \rangle$ de la transition $\langle p_z \rangle = -e\langle z \rangle$, on obtient après quelques réarrangements :

$$\Gamma_0 = \frac{16n_1 e^2 \langle z \rangle^2 \pi^3}{3\varepsilon_0 h \lambda^3} \tag{1.78}$$

La valeur moyenne $\langle z \rangle$ s'obtient à partir d'une résolution numérique de l'équation de Schrödinger pour la structure. Typiquement on obtient $\langle z \rangle \approx 10 \ nm$. Avec une longueur d'onde $\lambda = 100 \ \mu m$ on estime le temps caractéristique τ_0 de l'émission spontanée :

$$\tau_0 = 1/\Gamma_0 \approx 14\mu s \tag{1.79}$$

Dans la gamme de fréquences THz l'émission spontanée s'effectue alors à l'échelle de quelques dizaines de micro-secondes.

L'autre grandeur pertinente pour les transitions inter-sous-bandes est le taux des transitions non-radiatifs Γ_{nr} . Deux mécanismes non-radiatifs sont à prendre en compte : les collisions électron-électron et l'émission des phonons optiques [57]. Les deux mécanismes ont des temps caractéristiques τ_{nr} à l'échelle de la picoseconde :

$$\tau_{nr} = 1/\Gamma_{nr} = (0.1 - 10)ps \tag{1.80}$$

Ce temps est beaucoup plus court que le temps caractéristique de l'émission spontanée. Cherchons maintenant à évaluer l'ampleur des effets de modification de l'émission dans le domaine THz. La quantité pertinente ici est le rapport entre la longueur d'onde rayonnée λ et l'épaisseur du dispositif L. Pour un dispositif typique la période de la cascade est de $D \approx 0.1 \ \mu m$ [55]. La longueur d'onde étant $\lambda \approx 100 \ \mu m$, on obtient, pour un dispositif à une seule période (épaisseur minimale) :

$$\frac{\lambda}{L}\Big|_{THz} \approx 10^3 \tag{1.81}$$

Par comparaison, pour la même expérience dans le domaine optique [58], l'épaisseur typique de la cavité est 30 nm, la longueur d'onde étant 950 nm on obtient pour le rapport :

$$\frac{\lambda}{L}\Big|_{optique} \approx 30 \tag{1.82}$$

Ainsi, dans le domaine THz, les effets qu'on cherchera à mettre en évidence sont favorisés par plus de deux ordres de grandeur. Cette estimation ne doit servir qu'à titre indicatif; une analyse plus ample mettrait en jeu l'orientation du dipôle dans la cavité. Des estimations quantitatives font l'objet du chapitre 2.

Remarquons à la fin qu'avec une extension typique de dipôle de l'ordre de $\approx 10 \ nm$ pour la gamme des longueurs d'onde qui nous intéressent l'approximation des grandes longueurs d'onde est évidemment satisfaite.

Chapitre 2

Source dans une microcavité planaire

2.1 Généralités

2.1.1 Cavité planaire dans le domaine THz

Ce chapitre est consacré à l'étude des modes et de l'émission spontanée d'une source ponctuelle dans une cavité planaire. Bien que ce problème ait été déjà traité dans la littérature de manière générale, l'analyse qui est fournie ici est spécifique au domaine THz.

On commence en introduisant le dispositif à modéliser dans le paragraphe suivant. Ensuite, dans la section 2.2 les modes d'une cavité "vide" (sans source) sont passés en revue. La spécificité ici provient de la présence dans la cavité des couches semi-conductrices fortement dopées, ce qui détermine l'existence des excitations électromagnétiques de type plasmon de surface qui influent fortement sur la morphologie des modes de la cavité et donc sur le rayonnement de la source. L'analyse du système multi-couche est la première étape de l'étude des systèmes plus compliqués, comme les cavités avec un réseau métallique qui sont étudiées dans les chapitres 3 et 4.

Le modèle théorique présenté dans cette partie pourrait aussi servir, dans un cadre plus général, pour l'étude des dispositifs lasers ou d'autres dispositifs optiques multi-couches.

Dans la section 2.3, on étudie l'émission spontanée d'une source dipolaire placée à l'intérieur de la cavité THz planaire. Cette étude a trois aspects, qui sont encore dictés par la particularité de domaine de fréquences :

- le développement des outils analytiques et numériques pour la mise en oeuvre des idées générales présentées dans le chapitre 1. L'aspect multi-couche de la cavité et en particulier la présence des couches dopées est explicitement pris en compte. Le taux d'émission dans les modes guidés de la cavité est calculé par la règle d'or de Fermi. On l'appellera "taux d'émission spontanée modal". On calcule aussi le taux d'émission classique par le champ rétro-réfléchi sur le site du dipôle.

- ensuite on donne une analyse quantitative de la désexcitation du dipôle dans les différentes voies. D'une part, on confirme que le taux d'émission dans le mode fondamental croît comme l'inverse de l'épaisseur la cavité, ce qui est la conclusion importante du paragraphe 1.4.1. D'autre part, la voie non-radiative, due à la présence des couches dopées est étudiée en détail à partir du champ-rétro-réfléchi.

- enfin, partant des analyses théoriques, on prédit le comportement de la puissance extraite par la facette de la cavité lorsqu'on fait varier l'épaisseur de la cavité. La modification de l'émission spontanée peut être ainsi mise en evidence expérimentalement.

L'accent de cette étude est porté sur les cavités qui confinent complètement les modes optiques par deux miroirs métalliques. Dans ce cas les effets de modification de l'émission sont maximaux. Des systèmes sans confinement fort sont aussi discutés par comparaison avec les premiers.

2.1.2 Dispositif étudié : modèle

Le dispositif planaire est décrit à la figure 2.1. Il est constitué de la cascade quantique GaAs/AlGaAs, brièvement décrite dans la section 1.5, mise dans la cavité optique qui est formée par les deux miroirs indiqués sur la figure. Passons alors en revue les différents éléments.

La couche métallique supérieure est un élément indispensable : elle sert à guider le mode optique, et d'électrode pour le pompage électrique de la cascade. Cette couche d'épaisseur typique de quelques centaines de nanomètres contient principalement de l'or. Dans le domaine THz la longueur de pénétration du champ électromagnétique dans les métaux est typiquement de quelques dizaines de nanomètres, ce qui justifie de modéliser cette couche par un miroir métallique en or infini. Cependant, avec le formalisme qu'on va développer dans le paragraphe 2.2.2 on peut prendre en compte explicitement l'épaisseur finie du métal.

La cascade quantique GaAs/AlGaAs, d'épaisseur L, est épitaxiée entre deux couches de contact de GaAs avec un fort niveau du dopage de type n+ pour l'injection du courant dans la cascade. Les propriétés optiques des couches de contact sont bien décrites par le modèle de Drude et seront discutées dans le paragraphe suivant. Du point de vue optique les couches de contact introduisent de l'absorption, mais peuvent aussi servir, dans cette gamme de fréquences, pour le confinement optique du mode à cause de leur forte réflectivité. Les épaisseurs des deux couches de contact seront notées par L_a et L_b . Les concentrations des dopants seront respectivement notées par C_a et C_b .

Dans la modélisation, la nature du miroir inférieur n'est pas fixée. S'il s'agit d'une couche métallique, alors le champ électromagnétique est entièrement confiné dans la cavité; on parlera d'une "cavité confinée". En revanche s'il s'agit, par exemple, d'un substrat GaAs infini le mode optique guidé pénètre en large partie dans le substrat (un confinement partiel se fait alors par la couche de contact inférieure); on parlera d'une "structure sans confinement".

2.2 Modes dans une cavité planaire

2.2.1 Constantes diélectriques des différentes couches

Les microcavités étudiées sont constituées de couches planes très hétérogènes optiquement. Trois différents types de couches sont envisagés : couches diélectriques non absorbantes, couches de GaAs dopées et couches métalliques.

2.2. Modes dans une cavité planaire



FIG. 2.1 – Cavité planaire comportant les couches principales à modéliser : la cascade quantique, les couches de contact dopées type n, le miroir supérieur supposé infini et le "miroir" inférieur de nature arbitraire.

Pour la constante diélectrique des métaux et les semi-conducteurs dopés on utilise le modèle de Drude :

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_{\infty} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i/\tau)} \right)$$
(2.1)

Le paramètre ε_{∞} est la constante diélectrique statique (à fréquence infinie) du milieu. La quantité ω_p est la fréquence plasma du gaz des électrons libres et τ est leur temps typique de diffusion.

Dans le cas des métaux $\varepsilon_{\infty} = 1$ et les grandeurs ω_p et τ sont déterminées à partir du fit de la loi (2.1) sur les données expérimentales tabulées dans [59]. Les valeurs utilisées sont résumées dans le tableau suivant :

Métal	Symbol	$\omega_p \times 10^4 \text{ THz}$	$\tau~{\rm ps}$	Accord avec (2.1)
Or	Au	1,11	0,012	Très bon
Argent	Ag	1,04	0,016	Bon
Platine	Pt	0,72	0,015	Bon
Nickel	Ni	1,05	$0,\!03$	Moyen
Titane	Ti	N/A	N/A	N/A

On peut remarquer que les valeurs obtenues dépendent peu de la nature du métal; voilà pourquoi on adoptera les valeurs $\omega_p = 10^4$ THz et $\tau = 0,02$ ps dans le cas du Titane pour lequel on ne dispose pas des valeurs tabulées.

Le système $GaAs/Ga_{0.85}Al_{0.15}As$ sera assimilé (lorsqu'on néglige le dopage, voir plus bas) à un diélectrique homogène de constante diélectrique statique $\varepsilon_{\infty} = 12,96$. La fréquence plasma dépend de la concentration N des dopants selon la formule :

$$\omega_p^2 = \frac{e^2 N}{\varepsilon_\infty \varepsilon_0 m^*} \tag{2.2}$$



FIG. 2.2 - (a) Fréquence plasma du n-GaAs en fonction de la concentration des dopants. (b) Partie réelle de la constante diélectrique en fonction de la longueur d'onde pour différentes concentrations de dopage.

avec e et m_0 la charge et la masse de l'electron. La masse effective des électrons dans la bande de conduction du GaAs est $m^* = 0,067m_0$.

Pour une concentration des dopants $N=n\times 10^{18}\ cm^{-3}$ la fréquence plasma en THz est donnée par la formule :

$$\omega_p(\text{THz}) = 60.5\sqrt{n}.\tag{2.3}$$

Des valeurs de la fréquence pour les concentrations de dopage $N = 10^{15} \ cm^{-3} - 10^{18} \ cm^{-3}$ sont tracées à la figure 2.2(a). La fréquence plasma des couches fortement dopées est alors du même ordre de grandeur que les fréquences angulaires correspondant au fonctionnement du dispositif (pour $\lambda \approx 100 \ \mu m$ on a $\nu \approx 3 \ \text{THz}$ et $\omega = 2\pi\nu \approx 19 \ \text{THz}$). Clairement, les couches dopées ont un comportement non-trivial dans le domaine THz.

En négligeant la diffusion dans les couches, la partie réelle de la constante diélectrique de la couche dopée peut s'exprimer de la manière suivante en fonction du paramètre n et de la longueur d'onde λ exprimée en microns :

$$\operatorname{Re}\varepsilon \approx 12.96 \times (1 - 1.03 \times 10^{-3} \lambda^2 n) \tag{2.4}$$

Cette fonction est tracée à la figure 2.2(b). dans la gamme de longueurs d'ondes $\lambda = 50$ μm - 150 μm pour différentes concentrations. Le graphique montre que pour les couches dans le régime du dopage résiduel $N \approx 10^{15} \ cm^{-3}$ - $10^{16} \ cm^{-3}$ on a un comportement diélectrique ,avec une constante diélectrique légèrement réduite par le facteur de Drude $(1 - \omega_p^2/\omega^2)$. Voilà pourquoi nous avons adopté la valeur $\varepsilon = 12,96$ pour les couches de la cascade. Par contre, le comportement des couches fortement dopées $N \ge 10^{17} \ cm^{-3}$ est clairement "métallique" et la constante diélectrique complexe (2.1) doit être prise en compte.

Pour le temps de diffusion τ nous avons utilisé les valeurs adoptées dans la référence [60] : $\tau = 0.1 \ ps$ pour les dopages forts ($N \approx 10^{18} \ cm^{-3}$) et $\tau = 0.5 \ ps$ pour les dopages faibles ($N \approx 10^{15} \ cm^{-3}$). Numériquement, pour avoir une fonction continue du paramètre n on a utilisé l'expression :

$$\tau = \begin{cases} 0, 1 - 0, 2\log(n) & \text{ps} & n < 1\\ 0, 1 & \text{ps} & n > 1 \end{cases}$$

Avec un temps de diffusion fini de cet ordre de grandeur, les conclusions tirées plus haut sur le comportement diélectrique ou métallique des couches ne sont pas altérées.

2.2.2 Système multicouche

Nous nous intéressons à présent à la propagation des ondes planes à l'intérieur d'un empilement des couches homogènes. Chacune des couches de l'empilement est caractérisée par sa constante diélectrique ε_i en général complexe et son épaisseur L_i . Les couches sont parallèles au plan Oxy. On considérera dans chaque couche une paire d'ondes planes contra-propagatives du type :

$$P_i e^{i\mathbf{k}_p \mathbf{r}_p + i\gamma_i z} + Q_i e^{i\mathbf{k}_p \mathbf{r}_p - i\gamma_i z} \tag{2.5}$$

Ici \mathbf{k}_p est la composante dans le plan Oxy du vecteur d'onde de chaque onde plane, et $\gamma_i = \sqrt{\varepsilon_i k_0^2 - \mathbf{k}_p^2}$ est la composante selon l'axe Oz du vecteur d'onde dans la couche *i*. Dans le cas général les quantités γ_i sont complexes, la racine carrée est alors choisie de telle façon que $\operatorname{Re}(\gamma_i) + \operatorname{Im}(\gamma_i) > 0$. La quantité k_0 est définie par $k_0 = \omega_0/c$ avec *c* la vitesse de lumière dans le vide.

A partir des équations de Maxwell on peut montrer que les composantes E_z et H_z du champ électromagnétique sont découplées, i. e. les couples $E_z = (P_i^e, Q_i^e)$ et $H_z = (P_i^h, Q_i^h)$ suivent des évolutions indépendantes [61]. Le superscript "e" réfère la composante E_z du champ électrique, et le superscript "h" réfère la composante H_z du champ magnétique. Les équations qu'on écrira sans superscripts sont valables pour les deux composantes. En vertu des formules :

$$\mathbf{E}_{\perp} = \frac{\pm i\gamma_i \nabla_{\perp} E_z - i\omega\mu_0 \hat{\mathbf{z}} \times \nabla_{\perp} H_z}{\varepsilon_i k_0^2 - \gamma_i^2}$$
(2.6)

$$\mathbf{H}_{\perp} = \frac{\pm i\gamma_i \nabla_{\perp} H_z + i\omega\varepsilon_0\varepsilon_i \hat{\mathbf{z}} \times \nabla_{\perp} E_z}{\varepsilon_i k_0^2 - \gamma_i^2}$$
(2.7)

qui fournissent les composantes du champ parallèles au plan des couches ($\nabla_{\perp} = \{\partial/\partial x, \partial/\partial y\}$ est le Laplacien transverse) d'une onde plane $e^{\pm i\gamma_i z}$, les composantes E_z et H_z déterminent complètement le champ électromagnétique.

Considérons l'interface entre les milieux 1 et 2, les relations de passage permettent de trouver le lien entre les couples $\{P_1, Q_1\}$ et $\{P_2, Q_2\}$ que l'on peut mettre sous la forme :

$$P_{2} = \frac{1}{t_{21}} [P_{1}e^{i\gamma_{1}L_{1}} + \rho_{21}Q_{1}e^{-i\gamma_{1}L_{1}}]$$

$$Q_{2} = \frac{1}{t_{21}} [\rho_{21}P_{1}e^{i\gamma_{1}L_{1}} + Q_{1}e^{-i\gamma_{1}L_{1}}]$$
(2.8)



FIG. 2.3 – Empilement des couches à partir d'un milieu semi-infini. On peut éliminer successivement les couches à partir du milieux infini, comme décrit dans le texte, pour se ramener à une seule interface entre deux milieux possédant une réfléctivité et transmitivité efficace.

Par commodité, on a choisi l'origine des phases pour chaque paire d'amplitudes sur la paroi inférieure de la couche. Les coefficients t_{21} et ρ_{21} sont la transmitivité et la réflectivité de l'interface dans le sens du passage $1 \rightarrow 2$, qui sont données dans le cas du champ électrique E_z par :

$$t_{21}^e = \frac{2\gamma_2/\varepsilon_1}{\gamma_2/\varepsilon_2 + \gamma_1/\varepsilon_1}, \quad \rho_{21}^e = \frac{\gamma_2/\varepsilon_2 - \gamma_1/\varepsilon_1}{\gamma_2/\varepsilon_2 + \gamma_1/\varepsilon_1}, \tag{2.9}$$

De la même façon, pour le champ H_z les coefficients s'écrivent :

$$t_{21}^h = \frac{2\gamma_2}{\gamma_2 + \gamma_1}, \quad \rho_{21}^h = \frac{\gamma_2 - \gamma_1}{\gamma_2 + \gamma_1}.$$
 (2.10)

On voit ainsi qu'en terme de coefficients de Fresnel, les coefficients (2.10) correspondent à la polarisation "classique" "TE" et les coefficients (2.9) correspondent à la polarisation "TM" [49].

L'empilement des couches est nécessairement délimité par un milieu semi-infini M. Soit ce milieu situé du côté inférieur de l'empilement (dans le sens des z négatifs), comme à la figure 2.3. On supposera qu'il n'y pas de champ rentrant dans le système, juste un champ sortant T_M se propageant vers le bas (nous serons souvent dans cette situation, vu que la source sera placée à l'intérieur du système). Alors les équations (2.8) fournissent les relations suivantes :

$$P_1 = \frac{1}{t_{1M}} \rho_{1M} T_M, \quad Q_1 = \frac{1}{t_{1M}} T_M, \quad P_1 = \rho_{1M} Q_1.$$
(2.11)

Maintenant en éliminant P_1 et Q_1 dans (2.8) on trouve les résultats :

$$P_2 = \frac{1}{T_{2M}} R_{2M} T_M, \quad Q_2 = \frac{1}{T_{2M}} T_M, \quad P_2 = R_{2M} Q_2, \tag{2.12}$$

avec les coefficients R_{2M} et T_{2M} fournis par :

$$R_{2M} = \frac{\rho_{21} + \rho_{1M} e^{2i\gamma_1 L_1}}{1 + \rho_{21}\rho_{1M} e^{2i\gamma_1 L_1}}, \quad T_{2M} = \frac{t_{21} e^{i\gamma_1 L_1} t_{1M}}{1 + \rho_{21}\rho_{1M} e^{2i\gamma_1 L_1}}.$$
(2.13)

Dans les équations (2.12) les amplitudes du champ dans la couche 1 n'interviennent plus. En revanche, on a fait apparaître dans les équations (2.12) et (2.13) des coefficients de réflexion R_{2M} et transmission T_{2M} entre la couche 2 et le substrat M : le milieu 1 est ainsi "éliminé" (voir figure 2.3). Les formules (2.13) sont clairement des lois de composition des coefficients optiques. On peut les utiliser pour éliminer itérativement toutes les couches de l'empilement entre le milieu infini M et une certaine couche i. Ce résultat sera très utile pour la suite ; par ailleurs cette démarche itérative se prête très bien à une implémentation numérique⁸.

2.2.3 Relation de dispersion et modes dans les systèmes multicouches

Soit un empilement des couches délimité en $z \to -\infty$ par le milieu semi-infini M_2 est en $z \to +\infty$ par le milieu semi-infini M_1 .

Appelons E l'amplitude du champ entrant du côté du milieu infini M_1 , alors l'amplitude sortante ou réfléchie S est donnée par :

$$S = R_{M1M2}E\tag{2.14}$$

avec R_{M1M2} la réflectivité efficace de l'empilement obtenue par la procédure itérative décrite dans le paragraphe précédent. Si le système supporte un mode propre, il doit exister indépendamment de l'excitation extérieure du système ; le champ entrant est alors nul : E = 0. Pour avoir un champ non nul dans le système (un champ sortant S non nul), il faut que la réflectivité R_{M1M2} diverge ; les modes propres sont ainsi fournis par les pôles de la réflectivité totale du système :

$$\frac{1}{R_{M1M2}} = 0 \tag{2.15}$$

La relation (2.15) fixe un lien (via les coefficients γ_j et ε_j qui y interviennent) entre le nombre d'onde dans le plan \mathbf{k}_p et la fréquence ω . Alors il fournit de manière implicite *la* relation de dispersion pour les différents modes supportés par le système multicouche.

Comme en général (2.15) fait intervenir des nombres complexes, on obtiendra une relation de dispersion complexe. Si on choisit (comme c'est souvent commode de faire) le vecteur \mathbf{k}_p comme paramètre réel, (2.15) fournira une fréquence complexe $\omega = \omega' + i\omega''$ dont la partie imaginaire ω'' est liée à l'absorption du mode dans le système.

L'équation (2.15) ne fixe pas les amplitudes (P_i, Q_i) dans les différentes couches. Cependant, on peut exprimer tous les couples (P_i, Q_i) à partir, par exemple, de l'amplitude du champ sortant S via des relations du type (2.12). Toutes les amplitudes sont alors proportionnelles à un seul paramètre arbitraire S, qui peut être fixé par une condition de normalisation appropriée du mode (voir par exemple 2.3.3). Le champ électromagnétique du mode est alors entièrement connu dans tout l'espace.

⁸Notons aussi que les lois (2.13) ont une interprétation physique simple en termes de réflexions multiples sur les interfaces.

Soit une couche *i* particulière de l'empilement. Éliminons toutes les couches intermédiaires à celle-la jusqu'aux milieux infinis M_1 et M_2 . En annulant les amplitudes entrantes dans ces milieux on obtient les équations suivantes :

$$0 = -R_{iM_1}Q_i + P_i (2.16)$$

$$0 = -R_{iM_2}P_i e^{i\gamma_i L_i} + Q_i e^{-i\gamma_i L_i}, (2.17)$$

qui constituent un système d'équations linéaire et homogène pour les amplitudes P_i et Q_i . Ce système possède une solution non-triviale si et seulement si son determinant est égal à zéro :

$$1 - R_{iM1}R_{iM2}e^{2i\gamma_i L_i} = 0. (2.18)$$

Ceci est une autre version de la relation (2.15). Elle possède une interprétation physique simple : l'amplitude totale du champ dans la couche *i* doit retrouver sa valeur après un aller-retour complet consistant en une réflexion sur la face supérieure de la couche (facteur R_{iM1}), propagation (facteur $e^{i\gamma_i L_i}$), réflexion sur la face inférieure (facteur R_{iM2}) et propagation (de nouveau facteur $e^{i\gamma_i L_i}$). Cette version s'avère utile pour l'analyse de rayonnement d'une source placée dans la couche *i* (voir le paragraphe 1.4.2).

Il est important de préciser que les équations (2.15) ou (2.18) fournissent des *modes liés* du système, ou encore les modes qui sont attachés aux interfaces. En effet, tous ces modes se propagent dans le plan des couches.

Pour la recherche numérique des modes propres de la cavité présentée dans le paragraphe suivant, on a utilisé l'équation (2.15), avec l'implémentation en C++ de l'algorithme de Newton-Raphson [62] dans sa version complexe.

2.2.4 Modes et absorption dans le mode fondamental de la cavité

Nous passons en revue les propriétés de dispersion des microcavités planaires. La structure de référence est une cavité constituée juste de miroirs métalliques parfaits et de diélectrique homogène d'indice n_1 . La relation de dispersion (2.18) avec $R_{1M1} = R_{1M2} = -1$ mène à l'équation suivante pour les modes propres du système :

$$2\gamma_1 L_1 = 2L_1 \sqrt{\varepsilon_1 \frac{\omega^2}{c^2} - \mathbf{k}_P^2} = 2\pi m, \qquad m \in \mathbb{N}$$
(2.19)

Le mode fondamental m = 0 qui n'existe qu'en polarisation TM est confondu avec le cône de lumière :

$$\omega' = \frac{c}{n_1}k, \qquad \omega'' = 0, \tag{2.20}$$

avec $k = |\mathbf{k}_p|$ Cette relation de dispersion est tout à fait remarquable, car indépendante de l'épaisseur L de la cavité. Le mode fondamental ainsi n'a pas de fréquence de coupure (voir aussi paragraphe 1.4.1).

Soit maintenant la structure plus réaliste de la figure 2.1, avec deux miroirs métalliques réels. Comme les métaux se comportent dans le domaine THz en métaux quasi-parfaits,



FIG. 2.4 – Image qualitative du mode plasmon-polariton dans les cavités avec couches de contact dopées, dû à l'interaction entre le mode TM fondamental de la cavité à miroirs métalliques et le plasma des électrons dans les couches dopées.

on peut s'attendre à une relation de dispersion très proche de (2.20). On a vérifié numériquement que ceci est vrai pour des cavités constituées de diélectriques non dopés et de métaux de Drude.

Cependant, la prise en compte des couches de contact change considérablement le mode. En effet, le plasma tridimensionnel des porteurs libres dans ces couches se comporte comme un oscillateur harmonique à la fréquence ω_P [63] ayant relation de dispersion plate :

$$\omega' = \omega_P \tag{2.21}$$

Comme ω_P pour des couches dopées est proche en valeur numérique des fréquences THz, une interaction par anti-croisement apparaît entre les porteurs libres et le mode fondamental TM₀. Physiquement, cette interaction est due au fait que le mode TM₀ possède une composante du champ électrique dans le sens de propagation, grâce à laquelle l'énergie du mode peut être échangée avec les porteurs libres [64]. Cette interaction ne peut pas avoir lieu avec le mode TE₀, car la composante du champ électrique est perpendiculaire au sens de propagation.

L'objet mixte obtenu ainsi est appelé *plasmon-polariton* [64]. Sa dispersion est décrite à la figure 2.4. L'interaction ouvre une bande interdite "plasmonique" dans la courbe de dispersion et sépare le mode en deux branches, que nous allons référer comme "branche inférieure" et "branche supérieure". Ce mode est analogue au mode plasmon qui existe sur l'interface entre diélectrique non-dopé et diélectrique dopé (ou diélectrique et métal). Cependant, dans ce dernier cas, la branche supérieure ne peut pas exister car elle correspondrait à un champ qui diverge à l'infini [65]. Elle existe pourtant pour le "plasmon de cavité" qu'on vient de décrire car le champ électromagnétique est confiné dans la cavité.

La branche inférieure possède une fréquence maximale approximativement égale à $\omega_P/\sqrt{2}$, qui est la fréquence du plasmon à l'interface entre les diélectriques dopé et non

dopé. La branche supérieure démarre en k = 0 pour une fréquence $\approx \omega_P$. La largeur du gap $\approx \omega_P (1 - 1/\sqrt{2}) \approx 0.3 \omega_P$ est ainsi proportionnelle à la racine carrée du dopage dans les couches.

Dans toute la suite les couches de contact seront supposées d'épaisseur $L_a = L_b = 300$ nm, avec un niveau de dopage variable.

A la figure 2.5(a), on a tracé les deux branches du polariton pour une cavité d'épaisseur $L = 1.85 \ \mu \text{m}$ et un niveau du dopage $C_a = C_b = 1.0 \times 10^{18} \ cm^{-3}$. Le gap plasmonique est $\approx 2 \text{ THz}$. La fréquence plasma des couches estimée avec la formule (2.3) est de 9.6 THz; ce qui confirme la description qualitative de la figure 2.4. La fréquence du plasmon de surface $9.6/\sqrt{2} \approx 6.8$ est un peu plus faible que le bord de bande de la branche inférieure.

A partir de la courbe de dispersion on obtient par une dérivation numérique la vitesse de groupe du mode $V_g = d\omega'/dk$. Le coefficient d'absorption en énergie α s'écrit alors [65] :

$$\alpha = \frac{-2\omega''}{V_g} \tag{2.22}$$

L'absorption dans les deux branches pour la cavité $L = 1.85 \ \mu m$ est tracée à la figure 2.5(b). Dans l'approximation (2.22) l'absorption optique du système diverge au voisinage du gap à cause de l'annulation de la vitesse de groupe V_q .

Lorsqu'on diminue le dopage, en accord avec la formule (2.3), la fréquence plasma diminue et le gap se déplace vers les basses fréquences, tout en se rétrécissant. On retrouve ainsi, à la limite $C_a, C_b \rightarrow 0$ le mode TM₀ fondamental de la cavité métallique simple sans dopage.

Inversement, lorsqu'on augmente le dopage le gap se déplace vers les hautes fréquences. Pour une fréquence de 3 THz le dispositif fonctionne toujours sur la branche inférieure, voilà pourquoi on n'étudiera que cette branche dans la suite. En plus, comme nous nous intéressons aux cavités à grand confinement, et donc de faibles épaisseurs, seul le mode fondamental sera présent.

Par éloignement du gap, l'augmentation du dopage à aussi pour effet de diminuer l'absorption sur la branche inférieure pour une fréquence donnée. Remarquons que pour les structures lasers habituelles, à cause de valeurs élevées du dopage $(3.0 - 5.0 \times 10^{18}$ $cm^{-3})$ le gap est assez loin du point de fonctionnement, habituellement situé autour de 2-3 THz. On a observé dans les simulations numériques que la réduction de l'épaisseur des couches de dopage a aussi pour effet de repousser le gap vers les hautes fréquences et de diminuer l'absorption.

Maintenant on s'intéressera à des propriétés du mode optique lorsque l'épaisseur de la cavité L change. A la figure 2.6(a) on a tracé l'absorption à 3 THz en fonction de l'épaisseur de la cavité pour quatres types de cavités : trois cavités confinées avec un niveau du dopage de $10 \times 10^{18} \ cm^{-3}$, $3.0 \times 10^{18} \ cm^{-3}$, $0.3 \times 10^{18} \ cm^{-3}$ et une cavité avec un dopage de $3.0 \times 10^{18} \ cm^{-3}$ dans laquelle le miroir inférieur est remplacé par un substrat de GaAs. On retrouve la variation de l'absorption avec le dopage discutée plus haut. Pour les cavités confinées, l'absorbtion suit une loi approximative $\alpha \propto L^{-1}$ pour les dopages modérés. La structure non confinée exhibe une absorption relativement faible, quasiment indépendante de l'épaisseur de la cascade. Le confinement du mode a donc pour effet une absorption accrue d'un ordre de grandeur.



FIG. 2.5 – (a) Résultat du calcul numérique, à partir de l'équation (2.15), de la courbe de dispersion du mode TM_0 de la cavité planaire décrite à la figure 2.1, avec $L = 1.85 \ \mu m$, $L_a = L_b = 0.3 \ \mu m$ et $C_a = C_b = 1 \times 10^{18} \ cm^{-3}$. Le caractère du mode plasmon-polariton est clairement visible. (b) Absorption dans les deux branches du mode plasmon-polariton, calculée numériquement à partir de la courbe de dispersion via l'équation (2.22)



FIG. 2.6 – (a) Absorption dans la branche inférieure du mode à 3 THz en fonction de l'épaisseur de la cavité, pour quatre cavités différentes : trois cavités confinées avec un niveau du dopage variable et un système sans confinement avec un dopage de 3.0×10^{18} cm⁻³. (b) Les variations respectives de l'indice de groupe.

Une autre quantité pertinente pour la suite (notamment pour le calcul de la puissance extraite de la cavité) est l'indice de groupe défini comme :

$$n_{eff} = c/V_g \tag{2.23}$$

Les variations de l'indice de groupe avec l'épaisseur L pour les quatre systèmes sont données à la figure 2.6(b). Pour la cavité dopée $0.3 \times 10^{18} \ cm^{-3}$, l'indice a des valeurs très importantes à 3 THz; en effet le point du fonctionnement du dispositif est sur la partie plate de la branche inférieure. Pour des dopages modérés l'indice varie faiblement avec l'épaisseur. A la limite $L \to \infty$ on retrouve l'indice d'un substrat non-dopé. Finalement, l'indice du système non-confiné est pratiquement celui du substrat pour ces fréquences comme on pouvait le supposer.

Pour valider notre modèle nous avons cherché à comparer les valeurs de l'absorption des dispositifs laser données dans les références [66], [60] et [67]. Les résultats sont résumés dans le tableau ci-dessous. Les grandeurs L, L_a et L_b sont les épaisseurs des différentes couches exprimées en microns et définies à la figure 2.1. Les grandeurs C_a et C_b sont les concentrations des porteurs dans les couches de contact exprimées en 10^{18} cm⁻³. Dans tous les dispositifs le miroir supérieur est supposé être un miroir d'or. La nature du miroir inférieur est donnée par la deuxième colonne.

Ref.	Miroir	L_a	C_a	L_b	C_b	L	$\omega/2\pi$	$\alpha \ cm^{-1}$	$\alpha \ cm^{-1}$
		μm		μm		μm	THz	(Ref.)	(Calc.)
[66]	Substrat GaAs	0,06	5,0	0,8	3,0	9,2	3,4	7,2	5,7
[60]	Miroir d'or	0,6	2,0	0,06	5,0	10,1	3,0	17,8	13,3
[67]	Miroir d'or	0,8	3,0	0,06	5,0	9,5	3,8	14,2	22,2

D'après les références citées, la valeur de l'absorption est calculée par des simulations FDTD dans une géométrie "en ridge". Dans notre modèle on ne prend pas en compte le confinement latéral du mode laser. Ceci pourrait expliquer les valeurs différentes issues des deux modèles, qui sont pour le moins en accord qualitatif.

2.3 Dipôle dans une cavité métallique avec couches de contact dopées

2.3.1 Champ rétro-réfléchi sur le site du dipôle

A présent nous considérons une source dipolaire située à l'intérieur d'un empilement de couches, comme à la figure 2.7. L'empilement des couches est délimité en $z \to -\infty$ par le milieu semi-infini M_2 est en $z \to +\infty$ par le milieu semi-infini M_1 , comme dans le paragraphe 2.2.3. La couche où se situe le dipôle sera "la couche 1" de constante diélectrique ε_1 et d'épaisseur L. Alors que la nature des autres couches de l'empilement est arbitraire, la couche 1 sera toujours considérée diélectrique et non-absorbante, d'indice réel $n_1 = \sqrt{\varepsilon_1}$. La distance entre la source et la face supérieure de la couche 1 est notée L_1 . On notera pour chaque polarisation u le champ électrique du dipôle se propageant vers le haut et d le champ se propageant vers le bas à partir du site du dipôle. Conformément à la discussion de 1.3.3 il s'agit d'un couple d'ondes planes. L'origine des phases pour ces ondes est choisi sur l'emplacement de la source.

Hormis le champ du dipôle, dans la couche 1 existe aussi le "champ réfléchi" caractérisé par le couple (P, Q). Physiquement, ce champ est engendré par les réflexions et transmissions multiples du champ de la source sur les couches de l'empilement.

Ainsi dans chacune des couches il y a un couple d'ondes planes contra-propagatives comme dans le paragraphe 2.2.2. Les conditions aux limites veillent à ce que le champ entrant par les milieux M_2 et M_1 soit nul; ceci entraîne les équations :

$$0 = -R_{1M_1}(P + ue^{i\gamma_1 L_1}) + Q \tag{2.24}$$

$$0 = -R_{1M_2}(Qe^{i\gamma_1L} + de^{i\gamma_1(L-L_1)}) + Pe^{-i\gamma_1L}$$
(2.25)

avec R_{1M_1} et R_{1M_2} les réflectivités entre le milieu 1 et les milieux M_1 et M_2 obtenues par la procédure décrite dans le paragraphe précédent. Ces équations se résolvent facilement pour les inconnues (P, Q); on obtient ainsi le champ réfléchi sur le site du dipôle :

$$Pe^{-i\gamma_{1}L_{1}} + Qe^{i\gamma_{1}L_{1}} =$$

$$\underline{uR_{1M_{1}}e^{2i\gamma_{1}L_{1}} + dR_{1M_{2}}e^{2i\gamma_{1}(L-L_{1})} + (u+d)R_{1M_{1}}R_{1M_{2}}e^{2i\gamma_{1}L}}{1 - R_{1M_{1}}R_{1M_{2}}e^{2i\gamma_{1}L}}$$

$$(2.26)$$

Nous allons nous intéresser à un dipôle perpendiculaire au couches ; conformément aux résultats généraux du chapitre 1 il faut calculer la composante E_z du champ réfléchi sur



FIG. 2.7 – Système multi-couche contenant une source dans la couche 1 d'épaisseur L_1 . Les milieux M_1 et M_2 sont infinis; le champ rentrant dans le système par ces milieux est nul. Les champs transmis dans les milieux M_1 et M_2 sont notés T_1 et T_2 .

le site du dipôle, déjà fournie par l'équation (2.26). Les équations (1.68) fournissent les amplitudes :

$$u = d = p \frac{i\mu_0 \omega^2}{8\pi^2 \gamma_1} \left(1 - \frac{\gamma_1^2}{\varepsilon_1 k_0^2} \right)$$
(2.27)

On peut montrer qu'en plus la composante du champ magnétique H_z est nulle dans ce cas là. Avant de donner le résultat sur l'émission spontanée, introduisons la notation :

$$\overline{R}(\gamma_1) = \frac{R_{1M_1}e^{2i\gamma_1L_1} + R_{1M_2}e^{2i\gamma_1(L-L_1)} + 2R_{1M_1}R_{1M_2}e^{2i\gamma_1L}}{1 - R_{1M_1}R_{1M_2}e^{2i\gamma_1L}}$$
(2.28)

Alors la modification du taux de l'émission spontanée (formule (1.64)) s'exprimera par l'expression intégrale :

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_{0cl}} = 1 + \frac{3}{4\pi n_1 k_0} \operatorname{Re} \int \overline{R} \frac{1 - \gamma_1^2 / \varepsilon_1 k_0^2}{\gamma_1} \mathrm{d}^2 \mathbf{k}_p$$
(2.29)

Par une série de changements de variables on peut réécrire la dernière formule sous la forme :

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_{0cl}} = 1 + \frac{3}{2n_1k_0} \operatorname{Re} \int_0^{n_1k_0} \overline{R}(\gamma_1)(1 - \gamma_1^2/\varepsilon_1k_0^2) \mathrm{d}\gamma_1 + \frac{3}{2n_1k_0} \operatorname{Im} \int_0^\infty \overline{R}(iv)(1 + v^2/\varepsilon_1k_0^2) \mathrm{d}v$$
(2.30)

La première intégrale dans (2.30) décrit la contribution des ondes radiatives du dipôle, alors que la seconde décrit la contribution des ondes évanescentes (voir la figure 1.2 du paragraphe 1.3.3).

La quantité $\overline{R}(\gamma_1)$ introduite par la formule (2.28) est proportionnelle au champ E_z rétroréfléchi sur le site du dipôle. D'après la formule (2.18) du paragraphe 2.2.3 cette quantité devient singulière pour les modes propres de système. Ainsi les modes propres introduisent des pôles dans l'intégrale (2.29) qui cumulent les principales contribution dans l'intégrale. Ceci est la raison mathématique pour laquelle dans le paragraphe 1.4.1 on a avait obtenu les mêmes résultat par le calcul classique et le calcul quantique du taux d'émission dans les modes.

On peut également calculer le diagramme du rayonnement du dipôle, c'est à dire la distribution de l'énergie rayonnée en fonction de la direction d'observation. On s'intéressera à l'énergie rayonnée dans le milieux M_1 . Le champ transmis T_{M_1} est donné par :

$$T_{M_1} = T_{1M_1}(P + ue^{i\gamma_1 L_1}) = T_{1M_1} \frac{1 + R_{1M_2} e^{2i\gamma_1 (L - L_1)}}{1 - R_{1M_1} R_{1M_2} e^{2i\gamma_1 L}} e_z e^{i\gamma_1 L_1},$$
(2.31)

avec T_{1M_1} le coefficient de transmission du milieu 1 vers le milieu M_1 . Ici on a introduit la notation :

$$e_z = p \frac{i\mu_0 \omega^2}{8\pi^2 \gamma_1} \left(1 - \frac{\gamma_1^2}{\varepsilon_1 k_0^2}\right),\tag{2.32}$$

qu'on utilisera dans la suite. Alors l'intensité rayonnée d*I* dans la direction $(\mathbf{k}_p, \gamma_{M_1})$, dans l'angle solide d Ω et dans le milieu M_1 s'écrit :

$$\frac{1}{\Phi} \frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}\Omega} =$$

$$\frac{3}{8\pi} \frac{|\mathbf{k}_p|^4}{\varepsilon_1^2 k_0^4} \left|\frac{\gamma_{M_1}}{\gamma_1}\right|^2 \left|T_{1M_1} \frac{1 + R_{1M_2} e^{2i\gamma_1(L-L_1)}}{1 - R_{1M_1} R_{1M_2} e^{2i\gamma_1 L}} e^{i\gamma_1 L_1}\right|^2.$$
(2.33)

On a normalisé cette expression par le flux de Poynting Φ rayonné par un dipôle classique dans le milieu M_1 :

$$\Phi = n_{M_1} P_{tot} \tag{2.34}$$

 P_{tot} étant donnée par l'expression (1.52) du paragraphe 1.3.1. Notons que l'équation (2.33) possède une signification physique seulement lorsque le milieu M_1 est un diélectrique non (ou faiblement) absorbant.

Les résultats obtenus dans ce paragraphe sont très généraux, car nulle part on n'a fait des hypothèses sur la nature des couches.

2.3.2 Couplage résonant avec le plasmon des couches dopées

Le calcul du taux d'émission par le champ rétro-réfléchi permet d'étudier en détail la voie de désexcitation par absorption d'un dipôle au voisinage d'une couche dopée. Le dispositif qu'on étudiera est celui de la figure 2.1 avec deux miroirs métalliques en or. Nous avons vu dans le paragraphe 1.4.2 que ce sont les ondes évanescentes, ou encore le champ proche du dipôle, qui sont les véhicules de cette voie. Alors dans l'équation (2.30) considérons uniquement la contribution du champ évanescent :

$$\frac{\Gamma_{evs}}{\Gamma_{0cl}} = \frac{3}{2n_1k_0} \operatorname{Im} \int_0^\infty \overline{R}(iv)(1+v^2/\varepsilon_1k_0^2) \mathrm{d}v$$
(2.35)

Supposons que le dipôle est très proche d'une des interfaces : $L_1 \ll L$. Effectuons le changement de variable $u = vL_1$, alors en négligeant les termes exponentiellement petits du type e^{-2uL/L_1} et $e^{-2u(L-L_1)/L_1}$ le coefficient \overline{R} de (2.28) s'écrit approximativement :

$$\overline{R} \approx R_{1M_1} e^{-2u} \tag{2.36}$$

Maintenant le coefficient R_{1M_1} s'écrit, à l'aide des lois de composition du paragraphe 2.2.2 :

$$R_{1M_1} = \frac{\rho_{1a} + \rho_{aM_1} e^{2i\gamma_a L_a}}{1 + \rho_{1a}\rho_{aM_1} e^{2i\gamma_a L_a}}$$
(2.37)

Pour L_1 très petit on a $\gamma_a \approx \gamma_1 \approx iu/L_1$. En supposant que $L_1 \ll L_a$ le terme en exponentielle sera négligeable et seul le coefficient ρ_{1a} restera dans la formule (2.37). Avec les valeurs approximatives des coefficients γ_a et γ_1 , et les formules (2.9), on obtient :

$$R_{1M_1} \approx \rho_{1a} \approx \frac{\varepsilon_a - \varepsilon_1}{\varepsilon_a + \varepsilon_1} \tag{2.38}$$

L'integrale (2.35) est alors triviale, et on peut donner le taux d'émission dans une forme explicite :

$$\frac{\Gamma_{evs}}{\Gamma_{0cl}} \approx \frac{3}{8} \frac{1}{(n_1 k_0 L_1)^3} \operatorname{Im} \left(\frac{\varepsilon_a - \varepsilon_1}{\varepsilon_a + \varepsilon_1}\right)$$
(2.39)

Dans cette dernière expression on reconnaît la partie imaginaire de la réfléctivité $\text{Im}\rho_{1a}$ de l'interface, ce qui suggère le mécanisme évoqué par l'équation (1.77). Avec la constante diélectrique du modèle de Drude (2.1) on peut obtenir le taux en fonction de la fréquence ω :

$$\frac{\Gamma_{evs}}{\Gamma_{0cl}}(\omega) \approx \frac{3}{16} \frac{c^3}{n_1^3 L_1^3} \frac{\delta \omega_p^2 / \omega^2}{(\omega^2 - \omega_p^2 / 2)^2 + \delta^2 \omega^2}$$
(2.40)

On a posé ici $\delta = 1/\tau$; ω_p est la fréquence plasma de la couche dopée selon la formule (2.2) et c est la vitesse de la lumière dans le vide. Les formules (2.39) et (2.40) ont déjà été établies dans le cas des molécules fluorescentes au voisinage des surfaces métalliques [43]. La formule (2.40) montre en particulier que le taux d'émission spontanée dans les ondes évanescentes est directement proportionnel à l'absorption (coefficient δ de la couche). En



FIG. 2.8 – (a) Variations du Taux de l'Emission Spontanée (TES) en fonction de la position du dipôle à l'intérieur d'une cavité d'épaisseur $L = 10 \ \mu m$, pour le cas d'une cavité avec couches dopées de $5 \times 10^{18} \ cm^{-3}$ (rouge) et d'une cavité sans dopage (bleu). La fréquence d'émission est 15 THz, correspondant à la fréquence du plasmon d'interface $\omega_P/(2\pi\sqrt{2})$. (b) Dans cette figure le dipôle est placé à l'interface entre les couches dopée et non-dopée. Dans le graphique principal les variations du TES en fonction de la fréquence sont représentées pour un dopage $5 \times 10^{18} \ cm^{-3}$. Un maximum clair à 15 THz est visible. Sur la figure secondaire on a tracé les fréquences du maximum pour différents niveaux de dopage. Les points se situent parfaitement sur la courbe $f_p = \omega_P/(2\pi\sqrt{2}) = 6.8\sqrt{C_a}$ dérivée à partir de l'équation (2.3).

outre il a un caractère résonant, la fréquence de résonance étant la fréquence de saturation $\omega_p/\sqrt{2}$ du plasmon d'interface entre les couches dopée et non-dopée.

Pour illustrer ces effets numériquement on a calculé le taux d'émission spontanée (TES) d'après la formule (2.30) dans une cavité d'épaisseur $L = 10 \ \mu m$, avec des couches dopées d'épaisseur 300 nm et pour différents niveaux de dopage. A la figure 2.8(a) on a comparé le TES en fonction de la position du dipôle à l'intérieur de la cavité, pour le cas d'un dopage de $5 \times 10^{18} \ cm^{-3}$ et le cas sans dopage. La fréquence est de 15 THz, avoisinant la fréquence de résonance du plasmon à l'interface entre les couches dopée et non-dopée. Dans le cas avec dopage, un très fort accroissement du TES est observé lorsque le dipôle est très proche de la couche dopée, indiquant le couplage avec les plasmons de surface. A la figure 2.8(b) le dipôle est placé à l'interface entre la couche dopée et non dopée, et on trace TES en fonction de la fréquence pour différents dopages. Les courbes présentent des résonances très marquées, dont les fréquences sont très voisines des fréquences plasmon $\omega_p/\sqrt{2}$ pour les dopages correspondants. Les faibles différences proviennent des effets géométriques de confinement dans la cavité.

Ces effets deviennent très marqués dans des cavités de taille comparable à l'extension des plasmons d'interface, comme montré à la figure 2.9(a). Dans cette figure, le dipôle est placé à l'interface entre le diélectrique et l'une des couches de contact de dopage 3×10^{17} cm^{-3} . La fréquence du plasmon de surface est de $\omega_p/\sqrt{2} \approx 2\pi \times 3.7$ THz. On diminue progressivement l'épaisseur de la cavité L. Pour des épaisseurs $L \geq 0.2\mu m$ les courbes



FIG. 2.9 – (a) Le dipôle est toujours placé à l'interface entre les couches non-dopée et dopée, de dopage 0.3×10^{17} cm⁻³ (fréquence du plasmon $f_p = \omega_P/(2\pi\sqrt{2}) = 3.5$ THz). Le TES en fonction de la fréquence est tracé pour différentes épaisseurs. (b) Les fréquences des maxima du TES sont tracées en fonction de l'épaisseur L. Un dédoublement apparaît pour $L < 0.2 \ \mu m$: pour cette épaisseur la dégénérescence (due à la symétrie de la cavité) des plasmons localisés sur les deux interfaces est levée.

de TES sont indépendantes de l'épaisseur et restent centrées autour de la fréquence de résonance 3.7 THz. Cependant, pour de très faibles épaisseurs, le couplage évanescent entre les plasmons confinés à chaque interface devient de plus en plus important et la résonance unique est scindée en deux, comme on peut le constater sur la figure 2.9(b).

Dans les résultats numériques qu'on vient de décrire on s'est finalement servi du dipôle comme d'une sonde pour le champ du mode de la cavité. Ils ne sont pas sans rappeler les expériences réelles dans le domaine du visible, dans lesquelles des molécules fluorescentes ou nano-pointes métalliques sondent le champ proche autour de nano-objets diélectriques ou métalliques [44].

2.3.3 Taux d'émission spontanée modal

Dans ce paragraphe nous allons expliquer le calcul du taux d'émission spontanée dans un mode du champ. Le but est d'adapter le calcul présenté au chapitre 1 en tenant compte des particularités du mode optique et de l'absorption. Rappelons que l'expression donnée par le règle d'or de Fermi est :

$$\Gamma_{mode} = \frac{2\pi}{\hbar} |\mathbf{p}\mathbf{E}|^2 \rho(\hbar\omega) \tag{2.41}$$

avec $\rho(\hbar\omega)$ la densité d'états photonique du système, **E** le champ du mode sur le site du dipôle normalisé de manière appropriée (voir plus bas) et \hbar la constante de Planck.

Densité d'états

Le premier ingrédient dans la formule (2.41) est la densité d'états $\rho(\hbar\omega)$. Comme les modes qu'on considère sont bidimensionnels, en notant par S la surface de quantification, la densité d'états peut être exprimé comme :

$$\rho(\hbar\omega) = \frac{S}{4\pi^2\hbar} \int_0^\infty \delta(\omega - f(k)) 2\pi k dk = \frac{S}{4\pi\hbar} \frac{dk^2}{d\omega}$$
(2.42)

Ici $\delta(x)$ est la fonction delta de Dirac. La connaissance de la relation de dispersion $\omega = f(k)$ permet alors de calculer simplement la quantité (2.42) par une dérivation numérique.

La quantité (2.42) est inversement proportionnelle à la vitesse de groupe $V_g = d\omega/dk$ du mode. Or sur la figure (2.5) on voit que la vitesse de groupe s'annule sur la bande interdite photonique plasmonique du mode, et donc la densité d'états diverge, ainsi que le taux d'émission spontanée. Conformément à la référence [38] (voir aussi la remarque à la fin du paragraphe 1.2.2) les hypothèses usuelles de couplage faible ne doivent plus être valables au voisinage de ce point.

Considérons maintenant les points dans la partie linéaire de la branche inférieure du mode. On tentera de prendre en compte l'absorption dans le mode. Rappelons que la fréquence d'un mode avec absorption $\omega = \omega' + i\omega''$ est complexe. Ainsi, dans l'expression (2.42) il faut prendre non plus un delta de Dirac mais plutôt une lorentzienne de largeur à mi-hauteur $2|\omega''|$. Notons par k_{max} le vecteur d'onde pour lequel la vitesse de groupe du mode V_g s'annule. La densité d'états s'écrit alors :

$$\rho(\omega'(\bar{k})) = \frac{S}{4\pi^2\hbar} \frac{1}{|\omega''(\bar{k})|} (\int_0^{k_{max}} + \int_{k_{max}}^\infty) \frac{k dk}{1 + \frac{(\omega'(k) - \omega'(\bar{k}))^2}{4|\omega''(\bar{k})|^2}}$$
(2.43)

L'intégrale exprimée en fonction du vecteur d'onde \bar{k} correspondant à la fréquence $\omega = \omega' + i\omega'' = f(\bar{k})$, plutôt que de la fréquence elle même. On a coupé le domaine de l'intégration en deux parties par k_{max} pour garder des fonctions univoques sous le signe d'intégration. L'intégrale entre k_{max} et l'infini est effectuée dans un domaine de fréquences très serré autour du gap, avec des vitesses de groupe très faibles. C'est la partie divérgente de la densité d'états. Comme nous nous intéressons aux fréquences sur la partie linéaire de la branche, on ne gardera que la contribution finie entre 0 et k_{max}^9 .

A cause de la symétrie par réflexion dans le plan Oxy des systèmes multicouches, la fréquence ω est une fonction de k^2 plutôt que de k. En effet, les réflectivités introduites dans les paragraphes précédents ne dependent que du k^2 car les deux directions de propagation $\pm k$ sont dégénérées. On peut alors faire le développement limité suivant :

$$\omega'(k) \approx \omega'(\bar{k}) + \frac{\mathrm{d}\omega'}{\mathrm{d}k^2} \Big|_{\bar{k}} (k^2 - \bar{k}^2)$$
(2.44)

⁹On peut remarquer que la densité d'état (2.42) est "locale", i.e. ne dépend que du point sur la courbe de dispersion auquel on s'interesse, et son voisinage immédiat. Ceci est valable sur la partie linéaire de la branche, mais n'est plus valable dans les zones de faible V_g . Or, pour les points de densité d'états "locale" il suffit de garder la première intégrale

Notons $\xi = d\omega'/dk^2|_{\bar{k}}$, alors l'intégrale (2.43) peut maintenant être évaluée explicitement :

$$\rho(\bar{k}) = \frac{S}{4\pi\hbar} \frac{1}{\xi\pi} \left(\arctan \frac{\xi \bar{k}^2}{2|\omega''|} + \arctan \frac{\xi (k_{max}^2 - \bar{k}^2)}{2|\omega''|} \right)$$
(2.45)

Dans le cas d'une branche sans coupure, on obtient simplement dans la limite $k_{max} \rightarrow \infty$:

$$\rho(\bar{k}) = \frac{S}{4\pi\hbar} \frac{1}{\xi\pi} \left(\arctan \frac{\xi \bar{k}^2}{2|\omega''|} + \frac{\pi}{2} \right)$$
(2.46)

Les expressions (2.45) et (2.46) possèdent toutes les bonnes propriétés : elles sont majorées par l'expression sans pertes (2.42), vers laquelle elles tendent lorsque $|\omega''| \to 0$. En fait, numériquement on obtient des valeurs très proches de (2.42) quelle que soit la cavité et loin du gap, en raison du faible valeur de ω'' .

Normalisation du mode

Le second ingrédient de l'équation (2.41) est le champ électrique **E** du mode qui doit être normalisé de manière convenable. Notons par W(z) la densité d'énergie du champ électromagnétique, alors il faut normaliser le champ de telle manière que l'énergie totale du mode soit égale à une fluctuation du vide :

$$S \int_{-\infty}^{\infty} W(z) dz = \frac{\hbar\omega}{2}$$
(2.47)

Pour calculer la grandeur W(z) dans le système multicouche, on commence par l'exprimer en fonction de la composante E_z du champ électrique dans chaque couche. On va distinguer le cas des couches avec un dopage négligeable (les couches dopées $\leq qq10^{16}$ cm^{-3}) de celui des couches dopées. Pour les premières on utilisera l'expression classique de la densité d'énergie électromagnétique dans un milieu diélectrique d'indice ε_1 :

$$W(z) = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_1}{2} |\mathbf{E}|^2 + \frac{\mu_0}{2} |\mathbf{H}|^2 = \frac{\varepsilon_0}{2} |E_z|^2 \left\{ \varepsilon_1 \left(1 + \frac{|\gamma_1|^2}{k^2} \right) + \frac{\varepsilon_1^2 k_0^2}{k^2} \right\}$$
(2.48)

Dans la dernière égalité on a utilisé les formules (2.6) pour exprimer toutes les composantes du champ en fonction du E_z^{10} . Nous avons utilisé la représentation dans laquelle la grandeur $k = |\mathbf{k}_p|$ est réelle et la fréquence ω et, par conséquent, la grandeur γ_1 , sont complexes.

Pour les couches dopées qui peuvent être fortement absorbantes et dispersives il n'existe pas, à priori, d'expression pour la densité de l'énergie électromagnétique [49]. Une estimation de la grandeur W(x) peut être donnée lorsqu'on ne garde que les propriétés de dispersion du plasma de porteurs, en écrivant la constate diélectrique sous la forme :

$$\varepsilon(\omega) \approx \varepsilon_{\infty} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right)$$
(2.49)

 $^{^{10}}$ Rappelons que $H_z=0$ pour le dipôle vertical.

2.3. Dipôle dans une cavité métallique avec couches de contact dopées

Dans ce cas là, une grandeur ayant signification d'une densité d'énergie peut être donnée sous la forme :

$$W(z) = \frac{\varepsilon_0}{2} |E_z|^2 \left\{ \left(\frac{\mathrm{d}\omega\varepsilon(\omega)}{\mathrm{d}\omega} + \varepsilon_\infty \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right) \left(1 + \frac{|\gamma_1|^2}{k^2} \right) + \frac{|\varepsilon(\omega)|^2 k_0^2}{k^2} \right\}$$
(2.50)

Le premier terme entre les accolades dans (2.50) est la densité d'énergie dans un milieu dispersif comme donné par la référence [49]. Le second terme (proportionnel à $\varepsilon_{\infty}\omega_p^2/\omega^2$) est la densité volumique de l'énergie cinétique des porteurs constituant le plasma. Le troisième terme est la densité d'énergie du champ magnétique. On observe numériquement que pour les cavités suffisamment larges l'énergie calculée à partir de (2.50) est négligeable devant l'énergie totale dans les couches diélectriques non dopées. Cependant, pour les fréquences proches du gap plasmonique du mode et pour des cavités de faible épaisseur, la quantité (2.50) acquiert un poids important dans l'énergie totale du mode.

La densité d'énergie dans le métal est prise comme nulle.

Quelle que soit la couche, la densité d'énergie est proportionnelle à $|E_z|^2$:

$$W(z) = \frac{\varepsilon_0}{2} \Pi(z) |E_z|^2 \tag{2.51}$$

avec $\Pi(z)$ un coefficient qui dépend de la couche. Comme dans 2.2.2, le champ électrique E_z dans la couche i est :

$$E_z = P_i e^{i\gamma_i z} + Q_i e^{-i\gamma_i z}, \qquad (2.52)$$

les grandeurs P_i et Q_i dans les différentes couches étant reliées par des relations du type (2.8). Dans ce calcul les grandeurs γ_i , ainsi que les différents coefficients de réflexion et transmission doivent être calculés pour la valeur particulière de la fréquence complexe obtenue à partir la relation de dispersion. Introduisons la notation :

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \Pi(z) |E_z|^2 \mathrm{d}z \tag{2.53}$$

Alors la formule finale qui fournit le taux d'émission spontanée dans le mode d'après le règle d'or de Fermi est, pour le dipôle placé au point z_0 dans la couche diélectrique d'indice n_1 :

$$\frac{\Gamma_{mode}(z_0)}{\Gamma_0} = \frac{3}{2n_1} \frac{|E_z|^2(z_0)}{Ik_0^3} \frac{\omega'}{\xi} \Big(\arctan\frac{\xi \bar{k}^2}{2|\omega''|} + \arctan\frac{\xi (k_{max}^2 - \bar{k}^2)}{2|\omega''|} \Big)$$
(2.54)

C'est cette dernière expression qu'on a utilisée pour le calcul du taux modal présenté dans le paragraphe 1.4.1. Le language C++ permet une implémentation numérique de la relation (2.54) par un codage assez compact.

Une généralisation, et plus de détails sur le calcul du taux modal sont fournis dans l'annexe A.

2.4 Variations de l'émission spontanée avec les paramètres de la cavité planaire

On étudie dans cette partie la variation du taux de l'émission spontanée pour dispositifs THz avec des paramètres qui sont accessibles par les techniques de fabrication actuelles. On examinera l'effet de variation de l'épaisseur du dispositif et du niveau de dopage dans les couches de contact. Rappelons que l'épaisseur de la couche active est proportionnelle au nombre de périodes N de la cascade.

Pour abréger, on appellera le taux obtenu par le calcul classique "taux global". Le critère de pertinence pour les calculs numériques qu'on présente est que le taux global, qui intègre toutes les voies de désexcitation possibles, soit supérieur au taux modal.

2.4.1 Taux d'émission global et taux d'émission dans le mode fondamental

Nous considérons à présent une cavité d'épaisseur $L = 1.85 \ \mu m$, et des couches de contact d'épaisseur 0.3 μm et de dopage $1.0 \times 10^{18} cm^{-3}$.

A la figure 2.10(a) on a tracé, pour une fréquence de 3 THz, les variations du taux modal dans le mode TM_0 et du taux total en fonction de la position du dipôle à l'intérieur de la cavité. Seul le mode TM_0 existe dans la cavité pour cette fréquence. Le taux modal (en rouge) ne dépend quasiment pas de la position du dipôle, car la distribution du champ électromagnétique est uniforme pour le mode fondamental. En revanche, le taux global (en bleu) varie fortement avec la position. Le taux global reste nettement supérieur au taux modal, de plusieurs ordres de grandeurs lorsque le dipôle est proche des couches dopées. La première conclusion est alors que seule une fraction très minoritaire de l'énergie du dipôle est couplée au mode de la cavité ¹¹. Le mécanisme d'émission dominant dans le domaine THz est alors la perte non-radiative d'énergie vers les plasmons des couches dopées.

On place à présent le dipôle au centre de la cavité. A la figure 2.10(b) on a tracé les variations des différents taux en fonction de la fréquence d'émission. Pour le taux global (en bleu) on retrouve l'aspect discuté précédemment, notamment le pic correspondant au plasmon d'interface. Le taux d'émission dans le mode TM_0 , (en rouge) s'annule complètement pour les fréquences dans le gap plasmonique. Le gap débute approximativement à la fréquence correspondant au plasmon d'interface. Le taux modal croît ensuite lorsque la fréquence décroît, i.e. lorsque la longueur d'onde croît (et donc le rapport L/λ diminue). A partir d'une fréquence de 35 THz l'émission du mode TM_2 apparaît (en vert). L'émission dans le mode TM_1 est nulle au centre de la cavité, car cette position correspond à un nœud du champ.

Nous passons ensuite à l'étude des variations du taux d'émission en fonction de l'épaisseur de la cavité. Le dipôle est toujours placé au centre. Pour rendre la discussion plus concrète, on étudie la cascade quantique décrite dans la référence [55] dont la période vaut 92.5 nm. En figure 2.11(a) on a tracé d'une part les taux d'émission globaux (symboles et traits minces) et d'autre part les taux d'émission modaux (symboles et traits gras) en

¹¹Remarquons que cette conclusion s'applique en régime d'émission spontanée. En cas de régime laser, l'énergie du mode est nettement supérieure à cause du mécanisme de gain sur le mode.



FIG. 2.10 – (a) Cavité d'épaisseur $L = 1.85 \ \mu m$, dopage des couches de contact $1.0 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$. Le taux d'émission global (bleu) et modal (rouge) sont tracés en fonction de la position du dipôle, pour une fréquence d'émission de 3 THz. (b) Le dipôle est placé au centre de la cavité. Les différents taux d'émission sont tracés en fonction de la fréquence.



FIG. 2.11 - (a) Taux d'émission total (courbes en pointillé) et modal (courbes continues) en fonction du nombre des périodes N dans la cascade, pour les trois valeurs du dopage.
(b) La dérivée (2.56) en fonction du nombre des périodes N dans la cascade.

fonction du nombre des périodes N dans la cascade pour trois valeurs du dopage dans les couches de contact : $0.3 \times 10^{18} \ cm^{-3}$, $3.0 \times 10^{18} \ cm^{-3}$ et $10.0 \times 10^{18} \ cm^{-3}$. La fréquence de l'émission est de 3 THz. Avec l'échelle double logarithmique choisie pour la représentation, la courbe des variations du taux modal apparaît proche d'une droite, ce qui suggère une loi de puissance :

$$\Gamma_{mode} \propto N^{-\beta}$$
 (2.55)

Pour determiner l'exposante β , sur la figure 2.11(b) on a tracé la dérivée :

$$-\frac{\mathrm{d}\ln\Gamma_{mode}}{\mathrm{d}\ln N}\tag{2.56}$$

pour les trois valeurs de dopage respectives.

Pour des cavités suffisamment épaisses (N > 20), la figure 2.11(b) donne un exposant $\beta = 1$, quel que soit le dopage. On retrouve le résultat établi dans le paragraphe 1.4.1 : le taux d'émission spontanée modal est inversement proportionnel à la largeur de la cavité (le nombre des périodes de la cascade) pour les cavités suffisamment épaisses. Dans ce régime, les taux modaux pour les trois dopages sont confondus (figure 2.11(a)), le taux modal n'est alors pas très différent de celui du mode TM₀ fondamental d'une cavité non-dopée. Alors que pour les dopages $3.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $10.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ on trouve des taux similaires, le taux modal est sensiblement plus grand pour le dopage $0.3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et pour les cavités de faible largeur. La raison est que pour cette valeur de dopage la fréquence 3 THz se trouve au voisinage de la bande interdite plasmonique, qui est une zone de forte densité d'états car sa dispersion est plate.

La figure 2.11(a) compare également les taux globaux et modaux pour les différents dopages. Les taux globaux sont confondus avec les taux modaux au centre de la cavité pour des larges cavités (N > 20). L'écart entre le taux global est le taux modal diminue lorsque le dopage augmente. En effet, l'augmentation du dopage écarte la bande interdite photonique de la fréquence de 3 THz et le couplage résonant avec le plasmon d'interface est réduit. Le taux global est supérieur au taux modal, à l'exception de la cavité de très faible taille (N = 1) pour le dopage $0.3 \times 10^{18} \ cm^{-3}$. Ceci n'est pas étonnant car la bande interdite de cette cavité est très proche da la fréquence de fonctionnement. Or nous avons vu que les hypothèses usuelles de couplage faible ne sont plus valables dans ce régime.

2.4.2 Puissance extraite de la cavité

Pour mettre en évidence les effets de confinement sur l'émission spontanée, le seul moyen expérimental à ce jour serait d'étudier la puissance extraite des cavités en fonction de leur épaisseur. Nous considérons ici l'extraction sur le bout de la cavité (configuration du laser "ridge"). La puissance extraite est dans cette configuration véhiculée par le mode guidé à l'intérieur de la cavité. Conformément aux références [68], [55] ainsi que les résultats de l'annexe B on peut écrire la puissance de l'électroluminescence extraite d'une cascade de N périodes sous la forme :

$$P_{out} = \frac{T}{\alpha l} \frac{\Gamma_{mode}}{\Gamma_{nr}} \frac{I}{e} N \hbar \omega$$
(2.57)

avec I le courant électrique traversant la structure, e la charge de l'électron, et $\hbar \omega$ l'énergie du photon émis. Γ_{nr} est le taux des transitions non-radiatives, α est le coefficient d'absorption par unité de longueur et l la longueur de la cavité. Le coefficient T est le coefficient de transmission par la facette, dérivé dans l'annexe B :

$$T = \frac{2}{n_{eff}} \frac{\pi w}{\lambda} \tag{2.58}$$

avec n_{eff} l'indice de groupe et w la largeur de la facette.

Faisons alors une estimation numérique de la puissance. Soit un dispositif à cascade d'une longueur typique de $l = 100 \ \mu m$, parcouru par un courant $I = 100 \ mA$, émettant à une longueur d'onde $\lambda = 100 \ \mu m$ (fréquence de 3 THz). Comme on avait vu dans le paragraphe 1.5, le temps typique des transitions non-radiatives est à l'échelle de la picoseconde : $\Gamma_{nr} \approx 10^{12} \ s^{-1}$, alors que le temps d'électroluminescence est à l'échelle de la microseconde : $\Gamma_0 \approx 10^6 \ s^{-1}$. En écrivant le rapport $\Gamma_{mode}/\Gamma_{nr} = (\Gamma_{mode}/\Gamma_0)/(\Gamma_{nr}/\Gamma_0)$, on a l'expression numérique suivante pour la puissance :

$$P_{out} = 1.2 \frac{T}{\alpha l} \frac{\Gamma_{mode}}{\Gamma_0} N \qquad (nW)$$
(2.59)

A la figure 2.12(a) on a tracé la puissance en fonction du nombre de périodes, en double échelle logarithmique, pour les trois valeurs de dopage dans les couches de contact. Sur ce graphique la dépendance $P_{out}(N)$ apparaît comme une droite, on peut alors supposer une loi de puissance $P_{out} \propto N^{\beta}$. L'exposant β est fournie par la dérivée :

$$d\ln P_{out}/d\ln N \tag{2.60}$$

qui est tracée à la figure 2.12(b) en fonction de N dans les cas sans $(\Gamma_{mode}/\Gamma_0 = 1)$ et avec modification de l'émission spontanée par effets de confinement.


FIG. 2.12 - (a) Puissance extraite de la cavité en fonction de l'épaisseur pour les trois niveaux du dopage telle que fournie par la formule (2.59). (b) La dérivée (2.60) pour les trois dopages. On a comparé le cas ou il n'y a pas de modification de l'émission spontanée (petits symboles) avec le cas de modification (grands symboles), calculé par le modèle du paragraphe 2.3.3.

Un exposant $\beta = 3$ est observé dans le cas sans modification, alors qu'un exposant $\beta = 2$ est obtenu dans le cas avec modification. Ces valeurs ont une interprétation simple à partir de la formule 2.59 : le coefficient d'absorption diminue comme l'inverse de la largeur de la cavité $\alpha \propto 1/L \sim 1/N$ (figure 2.6(a)), alors que le coefficient d'extraction T est proportionnel à la largeur de la cavité $T \propto L \sim N$, ce qui donne avec le facteur N une puissance globale $\beta = 3$ dans le cas sans modification du TES. Dans le cas TES modifié, à cause de la dépendance $\Gamma_{mode} \propto N^{-1}$ (figure 2.11(a),(b)) la puissance extraite croît plus lentement avec le nombre de périodes, ce qui donne un exposant global $\beta = 2$. Pour des cavités de faible épaisseur ces exposants sont modifiés, car alors l'indice de groupe du mode n_{eff} intervenant dans la formule (2.58) commence à dépendre sensiblement de l'épaisseur (voir la figure 2.6(b)).

On arrive à la conclusion que l'étude de la puissance extraite sur la facette en fonction du nombre de périodes, notamment de la dérivée logarithmique de la puissance (2.60), constitue un moyen expérimental de vérifier la modification du taux de l'émission spontanée par l'effet du confinement. D'après les résultats graphiques (figure 2.12(b)) une telle étude doit être menée pour des cavités suffisamment épaisses pour que la dérivée (2.60) varie en fonction de N de manière régulière. Cependant, la cavité ne doit pas être trop épaisse, car des modes d'ordre supérieur peuvent alors exister. Le domaine d'étude pour les cavités planaires est ainsi limité à $10 \le N \le 100$, soit des valeurs accessibles expérimentalement¹².

Des figures 2.12(a) et 2.11(a) on remarque que la puissance extraite pour le dopage

¹²Une étude analogue pourrait être menée pour des cavités de même épaisseur mais un dopage variable dans les couches de contact. Le couplage avec les plasmons peut être ainsi mis en évidence. Cependant, d'après la figure 2.12(b), les cavités fonctionnant à une fréquence proche de celle du plasmon d'interface seraient très pénalisées en terme de puissance extraite.



FIG. 2.13 – (a) Variation du TES avec la fréquence pour une cavité sans confinement d'épaisseur $L = 1.85 \ \mu m$. Une seule branche est présente, limitée en fréquence par la condition $V_g = d\omega/dk = 0$. (b) Comparaison entre les taux modaux dans les cavités confinée et non-confinée en fonction de l'épaisseur de la cavité. La fréquence d'émission est 3 THz.

 $0.3 \times 10^{18} \ cm^{-3}$ est inférieure à celle obtenue pour les autres valeurs du dopage, alors que le taux d'émission spontanée est nettement supérieur. En fait, l'effet du taux modal sur la puissance extraite par le bout du dispositif de faible nombre de périodes est contré par une absorption très accrue à cause du voisinage de la fréquence du plasmon.

L'autre effet pénalisant sur la puissance extraite lorsqu'on diminue l'épaisseur, quel que soit le dopage, est la réduction du coefficient de transmission (2.58). C'est pour cette raison qu'on a envisagé l'extraction par la surface du dispositif par un réseau de diffraction, décrite dans le chapitre suivant.

2.4.3 Cas d'une cavité sans confinement

Nous allons conclure ce chapitre avec une brève comparaison entre le cas d'une cavité confinée et une structure sans confinement par miroir inférieur. Le dipôle est placé toujours au centre de la zone active. Le dopage dans les couches de contacts est de $3 \times 10^{18} \ cm^{-3}$. Le miroir inférieur est remplacé par un substrat de GaAs d'indice n = 3.6 par rapport à la figure 2.1. L'épaisseur de la cascade est $L = 1.85 \ \mu m$, correspondant à N = 20 périodes pour la structure de [55].

A la figure 2.13(a) les variations du taux d'émission spontanée sont tracées en fonction de la fréquence. Le mode guidé présente une seule branche, limitée en fréquence par la condition $V_g = 0$ (voir paragraphe 2.3.3). Des valeurs assez faibles du taux d'émission sont observées ($\Gamma_{mode}/\Gamma_0 \approx 2$ au maximum).

La différence entre les taux modal et total provient, comme pour le cas avec confinement, du couplage avec le plasma des porteurs libres. Cette voie est visible par le pic du taux global autour de 12 THz, qui est approximativement la fréquence du plasmon pour ce dopage. Mais ce couplage seul ne suffit pas pour rendre compte des différences, comme



FIG. 2.14 - (a) Comparaison entre les puissances extraites de deux cavités avec et sans confinement. (b) La dérivée (2.60) en fonction du nombre des périodes de la cascade dans les cas avec et sans modification du TES, pour la structure non-confinée.

c'était le cas pour la cavité confinée. En effet, dans le cas de la configuration avec un seul miroir métallique, une voie supplémentaire de nature "triviale" existe. Ce sont simplement les ondes *radiatives* issues du dipôle qui emportent son énergie à l'infini $(z \to -\infty)$ directement, ou après une réflexion sur le miroir métallique. Cette voie doit en effet être ici majoritaire, comme le montrent les faibles valeurs du taux modal.

A la figure 2.13(b) les variations du taux modal avec l'épaisseur dans les cas avec et sans confinement sont comparées, pour le même niveau du dopage. La cavité confinée fournit un taux plus important par rapport aux cas sans confinement. En effet, le champ électromagnétique étant délocalisé du côté du substrat, l'intensité normalisée du champ vue par le dipôle est plus faible dans le cas sans confinement. En plus, plutôt que d'avoir un comportement singulier du type $\Gamma_{mode} \propto N^{-1}$ (courbe en bleu), le taux (en rouge) ne varie quasiment pas avec l'épaisseur, et ces valeurs restent proches de l'espace libre quel que soit l'épaisseur de la cascade.

Quant à la puissance extraite par la facette de la cavité P_{out} , elle est fournie aussi par l'expression (2.59), mais en l'absence du confinement le coefficient de transmission peut être pris égal à celui d'une interface semi-infinie (voir l'annexe B) :

$$T \approx \frac{4n_{eff}}{(1+n_{eff})^2}.$$
 (2.61)

A la figure 2.14(a) on compare la puissance extraite dans le cas avec et sans confinement. Dans le dernier cas la puissance extraite est beaucoup plus importante; pour deux raisons. La première est que le coefficient de transmission T n'est plus limité par les effets de diffraction. La seconde est que l'absorption dans les systèmes non confinées est beaucoup plus faible (voir figure 2.6(a)). A la figure 2.14(b) on a étudié la dérivée (2.60) pour les cas avec et sans modification du TES. On ne peut pas dégager ici un comportement clair en loi de puissance comme s'est le cas de la figure 2.12(b).

On peut conclure alors que les cavités non-confinées ne peuvent pas servir à une étude



FIG. 2.15 – Comparaison entre les puissances par unité de largeur extraites des facettes de deux dispositifs laser - un avec fort et un avec faible confinement du mode optique (mesures effectués par S. Dhillon du laboratoire MPQ).

sur la modification de l'émission spontanée analogue à celle sur les cavités confinées¹³.

Comme on n'a considéré qu'un seul mode se propageant dans une direction particulière de la cavité, les résultats sur l'extraction de la puissance de la cavité (le comportement du préfacteur $T/\alpha l$ de l'équation (2.59)) s'appliquent aussi en régime laser ¹⁴. A la figure 2.15 on a comparé la puissance extraite des deux dispositifs laser du type de référence [69] (N = 90 périodes), l'un étant fabriqué en cavité avec deux miroirs métalliques et l'autre avec une seule couche métallique. Les deux dispositifs ont la même longueur 2 mm, mais des largeurs différentes. La puissance est mesurée en fonction de la densité de courant $J = I/(\text{lageur} \times \text{longeur})$. Pour comparer les deux dispositifs on a tracé la puissance divisée par la largeur de la facette. Le rapport des puissances est en accord qualitatif avec les résultats de la figure 2.14(a).

¹³Cette conclusion est spécifique au domaine THz. En effet, pour le cas d'un dipôle horizontal on pourrait mettre en évidence les modifications du TES par observation de la puissance rayonnée perpendiculairement au couches.

¹⁴Mais pas les résultats sur l'émission spontanée car le laser opère en régime d'émission stimulée

Chapitre 3

Diffraction sur un réseau de fentes métalliques

3.1 But de cette étude

Nous avons vu dans le chapitre précédent que l'extraction de l'émission est un souci majeur pour les dispositifs inter-sous-bandes, notamment pour les dispositifs à fort confinement du champ électromagnétique. Pour une géométrie planaire, le coefficient d'extraction par la facette diminue linéairement avec l'épaisseur du dispositif (annexe B).

L'autre possibilité est d'extraire le rayonnement à l'aide d'un réseau métallique déposé sur la surface supérieure du dispositif. Le rayonnement inter-sous-bande est extrait perpendiculairement à la surface par l'effet de diffraction sur le réseau. Historiquement, c'est cette approche qui a été adoptée pour l'étude des premières sources de rayonnement intersous-bandes [53], [52], [55]. Inversement, une onde plane incidente peut être convertie par la diffraction en onde évanescente qui se propage parallèlement aux couches épitaxiales, pour une configuration en détection [70], [71], [72]. Outre l'extraction du signal optique, le réseau métallique permet l'injection du courant électrique dans la structure.

Comme les dispositifs électroluminescents ont progressivement fait place aux dispositifs lasers, cette configuration d'extraction à été abandonnée au profit de l'extraction par la facette. Néanmoins, très récemment, l'extraction par un réseau est à nouveau envisagée même pour les dispositifs lasers [73],[74]. D'autre moyens d'extraction plus sophistiqués, comme l'utilisation des cristaux photoniques diélectriques ont aussi été employés dans l'infrarouge moyen [75].

Le but de ce chapitre, ainsi que du chapitre suivant, est de fournir une étude extensive du rayonnement d'une source dipolaire à l'intérieur d'un dispositif avec réseau. Cette étude doit prendre en compte les particularités suivantes :

- L'aspect multi-couche du dispositif, qui comportera, comme dans le chapitre précédent, des couches hétérogènes optiquement (couches dopées, couches diélectriques et métalliques).

- La source dipolaire émet dans toutes les directions de l'espace. Il faut prendre explicitement en compte la morphologie du champ rayonné par la source.

Pour traiter le problème dans sa complexité, l'approche par décomposition en ondes



FIG. 3.1 - Réseau métallique de fentes rectangulaires. Les notations qui sont introduites dans cette figure, ainsi que l'orientation du système de coordonnées Oxyz seront utilisées dans toute la suite du manuscrit.

planes du champ rayonné du dipôle classique (paragraphe 1.3.3), semble bien adaptée. L'étude se fera en deux étapes. En premier temps, dans ce chapitre on va résoudre le problème de la diffraction d'une onde plane sur un réseau métallique situé sur un système multicouche, pour une direction d'incidence de l'onde arbitraire. Un tel traitement n'a pas encore été donné dans la littérature dans sa généralité. En deuxième temps, dans le chapitre suivant, on traitera le problème d'un dipôle ponctuel rayonnant à l'intérieur d'un système multicouche.

3.2 Diffraction en incidence arbitraire

3.2.1 Méthode modale

De manière générale, lorsqu'on parle de "problème de diffraction", il s'agit de calculer le champ électromagnétique créé par une onde incidente sur une structure diélectrique ou métallique, périodique dans une ou deux dimensions ("réseau de diffraction"). De nombreux méthodes existent dans la littérature [76], dont les plus générales sont la méthode des ondes couplées ("RCWA") [77], les méthodes intégrale et différentielle [76].

Une discussion des différentes approches va au delà des objectifs de ce manuscrit. Ici nous sommes concernés par le problème de diffraction sur un réseau de fentes métalliques et rectangulaires, comme à la figure 3.1. Dans tout le manuscrit, l'épaisseur des fentes sera notée h, la période du réseau d et la distance entre les fentes a, comme à la figure 3.1. Dans cette géométrie particulière, la méthode la plus adaptée et efficace est "la méthode modale", introduite par Botten et al. en 1981 dans une série d'articles [78], [79], [80], quasiment en même temps que Sheng et al. [81].

Précisons d'abord quelques conventions habituellement utilisées dans la littérature. Sur la figure 3.1, le plan Oxz, qui est perpendiculaire aux fentes, joue un rôle particulier. Lorsque l'onde incidente est contenue dans ce plan, il s'agit d'un problème de "diffraction classique". On distingue alors deux cas : lorsque le champ électrique de l'onde est parallel à l'axe Oy, on parle de polarisation "S" ou TE; lorsque c'est le champ magnétique qui est parallel à l'axe Oy, on parle de polarisation "P" ou TM [76]. Grâce à l'invariance du système dans la direction Oy les deux polarisations sont découplées. Lorsque l'onde est en incidence arbitraire, on parle d'"incidence oblique". Les deux polarisations ne sont plus découplées dans le cas général ¹⁵.

A la figure 3.1, on peut diviser l'espace en trois zones : la région semi-infinie $-\infty \leq z \leq 0$, la région du réseau $0 \leq z \leq h$, et la région semi-infinie $h \leq z \leq \infty$. L'idée de la méthode modale consiste à donner une décomposition du champ électromagnétique en modes propres dans chaque région, qui sont, si possible, des solutions exactes des équations de Maxwell. Dans les régions semi-infinies, la décomposition du champ s'appelle "décomposition de Rayleigh" [76], [82], [83]; et n'est rien d'autre qu'une décomposition en série de Fourier d'ondes planes.

Dans la région du réseau, on traite les fentes comme un ensemble de guides d'ondes rectangulaires couplés. Le champ est alors décomposé sur l'ensemble des modes guidés, qui forment une base dans l'espace des fonctions [78].

La continuité des composantes tangentielles (parallèles au plan Oxy) du champ entre les différentes régions est ensuite appliquée, et on obtient des relations linéaires entre les amplitudes de Fourier et les amplitudes des modes guidés, ainsi que l'amplitude du champ incident. Un système d'équations linéaires pour les amplitudes inconnues est ainsi obtenu.

Les articles fondateurs de Scheng et al. [81] et Botten at al. [78], [79], [80] donnent une solution exacte du problème en incidence classique. La généralisation pour une incidence conique a été donnée par Linfeng Li en 1993 [61].

Les guides d'ondes étant en général couplés (dans le cas d'un réseau diélectrique ou faiblement conducteur), les fréquences propres des modes guidés sont obtenues à partir des zéros complexes d'une équation transcendante (voir (3.15)), qui est un problème non-trivial numériquement [84]. Lorsqu'on s'intéresse au rayonnement d'un dipôle, dans l'approche que nous avons choisie, il faut examiner la diffraction d'un très grand nombre d'ondes planes rayonnées par la source, ce qui rendrait une solution exacte, basée sur la recherche des zéros complexes, redoutable en termes d'effort numérique.

La résolution de l'équation transcendante peut être évitée par une description simplifiée du champ dans les fentes. Une première approche, dans laquelle le réseau est constitué de métal parfait, à été donnée en 1988 par Kok et al. [85], pour une incidence conique. Les guides d'onde sont alors découplés, et les modes guidés ont des expressions très simples. En contrepartie, l'absorption du métal est alors totalement négligée. En 1984 Wirgin et Lopez-Rios [86] proposent de traiter les faces verticales des fentes (parallèles au plan Oxz) comme des métaux parfait, et d'imposer la condition d'impédance de surface [49] sur les faces horizontales, ce qui permet de garder la simplicité des modes guidés, tout en introduisant de l'absorption dans la modèle. L'article de Wirgin et Lopez-Rios traite le problème en polarisation S en incidence classique; la polarisation P a été récemment traitée, dans la même approche, par A. Barabara et al. [87]. Cette approche est d'autant

¹⁵Sauf dans le cas très spécial d'un réseau constitué de conducteur parfait, suspendu dans l'air. Il s'agit du "théorème de l'invariance", démontré dans [76].



FIG. 3.2 – Système multicouche avec réseau métallique, pour notre problème de diffraction. Le réseau est une séquence de couches métalliques de constante ε_M et diélectrique de constante ε_r . Le système est délimité par les deux milieux S et M_2 semi-infinis. Le champ incident u arrive du côté du milieu S, créant un champ réfléchi R dans S et transmis Tdans le milieu M_2 . Dans chaque couche $i \in [1, k]$, d'épaisseur L_i et constante diélectrique arbitraire ε_i , il y a des paires d'ondes contrapropagatives (P_i, Q_i) . On a omis ici les indices de Rayleigh n.

plus justifiée dans le domaine de l'infrarouge lointain, où le comportement des métaux est proche du cas idéal de métal parfait.

En 1996 Lochbihler [88] donne la solution en incidence conique avec la condition d'impedance de surface sur toutes les faces métalliques. La modèle que nous proposons ici traite l'incidence conique, comme celui de Lochbihler, mais en utilisant l'idée de Wirgin et Lopez-Rios pour simplifier les expressions des modes dans les fentes.

Une approche encore plus simple, pour le cas d'une incidence classique, à été utilisée par Porto et al. [89] pour l'analyse de la diffraction d'un réseau de fentes d'ouverture *a* faible par rapport à la longueur d'onde. Il consiste à ne garder que le mode guidé fondamental en polarisation TM. Nous avons généralisé cette méthode pour une incidence arbitraire, afin de calculer l'émission d'un dipôle au voisinage du réseau métallique [90]. Ce modèle était le premier pas vers le calcul plus complet qui sera détaillé dans le chapitre suivant.

Dans toutes les références qui sont citées, les réseaux métalliques sont soit suspendus dans l'air, soit posés sur un substrat diélectrique infini. Cette situation simple ne correspond pas aux dispositifs multicouches décrits dans le chapitre 2. Le modèle que nous proposons combine la méthode modale avec le traitement des systèmes multicouches par l'élimination successive des interfaces (paragraphe 2.2.2), pour obtenir une description adéquate des dispositifs réels.

3.2.2 Décomposition modale du champ

Le système à modéliser est décrit à la figure 3.2. Au système multicouche du chapitre 2 on ajoute un réseau de fentes métalliques, qui est une alternance de lames métalliques de constante complexe ε_M et diélectriques (homogènes et non-dopées) de constante ε_r . Les paramètres du réseau sont notés de la même façon qu'à la figure 3.1. L'espace occupée par le système est alors divisé en trois régions : la région I contient l'ensemble multicouche, délimité du côté inférieur par un milieu semi-infini M_2 . La région II contient le réseau métallique. La région III est un milieu S semi-infini de constante ε_a . Le système de coordonnées Oxyz est choisi comme à la figure 3.1.

Dans cette partie, la source est une onde plane incidente du côté du milieu S:

$$ue^{i(\alpha x+\beta y-\gamma_a z)}, \quad \gamma_a = \sqrt{\varepsilon_a k_0^2 - \alpha^2 - \beta^2}$$
 (3.1)

La notation suivante pour les composantes du vecteur d'onde \mathbf{k}_p dans le plan (Oxy) des couches est couramment utilisée dans les problèmes de réseau :

$$\mathbf{k}_p = (\alpha, \beta) \tag{3.2}$$

Soit $\psi(x, y, z)$ une composante quelconque du champ électromagnétique (**E**, **H**). Alors elle satisfait l'équation de Helmholtz :

$$\Delta \psi + k_0^2 \varepsilon(x, y, z)\psi = 0 \tag{3.3}$$

La constante diélectrique du système $\varepsilon(x, y, z)$ est une fonction constante par morceaux (figure 3.2).

La périodicité du système dans la direction de l'axe Ox impose la condition suivante, dite encore *condition de quasi-périodicité* [76] :

$$\psi(x+d,y,z) = e^{i\alpha d}\psi(x,y,z), \qquad (3.4)$$

Une autre condition découle de l'invariance par translation dans la direction de l'axe ${\cal O}y$:

$$\psi(x, y, z) = e^{i\beta y}\psi(x, z).$$
(3.5)

L'idée de la méthode modale consiste à exploiter les trois conditions (3.3), (3.4) et (3.5) afin d'obtenir une décomposition en modes propres du champ électromagnétique dans chaque région de l'espace. C'est ce que nous faisons dans la suite.

Décomposition de Rayleigh

Dans les régions I et III, qui sont constituées de couches homogènes infinies dans le plan Oxy, les conditions (3.3), (3.4) et (3.5) impliquent la forme la plus générale du champ dans la couche i [76] :

$$\psi(x, y, z) = e^{i\beta y} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_n x} (P_{in} e^{i\gamma_{in} z} + Q_{in} e^{-i\gamma_{in} z}), \qquad n \in \mathbb{Z}$$
(3.6)

$$\alpha_n = \alpha + \frac{2\pi n}{d}, \qquad \gamma_{in} = \sqrt{\varepsilon_i k_0^2 - \alpha_n^2 - \beta^2} \tag{3.7}$$

Dans chaque couche on a une infinité (par leur indice n) des couples (P_{in}, Q_{in}) d'ondes planes contra-propageantes dans la direction de l'axe Oz, qu'on appelle encore "des ordres". Dans les couches qui sont semi-infinies dans la direction Oz il faut garder seulement les ordres sortants du système.

Les composantes E_z et H_z vont jouer un rôle spécial dans le calcul. Par la suite on aura besoin de leur développement de Rayleigh dans les couches "k" et "S" (figure 3.2), qui bornent le réseau :

$$E_z|_{z=h+} = e^{i\beta y} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{i\alpha_n x} (R_n^e e^{i\gamma_{an} z} + u^e \delta_{0n} e^{-i\gamma_{a0} z})$$
(3.8)

$$H_z|_{z=h+} = e^{i\beta y} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_n x} (R_n^h e^{i\gamma_{an} z} + u^h \delta_{0n} e^{-i\gamma_{a0} z})$$
(3.9)

$$E_{z}|_{z=0-} = e^{i\beta y} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_{n}x} (P_{kn}^{e} e^{i\gamma_{kn}z} + Q_{kn}^{e} e^{-i\gamma_{kn}z})$$
(3.10)

$$H_{z}|_{z=0-} = e^{i\beta y} \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{i\alpha_{n}x} (P^{h}_{kn} e^{i\gamma_{kn}z} + Q^{h}_{kn} e^{-i\gamma_{kn}z})$$
(3.11)

On peut exprimer les autres composantes du champ à l'aide des équations (2.6).

Lorsque la constante de la couche ε_i est un nombre réel, la quantité γ_{in} est soit réelle, soit imaginaire pure. Si γ_{in} est réelle, le *n*-ième ordre de Rayleigh est une onde propagative ; si γ_{in} est imaginaire pure, l'ordre *n* est une onde évanescente dans la direction de l'axe Oz. Soit *n* tel que γ_{in} est réelle, alors en augmentant la longueur d'onde λ , la quantité γ_{in} passe d'une valeur réelle à une valeur imaginaire pure, en s'annulant. L'ordre radiatif est devenu évanescent, et une redistribution de l'énergie du champ a lieu (l'énergie du champ lointain est convertie en énergie de champ proche). Le point particulier, caractérisé par

$$\gamma_{in} = 0 \tag{3.12}$$

marque une singularité dans le comportement du champ électromagnétique autour du réseau. La manifestation expérimentale de cette singularité, appelée encore "anomalie de Wood", à été observée par le physicien R.W.Wood au début du siècle dernier [91], [92], [93]. Les anomalies apparaissaient comme des brusques variations de l'intensité de la lumière blanche réfléchie par les réseaux métalliques, fabriqués par Wood, lorsque celle si était de polarisation TM.

Le fait que ces variations correspondent à la condition (3.12) a été remarqué à la même époque par Lord Rayleigh [82], [83], qui fut, d'ailleurs, le premier à introduire la décomposition (3.6), afin de rendre compte des observations de Wood. En fait, Wood observa d'autres anomalies dans les spectres, qui ne sont pas justifiables de l'explication



FIG. 3.3 – Le système des fentes, vu comme un ensemble de guides d'ondes. Le système est maintenant considéré comme infini dans la direction Oz. On a alors un empilement périodique de couches dans la direction Ox. Grâce à la périodicité, le champ est entièrement déterminé par la donnée des amplitudes d'ondes contra-propageantes (P_M, Q_M) et (P_r, Q_r) dans une période, constituée d'une couche ε_M et une couche ε_r . Ces amplitudes sont associées soit à la composante E_x (polarisation TM), soit à la composante H_x (polarisation TE).

de Rayleigh. Nous reviendrons sur ce point lors de la description des modes photoniques propres du réseau, au paragraphe 3.3.

Modes guidés dans les fentes du réseau

Le réseau métallique, montré à la figure 3.3, peut être vu comme un ensemble de guides d'ondes, guidant dans le plan Ozy. On va supposer pour l'instant que ces guides d'ondes sont infinis dans la direction Oz aussi.

Le problème, qui consiste à trouver les modes guidés, peut être adressé du point de vue du paragraphe 2.2.2. En effet, il s'agit ici toujours d'un système multicouche, mais tournée de 90°, car les couches sont empilées dans la direction Ox. Respectivement, les composantes E_x et H_x , qui sont les composantes du champ perpendiculaires aux couches peuvent être traitées séparément (voir paragraphe 2.2.2). Les modes associés à la composante E_x sont appelés "modes TM", et ceux associés à la composante H_x sont appelés "modes TE"¹⁶.

On va présenter les modes TM, les modes TE se traitant de manière analogue. On cherchera les modes propres comme superposition d'ondes planes (voir figure 3.3) :

$$E_x(0 \le x \le a) = (P_r e^{i\gamma_r x} + Q_r e^{-i\gamma_r x})e^{i\mu z + i\beta y}, \qquad \gamma_r = \sqrt{\varepsilon_r k_0^2 - \mu^2 - \beta^2}$$
(3.13)

$$E_x(a \le x \le d) = (P_M e^{i\gamma_M x} + Q_M e^{-i\gamma_M x})e^{i\mu z + i\beta y}, \qquad \gamma_M = \sqrt{\varepsilon_M k_0^2 - \mu^2 - \beta^2} \qquad (3.14)$$

On a noté par (μ, β) le vecteur d'onde dans le plan Oyz (analogue au vecteur (3.2) pour un empilement des couches selon Oz). Dans le chapitre 2 les modes propres étaient

¹⁶Habituellement, on introduit la classification TM et TE par rapport aux composantes H_y et E_y du champ. Cette classification, utilisée surtout pour les problèmes d'incidence classique, est équivalente avec la nôtre, qui est plus adaptée pour le cas d'une incidence arbitraire.

obtenus à partir des relations de continuité des composantes tangentielles du champ, et de la condition que le champ entrant par les deux milieux semi-infinis qui bornaient l'empilement soit égale à zéro. Dans la situation présente, on a un empilement des couches non borné mais périodique. La condition qui fixe les modes propres est maintenant la condition de quasi-périodicité (3.4). Cette condition, appliquée sur la composante E_x , et une autre composante (par exemple E_y), ainsi que les liens du type (2.8) entre les amplitudes dans les différentes couches, mènent à un système d'équations linéaire et homogène pour les amplitudes (P_r, Q_r). En annulant le déterminant du système on obtient la relation de dispersion des modes guidés dans les fentes :

$$\frac{(1-\rho_{rM}^{e_2})}{(1+\rho_{rM}^{e_2})} [\cos(\alpha d) - \cos(\gamma_r a)\cos(\gamma_M (d-a))] = \sin(\gamma_M (d-a))\sin(\gamma_r a).$$
(3.15)

Ici ρ_{rM}^e est la réflectivité TM à l'interface métal-diélectrique :

$$\rho_{rM}^{e} = \frac{\gamma_r/\varepsilon_r - \gamma_M/\varepsilon_M}{\gamma_r/\varepsilon_r + \gamma_M/\varepsilon_M}.$$
(3.16)

L'équation (3.15) fixe la valeur de la composante μ à travers les expressions de γ_M et γ_r dans les équations (3.13) et (3.14). Cette valeur est obtenue en fonction des paramètres extérieurs α et β , qui sont propres à l'onde incidente.

Pour la polarisation TE il faut juste remplacer la réflectivité TM ρ_{rM}^e par la réflectivité TE ρ_{rM}^h dans l'équation (3.15) (voir les formules (2.9) et (2.10)).

L'équation (3.15) est l'équation transcendante qui décrit la physique des modes. Elle mène à la recherche numérique des racines complexes, qui peut s'avérer un problème nontrivial [84]. Pour le calcul du champ rayonné par un dipôle, ce problème sera d'autant plus exigeant, car il faudra explorer un très grand nombre de valeurs (α , β) dans la décomposition en ondes planes. Cependant, dans le domaine THz, ainsi que dans le domaine de l'infrarouge moyen, on peut simplifier le problème considérablement. Pour ces fréquences la constante du métal ε_M étant très grande en valeur absolue, on peut faire l'approximation du métal parfait $|\varepsilon_M| \to \infty$. Dans cette approximation $\rho_{rM}^{e,h} \to \pm 1$ et l'équation (3.15) se simplifie, pour les deux polarisations, en :

$$\sin(\gamma_r a)\sin(\gamma_M (d-a)) = 0. \tag{3.17}$$

Supposons que ε_M est une quantité finie (mais très grande), alors on ne peut pas avoir $\sin(\gamma_M(d-a)) = 0$ car ε_M est une quantité complexe. Finalement, l'approximation du métal parfait donne simplement l'équation :

$$\sin(\gamma_r a) = 0. \tag{3.18}$$

dont les solutions μ_m peuvent être facilement explicitées :

$$\mu_m = \sqrt{\varepsilon_r k_0^2 - \left(\frac{\pi m}{a}\right)^2 - \beta^2}, \quad m \in \mathbb{N}.$$
(3.19)

Le couplage entre les guides d'onde a ainsi complètement disparu. Cette hypothèse restera valable tant que les fentes sont suffisamment épaisses par rapport à l'épaisseur de peau du métal. Par ailleurs, dans le paragraphe 1.4.1, nous avons déjà remarqué que, numériquement, les modes d'une cavité simple, constituée de miroirs d'or, sont pratiquement ceux fournies par l'approximation du métal parfait, pour les fréquances dans le domaine THz.

Il nous reste maintenant à expliciter le champ dans les fentes en fonction de la polarisation TM ou TE. On peut montrer facilement que les conditions aux limites sur les parois métal parfait imposent les dépendances suivant des composantes E_x et H_x en fonction de la position x:

$$TM: \quad E_x \sim \cos(\nu_m x) \tag{3.20}$$

TE:
$$H_x \sim \sin(\nu_m x)$$
 (3.21)

$$\nu_m = \frac{\pi m}{a} \tag{3.22}$$

Contrairement aux travaux sur l'incidence conique [61], [88], plutôt que les composantes E_x et H_x , on utilisera les composantes H_y et H_x . Les équations obtenues sont alors plus simples et symétriques. A l'aide de (2.6), appliquées sur les composantes E_x et H_x on peut expliciter la composante H_y est montrer que son dépendance est également en $\cos(\nu_m x)$. Au final, on obtient les expressions suivants pour les champs dans les overtures $0 \le x \le a$:

TE:
$$H_x(0 \le x \le a, y, z) = e^{i\beta y} \sum_{m=1}^{\infty} \sin(\nu_m x) (A_m^h e^{i\mu_m z} + B_m^h e^{i\mu_m (h-z)})$$
 (3.23)

TM:
$$H_y(0 \le x \le a, y, z) = e^{i\beta y} \sum_{m=0}^{\infty} \cos(\nu_m x) (A_m^e e^{i\mu_m z} + B_m^e e^{i\mu_m (h-z)})$$
 (3.24)

Le champ dans les ouvertures apparaît comme une superposition d'ondes stationnaires (facteurs en $\sin(\nu_m x)$ et $\cos(\nu_m x)$). Ces ondes stationnaires proviennent de la superposition d'ondes contra-propageantes dans la direction Ox (figure 3.3). Pour prendre en compte l'épaisseur finie du réseau dans la direction Oz, on considère une paire de modes contra-propageantes dans la direction Oz (termes en $e^{i\mu_m z}$ et $e^{i\mu_m(h-z)}$).

Les amplitudes (A_m^e, B_m^e) et (A_m^h, B_m^h) introduites dans ces équations sont des quantités indépendants. Pour poursuivre, il faut maintenant les relier avec les amplitudes $(P_{ik}^{e,h}, Q_{ik}^{e,h})$ dans les couches.

Remarquons que les modes TE existent pour m > 0, alors que le mode TM fondamental est le mode m = 0. Dans la limite d'ouverture *a* faible par rapport à la longueur d'onde, seulement le mode $\text{TM}_{m=0}$ se propage dans les fentes, les autres modes étant évanescents. Souvent on néglige les modes m > 0 pour simplifier le problème (voir [89], [90]).

3.2.3 Equation pour les amplitudes diffractées

Approximation d'impédance de surface

Les amplitudes $(P_{in}^{e,h}, Q_{in}^{e,h})$ dans les différentes couches sont couplées aux interfaces du système multicouche par des relations de type 2.8. Il faut maintenant introduire des nouvelles conditions sur les interfaces métalliques.

Une première idée serait d'utiliser l'approximation du métal parfait sur toutes les interfaces métalliques. L'absorption du métal est ainsi négligée. Cependant, une telle approche mène à des coefficients de réflexion pour les amplitudes (P_{in}, Q_{in}) qui divergent sur les anomalies de Wood de type (3.12). Des coefficients de réflexion non divergents sont obtenus dans l'approximation d'impédance de surface, qui apparaît comme la "première correction" du métal parfait par rapport à la "petite quantité" $1/|\sqrt{\varepsilon_M}|$.

Soit une onde plane $e^{-i\gamma_a z + i\mathbf{k}_P \mathbf{r}_P}$ incidente sur une interface métal-diélectrique. Le métal se situe dans le demi-plan z < 0 (figure 3.4(a)). A l'intérieur du métal, le champ transmis est exponentiellement décroissant selon la loi [49] :

$$\psi \sim e^{i\sqrt{\varepsilon_M k_0^2 - \mathbf{k}_P^2 z}} \sim e^{ik_0\sqrt{\varepsilon_M z}}$$
(3.25)

Comme la constante du métal ε_M est très grande en valeur absolue, on a négligé le vecteur d'onde dans le plan \mathbf{k}_P^2 . Soient \mathbf{E}_{\parallel} et \mathbf{H}_{\parallel} les composantes du champ sur la surface métallique, juste à l'extérieur du métal. Alors les conditions de continuité des composantes tangentielles mènent à la relation :

$$\mathbf{E}_{\parallel} = Z\mathbf{n} \times \mathbf{H}_{\parallel} \tag{3.26}$$

$$Z = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon_M}} = \eta Z_0 \tag{3.27}$$

et on a introduit la notation :

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_M}} \tag{3.28}$$

Ici **n** est la normale sortante de la surface métallique (figure 3.4), et "×" signifie produit vectoriel. La quantité $Z_0 = \sqrt{\mu_0/\varepsilon_0} = 377 \ \Omega$ est l'impédance du vide [42]. La condition (3.26) à perdu la trace de la morphologie du champ incident, l'idée de l'approximation de l'impédance de surface consiste notamment à adopter (3.26) comme une condition aux limites pour n'importe quel champ au voisinage d'une surface métallique [49]. La particularité de cette condition aux limites est qu'elle porte seulement sur le champ à l'extérieur du métal, le champ à l'intérieur restant inconnu.

La quantité η est la petite quantité sans dimension du problème. Le métal parfait est obtenu à la limite $|\eta| \to 0$. L'épaisseur de peau du métal est proportionnelle à cette quantité, ainsi que l'absorption sur la surface métallique. En effet, avec l'équation (3.26) on obtient un flux de Poynting :

$$\mathbf{S} = -\frac{1}{2} Z_0 \operatorname{Re}(\eta) |\mathbf{H}_{||}|^2 \mathbf{n}$$
(3.29)



FIG. 3.4 – (a) Interface métal-diélectrique, de normale sortante **n**. Le champ électromagnétique est exponentiellement décroissant à l'intérieur du métal (trait rouge). (b) La grandeur $|\eta| = 1/\sqrt{|\varepsilon_M|}$ en fonction de la fréquence pour différents métaux. Les constantes diélectriques des métaux sont obtenues à partir du modèle de Drude (paragraphe 2.2.1).

rentrant dans le métal.

La quantité $|\eta|$ est tracée en fonction de la fréquence à la figure 3.4(b) pour de trois métaux différents, utilisés pour la fabrication des dispositifs : Argent, Or et Nickel. Dans le domaine THz $|\eta|$ reste de l'ordre de 10⁻³, sans variations sensibles en fonction de la nature du métal.

Dans la suite on utilisera souvent les coefficients de réflectivité sur une interface métaldiélectrique dans l'approximation d'impédance de surface. Soit $\gamma_M = \sqrt{\varepsilon_M k_0^2 - k_p^2}$ le vecteur d'onde perpendiculaire; comme dans cette approximation ε_M est très grand en valeur absolue, $\gamma_M \approx \sqrt{\varepsilon_M k_0^2} = k_0/\eta$. D'où les réflectivités TM ρ_{Md}^e et TE ρ_{Md}^h :

$$\rho_{Md}^{e} \approx \frac{\eta \varepsilon_d - \gamma_d/k_0}{\eta \varepsilon_d + \gamma_d/k_0}, \qquad \rho_{Md}^{h} \approx \frac{1 - \eta \gamma_d/k_0}{1 + \eta \gamma_d/k_0}, \tag{3.30}$$

 ε_d étant la constante du diélectrique au voisinage du métal.

Précisons maintenant les condition de validité de l'approximation d'impédance de surface. Le point central de l'approximation est qu'on néglige le vecteur d'onde parallèle \mathbf{k}_P du champ incident devant la quantité $k_0 \sqrt{|\varepsilon_M|}$. Ceci revient à négliger les variations transverses du champ à l'intérieur du métal par rapport aux variations le long de la normale \mathbf{n} (figure 3.4(a)).

En termes du rayonnement du dipôle, il faut supposer que les amplitudes dans la décomposition en ondes planes, vues comme fonctions de \mathbf{k}_P , décroissent suffisamment rapidement dans le cercle $\mathbf{k}_P \leq k_0 \sqrt{|\varepsilon_M|}$ (voir la figure (1.2)b).

Pour le problème de diffraction, il s'agit de restreindre le nombre d'ordres dans la décomposition de Rayleigh (3.6). Considérons, pour simplifier, le cas de l'incidence normale $(\alpha = 0, \beta = 0)$. Alors l'approximation de l'impédance de surface s'applique sur le *n*-ième ordre de Rayleigh si $\alpha_n \ll k_0 \sqrt{|\varepsilon_M|}$, soit :

$$|n| \ll \frac{d}{\lambda} \sqrt{|\varepsilon_M|} \tag{3.31}$$

Les dispositifs THz que nous avons fabriqués ont des réseaux de période typique $d \ge 10 \ \mu m$, et émettent à une longueur d'onde $\lambda \le 100 \ \mu m$. De la figure 3.4(a) on voit que $\sqrt{|\varepsilon_M|} \approx 10^3$, ce qui donne un nombre maximal d'ordre de Rayleigh de $|n| \le 10^2$. En pratique, les calculs numériques qui seront présentés dans la suite, convergent avec quelques dizaines d'ordres de Rayleigh.

Normalisation du champ magnétique et des vecteurs d'onde

Pour simplifier les équations qui vont suivre, on va normaliser le champ magnétique \mathbf{H} de telle manière qu'il y a la dimension du champ électrique \mathbf{E} . En posant :

$$\bar{\mathbf{H}} = \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0}} \mathbf{H} = Z_0 \mathbf{H}$$
(3.32)

le vecteur $\overline{\mathbf{H}}$ a bien la dimension d'un champ électrique. L'équation (3.26) devient simplement :

$$\mathbf{E}_{\parallel} = \eta \mathbf{n} \times \bar{\mathbf{H}}_{\parallel} \tag{3.33}$$

Il sera facile de reconstituer la bonne dimension du champ magnétique à partir de (3.32) lorsque ceci est nécessaire.

Aussi, pour simplifier encore les notations, toutes les grandeurs homogènes à un vecteur d'onde (i.e. γ , \mathbf{k}_p) seront normalisées à k_0 .

Raccordement du champ

Les conditions de raccordement du champ entre les régions I, II et III sont, d'une part la condition aux limites d'impédance de surface (3.26), et d'autre part la continuité des composantes E_x , E_y , \bar{H}_x et \bar{H}_y sur les interfaces diélectrique-diélectrique des ouvertures. Comme les champs sont quasipériodiques (condition (3.4)), on peut se restreindre à une seule période $0 \le x \le d$.

La forme particulière du champ, notamment la décomposition de Rayleigh (3.6) et les expressions modales des champs \bar{H}_x et \bar{H}_y à partir de (3.23) et (3.24) permettent une écriture adaptée des conditions aux limites. Notons que les modes dans les couches planes sont les ondes planes ~ $e^{i\alpha_n x}$, alors que dans les fentes ce sont les ondes stationnaires (3.23) et (3.24). Ces modes satisfont les relations d'orthogonalité suivantes :

$$\int_{0}^{d} e^{i(\alpha_{n} - \alpha_{n'})x} \mathrm{d}x = \int_{0}^{d} e^{i\frac{2\pi(n-n')x}{d}} \mathrm{d}x = d\delta_{n,n'}$$
(3.34)

$$\int_{0}^{a} \cos(\nu_{m}x) \cos(\nu_{m'}x) dx = ak_{m}^{e} \delta_{m,m'}, \quad k_{m}^{e} = 1 \text{ si } m = 0, \ 1/2 \text{ sinon}$$
(3.35)

3.2. Diffraction en incidence arbitraire

$$\int_{0}^{a} \sin(\nu_{m}x) \sin(\nu_{m'}x) dx = ak_{m}^{h} \delta_{m,m'}, \quad k_{m}^{h} = 1/2$$
(3.36)

Ces relations d'orthogonalité suggèrent que les modes dans les différentes régions constituent une base des fonctions pour le champ électromagnétique. On peut alors projeter les conditions aux limites pour le champ sur les différents modes. Notons $\mathbf{E}_{\parallel} = (E_x, E_y)$, $\bar{\mathbf{H}}_{\parallel} = (\bar{H}_x, \bar{H}_y)$ alors, on obtient les relations de raccordement du champ suivantes, par la projection sur les modes :

- sur l'interface I/II :

$$\int_{0}^{d} e^{-i\alpha_{n}x} (\mathbf{E}_{\parallel} - \eta \mathbf{n}_{+} \times \bar{\mathbf{H}}_{\parallel})|_{z=h+} \mathrm{d}x = \int_{0}^{a} e^{-i\alpha_{n}x} (\mathbf{E}_{\parallel} - \eta \mathbf{n}_{+} \times \bar{\mathbf{H}}_{\parallel})|_{z=h-} \mathrm{d}x \qquad (3.37)$$

$$\mathbf{n}_{+} = (0, 0, 1) \tag{3.38}$$

$$\int_{0}^{a} \bar{H}_{y}|_{z=h+} \cos(\nu_{m}x) \mathrm{d}x = \int_{0}^{a} \bar{H}_{y}|_{z=h-} \cos(\nu_{m}x) \mathrm{d}x$$
(3.39)

$$\int_{0}^{a} \bar{H}_{x}|_{z=h+} \sin(\nu_{m}x) \mathrm{d}x = \int_{0}^{a} \bar{H}_{x}|_{z=h-} \sin(\nu_{m}x) \mathrm{d}x$$
(3.40)

- sur l'interface II/III :

$$\int_0^d e^{-i\alpha_n x} (\mathbf{E}_{\parallel} - \eta \mathbf{n}_- \times \bar{\mathbf{H}}_{\parallel})|_{z=0-} \mathrm{d}x = \int_0^a e^{-i\alpha_n x} (\mathbf{E}_{\parallel} - \eta \mathbf{n}_- \times \bar{\mathbf{H}}_{\parallel})|_{z=0+} \mathrm{d}x \qquad (3.41)$$

$$\mathbf{n}_{-} = (0, 0, -1) \tag{3.42}$$

$$\int_{0}^{a} \bar{H}_{y}|_{z=0-} \cos(\nu_{m}x) \mathrm{d}x = \int_{0}^{a} \bar{H}_{y}|_{z=0+} \cos(\nu_{m}x) \mathrm{d}x$$
(3.43)

$$\int_{0}^{a} \bar{H}_{x}|_{z=0-} \sin(\nu_{m}x) \mathrm{d}x = \int_{0}^{a} \bar{H}_{x}|_{z=0+} \sin(\nu_{m}x) \mathrm{d}x$$
(3.44)

Ces équations sont dans au coeur de la résolution du problème de diffraction en incidence conique à l'approximation de l'impédance de surface. Elles permettent d'obtenir un système d'équations linéaires qui relient les amplitudes $(A_m^e, B_m^e), (A_m^h, B_m^h), (P_{in}^{e,h}, Q_{in}^{e,h})$ et le champ incident $u^{e,h}$ sur la structure.

Equations pour les amplitudes diffractées

Les équations (3.37)-(3.44) couplent les modes dans les fentes avec les ondes planes dans la décomposition de Rayleigh. Les intégrales suivantes :

$$I_{nm}^{\pm} = \frac{1}{a} \int_{0}^{a} e^{\pm i\alpha_{n}x} \cos(\nu_{m}x) \mathrm{d}x$$
(3.45)

$$J_{nm}^{\pm} = \frac{1}{a} \int_{0}^{a} e^{\pm i\alpha_{n}x} \sin(\nu_{m}x) dx$$
 (3.46)

jouent le rôle de constantes de couplage; la quantité I_{nm}^{\pm} est le recouvrement entre le *n*-ième ordre de Rayleigh et le mode TM_m , alors que la quantité J_{nm}^{\pm} est le recouvrement entre le *n*-ième ordre de Rayleigh et le mode TE_m . On peut facilement les obtenir explicitement; en particulier on peut montrer que si l'ouverture du réseau *a* est suffisamment faible par rapport à la longueur d'onde λ , seulement le mode $TM_{m=0}$ possède un couplage non négligeable avec les ordres de Rayleigh, ce qui justifie les modèles simples des réf. [89] et [90].

Lorsqu'on établit les équations pour les amplitudes diffractées on fait deux étapes préliminaires. Tout d'abord, on exprime les composantes E_x , E_y , \bar{H}_x et \bar{H}_y du champ dans les couches en fonction des composantes E_z , \bar{H}_z comme définies par les équations (3.8)-(3.11) et les relations (2.6)-(2.7). Ensuite, à l'aide des équations de Maxwell, on exprime les composantes E_x et E_y du champ dans les fentes en fonction des amplitudes (A_m^e, B_m^e) et (A_m^h, B_m^h) des composantes \bar{H}_x et \bar{H}_y dans les fentes.

On se servira des grandeurs suivantes :

$$\Sigma_{kn}^{x} = \frac{1}{d} \int_{0}^{a} e^{-i\alpha_{n}x} (E_{x} - \eta \bar{H}_{y})|_{z=0+} \mathrm{d}x$$
(3.47)

$$\Sigma_{kn}^{y} = \frac{1}{d} \int_{0}^{a} e^{-i\alpha_{n}x} (E_{y} + \eta \bar{H}_{x})|_{z=0+} \mathrm{d}x$$
(3.48)

$$\Sigma_{an}^{x} = \frac{1}{d} \int_{0}^{a} e^{-i\alpha_{n}x} (E_{x} + \eta \bar{H}_{y})|_{z=h-} \mathrm{d}x$$
(3.49)

$$\Sigma_{an}^{y} = \frac{1}{d} \int_{0}^{a} e^{-i\alpha_{n}x} (E_{y} - \eta \bar{H}_{x})|_{z=h-} \mathrm{d}x$$
(3.50)

comme intermédiaires des calculs.

On peut maintenant traduire les conditions de raccordement (3.37) et (3.41) sous la forme des deux relations matricielles suivantes, en termes d'ordres de Rayleigh et d'amplitudes des modes guidés :

$$\begin{bmatrix} (\gamma_{kn} + \eta \varepsilon_k)(Q_{kn}^e + \rho_{Mk}^{en} P_{kn}^e) \\ (\gamma_{an} + \eta \varepsilon_a)(R_n^e + \rho_{Ma}^{en} u^e \delta_{0n}) \\ (1 + \eta \gamma_{kn})(Q_{kn}^h + \rho_{Ma}^{en} P_{kn}^h) \\ (1 + \eta \gamma_{an})(R_n^h + \rho_{Ma}^{en} u^h \delta_{0n}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_n & 0 & \beta & 0 \\ 0 & \alpha_n & 0 & \beta \\ -\beta & 0 & \alpha_n & 0 \\ 0 & \beta & 0 & -\alpha_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_{kn}^x \\ -\Sigma_{an}^x \\ \Sigma_{kn}^y \\ -\Sigma_{an}^y \end{bmatrix}$$
(3.51)

3.2. Diffraction en incidence arbitraire

$$\begin{bmatrix} \Sigma_{kn}^{x} \\ -\Sigma_{an}^{x} \\ \Sigma_{kn}^{y} \\ -\Sigma_{an}^{y} \end{bmatrix} = \frac{a}{d} \begin{bmatrix} I_{nm'}^{-} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I_{nm'}^{-} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & J_{nm'}^{-} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J_{nm'}^{-} \end{bmatrix} \overline{\overline{M}}_{2} \begin{bmatrix} A_{m}^{e} \\ B_{m}^{e} \\ A_{m}^{h} \\ B_{m}^{h} \end{bmatrix}$$
(3.52)

Ici ρ_{Mk}^{en} et ρ_{Mk}^{hn} sont les réflectivités TM et TE du *n*-ième ordre de Rayleigh à l'interface métal-diélectrique k à l'approximation d'impédance de surface :

$$\rho_{Mk}^{en} = \frac{\eta \varepsilon_k - \gamma_{kn}}{\eta \varepsilon_k + \gamma_{kn}}, \qquad \rho_{Mk}^{hn} = \frac{1 - \eta \gamma_{kn}}{1 + \eta \gamma_{kn}}$$
(3.53)

et les coefficients ρ_{Ma}^{en} et ρ_{Ma}^{hn} sont définis de manière analogue. La matrice $\overline{\overline{M}}_2$ qu'on va utiliser très souvent s'exprime :

$$\overline{\overline{M}}_{2} = \overline{\overline{M}}_{2(m'm)} = \delta_{m'm} \otimes \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} \nu_{m}^{e^{-}} & -g_{m}\nu_{m}^{e^{+}} \\ -g_{m}\nu_{m}^{e^{+}} & \nu_{m}^{e^{-}} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -\nu_{m}^{0} & g_{m}\nu_{m}^{0} \\ g_{m}\nu_{m}^{0} & -\nu_{m}^{0} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} -\nu_{m}^{0} & g_{m}\nu_{m}^{0} \\ g_{m}\nu_{m}^{0} & -\nu_{m}^{0} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -\nu_{m}^{0} & g_{m}\nu_{m}^{0} \\ -\nu_{m}^{h^{-}} & g_{m}\nu_{m}^{h^{+}} \\ g_{m}\nu_{m}^{h^{+}} & -\nu_{m}^{h^{-}} \end{pmatrix} \end{bmatrix}$$
(3.54)

Ici les notations :

$$g_m = e^{i\mu_m h}, \quad \nu_m^0 = \frac{i\beta\nu_m}{\mu_m\varepsilon_r}, \quad \nu_m^{e\pm} = \frac{\varepsilon_r - \nu_m^2}{\mu_m\varepsilon_r} \pm \eta, \quad \nu_m^{h\pm} = \frac{\varepsilon_r - \beta^2}{\mu_m\varepsilon_r} \pm \eta$$
(3.55)

sont introduites. Il est nécessaire d'apporter ici une explication sur les notations dans la matrice $\overline{\overline{M}}_2$ (3.54). Les indices m et m' se réfèrent ici non pas aux lignes et colonnes de la matrice, mais à l'index du mode guidé TM ou TE qui intervient dans l'équation (3.19). Telle qu'elle est présentée dans (3.54), la matrice $\overline{\overline{M}}_2$ est constituée de quatre sous-matrices. La sous-matrice en haut à gauche n'agit que sur les modes TM, regroupés dans le sous vecteur ${}^T(A_0^e, A_1^e, \ldots, B_0^e, B_1^e, \ldots)$, alors que la sous-matrice en bas à droite n'agit que sur les modes TE regroupés dans le sous vecteur ${}^T(A_0^h, A_1^h, \ldots, B_0^h, B_1^h, \ldots)$. Les sous-matrices non-diagonales contiennent des coefficients de couplage entre les modes TE et TM, qui sont tous proportionnels à β .

En outre, chaque sous-matrice (en grandes parenthèses dans l'équation (3.54)) est elle-même divisée en quatre sous-matrices, agissant sur les modes se propageant vers le haut ou les modes se propageant vers le bas, ou bien couplant les deux. Chacune de ces "petites" sous-matrice est diagonale. Plutôt que d'écrire chaque sous-matrice de ce type comme " $\delta_{mm'}\nu_m^{e-}$ ",..., etc., on a factorisé le symbole de Kronecker $\delta_{mm'}$ à l'aide du produit tensoriel " \otimes ".

En utilisant les conditions de raccordement par la projection sur les modes dans les fentes (3.39), (3.40),(3.43) et (3.44) on obtient :

$$\frac{1}{\alpha_n^2 + \beta^2} \begin{bmatrix} -\alpha_n I_{nm'}^+ & 0 & \beta I_{nm'}^+ & 0 \\ 0 & -\alpha_n I_{nm'}^+ & 0 & -\beta I_{nm'}^+ \\ \beta_n J_{nm'}^+ & 0 & \alpha_n J_{nm'}^+ & 0 \\ 0 & \beta J_{nm'}^+ & 0 & -\alpha_n J_{nm'}^+ \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_k (Q_{kn}^e + P_{kn}^e) \\ \varepsilon_a (R_n^e + u^e \delta_{0n}) \\ \gamma_{nk} (Q_{kn}^h - P_{kn}^h) \\ \gamma_{na} (R_n^h - u^h \delta_{0n}) \end{bmatrix} = \overline{M}_1 \begin{bmatrix} A_m^e \\ B_m^e \\ A_m^h \\ B_m^h \end{bmatrix} 3.56$$

avec \overline{M}_1 la matrice :

$$\overline{\overline{M}}_{1} = \overline{\overline{M}}_{1(m'm)} = \delta_{m'm} \otimes \begin{bmatrix} \begin{pmatrix} k_{m}^{e} & g_{m}k_{m}^{e} \\ g_{m}k_{m}^{e} & k_{m}^{e} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} k_{m}^{h} & g_{m}k_{m}^{h} \\ g_{m}k_{m}^{h} & k_{m}^{h} \end{pmatrix} \end{bmatrix}$$
(3.57)

La combinaison des équations (3.51) et (3.52), et de (3.56) fournit un système d'équations linéaire homogène pour les amplitudes des modes dans les fentes et les ordres de Rayleigh, en incidence (α, β) arbitraire. Ces équations sont similaires aux équations de Lochbihler [88], qui les a établies pour les composantes E_y et H_y . Nos équations ont le mérite d'être beaucoup plus simples et symétriques. Un autre mérite de ces équations est que le nombre d'ordres de Rayleigh retenus dans le calcul n'est pas lié au nombre de modes dans les fentes, contrairement à la méthode de matrice S (voir [84]).

A partir d'ici, deux stratégies sont possibles, pour réduire la taille du système des équations : éliminer soit les ordres de Rayleigh, soit les amplitudes des modes. Nous avons préféré la première stratégie car il s'avère que le nombre de modes dans les fentes nécessaire pour obtenir la convergence du calcul est généralement plus faible que le nombre d'ordres de Rayleigh.

Un autre avantage, qui est en fait très important, est que la matrice du système ne va pas dépendre de la morphologie du champ incident.

L'étape préliminaire est d'écrire le lien qui existe entre les amplitudes $P_{nk}^{e,h}$ et $Q_{nk}^{e,h}$, le milieu M_2 étant semi-infini, en prenant l'origine de la phase sur la face supérieur de la couche :

$$P_{kn}^{e} = Q_{kn}^{e} R_{kM_{2}}^{en} e^{2i\gamma_{kn}L_{k}}, \qquad P_{kn}^{h} = Q_{kn}^{h} R_{kM_{2}}^{hn} e^{2i\gamma_{kn}L_{k}}$$
(3.58)

Après quelques calculs algébriques, on obtient une système d'équations, que l'on peut écrire sous une forme compacte :

$$(\overline{\overline{M}}_{1} + \overline{\overline{M}}_{S}\overline{\overline{M}}_{2}) \begin{bmatrix} A_{m}^{e} \\ B_{m}^{h} \\ A_{m}^{h} \\ B_{m}^{h} \end{bmatrix} = \frac{1}{\alpha^{2} + \beta^{2}} \begin{bmatrix} 0 \\ -I_{0m'}^{+}(\alpha\varepsilon_{a}u^{e}(1 - \rho_{Ma}^{e}) + \beta\gamma_{a}u^{h}(1 + \rho_{Ma}^{h})) \\ 0 \\ J_{0m'}^{+}(\beta\varepsilon_{a}u^{e}(1 - \rho_{Ma}^{e}) + \alpha\gamma_{a}u^{h}(1 + \rho_{Ma}^{h})) \end{bmatrix}$$
(3.59)

La matrice $\overline{\overline{M}}_S$ est définie comme :

$$\overline{\overline{M}}_{S} = \overline{\overline{M}}_{S(m'm)} = \begin{bmatrix} S_{k(m'm)}^{ee} & 0 & S_{k(m'm)}^{eh} & 0\\ 0 & S_{a(m'm)}^{ee} & 0 & S_{a(m'm)}^{eh} \\ -S_{k(m'm)}^{he} & 0 & -S_{k(m'm)}^{hh} & 0\\ 0 & -S_{a(m'm)}^{he} & 0 & -S_{a(m'm)}^{hh} \end{bmatrix}$$
(3.60)

Les éléments de cette matrice sont les sommes infinies :

$$S_{k(m'm)}^{ee} = \frac{a}{2d\eta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{I_{nm}^+ I_{nm'}^-}{\alpha_n^2 + \beta^2} [\alpha_n^2 (1 + R_{MM_2}^{en}) + \beta^2 (1 - R_{MM_2}^{hn})]$$
(3.61)

3.2. Diffraction en incidence arbitraire

$$S_{a(m'm)}^{ee} = \frac{a}{2d\eta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{I_{nm}^+ I_{nm'}^-}{\alpha_n^2 + \beta^2} [\alpha_n^2 (1 + \rho_{Ma}^{en}) + \beta^2 (1 - \rho_{Ma}^{hn})]$$
(3.62)

$$S_{k(m'm)}^{hh} = \frac{a}{2d\eta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{J_{nm}^+ J_{nm'}^-}{\alpha_n^2 + \beta^2} [\alpha_n^2 (1 - R_{MM_2}^{hn}) + \beta^2 (1 + R_{MM_2}^{en})]$$
(3.63)

$$S_{a(m'm)}^{hh} = \frac{a}{2d\eta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{J_{nm}^+ J_{nm'}^-}{\alpha_n^2 + \beta^2} [\alpha_n^2 (1 - \rho_{Ma}^{hn}) + \beta^2 (1 + \rho_{Ma}^{en})]$$
(3.64)

$$S_{k(m'm)}^{eh} = \frac{a}{2d\eta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{I_{nm}^+ J_{nm'}^-}{\alpha_n^2 + \beta^2} \alpha_n \beta (R_{MM_2}^{en} + R_{MM_2}^{hn})$$
(3.65)

$$S_{a(m'm)}^{eh} = \frac{a}{2d\eta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{I_{nm}^+ J_{nm'}^-}{\alpha_n^2 + \beta^2} \alpha_n \beta(\rho_{Ma}^{en} + \rho_{Ma}^{hn})$$
(3.66)

$$S_{k(m'm)}^{he} = \frac{a}{2d\eta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{J_{nm}^+ I_{nm'}^-}{\alpha_n^2 + \beta^2} \alpha_n \beta (R_{MM_2}^{en} + R_{MM_2}^{hn})$$
(3.67)

$$S_{a(m'm)}^{he} = \frac{a}{2d\eta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{J_{nm}^+ I_{nm'}^-}{\alpha_n^2 + \beta^2} \alpha_n \beta(\rho_{Ma}^{en} + \rho_{Ma}^{hn})$$
(3.68)

L'équation (3.59) est notre équation qui décrit la diffraction sur le réseau pour une onde sous incidence arbitraire, provenant de la région I. Dans le paragraphe 4.3 on écrira la version de cette équation pour un dipôle situé à l'intérieur du système multi-couche. En fait la matrice du système ne va pas changer, la seule chose qui changera sera le vecteur de droite de (3.59) décrivant le champ incident. Ainsi, quel que soit le champ incident, la plus grande partie du problème de diffraction est déjà résolue en établissant les matrices $\overline{M}_1, \overline{M}_2$ et \overline{M}_S .

Le cas le plus intensivement étudié dans la littérature est l'incidence classique $\beta = 0$. On peut vérifier aisément que lorsque $\beta = 0$ la matrice du système (3.59) se scinde en deux sous-matrices sur la diagonale, chacune opérant séparément sur les amplitudes TM (A_m^e, B_m^e) et TE (A_m^h, B_m^h) . Le "sous-modèle" TM est mathématiquement équivalent au modèle développé par Barbara et al. [87] pour le visible et le proche infrarouge. Dans cette dernière référence on a également comparé le modèle avec l'expérience, et un accord satisfaisant est obtenu. Le sous-modèle TE est équivalent au travail de Wirgin et Lopèz-Rios [86], dans lequel on a étudié l'amplification Raman du champ proche des réseaux métalliques.

Pour inverser numériquement le système (3.59), il faut tronquer les sommes infinies sur les ordres de Rayleigh, et il faut garder un nombre fini de modes guidés dans les fentes. Tel qu'il est écrit, le système (3.59) permet d'une part de traiter un nombre N d'ordre de Rayleigh, indépendant du nombre des modes guidés. En plus, la matrice du système reste carrée, même si le nombre M_e de modes TM est différent du nombre M_h de modes TE, ce qui permet une plus grande flexibilité numérique par rapport aux approches publiées précédemment. Pour la structure du vecteur de droite, remarquons qu'on l'a construit de telle manière que les lignes 1 et 3 correspondent à un champ provenant de la région III, alors que les lignes 2 et 4 correspondent à un champ provenant de la région I.

Note sur la matrice \overline{M}_S

Les sommes infinies qui interviennent dans la matrice \overline{M}_S sont une généralisation des sommes S_{nm}^{\pm} introduites dans la référence [87] et la grandeur "f" de la référence [94], pour le cas d'incidence arbitraire sur un système multicouche.

La structure de ces expressions suggère une interprétation simple. Considérons, par exemple, la somme $S_{a(m'm)}^{ee}$ (équation (3.62)). On a déjà remarqué que les quantités I_{nm}^{\pm} sont les constantes de couplage entre le mode guidé TM_m et l'ordre de Rayleigh n. Le coefficient $S_{a(m'm)}^{ee}$ n'est alors rien d'autre que le couplage entre le mode TM_m et le mode $TM_{m'}$ via les interactions avec tous les ordres de Rayleigh dans le substrat S. Ce couplage dépend de la direction du champ incident (via les coefficients α_n et β).

Remarquons aussi qu'en incidence classique $\beta = 0$ le couplage entre les polarisations TM et TE disparaît, comme attendu.

Dans l'écriture des sommes "la petite quantité" η intervient en dénominateur, et il peut sembler que les sommes divergent à la limite $\eta \to 0$. En fait il s'agit d'un artifice de calcul. Soit par exemple les réflectivités ρ_{Ma}^{en} et ρ_{Ma}^{hn} intervenant dans la somme $S_{a(m'm)}^{ee}(3.62)$:

$$\rho_{Ma}^{en} = \frac{\eta \varepsilon_a - \gamma_{an}}{\eta \varepsilon_a + \gamma_{an}}, \qquad \rho_{Ma}^{hn} = \frac{1 - \eta \gamma_{na}}{1 + \eta \gamma_{na}}$$
(3.69)

Alors les quantités suivantes :

$$\frac{1+\rho_{Ma}^{en}}{\eta} = \frac{2\varepsilon_a}{\eta\varepsilon_a + \gamma_{an}}, \qquad \frac{1-\rho_{Ma}^{hn}}{\eta} = \frac{2\gamma_{an}}{1+\gamma_{an}\eta}$$
(3.70)

sont bien définies à la limite $\eta \to 0$. On peut montrer que tous les quantités intervenant dans les sommes sont aussi bien définies. L'écriture de η en dénominateur donne l'avantage d'utiliser facilement les réflectivités composites (de type $R_{MM_2}^{en},...$), simplifiant de beaucoup le traitement des systèmes multicouches.

3.2.4 Réflexion et transmission sur le réseau

On définit ici les coefficients de transmission et de réflexion en énergie pour le champ diffracté. Ce sont ces grandeurs qu'on mesure dans les expériences d'optique traditionnelle. Dans les expériences d'optique THz, qui seront décrites dans le paragraphe 3.5, on mesure aussi l'amplitude et la phase du champ.

Soit S_z^{I} la composante selon Oz du vecteur du Poynting dans le région I (substrat infini de constante ε_a). Sa valeur moyenne sur une période s'écrit :

$$\frac{1}{d} \int_0^d S_z^{\mathrm{I}} \mathrm{d}x = -S_z^{inc} + \sum_{n \in \mathbb{Z}} S_{nz}^{\mathrm{I}}$$
(3.71)

3.2. Diffraction en incidence arbitraire

avec $-S_z^{inc}$ la composante selon Oz du vecteur de Poynting de l'onde incidente et S_{nz}^{I} les composantes correspondant à l'ordre n réfléchi. Ces grandeurs s'expriment en fonction des amplitudes $R_{an}^{e,h}$ et $u^{e,h}$:

$$S_z^{inc} = \frac{\omega\varepsilon_0}{k_0} \operatorname{Re}(\gamma_a) \frac{\varepsilon_a |u^e|^2 + |u^h|^2}{\alpha^2 + \beta^2} + \frac{\omega\varepsilon_0}{k_0} \operatorname{Im}(\gamma_a) \frac{2\operatorname{Im}(\varepsilon_a u^e R_{a0}^{e*} + u^h R_{a0}^{h*})}{\alpha^2 + \beta^2}$$
(3.72)

$$S_{nz}^{I} = \omega \varepsilon_0 \operatorname{Re}(\gamma_{an}) \frac{\varepsilon_a |R_{an}^e|^2 + |R_{an}^h|^2}{\alpha_n^2 + \beta^2}$$
(3.73)

Le seconde term de l'équation (3.72) traite le cas ou l'onde incidente est une onde évanescente, le flux incidente apparaît alors par le mécanisme décrit dans le paragraphe 1.4.2.

En analogie avec la réflexion sur une interface plane entre deux diélectriques, il est naturel alors de définir des coefficients de réflexion \mathcal{R}_n en énergie :

$$\mathcal{R}_n = \frac{S_{nz}^1}{S_z^{inc}} \tag{3.74}$$

De la même façon, en considérant le champ $T_{an}^{e,h}$ dans le substrat infini M_2 , on peut calculer les vecteurs de Poynting dans les ordres transmis, lorsque le substrat est un milieu non-absorbant :

$$S_{nz}^{M_2} = \omega \varepsilon_0 \text{Re}(\gamma_{M_2 n}) \frac{\varepsilon_a |T_{M_2 n}^e|^2 + |T_{M_2 n}^h|^2}{\alpha_n^2 + \beta^2}$$
(3.75)

On définit le coefficient de transmission \mathcal{T}_n en énergie pour l'ordre n:

$$\mathcal{T}_n = \frac{S_{nz}^{M_2}}{S_z^{inc}} \tag{3.76}$$

Si le système est non-absorbant, la conservation de l'énergie impose :

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} (\mathcal{R}_n + \mathcal{T}_n) = 1 \tag{3.77}$$

ce qui peut constituer un critère de pertinence pour les amplitudes du champ obtenues numériquement. Pour un système à pertes la somme des coefficients \mathcal{R}_n et \mathcal{T}_n doit être inférieure à l'unité.

En pratique, on doit d'abord inverser numériquement le système linéaire (3.59) pour obtenir les amplitudes $(A_m^e, B_m^e, A_m^h, B_m^h)$ des modes dans les fentes. Ensuite les équations (3.51) et (3.52) permettent de remonter jusqu'aux ordres de Rayleigh, intervenant dans les définitions de \mathcal{R}_n et \mathcal{T}_n . Pour les ordres réfléchis on obtient :

$$R_n^e = -\rho_{Ma}^e u^e \delta_{0n} - \eta t_{Ma}^{en} \frac{\alpha_n \Sigma_{an}^x + \beta \Sigma_{an}^y}{2}$$
(3.78)

$$R_{n}^{h} = -\rho_{Ma}^{h} u^{h} \delta_{0n} - t_{Ma}^{hn} \frac{\beta \Sigma_{an}^{x} - \alpha_{n} \Sigma_{an}^{y}}{2}$$
(3.79)

On a introduit ici les transmissivités métal-diélectrique à l'approximation d'impédance de surface :

$$t_{Ma}^{en} = \frac{2}{\eta(\gamma_{na} + \eta\varepsilon_a)}, \qquad t_{Ma}^{hn} = \frac{2}{1 + \eta\gamma_{na}}$$
(3.80)

Pour les ordres transmis, le calcul est un peu plus long, car il faut prendre en compte la traversée des couches; finalement on obtient :

$$T_n^e = \eta T_{MM_2}^{en} \frac{\alpha_n \Sigma_{kn}^x + \beta \Sigma_{kn}^y}{2}$$
(3.81)

$$T_n^h = T_{MM_2}^{hn} \frac{-\beta \Sigma_{kn}^x + \alpha_n \Sigma_{kn}^y}{2}$$
(3.82)

avec $T_{MM_2}^{en}$ et $T_{MM_2}^{hn}$ les transmissivités composites métal *M*-milieu M_2 , obtenues avec la recette du paragraphe 2.2.2.

Remarquons que les coefficients de transmissivité et de réflectivité métal-diélectrique (comme par exemple t_{Ma}^{en} et t_{Ma}^{hn}) n'ont pas une signification physique directe, contrairement aux grandeurs correspondantes au cas d'une interface diélectrique-diélectrique. La raison est qu'à l'approximation d'impédance de surface, on ne connaît pas (ou on connaît mal) le champ à l'intérieur du métal. Ces grandeurs sont pour le moins utiles pour la formulation compacte du problème réseau-multicouche.

D'après les équations (3.78), (3.79), (3.81) et (3.82), on pourrait voir le réseau comme une couche avec des propriétés électromagnétiques moyennes, qui dépendent de l'ordre ndiffracté. Par exemple, d'après l'équation (3.78) le champ moyen pour la polarisation TM à l'interface substrat S - réseau est :

$$\eta \frac{\alpha_n \Sigma_{an}^x + \beta \Sigma_{an}^y}{2} \tag{3.83}$$

Les champs moyens de ce type interviennent dans les équations au même titre que les couples d'ondes planes contra-propageantes dans une couche du système multicouche, ce qui simplifie le traitement mathématique du problème.

Les grandeurs \mathcal{T}_n et \mathcal{R}_n ont, quant à elles, une signification physique claire, ce qui les rend utiles pour la discussion de la physique du réseau métallique.

3.3 Modes propres de la cavité complexe

3.3.1 Equation pour les modes propres

Nous avons vu dans le chapitre 2 que les modes propres d'un système multicouche sont obtenus comme les pôles de la réflectivité composite du système (paragraphe 2.2.3). De manière générale, la même démarche s'applique aux systèmes avec un réseau, comme celui de la figure 3.2. Les modes photoniques de ces systèmes peuvent être obtenus comme les pôles des coefficients de transmission et réflexion définis dans le paragraphe 3.2.4. Comme dans le cas d'un système multicouche, la présence des modes ouvre des voies



FIG. 3.5 - (a) Image du réseau métallique en Argent utilisé par Ebbesen dans ses expériences de transmission extraordinaire. (b) Spectre de transmission à travers le réseau de la figure (a). Les images sont tirées de la référence [95].

supplémentaires pour l'acheminement de l'énergie d'un dipôle rayonnant au voisinage de ces structures [90].

Du point de vue mathématique, les coefficients \mathcal{R}_n et \mathcal{T}_n seront tous inversement proportionnels à la quantité $|\det(\overline{\overline{M}}_1 + \overline{\overline{M}}_S \overline{\overline{M}}_2)|^2$. Les pôles complexes correspondants aux modes photoniques sont alors donnés par l'équation :

$$\det(\overline{\overline{M}}_1 + \overline{\overline{M}}_S \overline{\overline{M}}_2) = 0 \tag{3.84}$$

D'un autre point de vue, les modes propres du système correspondent aux solutions pour un vecteur de droite nul; pour avoir des solutions non triviales la matrice du système doit être singulière, d'où la condition (3.84).

L'équation (3.84) fixe le lien entre la fréquence ω et le vecteur d'onde de l'onde incidente \mathbf{k}_P , et fournit donc la relation de dispersion du système. Comme dans le paragraphe 2.2.3, la fréquence ω obtenue est en général une quantité complexe, la partie réelle fournissant la fréquence propre du mode, et la partie imaginaire étant liée à l'absorption (facteur de qualité) du mode.

La recherche des zéros complexes de l'équation (3.84) n'est pas une tâche facile numériquement. En particulier, on doit être soigneux dans la définition des racines carrées complexes pour les quantités γ_{in} [84]. Un exemple d'application de cette méthode pour un cas particulier est donné dans le paragraphe 3.3.3.

3.3.2 Transmission extraordinaire de la lumière

Dans le domaine de l'optique, l'intérêt pour les réseaux métalliques à été récemment ressuscité par la découverte du phénomène de la transmission extraordinaire de la lumière (en polarisation TM), faite par T.W. Ebbesen en 1998 [96]. Dans cet article on décrit des expériences avec un réseau rectangulaire de trous cylindriques perforés dans une mince couche métallique en Argent (épaisseur $\approx 200 \ nm$), posée sur un substrat de quartz (figure 3.5(a)). Le diamètre des trous était de 150 nm, très faible par rapport aux longueurs d'onde utilisées pour sonder la transmission à travers le réseau (200 nm $\leq \lambda \leq$ 1200 nm). La transmission mesurée (figure 3.5(b)) était supérieure de plusieurs ordres de grandeur à la valeur prédite par la théorie classique de Bethe, développée en 1944 [97].

Pour expliquer ce phénomène, on a d'abord évoqué l'excitation de plasmons de surface [95], [98], point contesté car les fréquences des plasmons correspondaient plutôt aux minima de la transmission [99]. Un modèle théorique plus avancé à été proposé par Moreno et al. en 2001 [100]. Dans ce modèle, on considère deux modes guidés contra-propageants dans les trous. Les modes sont évanescents car les trous sont sub-longueur d'onde, leur interférence engendre un flux de Poynting à travers les trous par le mécanisme décrit dans le paragraphe 1.4.2.

Plus récemment, un modèle qui met en jeu la partie évanescente du champ, obtenu par diffraction de l'onde plane incidente sur le trou semble bien rendre compte des observations dans les réseaux métalliques et diélectriques, ces derniers ne soutenant pas de plasmons de surface [101]. L'analyse du champ diffracté par le trou est analogue à l'analyse du rayonnement dipolaire par la décomposition en ondes planes.

Les phénomènes dans les réseaux 2D ont sollicité l'étude des réseaux métalliques de fentes rectangulaires, considérés comme systèmes modèles plus simples. Cependant, il s'avère que la présence des modes guidés propagatifs dans les fentes rend leur étude légèrement plus complexe. La première étude dans le contexte des résultats d'Ebbesen à été publiée par Porto et al. en 1999 [89] : il s'agit du modèle simple déjà mentionné. Dans cette article on observe aussi une transmission extraordinaire, qu'on explique par l'excitation des modes photoniques propres supportés par le réseau. Une étude plus approfondie de ces modes, en termes de propriétés de dispersion, à été donnée par Collin et al. [102], [84]. Dans ces travaux, on distingue deux types de modes, qu'on appelle "modes horizontaux" et "modes verticaux".

Pour illustrer le phénomène de transmission extraordinaire, considérons un réseau de fentes entouré entièrement de l'air. Les paramètres du réseau sont ceux de la référence [89] : période $d = 3.5 \ \mu m$, ouverture $a = 0.5 \ \mu m$ et une épaisseur h variable. La transmission d'ordre 0, en incidence normale ($\alpha = 0, \ \beta = 0$), pour la polarisation TM, est tracée à la figure 3.6, en fonction de la longueur d'onde, en utilisant les résultats de calcul de la partie précédente. Trois valeurs de l'épaisseur sont utilisées : $h = 1.2 \ \mu m$, 3.0 μm et 5.0 μm . Les longueurs d'onde utilisées sont dans le proche infrarouge.

Le résultat est obtenu avec seulement le mode $TM_{m=0}$ guidé dans les fentes. Nous avons vérifié numériquement que l'inclusion des modes supplémentaires ne change pas les courbes obtenues. Nos résultats sont identiques avec ceux de Porto et al. [89].

Sur la graphique on observe des maxima pour lesquels la transmission est très proche de l'unité, ce qui est justement le phénomène de "transmission extraordinaire".

Lorsqu'on varie l'épaisseur h, le premier maximum, très fin, situé autour de $\lambda = 3.8 \ \mu m$, ne change quasiment pas de position. En outre, la longueur d'onde du maximum est quasiment égale à la période de réseau (rappelons que $d = 3.5 \ \mu m$) :

$$\lambda_{max} \approx d \tag{3.85}$$

Le maximum est ainsi situé au voisinage de l'apparition de l'ordre ± 1 diffracté par



FIG. 3.6 – Spectres de transmission dans le proche infrarouge pour une réseau de fentes rectangulaires de période $d = 3.5 \ \mu m$, ouverture $a = 0.5 \ \mu m$, et d'épaisseur h variable. Les courbes, obtenues avec notre modèle, sont identiques aux résultats de Porto et al. [89].

le réseau. Il est associé à l'excitation d'un "mode horizontal" du réseau, car des études de la distribution de l'énergie électromagnétique montrent que le champ est localisé au voisinage des surfaces horizontales du réseau pour cette longueur d'onde [94], [84]. La présence de ce mode est parfois associé à l'excitation du plasmon de surface du métal; cependant la même résonance existe aussi dans le cas du métal parfait, qui ne supporte pas des plasmons de surface.

Lorsqu'on augmente l'épaisseur du réseau, des résonances supplémentaires apparaissent. On peut vérifier aisément que les longueurs d'onde de ces résonances λ_{max} satisfont à la condition :

$$d < \lambda_{max} \approx \frac{2h}{n}, \quad n = 1, 2, \dots \tag{3.86}$$

L'étude des cartes de champ électromagnétique montrent que le champ est concentré à l'intérieur des fentes pour ces longueur d'onde. La condition (3.86) n'est rien d'autre que la condition d'excitation des résonances Fabry-Perot à l'intérieur des fentes, associé au mode $TM_{m=0}$ qui est toujours propagatif¹⁷.

On peut comprendre, de manière très qualitative, l'existence de deux types de modes grâce à la structure de la matrice du système (3.59). Nous avons vu que les modes photoniques du système sont donnés par les singularités de la matrice, décrites par l'équation (3.84). Une première source de singularités est la matrice des sommes infinies $\overline{\overline{M}}_S$. Considérons, pour simplifier, le cas du métal parfait $\eta = 0$, et remarquons que notre modèle fournit une solution exacte des équation de Maxwell dans ce cas là.

¹⁷Pour avoir une expression plus stricte de type (3.86), il faut, bien évidement, inclure aussi les réflectivités efficaces du mode $\text{TM}_{m=0}$ sur les ouvertures des fentes

Alors les quantités (3.70) intervenants dans la somme $S^{ee}_{a(m'm)}$ (équation (3.62)) deviennent :

$$\frac{1+\rho_{Ma}^{en}}{\eta} = \frac{2\varepsilon_a}{\gamma_{an}}, \qquad \frac{1-\rho_{Ma}^{hn}}{\eta} = 2\gamma_{an}$$
(3.87)

La somme va clairement diverger sur l'anomalie de Wood $\gamma_{an} = 0$. Remarquons que seulement la partie du champ TM est divergente, alors que la partie TE reste finie, ce qui explique pourquoi ce type d'anomalies ne sont observées qu'en polarisation TM. On peut alors associer les modes "horizontaux" aux singularités du champ qui apparaissent lorsqu'un ordre radiatif devient évanescent en polarisation TM.

Toujours dans le cas du métal parfait, les quantités $\nu_m^{e\pm}$ (données par les équations (3.55)) sont égales. Alors une condition suffisante pour que les matrices $\overline{\overline{M}}_1$ et $\overline{\overline{M}}_2$ soient singulières est :

$$g_m^2 = e^{2i\mu_m h} = 1 \tag{3.88}$$

qui n'est rien d'autre que la condition d'existence d'une résonance Fabry-Perot pour le mode guidé d'indice m dans les fentes. Le mode $TM_{m=0}$ étant toujours propagatif, il existe toujours une épaisseur de réseau h pour que cette condition soit remplie en polarisation TM. On vient de décrire les "modes verticaux", qui sont aussi un autre type d'anomalies de Wood.

En conclusion, les résonances de transmission dans les réseaux de fentes métalliques sont bien expliquées dans le cadre des résonances photoniques, propres à la géométrie particulière du système.

3.3.3 Modèle simple avec un seul mode guidé TM

Nous avons tenté de trouver les modes photoniques du système à l'aide de l'équation (3.84), dans le cas du modèle simple de Porto. Seulement le mode $TM_{m=0}$ guidé est alors retenu dans le développement modal. Dans ce cas là, l'équation de dispersion (3.84) devient :

$$\det \begin{bmatrix} 1 + S_{k(00)}^{ee} \nu_0^{e-} & g_0 (1 - S_{k(00)}^{ee} \nu_0^{e+}) \\ g_0 (1 - S_{a(00)}^{ee} \nu_0^{e+}) & 1 + S_{a(00)}^{ee} \nu_0^{e-} \end{bmatrix} = 0$$
(3.89)

Tout d'abord, on a recherché les modes photoniques pour la structure de l'article de Porto [89], dont les paramètres sont $h = 3.0 \ \mu m$, $a = 0.5 \ \mu m$ et $d = 3.0 \ \mu m$. Les résultats de notre calcul sont donnés à la figure 3.7(a).

A la figure 3.7(b), on a représenté les résultats de l'article [89]. Strictement parlant, ces résultats sont obtenus non pas par les zéros complexes du déterminant (3.89), mais par les zéros réels de sa partie imaginaire. Sur la figure 3.7(a) avec nos résultats certaines branches de dispersion sont absentes, bien que les fréquences des modes apparaissent presqu'aux



FIG. 3.7 – (a) Diagramme de dispersion des modes photoniques pour un réseau en or, entouré de l'air, de paramètres $h = 3.0 \ \mu m$, $a = 0.5 \ \mu m$ et $d = 3.0 \ \mu m$. Le diagramme est obtenu par la recherche des zéros complexes de l'équation (3.89). (b) Diagramme de dispersion pour le même réseau, comme fourni dans la référence [89]. Les résultats sont obtenus par la recherche des zéros réels de la partie imaginaire du déterminant (3.89).



FIG. 3.8 – (a) Diagramme de dispersion pour une cavité complexe, fermée par un réseau en or : $h = 0.4 \ \mu m$, $a = 7.5 \ \mu m$ et $d = 15.0 \ \mu m$, et constituée de couches de contact $C_a = C_b = 3 \times 10^{18} \ cm^{-3}$, $L_a = L_b = 0.3 \ \mu m$ et zone active d'épaisseur $L = 0.8 \ \mu m$, et un miroir (inférieur) d'or. La courbe noire est le repliement dans la première zone de Brillouin de la dispersion du mode TM fondamental d'une cavité planaire de mêmes paramètres. (b) Les pertes de propagation dans la structure. En noir : la courbe correspondante pour la cavité planaire de mêmes paramètres.

mêmes endroits que celles de Porto. Nous attribuons les défauts de nos résultats à un algorithme de recherche des zéros complexes insuffisamment performant¹⁸.

Sur les deux figures les modes "verticaux" apparaissent comme des bandes plates, alors

 $^{^{18}}$ Un algorithme très puissant, basé sur la théorie des fonctions analytiques, et bien adapté au problèmes de ce type peut être trouvé dans la référence [80].

que les modes horizontaux apparaissent au voisinage des repliements de la dispersion du plasmon de surface dans la première zone de Brillouin.

A la figure (3.8)(a),(b) le méthode est extrapolé pour le cas d'une "cavité complexe", qui contient les mêmes couches que les structures discutées dans le chapitre 2, mais avec un réseau métallique en or à la place du miroir supérieur. Les paramètres de la structure sont : réseau : $h = 0.4 \ \mu m$, $a = 7.5 \ \mu m$ et $d = 15.0 \ \mu m$, cavité planaire : couches de contact $C_a = C_b = 3 \times 10^{18} \ cm^{-3}$, $L_a = L_b = 0.3 \ \mu m$ et l'épaisseur de la cavité est de $L = 0.8 \ \mu m$. A la figure (3.8)(a) les relations de dispersion des modes sont tracées (points en rouges), par comparaison avec le repliement de la dispersion du mode TM fondamental, dans la première zone de Brillouin, d'une cavité planaire ayant les mêmes couches (en noir). L'épaisseur du réseau étant très faible par rapport à la longueur d'onde, seulement des modes horizontaux sont présents. On observe l'ouverture de bandes photoniques interdites au bord de la zone. A la figure (3.8)(b) l'absorption par propagation des modes photoniques est tracée, par comparaison avec l'absorption dans la structure planaire. On observe que les pertes sont supérieures dans la cavité hybride.

Les derniers calculs ne doivent être considérés qu'à titre d'illustration. En effet, pour les paramètres du réseau métallique utilisé (rapport cyclique a/d de 50%), les calculs ne convergent que pour un nombre de mode guidés dans les fentes supérieur à 5. Une autre approche, développée dans le paragraphe suivant, permet d'obtenir une information plus quantitative sur les phénomènes de diffraction dans ces structures.

3.4 Diffraction d'un mode de cavité par le réseau

Nous considérons ici les situations où le réseau modifie peu les modes guidés par le système multicouche. Une approche perturbative est alors possible, dans laquelle on peut calculer les pertes par diffraction subies par le mode guidé. Cette demarche est inspirée par le travail de Xu et al. [103]. Dans cette référence, on a étudié une cavité complexe, constituée de métal parfait et d'une couche de GaAs homogène. Le réseau est supposé d'épaisseur nulle et le champ électromagnétique est obtenu par maillage des conditions aux limites sur l'interface métal-diélectrique.

Nous reprenons ici le même problème, mais en appliquant la méthode modale, et prenant en compte les différentes couches du dispositif. On considère la polarisation TM, et une propagation non-oblique $\beta = 0$. Dans la pratique ceci est le cas d'un ruban laser inter-sous-bande, suffisamment étroit par rapport à la longueur d'onde.

Tout d'abord on calcule le mode guidé de la cavité planaire comportant les mêmes couches (le réseau est remplacé par une couche métallique homogène). On obtient ainsi les amplitudes (P_{k0}^e, Q_{k0}^e) d'ordre zéro dans la décomposition de Rayleigh. La démarche consiste ensuite à écrire les équations de diffraction comme dans le paragraphe 3.2.3, en annulant les termes de source extérieurs u^e , et en se servant des amplitudes (P_{k0}^e, Q_{k0}^e) comme nouveaux termes de source. Les deux contraintes suivantes doivent être respectées :

$$1 + \rho_{Mk}^{e0} R_{kM_2}^{e0} e^{2i\gamma_{k0}L_k} = 0, \quad R_0^e = 0 \tag{3.90}$$

On aboutit alors à l'équation suivante pour les amplitudes (A_m^e, B_m^e) des modes guidés dans les fentes :



FIG. 3.9 – Fraction de la puissance extraite par un réseau en or P_{out}/P_0 pour un dispositif avec couches de contact d'épaisseur $L_a = L_b = 0.3 \ \mu m$ et de dopage $C_a = C_b = 3 \times 10^{18}$ cm⁻³, et trois valeurs différentes pour l'épaisseur de la zone active L.

$$\begin{bmatrix} S_m \\ 0 \end{bmatrix} = (\overline{\overline{M}}_1 + \overline{\overline{M}}_{Sn \neq 0} \overline{\overline{M}}_2)_{\text{TM}} \begin{bmatrix} A_m^e \\ B_m^e \end{bmatrix}$$
(3.91)

$$S_m = \frac{1}{\alpha} I_{0m} \varepsilon_k Q_{k0}^e (1 + R_{kM_2}^{e0} e^{2i\gamma_{k0}L_k})$$
(3.92)

Dans la dernière équation, les matrices sont restreintes sur le cluster TM. En plus, dans la matrice des sommes, tous les termes contenant l'indice de Rayleigh n = 0 sont nuls.

Lorsqu'on résout l'équation de dispersion du mode, on trouve une fréquence complexe $\omega = \omega' + i\omega'' = f(\alpha)$. Cependant dans l'équation (3.91) on a utilisé un champ non-amorti $S_m(\omega')$ comme source; ceci revient à considérer un régime permanent dans lequel une source externe (telle que le pompage électrique dans un laser) reconstitue l'énergie du mode guidé. Ce point est important, car la definition des pertes par diffraction qui va suivre n'a de sens qu'en régime permanent.

Dans la suite on posera $Q_{k0}^e = 1$ (rappelons que le mode est défini à une normalisation près). On aura besoin de la composante \overline{S}_x du vecteur de Poynting, moyennée sur la

section du dispositif (la dimension transverse est prise comme égale à l'unité) :

$$\overline{S}_x = \frac{\omega'\varepsilon_0 \alpha |T_{kM_2}^e e^{i\gamma_k L_k}|^2}{\sum_i L_i} \sum_i \frac{\operatorname{Re}\{\varepsilon_i\}G_i}{|T_{iM_2}^e e^{i\gamma_i L_i}|^2}$$
(3.93)

Les coefficients G_i sont introduits dans l'annexe A. La composante verticale du vecteur de Poynting \overline{S}_z , rayonnée dans le substrat S, et moyennée sur une période, est donnée par

$$\overline{S}_z = \sum_{n \neq 0} \operatorname{Re}(\gamma_{an}) \frac{\varepsilon_a |R_{an}^e|^2}{\alpha_n^2}$$
(3.94)

Suivant la référence [103], on définit le coefficient de couplage du réseau C:

$$C = \frac{\overline{S}_z}{\overline{S}_x} \tag{3.95}$$

Les pertes par diffraction par unité de longueur A_g sont alors données par [103] :

$$A_g = \frac{\mathcal{C}}{\sum_i L_i} \tag{3.96}$$

Soient A les pertes par unité de longueur du mode guidé dans le système multicouche, obtenues par exemple par l'expression (2.22), et P_0 la puissance rayonnée dans le mode. Alors la puissance P_{out} découplée par le réseau s'écrira [104] :

$$P_{out} = P_0 \frac{A_g}{A_g + A} \tag{3.97}$$

A la figure 3.9 on a tracé la fraction de la puissance extraite P_{out}/P_0 du mode TM fondamental en fonction de la fréquence, pour une cavité complexe, pour trois épaisseurs L différentes de la région active de la cavité : $L = 10 \ \mu m$, 5 μm et 1 μm . La cavité possède des couches de contact d'épaisseur $L_a = L_b = 0.3 \ \mu m$ et de dopage $C_a = C_b = 3 \times 10^{18} \ cm^{-3}$. Le réseau possède les paramètres du paragraphe précédent : $h = 0.4 \ \mu m$, $a = 7.5 \ \mu m$ et $d = 15.0 \ \mu m$. Pour obtenir la convergence, on a utilisé M = 9 paires de modes guidés dans les fentes et $2 \times N + 1 = 41$ ordres de Rayleigh.

Le rapport P_{out}/P_0 reste faible devant 1, ce qui justifie à posteriori l'approche perturbative. Cependant, ce rapport reste élevé par rapport à la grandeur $T/\alpha l$ qui mesure l'extraction de la puissance par la tranche de la cavité (paragraphe 2.4.2, équation (2.57)), notamment pour les cavités de faible épaisseur.

Les résultats numériques montrent une ouverture des fenêtres d'extraction de largeur d'environ 2 THz. La *n*-ième fenêtre correspond à la condition que la composante γ_{an} soit un nombre réel. En plus, connaissant l'indice effectif du mode n_{eff} , introduit dans le paragraphe 2.2.4, on peut vérifier facilement que les fenêtres sont centrées autour d'une fréquence ν_c donnée par :

$$\nu_c = \frac{c}{dn_{eff}} \tag{3.98}$$



FIG. 3.10 - (a) Image par microscopie électronique du réseau métallique fabriqué au LPN, pour les expériences en transmission et réflexion dans le domaine THz. Le réseau a une épaisseur de h = 400 nm, période $d = 100 \mu$ et ouverture $a = 50 \mu$ m. Il est déposé sun un substrat Si d'épaisseur $L = 450 - 500 \mu$ m. (b) Dispositif expérimental pour les mesures THz résolues en temps [106].

Ce résultat est compatible avec la théorie habituelle des réseaux de diffraction de second ordre [105]. En particulier, on voit sur la figure 3.9 que pour la cavité la moins épaisse $L = 1 \ \mu m$, la fenêtre d'extraction se déplace vers les basses fréquences, ce qui est consistant avec les résultats du paragraphe 2.2.4, selon lesquels l'indice effectif du mode augmente lorsque l'épaisseur de la cavité diminue.

Sur la figure 3.9 on voit également que la puissance extraite de la cavité ne suit pas une évolution monotone avec l'épaisseur de la cavité; notamment l'extraction de la cavité est maximale pour la cavité d'épaisseur $L = 5 \ \mu m$. On peut expliquer ce comportement par le fait que si les pertes par diffraction A_g augmentent globalement lorsque l'épaisseur de la cavité diminue, les pertes par propagation A augmentent aussi, mais pas à la même vitesse; le rapport A_g/A suit alors une évolution non-monotone.

Nous avons également vérifié que pour une cavité d'épaisseur donnée le rapport P_{out}/P_0 augmente lorsque l'ouverture du réseau *a* augmente, ce qui est consistant avec les résultats de la référence [103].

On peut facilement modifier le modèle pour inclure les effets du gain d'un milieu laser (il suffit pour cela de modifier l'expression de la constante diélectrique de la zone active ε_1). Elle peut être ainsi mise en oeuvre pour l'optimisation des dispositifs laser. La nature semi-analytique du modèle permet une exploration plus rapide et efficace d'une large gamme de paramètres de conception par rapport à une modèle FDTD [73], avec une meilleure compréhension des effets physiques en jeu.

3.5 Vérification expérimentale dans le domaine THz

Le modèle présenté dans le paragraphe 3.2 à été testé expérimentalement par des mesures de transmission et réflexion dans le domaine THz. L'échantillon, fabriqué par C.Minot au LPN est montré à la figure 3.10(a). Il s'agit d'un réseau métallique en or, déposé sur un substrat de silicium à haute résistivité (les effets du dopage sont ainsi

évités). Les paramètres du réseau sont : période $d = 100 \ \mu m$, ouverture $a = 50 \ \mu m$, épaisseur $h \approx 400 \ nm$. L'épaisseur L du substrat est $L = 450 - 500 \ \mu m$. La surface de l'échantillon est de plusieurs centimètres carrés.

Les mesures ont été effectuées dans l'équipe de J.L. Coutaz dans la laboratoire LAHC de l'Université de Savoie. Le dispositif expérimental pour la mesure de la transmission/réflexion dans le domaine THz est montré à la figure 3.10(b) [106]. Il s'agit d'un dispositif typique pour des mesures THz résolues en temps. Il est constitué d'un émetteur et d'un récepteur THz, qui sont des photocommutateurs à base de *GaAs*, épitaxié à basse température, et excité par un laser Ti-Saphir femtoseconde [107], [108]. L'émetteur fournit des impulsions électromagnétiques dont le spectre s'étend de 0.1 à 4 THz. Après la traversée de l'échantillon au point A ou B (figure 3.10(b)), le profil temporel de l'impulsion est sondé dans le récepteur par un faisceau dérivé du faisceau laser principal et retardé, sur une plage temporelle typique de 150 ps. Le spectre de transmission est ensuite extrait par une transformée de Fourier, avec une résolution de quelques GHz.

Plusieurs mesures, en transmission et réflexion, et sous plusieurs angles, ont été effectués sur l'échantillon. A la figure 3.11(a),(b) on a représenté les résultats pour la transmission de l'ordre 0 à travers le réseau, pour une polarisation TM, en incidence classique, sous un angle de 25°. Le spectre à été obtenu entre 0.1 et 2.2 THz. Pour bien représenter les résultats sur la figure, le spectre est séparé en deux parties, entre 0.1 et 1 THz (figure 3.11(a)) et entre 1.0 et 2.2 THz (figure 3.11(b)).

Les résultats expérimentaux sont représentés par la courbe noire. En rouge on a tracé la transmission \mathcal{T}_0 à travers le réseau, comme fournie par le modèle numérique. L'épaisseur exacte du substrat, ainsi que la valeur n_1 de l'indice de réfraction du Si pour les fréquences THz sont considérés comme paramètres ajustables. Le meilleur accord avec l'expérience est obtenu pour les valeurs $L = 475 \ \mu m$ et $n_1 = 3.47$. Dans le calcul, on a retenu $M_e = 5$ modes guidés TM dans les fentes et $2 \times N + 1 = 41$ ordres de Rayleigh, pour obtenir la convergence. En fait l'expérience fournit non pas la transmission en énergie \mathcal{T}_0 , mais l'amplitude du champ électrique de l'onde, à partir de laquelle on a obtenu la transmission en énergie pour les comparaisons avec le modèle théorique, en prenant le module au carré de l'amplitude.

Pour le réseau de période $d = 100 \ \mu m$ on a calculé les fréquences correspondant aux ordres diffractées par le réseau. Sur la figure 3.11 on a représenté les ordres ± 1 et ± 2 de diffraction dans le substrat. Les ordres correspondants à la diffraction dans l'air ne sont pas représentés, car leurs fréquences sont ≥ 2.0 THz.

L'aspect le plus marquant des spectres de la figure 3.11 est le caractère oscillatoire de la transmission en fonction de la fréquence. Ces oscillations sont dues à la présence du substrat, dont l'épaisseur est comparable avec les longueurs d'onde sondées. Avant la fréquence $\nu_{-1} = 0.78$ THz du premier ordre diffracté, on a un phénomène classique des oscillations Fabry-Perot de la transmission. Les minima/maxima de la transmission sont séparés par une distance de ≈ 0.09 THz, ce qui est en accord avec la valeur théorique obtenue par la formule $\Delta \nu_{\text{Fabry-Perot}} = c/(2n_1L)$.

Remarquons qu'en vertu de la loi de Descartes, l'angle de propagation dans le substrat θ_1 et lié à l'angle d'incidence θ selon la formule $\sin \theta_1 = \sin \theta/n_1$. A cause de la valeur élevée de l'indice $n_1 = 3.47$ la propagation dans le substrat se fait toujours pratiquement sur la normale.



FIG. 3.11 – Spectres de transmission en énergie de l'échantillon de la figure 3.10(a) (en noir), superposés avec les spectres théoriques pour un substrat d'épaisseur $L = 475 \ \mu m$ et d'indice $n_1 = 3.47$, pour une onde incidente sous un angle de 25°. Le spectre est divisé en deux partie : (a) de 0.1 à 1 THz et (b) de 1.0 à 2.2 THz.


FIG. 3.12 – Les trois familles de fréquences (3.100), (3.102) et (3.104) tracées en fonction de l'index entier P. Les fréquences expérimentales (en ronds bleus) sont superposés avec les fréquences théoriques.

En régime de diffraction, il y a beaucoup plus de minima/maxima, et leur nombre varie en fonction de la fréquence. Comme on le voit sur la figure 3.11, la variation de la densité des minima/maxima par intervalle de fréquence est corrélée avec l'apparition des ordres diffractés.

Pour comprendre l'origine des variations de la transmission nous allons considérer le cas de l'incidence normale $\theta = 0$. Dans la décomposition de Rayleigh du champ dans le substrat, considérons les ordres 0 et ± 1 , qui sont les seules ondes propagatives dans cette gamme de fréquences :

$$P_0 e^{ik_0 n_1 z} + Q_0 e^{-ik_0 n_1 z} + (P_1 e^{i\gamma_1 z} + Q_1 e^{-i\gamma_1 z}) e^{\frac{\pm i2\pi x}{d}}$$
(3.99)

avec une origine de phase prise en z = 0, qui sera l'interface réseau-substrat. Les ordres ± 1 sont dégénérés en incidence normale.

On peut comprendre l'évolution des ondes radiatives dans le substrat en termes de rayons lumineux, qui effectuent plusieurs allers-retours entre les interfaces, après des réflexions et diffractions multiples. Par exemple, un rayon d'ordre 0, se propageant vers le réseau, peut devenir, après réflexion et diffraction sur le réseau, un rayon d'ordre ± 1 , et vice versa.

La condition d'interférence constructive des rayons d'ordre 0, qui ne subissent que des réflexions, fournit une famille de fréquences pour les maxima de transmission possibles :

$$\nu_0(P) = P \frac{c}{2n_1 L}, \quad P \in \mathbb{N}$$
(3.100)

Maintenant considérons un aller-retour dans le substrat d'un rayon d'ordre 0, qui

devient rayon d'ordre +1 après diffraction et réflexion sur le réseau. La condition d'interférence constructive entre le rayon d'ordre 0 et le rayon d'ordre +1, après l'aller-retour, s'écrira :

$$L(\gamma_1 + n_1 k_0) = 2\pi P \tag{3.101}$$

On peut montrer facilement que cette condition mène à la famille de fréquences suivante :

$$\nu_{0\pm 1}(P) = \nu_0(P) + \frac{\Delta^2}{4\nu_0(P)} \tag{3.102}$$

avec $\nu_0(P)$ toujours donné par la formule (3.100) et Δ dénotant la quantité :

$$\Delta = \frac{c}{n_1 d} = 0.865 \text{ THz}$$
(3.103)

De même, la condition d'interférence constructive entre deux rayons d'ordre ± 1 fournit la famille :

$$\nu_{\pm 1\pm 1}(P) = \sqrt{\nu_0(P)^2 + \Delta^2} \tag{3.104}$$

A la figure 3.12 on a tracé les fréquences des maxima comme fournies par les trois familles écrites plus haut, en fonction du nombre entier P. Les fréquences obtenues sont comparées aux valeurs expérimentales, tirées d'un spectre en incidence normale $\theta = 0$ non représenté ici. Les fréquences expérimentales se répartissent bien sur les branches des trois familles, montrant un bon accord entre les observations et le modèle simple des interférences.

Jusqu'à maintenant on n'a expliqué que les maxima de la transmission. Les minima de la transmission s'expliquent de manière analogue; ces minima correspondent en fait aux modes guidés du système substrat-réseau.

En conclusion, on a un très bon accord entre l'expérience et les calculs de diffraction développés dans les paragraphes précédents. Un modèle simple qui explique les maxima dans les courbes de transmission en termes d'interférences entre rayons réfléchis et diffractés permet de comprendre qualitativement les résultats.

Chapitre 4

Source en microcavité complexe

4.1 Rétrospective des travaux existant dans la littérature

Outre que la proposition fondatrice de Purcell [1], qui démontre que la dynamique de désexcitation d'un dipôle dépend de son environnement électromagnétique, un développement considérable à été inspiré ces dernières années par le travail de Eli Yablonovitch publié en 1987 [109]. Yablonovitch propose de placer la source dipolaire dans un milieu dont la constante diélectrique est modulée périodiquement à l'échelle de la longueur d'onde, dans les trois directions de l'espace. Le "cristal photonique" ainsi obtenu pourrait posséder une bande interdite photonique omnidirectionelle, ce qui permettrait l'inhibition totale de l'émission spontanée de la source à cause de l'absence de densité d'états disponibles pour le rayonnement.

De manière plus générale, en plaçant un dipôle au voisinage d'un objet structuré périodiquement, on peut obtenir à la fois une modification de la dynamique de la source, et une redistribution de l'énergie électromagnétique rayonnée dans le champ lointain de la source. Ces deux effets sont conditionnés d'une part par la géométrie de l'environnement de la source : par exemple sa structuration périodique peut servir à redistribuer la densité d'états, et d'autre part par sa nature électromagnétique : ainsi des objets métalliques ou autres à forte densité de charges libres peuvent supporter des modes plasmons de surface, ce qui modifie aussi la densité d'états du rayonnement.

La grande quantité de travaux qui existent dans la littérature, et qui exploitent ces deux effets, peut être classifiée en deux courants. Dans le premier on s'intéresse à l'émission d'une source placée au voisinage d'un objet diélectrique ou métallique unique, de taille comparable ou inférieure à la longueur d'onde rayonnée (il s'agit d'un "nano"-objet pour les longueurs d'onde dans le visible). Ces études sont menées dans le contexte de la spectroscopie Raman par l'exaltatée par la surface¹⁹ (voir, par exemple [110], [111],[112], [113]). L'idée est d'exploiter le renforcement du champ électrique produit par la diffraction d'une onde plane incidente sur un point ou un coin nanoscopique [114]. La modification de l'émission spontanée d'une source située au voisinage d'une pointe ou d'un coin est

¹⁹L'acronyme anglais SERS est plus explicite : Surface Enhanced Raman Spectroscopy.

également étudiée dans la littérature par différentes méthodes théoriques [115], [116], [117], [118], [119]. La modification de l'émission par effets d'excitation des plasmons de surfaces portés par des nano-sphères métalliques était aussi envisagée [120], [121]. La redistribution du rayonnement d'une molécule unique au voisinage des nano-objets métalliques à été récemment mise en évidence expérimentalement par Gersen et al. [122].

Dans le deuxième courant, plutôt que des objets uniques, on considère des milieux structurés périodiquement à l'échelle de la longueur d'onde. L'une des premières explorations théoriques dans cet esprit est le travail de Agarwal et Kunasz [123]. Les auteurs considèrent un dipôle émettant au voisinage d'une surface de profil arbitraire. Ils calculent la puissance rayonnée par la source en utilisant la décomposition en ondes planes et en considérant que le profil est une faible perturbation à la surface plane (dans cette approximation la surface apparaît comme ayant un profil sinusoïdal). Le contexte de l'étude est la conversion des modes de plasmons de surface en ondes radiatives. Plus tard Leung et al. [124],[125], [126] utilisent la même méthode pour calculer la dynamique de la source au voisinage des surfaces ou couches fines au profil de sinusoïdes. Une étude expérimentale des temps moléculaires de désexcitation des molecules au voisinage d'une couche mince sinusoïdale fut donnée par Amos et Barnes en 1999 [127].

Dans les années 90, Suzuki et Yu effectuent une série d'études tant théoriques qu'expérimentales sur l'émission d'une source dipolaire dans des structures photoniques 2D et 3D. Dans leur article de 1995 [128] ils calculent la puissance rayonnée par une source à l'intérieur d'un cristal photonique diélectrique en réseau cubique face centrée. Ils démontrent l'inhibition totale de l'émission spontanée dans la bande photonique interdite, prédite par Yablonovitch, ainsi qu'une renforcement de l'émission au voisinage des bords de bande. Leur travail de 1996 [129] est une comparaison entre la théorie et l'expérience pour un réseau carré de cylindres diélectriques, dans le domaine des micro-ondes.

Plus récemment, des résolutions exactes pour la puissance émise d'une source dans une structure diélectrique comportant des fentes ou des plots diélectriques de périodicité 1D et 2D ont été données, par exemple par Rigneault et al. [45] et Delbeke et al. [130]. Leurs méthodes numériques sont basées sur la décomposition en ondes planes, la matrice de diffusion et la méthode RCWA. Le contexte des études était l'optimisation de l'extraction de la lumière émise par les diodes lasers. Il existe également de nombreux travaux récents expérimentaux sur le problème de l'extraction de la lumière et de la modification de l'émission spontanée : Borodisky et al. [131], Fehrembach et al. [132], etc. pour le domaine optique, Lee at al. [133], Colombelli et al. [75] pour le proche et moyen infrarouge.

Dans notre article de 2005 [90], nous avons étudié l'émission d'une source ponctuelle au voisinage d'un réseau de fentes métalliques suspendu dans l'air. La diffraction par le réseau était calculée par la version simplifiée de la méthode modale de Porto et al. [89]. Dans cet article, nous fournissons des résultats à la fois sur le champ rétro-réfléchi, la puissance émise et la distribution de l'intensité du champ lointain. Le domaine de fréquences est l'infrarouge proche et lointain. L'étude qui va suivre est d'abord une généralisation du modèle présenté en [90], qui ensuite sera adapté aux dispositifs THz.

4.2 Position du problème

Le dispositif auquel on s'intéresse est décrit à la figure 4.1(a). Il s'agit de la "cavité complexe", décrite dans le chapitre 3, comportant un réseau de fentes métalliques qui servira à découpler le rayonnement inter-sous-bandes perpendiculairement à la surface du dispositif. Comme dans le chapitre 3 les paramètres principaux du réseau sont : sa période d, l'ouverture entre les fentes a et l'épaisseur des fentes h. Cette fois-ci une source dipolaire se trouve à l'intérieur de la cavité.

Une image par microscope électronique d'un dispositif typique est montrée à la figure 4.1(b). Cette image donne les dimensions typiques : une ouverture du réseau $a = 7.5 \ \mu m$, période $d = 15.0 \ \mu m$, épaisseur du réseau $h = 0.4 \ \mu m$. L'ensemble de la cascade quantique avec les couches de contact a une épaisseur typique de quelques microns. La largeur typique du dispositif est de 200 μm . Dans les modélisation présentées ici le dispositif sera considéré comme infini dans le plan Oxy (voir figure 4.1(a)).

Le problème électromagnétique à résoudre consiste à déterminer le champ électromagnétique crée par le dipôle ponctuel et vertical en tout point de l'espace. En particulier, on s'intéressera à la puissance électromagnétique rayonnée par la source à travers le réseau, qui est dans le domaine THz la quantité observable expérimentalement. On cherchera l'emprunte de la modification du taux d'émission de la source dans l'évolution de la puissance avec la réduction de l'épaisseur de la cavité²⁰. Connaissant le champ dans tout l'espace, on pourra également calculer le champ rétro-réfléchi sur le site du dipôle, qui fournit le taux d'émission spontanée total.

Du point de vue mathématique il s'agit de trouver les solutions des équations de Maxwell pour le champ électrique \mathbf{E} et magnétique \mathbf{H}^{21} :

$$\nabla \times \mathbf{E} - i\omega\mu_0 \mathbf{H} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{H} + i\omega\varepsilon_0\varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E} = -i\omega\mathbf{p}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r_0})$$
(4.1)

en tenant compte des conditions aux limites, qui sont comme dans le chapitre 3 la continuité des composantes du champ parallèles aux interfaces diélectrique-diélectrique et la condition aux limites d'impédance de surface (3.26) sur les faces métalliques. Ici \mathbf{r}_0 est le vecteur position du dipôle qui se trouve dans un milieu diélectrique et homogène de constante diélectrique $\varepsilon(\mathbf{r} \approx \mathbf{r}_0) = \varepsilon_1$. On peut toujours séparer les champs \mathbf{E} et \mathbf{H} dans la couche du dipôle ε_1 en deux parties :

$$E = E_{dip} + E_{r}$$

$$H = H_{dip} + H_{r}$$
(4.2)

Le couple $(\mathbf{E}_{dip}, \mathbf{H}_{dip})$ décrit le champ rayonné par le dipôle dans un diélectrique homogène et infini de constante ε_1 , déjà décrit dans le paragraphe 1.3.3 du chapitre 2.

 $^{^{20}}$ Voir la figure 2.11(a) pour le cas de la cavité planaire.

 $^{^{21}}$ Les deux autres paires d'équations de Maxwell sont satisfaites automatiquement, car les champs auxquels on a affaire sont transverses.



FIG. 4.1 - (a) Schéma du dispositif étudié dans ce chapitre. Il est constitué d'une cascade quantique avec ses couches de contact en sandwich entre un miroir métallique et un réseau métallique qui servira à découpler le rayonnement inter-sous-bande. Sur le schéma on a également indiqué les notations qui seront utilisées pour les équations présentées dans le paragraphe 4.3. Les notations des paramètres du réseau sont les mêmes que dans le chapitre 3. La structure est considérée comme infinie dans le plan Oxy. Comme l'invariance par translation dans la direction Ox est brisée, la position du dipôle à l'intérieur de la cascade quantique est maintenant repérée par deux paramètres : x_0 et L_1 . (b) Photographie par microscope électronique d'un dispositif réel. Le réseau est constituée pour ce dispositif par un alliage Au-Ge-Ni. Le miroir inférieur est la couche grise sur laquelle est "posé" le dispositif. Il est constitué d'un alliage Au-In. Plus de précisions sur la fabrication sont données dans la deuxième partie du manuscrit. Cette photographie est destinée à donner une idées sur les ordres de grandeur des paramètres de la cavité complexe pour les dispositifs réels.

En remplaçant cette décomposition dans les équations de Maxwell (4.1) on trouve que le couple $(\mathbf{E_r}, \mathbf{H_r})$ satisfait les équations de Maxwell homogènes, sans seconde membre. Ce champ est engendré par la présence des parois de la cavité et il apparaît comme une correction sur le champ du dipôle libre. Il intervient, en particulier, dans la formule pour le taux d'émission spontanée par le champ rétro-réfléchi.

Les équations de Maxwell, ainsi que les conditions aux limites sont linéaires. La stratégie sera d'utiliser la décomposition en ondes planes du champ du dipôle libre du paragraphe 1.3.3 pour réduire le problème à celui de la diffraction par la cavité complexe d'une onde plane en incidence arbitraire : problème déjà traité dans le chapitre 3. Le champ total rayonné par le dipôle sera reconstitué ensuite par une intégration numérique sur les ondes planes diffractées. Ce travail est effectué dans le paragraphe 4.3.

Les résultats numériques sont présentés et discutés dans le paragraphe 4.4

4.3 Dipôle vertical en cavité complexe

4.3.1 Décomposition en sources quasi-périodiques

Rappelons que le champ du dipôle admet ψ_{dip} la décomposition en ondes planes suivante (voir équation (1.66) du paragraphe 1.3.3) :

$$\psi_{dip} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\beta \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\alpha u(\alpha, \beta) e^{i(\alpha x + \beta y + \gamma z)}$$
(4.3)

(pour simplifier on considère une seule direction de propagation). Chaque onde plane $u(\alpha, \beta)$ de cette décomposition est diffractée sur le réseau et le champ résultant se présente sous la forme d'une décomposition de Rayleigh (3.6). Après la resommation sur toutes les ondes planes on obtient le champ total de la forme :

$$\psi = \int_{-\infty}^{\infty} d\beta \int_{-\infty}^{\infty} d\alpha \sum_{n \in \mathbb{Z}} R_n(\alpha, \beta) e^{i(\alpha_n x + \beta y + \gamma_n z)}, \qquad \alpha_n = \alpha + n \frac{2\pi}{d}$$
(4.4)

Dans cette décomposition le nombre α varie de $-\infty$ à $+\infty$. Il faut explorer alors une grande plage des paramètres pour décrire le champ électromagnétique. Il existe une autre décomposition [45], appelée décomposition en sources quasi-périodiques, pour laquelle le nombre α est restreint à varier dans la première zone de Brillouin du réseau $-\pi/d \leq \alpha \leq$ π/d . Pour l'obtenir on divise le domaine d'intégration en segments $[2\pi k/d - \pi/d, 2\pi k/d +$ $\pi/d]$. Dans le segment k on effectue le changement de variable $\alpha \rightarrow \alpha - 2\pi k/d$ pour obtenir :

$$\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\beta \int_{-\pi/d}^{\pi/d} \mathrm{d}\alpha \sum_{n} \sum_{k} R_{n}(\alpha_{-k}, \beta) e^{i(\alpha_{n-k}x + \beta y + \gamma_{n-k})z}$$
(4.5)

Avec le changement de l'indice m = n - k les sommes peuvent être réorganisées sous la forme :

$$\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\beta \int_{-\pi/d}^{\pi/d} \mathrm{d}\alpha \sum_{m} \sum_{n} R_n(\alpha_{m-n}, \beta) e^{i(\alpha_m x + \beta y + \gamma_m z)}$$
(4.6)

Introduisons alors des nouvelles amplitudes "quasi-périodiques" :

$$\tilde{R}_m(\alpha) = \sum_n R_n(\alpha_{m-n}) \tag{4.7}$$

et alors on obtient une nouvelle décomposition de Rayleigh :

$$\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\beta \int_{-\pi/d}^{\pi/d} \mathrm{d}\alpha \sum_{m} \sum_{n} \tilde{R}_{m}(\alpha, \beta) e^{i\alpha_{m}x + i\beta y + i\gamma_{m}z}$$
(4.8)

dans laquelle les variables α et β sont contraintes de varier dans la première zone de Brillouin du réseau. C'est cette décomposition (4.8) qui est appelée "décomposition en sources quasi-périodiques". La formule (4.7) donne le lien entre les amplitudes quasipériodiques et les amplitudes ordinaires.

Appliquons cette décomposition au champ du dipôle (4.3). La seule composante de Rayleigh est la composante d'ordre 0, $u(\alpha)$. Avec (4.7) on obtient les amplitudes quasipériodiques :

$$\tilde{u}_m(\alpha) = u(\alpha_m) \tag{4.9}$$

L'ensemble des sources $\tilde{u}_m(\alpha)$ constitue une source quasi-périodique, car le changement de variable $\alpha \to \alpha + 2\pi k/d$ préserve cet ensemble. Outre le domaine de variations restreint de (α, β) , l'avantage de la source quasi-périodique est qu'une composante $\tilde{u}_m(\alpha)$ et couplée avec un et un seul ordre de Rayleigh $\tilde{R}_m(\alpha)$ du champ réfléchi.

4.3.2 Équation pour les amplitudes diffractées

Nous allons appliquer maintenant les résultats du paragraphe 3.2 dans le cas de notre dispositif THz. Les principaux ingrédients du modèle sont donnés à la figure 4.1(a). Rappelons que le champ dans le réseau est caractérisé par des paires d'amplitudes $A_m^{e,h}, B_m^{e,h}$ des modes dans les fentes décrits dans le chapitre précédent. La figure reprend également les notations du chapitre 2 pour le champ dans les multi-couches . La source est implantée à l'intérieur du système multi-couche (voir figure 2.1) : les milieux "a" et "b" sont les couches dopées, et le milieu "1" est la cascade quantique contenant le dipôle. Comme au chapitre 2, la source est décrite par une paire d'ondes planes contra-propageantes u et d, qui deviennent ici les composantes d'une source quasi-périodique :

$$\tilde{u}_{n}^{e} = \tilde{d}_{n}^{e} = p \frac{i\mu_{0}\omega^{2}}{8\pi^{2}\gamma_{1n}} \left(1 - \frac{\gamma_{1n}^{2}}{\varepsilon_{1}k_{0}^{2}}\right) e^{-i\alpha_{n}x_{0}}$$
(4.10)

On a explicitement pris en compte la position du dipôle x_0 par rapport au réseau, car l'invariance par translation est maintenant brisée dans la direction de l'axe Ox. L'origine de l'axe est choisie comme à la figure 4.1(a) : sur l'une des interfaces métal-diélectrique ε_r .

Par rapport aux équations écrites dans le paragraphe 3.2 et la figure 4.1(a) le rôle du milieu k est joué par la couche de contact a. Les amplitudes quasi-périodiques $\tilde{P}_{an}^{e,h}$ et $\tilde{Q}_{an}^{e,h}$

106

4.3. Dipôle vertical en cavité complexe

sont couplées avec le champ du dipôle via les équations :

$$\tilde{P}_{an}^{e} = \tilde{Q}_{an}^{e} R_{aM_{2}}^{en} e^{2i\gamma_{an}L_{a}} + t_{1a}^{en} e^{i\gamma_{1a}L_{a}} \frac{u_{n}^{e} e^{i\gamma_{1n}L_{1}} + R_{1M_{2}}^{en} d_{n}^{e} e^{i\gamma_{1n}(2L-L_{1})}}{1 + \rho_{a1}^{en} R_{1M_{2}}^{en} e^{2i\gamma_{1n}L}},$$
(4.11)

$$\tilde{P}^h_{an} = \tilde{Q}^h_{an} R^{hn}_{aM_2} e^{2i\gamma_{an}L_a} \tag{4.12}$$

On rappelle que pour le dipôle vertical le champ $h_z^{u,d} = 0$. En suivant la démarche expliquée au paragraphe 3.2.3, on obtient l'équation suivante pour les amplitudes $A_m^{e,h}$ et $B_m^{e,h}$:

$$(\overline{\overline{M}}_{1} + \overline{\overline{M}}_{S}\overline{\overline{M}}_{2})_{(m'm)} \begin{bmatrix} A_{m}^{e} \\ B_{m}^{e} \\ A_{m}^{h} \\ B_{m}^{h} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sum_{n} I_{nm'}^{+} \alpha_{n} \sigma_{n} \\ 0 \\ \sum_{n} J_{nm'}^{+} \beta \sigma_{n} \\ 0 \end{bmatrix}$$
(4.13)

Remarquons que la matrice $\overline{\overline{M}}_S$ possède déjà les propriétés de quasi-périodicité (il suffit de considérer les sommes (3.61)-(3.68)), et donc la matrice du système $\overline{\overline{M}}_1 + \overline{\overline{M}}_S \overline{\overline{M}}_2$ aussi. On adoptera la normalisation du paragraphe 3.2.3 du champ magnétique et des vecteurs d'ondes. La grandeur σ_n introduite ici, représentant la source, s'exprime :

$$\sigma_n = \eta T_{M1}^{en} \frac{e^{i\gamma_{1n}L_1} + R_{1M_2}^{en} e^{i\gamma_{1n}(2L-L_1)}}{1 + \rho_{a1}^{en} R_{1M_2}^{en} e^{2i\gamma_{1n}L}} e^{-i\alpha_n x_0}$$
(4.14)

Pour toutes les autres notations il faut consulter le chapitre 3.

Une fois les amplitudes $A_m^{e,h}$, $B_m^{e,h}$ obtenues par la résolution numérique de (4.13), on peut remonter jusqu'au champ qui se propage dans les multi-couches avec la démarche décrite dans le paragraphe 3.2.3.

4.3.3 Champ rayonné à l'extérieur de la cavité

Expérimentalement, on cherchera les empreintes des effets d'électrodynamique sur le rayonnement du dipôle dans la puissance récoltée à travers le réseau de la cavité complexe.

Une représentation visuelle de l'énergie rayonnée par angle solide dans une direction donnée est un diagramme de rayonnement. Pour le problème de dipôle qui nous intéresse ici, un diagramme bien adapté est celui introduit par Zengerle [134], qui est expliqué à la figure 4.2. On s'intéressera au champ rayonné dans le demi-espace infini A. Le champ rayonné dans la direction $\mathbf{k} = (\alpha, \beta, \gamma_{0A})$ s'exprime à partir des amplitudes de Rayleigh $\tilde{T}_{An}^{e,h}(\alpha,\beta)$ (voir la figure 4.1(a) pour les notations), vues comme des fonctions du vecteur d'onde planaire (α,β) . Les trois composantes étant liées par la formule $\varepsilon_A = \alpha^2 + \beta^2 + \gamma_{0A}^2$, à chaque direction de l'espace on peut associer un point (α,β) du cercle radiatif (voir aussi figure 1.2(b)). Il suffit alors de tracer la puissance rayonnée par unité d'angle solide d Ω (qui s'exprimera à travers les amplitudes $\tilde{T}_{An}^{e,h}(\alpha,\beta)$) en fonction de (α,β) pour obtenir la représentation voulue.



FIG. 4.2 – Construction du diagramme de rayonnement d'une source rayonnant dans le demi-espace A. Le champ lointain de la source est constitué d'un ensemble d'ondes planes, de vecteurs d'ondes $\mathbf{k} = (\alpha, \beta, \gamma_{0A})$, qui pointent dans la direction de propagation de l'onde, et d'amplitudes $\tilde{T}_{An}^{e,h}(\alpha,\beta)$. Les trois composantes du vecteur d'onde étant liées par $\varepsilon_A = \alpha^2 + \beta^2 + \gamma_{0A}^2$ (en notations réduites), il ne reste plus que les deux degrés de libertés (α, β) , pour décrire la direction de l'onde, qui correspondent en fait à un point à l'intérieur du cercle radiatif C. Pour avoir l'intensité rayonnée en fonction de la direction, on peut donc reporter cette dernière dans un cercle, obtenant ainsi un diagramme de Zengerle [134].

Pour obtenir une grandeur sans dimension, on va normaliser l'intensité rayonnée par la puissance totale P_1 rayonnée par le dipôle dans un milieu diélectrique infini d'indice n_1 , déjà introduite par les formules (2.34) et (1.52) :

$$P_1 = n_1 \frac{\mathbf{p}^2 \omega^4}{12\pi\varepsilon_0 c^3} \tag{4.15}$$

Soient $\tilde{T}_{nA}^{e,h}(\alpha,\beta)$ les amplitudes quasi-périodiques du champ rayonné dans le milieu A, obtenues par inversion de l'équation (4.13). Elles s'expriment à partir des formules :

$$\tilde{T}_{nA}^e = -\eta t_{MA}^{en} \frac{\alpha_n \Sigma_{An}^x + \beta \Sigma_{An}^y}{2}, \qquad \tilde{T}_{nA}^h = -t_{MA}^{hn} \frac{\beta \Sigma_{An}^x - \alpha_n \Sigma_{An}^y}{2}$$
(4.16)

Rappelons que les quantités $\Sigma_{an}^{x,y}$ sont liées aux solutions $A_m^{e,h}$, $B_m^{e,h}$ de l'équation (4.13) par une formule de type (3.52).

Alors la puissance normalisée $dI/P_1 d\Omega$, rayonnée dans la direction (α, β) par unité d'angle solide $d\Omega$ s'écrit :

$$\frac{1}{P_1} \frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{3}{8\pi} \frac{n_A}{n_1} \gamma_{A0}^2 \frac{\varepsilon_A |\tilde{T}_{nA}^e(\alpha_{ZB},\beta)|^2 + |\tilde{T}_{nA}^h(\alpha_{ZB},\beta)|^2}{\varepsilon_A - \gamma_{A0}^2}$$
(4.17)

4.3. Dipôle vertical en cavité complexe

L'ordre n est choisi de telle manière que la quantité α_{ZB} est dans la première zone de Brillouin :

$$\alpha_{ZB} = \alpha - n\frac{\lambda}{d} \in \left[-\frac{\lambda}{2d}, \frac{\lambda}{2d}\right]$$
(4.18)

(Pour les vecteurs d'ondes normalisés, la zone de Brillouin s'écrit $\left[-\frac{\lambda}{2d}, \frac{\lambda}{2d}\right]$). La formule (4.17) est démontrée dans l'annexe C. C'est cette dernière expression qu'on a utilisée pour les calculs numériques de la puissance extraite du dispositif.

Essayons maintenant de relier l'expression (4.17) à une quantité observable expérimentalement. La formule (4.17) donne la puissance extraite dans une direction donnée, pour une position particulière du dipôle, repérée par les paramètres L_1 et x_0 de la figure 4.1(a). Dans l'expérience, on a un angle solide de collection Ω_1 est on récolte la puissance d'un grand nombre de sources réparties sur toute la zone active du dispositif. Introduisons la puissance moyenne $\langle P \rangle$ récoltée par un seul dipôle :

$$\frac{\langle P \rangle}{P_1} = \int_{\Omega_1} \left\langle \frac{1}{P_1} \frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}\Omega} \right\rangle \Big|_{L_1, x_0} \mathrm{d}\Omega \tag{4.19}$$

Vu la périodicité du système on peut restreindre la moyenne sur une seule période du réseau. On a évidement négligé dans le calcul tout effet de taille finie du dispositif.

Les sources étant supposées incohérentes entr'elles, la puissance totale récoltée est la somme des puissances rayonnées par chaque source. Nous allons voir plus loin que pour un dispositif inter-sous-bande à cascade quantique de N périodes, pompé électriquement par un courant I, le nombre de dipôles excités en régime permanent est $NI/e\Gamma_{nr}$, Γ_{nr} étant le taux des transitions non-radiatives et e la charge de l'électron. La puissance expérimentale P_{tot} récoltée par le réseau du dispositif s'écrit alors :

$$P_{tot} = \frac{NI}{e\Gamma_{nr}} \langle P \rangle \tag{4.20}$$

La quantité P_{tot} , introduite par cette formule, est précisément la quantité qu'on mesure expérimentalement. Il faut cependant prendre en compte la largeur spectrale de la source inter-sous-bande, ce qui sera fait dans le paragraphe 4.4.4.

Comment la mesure de cette quantité peut-elle donner des indications sur les effets d'électrodynamique de cavité? En fait, la mesure de (4.20) ne donne en aucun cas *directement* l'émission spontanée dans la cavité. Par contre, nous pouvons étudier expérimentalement les variations de la grandeur P_{tot} avec les paramètres de la cavité (épaisseur de la zone active L, période du réseau d), et essayer de les comparer à la théorie. Si le modèle est conforme à l'expérience, alors on pourra en tirer des conclusions sur les phénomènes physiques à l'intérieur de la cavité.

Pour rendre les expressions données ici plus conformes à celles trouvées habituellement dans les références, remarquons qu'on peut toujours écrire la puissance moyenne rayonnée par un dipôle $\langle P \rangle$ au taux de l'émission spontanée Γ_{sp} par la formule :

$$\langle P \rangle = \eta_{col} \Gamma_{sp} \hbar \omega \tag{4.21}$$

La grandeur η_{col} introduite ici est l'efficacité de collection. La formule (4.21) exprime simplement le fait que l'effet Purcell qu'on cherche à mettre en évidence est "contaminé" par un effet d'extraction par le réseau. Nous ne disposons pas d'autre moyen que les modélisations qui vont suivre pour séparer les deux effets.

4.3.4 Champ rétro-réfléchi

Pour établir l'expression du champ rétro-réfléchi sur le site du dipôle on va procéder comme dans le paragraphe 2.3.1. La source est caractérisée par les composantes u et d(champs rayonnés vers le haut et vers le bas) introduites dans ce paragraphe. Les amplitudes de Rayleigh utilisées ici sont les amplitudes ordinaires, i.e. non quasi-périodiques.

Tout d'abord, on utilise (3.51) qui fournit le lien entre les amplitudes P_{an}^e et Q_{an}^e :

$$Q_{an}^e + \rho_{Ma}^{en} P_{an}^e = \frac{\alpha_n \Sigma_{an}^x + \beta \Sigma_{an}^y}{\gamma_{na} + \eta \varepsilon_a} = \eta t_{Ma}^{en} \frac{\alpha_n \Sigma_{an}^x + \beta \Sigma_{an}^y}{2}$$
(4.22)

On a fait apparaître ici le "champ efficace" du réseau, introduit dans le paragraphe 3.2.4. En propageant cette équation dans les couches à l'aide des équations (2.8), on obtient un premier lien entre les amplitudes P_{1n}^e et Q_{1n}^e dans la couche contenant le dipôle :

$$Q_{1n}^e - (P_{1n}^e + \delta_{0n} u e^{i\gamma_1 L_1}) R_{1M}^{en} = \eta T_{M1}^{en} \frac{\alpha_n \Sigma_{an}^x + \beta \Sigma_{an}^y}{2}$$
(4.23)

Le deuxième lien exprime, comme dans (2.24), la réflexion sur les multicouches :

$$R_{1M_2}^{en}(Q_{1n}^e e^{i\gamma_{1n}L} + \delta_{0n}de^{i\gamma_1(L-L_1)}) + P_{1n}^e e^{-i\gamma_{1n}L} = 0$$
(4.24)

En inversant le système (4.23) et (4.24) on obtient facilement la composante selon Oz du champ électrique rétro-réfléchi sur le dipôle :

$$\sum_{n} P_{1n}^{e} e^{i(\alpha_{n}x_{0}-\gamma_{1n}L_{1})} + Q_{1n}^{e} e^{i(\alpha_{n}x_{0}+\gamma_{1n}L_{1})} = \frac{uR_{1M}e^{2i\gamma_{1}L_{1}} + dR_{1M_{2}}e^{2i\gamma_{1}(L-L_{1})} + (u+d)R_{1M}R_{1M_{2}}e^{2i\gamma_{1}L}}{1 - R_{1M}R_{1M_{2}}e^{2i\gamma_{1}L}}$$

$$+ \sum_{n} \eta T_{M1}^{en} \frac{e^{i\gamma_{1n}L_{1}} + R_{1M_{2}}^{en}e^{i\gamma_{1n}(2L-L_{1})}}{1 - R_{1M}^{en}R_{1M_{2}}^{en}e^{2i\gamma_{1n}L}} \frac{\alpha_{n}\Sigma_{an}^{x} + \beta\Sigma_{an}^{y}}{2} e^{i\alpha_{n}x_{0}}$$

$$(4.25)$$

Le champ rétro-réfléchi apparaît clairement comme une contribution d'une cavité fictive planaire, délimitée par deux miroirs métalliques infinis, et une correction provenant du réseau, qui correspond à la dernière ligne de (4.25). La contribution du réseau peut être vue comme provenant de la diffusion du champ total rayonné vers le réseau à partir de la couche 1 et recyclé par la cavité (le recyclage s'exprime par le dénominateur $1 - R_{1M}^{en} R_{1M_2}^{en} e^{2i\gamma_{n1}L})^{22}$.

Le taux d'émission spontanée global Γ/Γ_{0cl} apparaît ainsi comme somme des deux contributions :

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_{0cl}} = \frac{\Gamma}{\Gamma_{0cl}}\Big|_{plan} + \frac{\Gamma}{\Gamma_{0cl}}\Big|_{res}$$
(4.26)

²²Cette séparation et les interprétations qu'on peut lui donner sont propres à l'approximation d'impédance de surface, qui permet cette écriture particulière des équations.

La première est le taux de la cavité planaire (formules (2.29) et (2.30)), déjà étudié dans la chapitre 2. Le seconde est la contribution du réseau métallique, qui s'écrit en notations de vecteur d'onde normalisé :

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_{0cl}}\Big|_{res} = \frac{3\text{Re}}{4\pi n_1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\alpha \mathrm{d}\beta \sum_n \eta T_{M1}^{en} \frac{e^{i\gamma_{1n}L_1} + R_{1M_2}^{en} e^{i\gamma_{1n}(2L-L_1)}}{1 - R_{1M}^{en} R_{1M_2}^{en} e^{2i\gamma_{1n}L}} \frac{\alpha_n \Sigma_{an}^x + \beta \Sigma_{an}^y}{2} e^{i\alpha_n x_0}$$
(4.27)

Les amplitudes $A_m^{e,h}$ et $B_m^{e,h}$ intervenant ici via les grandeurs Σ_{an}^x et Σ_{an}^y sont solutions de la version non-quasi-périodique de l'équation (4.13), avec un terme de source donné cette fois-ci par :

$$\sigma_n = \delta_{0n} \eta T_{M1}^{e0} \frac{e^{i\gamma_1 L_1} + R_{1M_2}^{e0} e^{i\gamma_1 (2L - L_1)}}{1 + \rho_{a1}^{e0} R_{1M_2}^{e0} e^{2i\gamma_1 L}} e^{-i\alpha x_0}$$
(4.28)

En effet, la domaine de l'intégration s'étendant sur tout l'espace de vecteurs d'onde, la réécriture des équations avec des amplitudes quasi-périodiques n'apporte rien à la résolution du problème.

4.4 Discussion des résultats numériques

Nous allons donner dans cette partie un analyse numérique du champ rayonné par le dipôle inter-sous-bande placé à l'intérieur de la cavité complexe. L'accent sera porté sur la puissance rayonnée à l'extérieur de la cavité, qui est la quantité accessible expérimentalement, d'après la formule (4.20).

Notre hypothèse est que le comportement de la puissance récoltée à l'extérieur de la cavité en fonction des paramètres peut être interprété en termes de couplage avec les modes de cavité. Dans ce point de vue, le dipôle excite l'ensemble des modes de la cavité complexe correspondant à sa polarisation. Même en absence d'absorption, les modes possèdent une durée de vie finie à cause des pertes de rayonnement à travers le réseau. D'après la règle d'or de Fermi, la puissance récoltée va dépendre, d'une part de la densité d'états des modes rayonnants, et d'autre part de la composante selon Oz (pour un dipôle vertical) du champ électrique total de l'ensemble des modes.

Les deux premiers paragraphes, qui concernent une source unique, sont consacrés à la confirmation de cette hypothèse. Dans le paragraphe 4.4.1 on fournit des résultats sur le comportement spectral de la puissance émise, qui reflète, de manière qualitative, la densité d'états du champ électromagnétique pour la polarisation TM. Dans le paragraphe suivant 4.4.2 on étudie la puissance pour une fréquence donnée en fonction de la position du dipôle. Des cartes puissance-position sont obtenues qui tracent la morphologie du champ de l'ensemble des modes excités à cette fréquence. Dans le paragraphe 4.4.3 on va corréler la distribution de la puissance dans le champ lointain avec la nature des modes excités.

Du point de vue pratique cette étude permettra de comprendre, de manière générale, comment le dipôle interagit avec l'environnement électromagnétique de la cavité complexe, ce qui peut être utile pour l'optimisation des paramètres des dispositifs luminescents inter-sous-bandes. Dans le paragraphe 4.4.4 on va simuler le comportement des vrais dispositifs THz utilisés pour l'expérience. On conclut dans le paragraphe 4.4.5 après avoir fait quelques remarques sur le taux d'émission spontanée global, obtenu par le champ rétro-réfléchi.

4.4.1 Comportement spectral de la puissance

Nous considérons à présent une cavité complexe, comme à la figure 4.1(a), d'épaisseur de la zone active $L = 3.7 \ \mu m$, de couches dopées avec les paramètres suivants : $L_a = 80 \ nm$, $C_a = 2 \times 10^{18} \ cm^{-3}$, $L_b = 300 \ nm$, $C_b = 3 \times 10^{18} \ cm^{-3}$. Le réseau en or possède les paramètres suivants : $h = 400 \ nm$, $d = 20 \ \mu m$, $a = 10 \ \mu m$. Le substrat inférieur est un miroir métallique en or. Le dispositif ainsi décrit correspond à un échantillon expérimental.

On commence par étudier le comportement de la puissance récoltée en fonction de la fréquence d'émission. La puissance sera toujours normalisée à la valeur P_1 donnée par la formule 4.15. Pour les calculs, on a retenu $2 \times N + 1 = 21$ ordres de Rayleigh et $M_e = M_h = 3$ modes guidés dans les fentes. Bien qu'on n'ait pas encore la convergence numérique pour ces paramètres, on a capté le comportement qualitatif du système. Pour la suite, pour confronter les résultats numériques avec l'expérience, on a utilisé des simulations convergentes.

On place le dipôle au centre de la cavité $L_1 = 0.5L$, au voisinage du coin d'un plot métallique $x_0 = 0$. On intègre la puissance émise dans un angle d'ouverture de 30° autour de la normale du réseau.

La puissance normalisée P/P_1 est tracée, en échelle logarithmique, à la figure 4.3(a) pour le dispositif (trait rouge) et une cavité de mêmes paramètres, mais sans dopage dans les couches (trait bleu mince). Les deux courbes sont quasiment coïncidentes pour $\nu \geq 20$ THz, alors que pour $\nu \leq 20$ THz la puissance récoltée du dispositif dopé est inférieure. La différence s'explique d'une part avec l'absorption dans les couches dopées : la fréquence du plasmon ν_p est égale à ≈ 17 THz pour un dopage de 3×10^{18} cm⁻³ d'après (2.3). D'autre part, la constante diélectrique des couches dopées change progressivement avec la fréquence (figure 2.2(b)), ce qui modifie les conditions de diffraction sur le réseau (en particulier, un décalage en fréquence des deux courbes est visible).

Même au voisinage de la fréquence de saturation du plasmon des couches dopées $\nu = \nu_p/\sqrt{2} = 12$ THz, le seul effet du plasmon est une absorption accrue. Rappelons que d'après les résultats du paragraphe 2.3.2, une forte modification de la dynamique du dipôle existe lorsque celui est placé au voisinage des couches de contact, due au couplage résonant avec le plasmon d'interface de ces couches. On aurait pu attendre une accroissement de la puissance rayonnée, due à la diffraction du plasmon par le réseau.

Pour verifier ce point, on a calculé la puissance extraite de la cavité en fonction du dopage de la couche de contact supérieur C_a , pour les fréquences $\nu = 6$ THz et $\nu = 15$ THz. La couche de contact inférieure n'est pas dopée $C_b = 0$ cm⁻³. Les résultats sont montrés à la figure 4.4.

Sur la figure 4.4 on voit une apparition de minima de la puissance extraite, pour les niveaux de dopage qui correspondent à la fréquence de saturation de plasmon des couches dopée. Rappelons que d'après la formule (2.2) ces niveaux de dopage C_{aPS} (exprimés en $\times 10^{18} \ cm^{-3}$) sont reliés à la fréquence ν en THz par l'expression $C_{aPS} = 92.7\nu^2$. Ces minima traduisent en effet une absorption accrue dans la cavité du à l'excitation de



FIG. 4.3 - (a) Puissance normalisée extraite en fonction de la fréquence de l'émission, pour une source placée au milieu de la zone active de la cavité, au voisinage d'un coin du réseau. En bleu : dispositif sans dopage dans les couches de contacts. En rouge : dispositif dopé. Cette comparaison permet de séparer les effets de géométrie de la cavité des effets d'excitation de plasmon de surface dans les couches dopées. (b) La même figure, où l'on compare cette fois-ci le dispositif avec une structure sans miroir inférieur. Les battements de Fabry-Perot dans le cas de la structure confinée sont clairement visibles.



FIG. 4.4 – Puissance extraite de la cavité complexe, en fonction du dopage de la couche de contact supérieure C_a , pour les fréquences 6 THz et 15 THz. La couche de contact inférieure est non dopée pour cette simulation. En trait bleus on a indiqué les niveaux de dopages qui correspondent aux fréquence de saturation des plasmons de couches dopées $\omega_P/\sqrt{2}$ (voir la formule (2.2)).

plasmons d'interface. Quant au maxima adjacents (vers $C_a = 4 \times 10^{18} \ cm^{-3}$ pour les deux courbes), on a vérifié qu'ils dépendent aussi de l'épaisseur de la cavité L, est sont donc dus à la modification réfléctivités sur les interfaces (les réfléctivités étant dépendantes de l'indice de réfraction des couches de contact, qui est une fonction du dopage).

La conclusion est que la forte modification de la dynamique de la source due au couplage avec les plasmons de couches dopée (paragraphe 2.3.2) n'intervient pas dans la puissance extraite.

Les minima très prononcés pour les deux courbes $(P/P_1 = 10^{-5}, 10^{-4})$, qui arrivent pour les fréquences 10 THz, 20 THz, 30 THz ... s'expliquent bien avec les oscillations Fabry-Perot de la cavité. En effet, la longueur optique totale L_{opt} de la cavité (en négligeant le dopage) est de $L_{opt} = n_1(L_a + L + L_b) = 14.7 \ \mu m$, correspondant à un intervalle spectral libre (ISL) de $c/2L_{opt} \sim 10$ THz, observé sur la figure. D'autre part, les fréquences Fabry-Perot correspondant à la condition d'interférence destructive sur la face supérieure de la cavité (pour une réflectivité du miroir inférieur ≈ -1) sont données par $\nu_n = Pc/2L_{opt}$, $P \in \mathbb{N}$, et correspondent bien aux positions des minima.

La dernière conclusion est confirmée par la figure 4.3(b), sur laquelle on a superposé deux courbes : en rouge pour un dispositif avec miroir métallique et en vert un dispositif avec un substrat de GaAs non-dopé au lieu du miroir métallique inférieur. La modulation Fabry-Perot est absente sur cette dernière.

D'autre part, la puissance extraite est plus importante pour le dispositif confiné, d'une ordre de grandeur typiquement. L'augmentation de l'extraction par la cavité est due au recyclage du champ électrique suite aux aller-retours multiples. D'autre part, pour

4.4. Discussion des résultats numériques

le dispositif non-confiné, la puissance extraite augmente pour les bases fréquences, les couches dopées devenant de plus en plus confinantes.

Les pics secondaires sur les courbes peuvent être expliqués avec l'apparition des différents ordres diffractés sur le réseau métallique, pour les deux interfaces réseau-diélectrique et réseau-air. Les fréquences correspondantes sont données par les formules :

$$\nu_m = \frac{mc}{dn_1} \text{ (reseau - dielectrique)}, \quad \nu_{m'} = \frac{m'c}{d} \text{ (reseau - air)}, \quad m, m' \in \mathbb{N}$$
 (4.29)

Ici on a encore négligé les effets de dopage et d'indice effectif de la cavité. Les pics correspondant à ces expressions sont indiqués sur la figure 4.3(b). Les positions des pics ne sont pas situées exactement aux valeurs fournies par (4.29), surtout pour les basses fréquences, à cause de la présence des couches dopées. Les mêmes pics se retrouvent sur la courbe en vert, pour laquelle les effets de confinement sont absents.

Davantage de structures résonantes sont observées dans le cas de la cavité. Ces structures peuvent être attribuées à l'apparition des interférences constructives entre ondes réfléchies et diffractées, comme dans le paragraphe (3.5), et donc encore à l'excitation de modes, mais cette fois-ci des modes qui n'existent que dans la cavité complexe.

En bref, le comportement spectral de la puissance émise peut être expliqué par le couplage du dipôle avec les modes de la cavité planaire (modulation Fabry-Perot), les modes horizontaux du réseau (indices indiqués sur la figure 4.3(b)), et avec des modes mixtes entre la cavité et le réseau (interférences constructives entre ondes réfléchies et diffractées).

4.4.2 Puissance récoltée en fonction de la position du dipôle

Dans le paragraphe précédent le dipôle était placé dans une position particulière dans la cavité. Nous allons examiner maintenant la puissance récoltée pour une fréquence donnée en variant la position du dipôle.

La puissance extraite est toujours récoltée dans une ouverture angulaire de 30° autour de la normale du dispositif. Les paramètres de la simulation sont identiques à ceux du paragraphe précédent : $2 \times N + 1 = 21$ ordres de Rayleigh et $M_e = M_h = 3$ modes guidés dans les fentes. Le dispositif étudié est la cavité dopée décrite plus haut, d'épaisseur de la couche active $L = 3.7 \ \mu m$, avec le réseau d'ouverture $a = 10 \ \mu m$ et période $d = 2a = 20 \ \mu m$.

Les paramètres qui décrivent la position du dipôle sont la distance L_1 à la couche dopée "a" et la distance x_0 au côté gauche d'une ouverture (figure 4.1(a)). Le système étant périodique dans la direction Ox, il suffit de varier x_0 à l'intérieur d'une période $0 \le x \le d$. En plus, les axes x = a/2 et x = (a + d)/2 sont des axes de symétrie par réflexion pour le réseau, le domaine d'étude peut être alors encore restreint à $a/2 \le x \le (a + d)/2$.

Les résultats des simulations sont montrés aux figures 4.5(a),(b) et 4.6(a),(b). Quatre fréquences différentes ont été choisies : 20.07 THz, correspondant à la résonance m = 5 de la figure 4.3(a) (figure 4.5(a)), 16.25 THz, correspondant à m = 4 (figure 4.5(b)), 5.95 THz correspondant à une résonance "mixte" (figure 4.6(a)) et 3.55 THz qui est le maximum spectral absolu de la puissance extraite de la cavité, correspondant à m = 1 (figure 4.6(b)).



FIG. 4.5 - (a) Puissance normalisée extraite de la cavité en fonction de la position du dipôle dans la zone active, pour la fréquence 20.07 THz (résonance m = 5 sur la figure 4.3 (b)). (b) Puissance normalisée extraite pour la fréquence 16.25 THz (résonance m = 4).



FIG. 4.6 – Puissance normalisée extraite pour la fréquence de 5.94 THz. (b) Puissance normalisée extraite pour la fréquence 3.55 THz (résonance m = 1 sur la figure 4.3 (b)).(maximum absolu pour la puissance extraite en fonction de la fréquence)

Sur les quatre figures, on a indiqué également la position du plot métallique (rectangle gris).

Les cartes puissance-position ainsi obtenues reflètent, de manière qualitative, la distribution de la composante E_z de l'ensemble des modes excités à cette fréquence. Cette distribution est plutôt complexe pour les hautes fréquences (figure 4.5(a),(b)), et donc des longueurs d'ondes petites par rapport aux dimensions caractéristiques de la cavité complexe. Pour les deux fréquences choisies, le champ E_z reste plutôt localisé autour du réseau métallique, ce qui confirme l'hypothèse faite dans le paragraphe 4.4.1 qui présume qu'il s'agit des modes horizontaux du réseau. Pour la résonance m = 4 à 16.25 THz, située au voisinage du maximum de la modulation Fabry-Perot (à \approx 15 THz), le champ électrique E_z paraît globalement plus fort à l'intérieur de la cavité par rapport au cas de la résonance m = 5, située sur un minimum de la modulation.

Pour la résonance à 5.95 THz (figure 4.6(a)) le champ est maximal sur le miroir inférieur de la cavité, mais globalement délocalisé entre le réseau et la cavité. Pour cette résonance, ainsi que la résonance à 3.55 THz, le champ est plutôt distribué entre le plot métallique et le miroir métallique. En effet, dans le régime de basses fréquences on tend vers une distribution électrostatique du champ électrique, qui doit rester normal aux surfaces métalliques. Cette distribution n'est d'ailleurs rien d'autre que la distribution du champ du mode TM_0 fondamental d'une cavité planaire, point qui nous sera utile dans la suite. Cette assertion est d'autant plus vrai, que non seulement l'épaisseur de la cavité étudiée est sub-longueur d'onde, mais également l'ouverture du réseau est inférieure à la longueur d'onde. Les couches de contact dopées ont également un effet confinant pour le mode de la cavité.

Quelle que soit la fréquence d'émission, on observe sur les quatre diagrammes un maximum local (pour les hautes fréquences), ou absolu (pour les basses fréquences) de la puissance émise lorsque le dipôle vertical est placé au voisinage du coin du plot métallique. D'après les résultats du paragraphe précédent, ce "point chaud" ne peut pas provenir du couplage avec les plasmons des couches dopées. Le maximum est particulièrement renforcé pour les basses fréquences (grandes longueurs d'onde). Il doit s'agir d'un effet géométrique de diffraction sur le coin métallique. En effet, le dipôle vertical rayonne dans la direction de l'axe Oz principalement des ondes évanescentes (figure 1.2(a)). Les ondes évanescentes sont fortement diffractées par le coin (et donc converties en ondes radiatives), qui représente une perturbation localisée, possédant par conséquent un spectre très large de fréquences spatiales. En revanche, pour un dipôle horizontal (le long de Ox) la puissance émise n'est pas renforcée au voisinage du coin [90], car le dipôle interagit avec l'obstacle principalement via ses ondes radiatives.

Le couplage d'un dipôle ponctuel unique avec l'extérieur dépend ainsi naturellement de la position du dipôle à l'intérieur de la cavité. C'est l'efficacité de collection η_{col} , introduite dans le paragraphe 4.3.3, qui est la grandeur contenant les effets de couplage de la source avec l'extérieur.

4.4.3 Diagrammes de rayonnement pour le champ lointain

Après avoir examiné le champ proche du dipôle, on examine maintenant le champ lointain, qui est représenté par les diagrammes de rayonnement décrits dans le paragraphe 4.3.3. Le dispositif étudié est toujours le même que dans le paragraphe précédent.

Le champ lointain est obtenu à partir de la formule (4.17), en moyennant sur les positions du dipôle à l'intérieur de la cavité. A cause de la moyenne, les axes $O\alpha$ et $O\beta$ sont des axes de symétrie pour les diagrammes. Nous donnons le résultat pour les quatre fréquences du paragraphe précédent : 20.07 THz, 16.25 THz, 5.95 THz et 3.55 THz. Les diagrammes sont donnés respectivement sur les figures 4.7(a), (b) et 4.8 (a),(b), que nous allons maintenant commenter brièvement.

Le diagramme pour la fréquence 20.07 THz, correspondant au mode m = 5, est donné à la figure 4.7(a). Sur le diagramme, on a également indiqué les anomalies de Wood pour le GaAs (indice $n_1 = 3.6$), données par $\gamma_{1m} = 0$ (on a négligé le dopage), et les anomalies de Wood pour l'air $\gamma_{am} = 0$. Ces anomalies apparaissent comme les arcs de cercle (en notations normalisées) :

$$\left(\alpha + m\frac{\lambda}{d}\right)^2 + \beta^2 = n_1^2 \text{ GaAs}, \quad \left(\alpha + m'\frac{\lambda}{d}\right)^2 + \beta^2 = 1 \text{ air}$$
 (4.30)

Sur la figure, on a indiqué les anomalies du substrat en lignes en pointillés blancs, alors que les anomalies de l'air sont indiquées en rouge. De brusques variations de l'intensité émise sont en effet observées. L'émission principale est concentrée sur des lobes situés sur les arcs m = 5 pour le GaAs, d'ouverture angulaire très étroite. Des lobes secondaires, également très étroits, sont situés sur les arcs m = 6. Remarquons aussi que les arcs m = 5 passent au voisinage de la normale du réseau $\alpha = \beta = 0$.

Le diagramme pour la fréquence 16.25 THz (mode m = 4), donné sur la figure 4.7(b) est moins évident à interpréter. En effet, bien que les arcs m = 4 du GaAs passent au voisinage de la normale, la principale contribution de l'émission provient des lobes qui sont écartés de 23.6° de la normale du réseau. On peut interpréter ce comportement par un effet de cavité; d'une part, on est situé spectralement sur un maximum de la modulation Fabry-Perot; d'autre part, on voit sur la figure 4.5(b) que l'émission provient principalement de l'intérieur de la cavité. La fréquence 20.07 THz est située plutôt sur un minimum de la modulation Fabry-Perot, pour lequel les effets de la cavité sont inhibés.

Pour la fréquence 5.95 THz les anomalies de Wood se situent en dehors du cercle radiatif; le diagramme pour cette fréquence est plutôt conditionnée par la cavité. L'émission se présente comme deux lobes d'émission assez larges (quelques dizaines de degrés dans chaque direction), situés à 30° de la normale du dispositif.

Finalement, pour la fréquence 3.55 THz on observe un seul lobe d'émission, très large, d'ouverture $\approx 74^{\circ}$ dans la direction des x et $\approx 50^{\circ}$ dans la direction des y. Les anomalies de Wood m = 1 ne sont pas visibles, ce qu'on peut expliquer avec la figure 4.6(b), qui indique que la plus grande partie de la puissance provient de la diffraction des ondes évanescentes sur le coin métallique. Ceci explique aussi la grande largeur des lobes d'émission, puisque la grande dispersion des fréquences spatiales du coin métallique se traduit par une grande divergence angulaire du champ diffracté.

Ainsi en moyenne sur les positions du dipôle, pour de grandes longueurs d'onde, la plu-



FIG. 4.7 - (a) Diagramme de rayonnement pour un ensemble de sources incohérentes, réparties à l'intérieur de la cavité, et émettant à la fréquence 20.07 THz (résonance m = 5). (b) Diagramme de rayonnement pour la fréquence 16.75 THz (résonance m = 4).



FIG. 4.8 - (a) Diagramme de rayonnement pour la fréquence 5.94 THz. (b) Diagramme de rayonnement pour la fréquence 3.55 THz. Les deux diagrammes sont obtenus en moyennant sur les positions possibles du dipôle, comme pour la figure 4.7(a), (b).

part de l'émission est rayonnée sur la normale de dispositif, dans une ouverture angulaire assez large, ce qui favorise la collection de l'émission.

4.4.4 Diagramme Puissance-Période

Le diagramme "Puissance-Période" qu'on décrira dans ce paragraphe constitue un moyen compact de tracer les variations de la puissance extraite du dispositif en fonction des paramètres, afin de pouvoir comparer l'expérience avec la théorie.

Pour modéliser la puissance mesurée dans les expériences, il faut faire encore un pas supplémentaire par rapport à la formule (4.20). Les conditions expérimentales, qui seront précisées en détail dans le chapitre 6 de la partie II, imposent les contraintes suivantes : un angle de collection du rayonnement à 60° autour de la normale, et il n'y a pas de résolution spectrale de la puissance récoltée. Il faut donc prendre en compte explicitement les caractéristiques spectrales de la source inter-sous-bande. Expérimentalement, on a trouvé que le profil spectral typique de nos sources inter-sous-bande se présente sous forme d'une lorentzienne, centrée autour d'une fréquence ν_0 et de largeur à mi-hauteur typique de 1 meV, ce qui correspond à $\Delta \nu = 0.24$ THz. Pour avoir la puissance totale ΔP mesurée, il faut intégrer la puissance moyenne émise par dipôle $\langle P \rangle$ sur tout le spectre :

$$\frac{\Delta P}{P_1} = \int_0^\infty \frac{\langle P \rangle}{P_1} (\nu) \frac{\Delta \nu / \pi}{(\nu - \nu_0)^2 + \Delta \nu^2} d\nu$$
(4.31)

et utiliser cette grandeur dans la formule (4.20) pour obtenir la puissance totale récoltée du dispositif.

Illustrons notre démarche sur le dispositif étudié dans les paragraphes précédents. A la figure 4.9(a) on a tracé, d'une part, la puissance extraite normalisée $\langle P \rangle / P_1$ dans une gamme de fréquences entre 2 et 6 THz, pour des périodes de réseau entre 10 et 22 μm , avec un écart de 2 μm entre les périodes, et des ouvertures toujours égales à la moitié de la période. Les paramètres de calculs sont maintenant $M_e = 9$ modes guidés TM, $M_h = 1$ mode TE, $2 \times N + 1 = 21$ ordres de Rayleigh pour obtenir la convergence dans les calculs numériques. La puissance extraite est moyennée sur $5 \times 5 = 25$ positions du dipôle réparties sur une demi-période du réseau et l'épaisseur de la couche active L; elle est récoltée dans un angle solide de $\Omega_1 = 4\pi(1 - \cos 60^\circ)$ autour de la normale du réseau.

Sur la même figure, mais sur une échelle différente on a tracé le profil lorentzien de l'émission inter-sous-bande. La grandeur ΔP s'obtient facilement en multipliant les courbes $\langle P \rangle(\nu)$ et le profil lorentzien, et en intégrant le résultat sur les fréquences.

La grandeur ΔP ainsi obtenue dépend essentiellement de trois paramètres : la fréquence ν_0 , la période du réseau d et l'épaisseur de la structure L. Le paramètre le plus facile à contrôler expérimentalement et dont la puissance dépend le plus fortement est la période d. Le diagramme Puissance-Période consisté à tracer ΔP en fonction de la période, en variant l'un des deux paramètres restant ν_0 et L.

Notre but sera de comparer la théorie avec l'expérience ; cependant les deux fournissent la grandeur ΔP en unités difficilement comparables. Voici pourquoi on a choisi une valeur de ΔP comme référence : la valeur $\Delta P(\nu_0, L = 3.7 \mu m, d = 18 \mu m)$, correspondant à une cavité d'épaisseur $L = 3.7 \mu m$ et une période de réseau $d = 18 \mu$. Ce qu'on trace en



FIG. 4.9 – (a) Puissance extraite normalisée $\langle P \rangle / P_1$ en fonction de la fréquence, pour différents pas du réseau. La puissance a été moyennée sur les différentes positions possibles du dipôle dans la zone active. On a superposé les sorties avec le profil spectral typique du rayonnement inter-sous-bande obtenu pour les structures fabriquées. (b) Diagramme puissance-période pour différentes longueurs d'onde, pour un dispositif d'épaisseur L = 3.7 μm . La cavité avec la période d = 18 μm est choisie comme référence.



FIG. 4.10 – (a) Diagramme puissance-période pour les quatre cavités d'épaisseurs différentes : $L = 0.46 \ \mu m$, 0.92 μm , 1.85 μm et 3.7 μm , pour la longueur d'onde d'émission $\lambda = 70 \ \mu m$. (b) Le diagramme correspondant à la longueur d'onde $\lambda = 70 \ \mu m$. Le dispositif de référence est le même qu'à la figure 4.9.

4.4. Discussion des résultats numériques

fonction de la période dans le diagramme est alors la grandeur NP_{18} normalisée par cette référence :

$$NP_{18} = \frac{\Delta P(\nu_0, L, d)}{\Delta P(\nu_0, L = 3.7\mu m, d = 18\mu m)}$$
(4.32)

Le nombre sans dimension NP_{18} ne dépend plus des unités de mesure de la puissance. Il peut être obtenu expérimentalement en comparant la puissance (non-calibrée) récoltée par un dispositif donné à la puissance récoltée par la cascade d'épaisseur $L = 3.7 \ \mu m$, sur laquelle on a déposé le réseau métallique de période $d = 18 \ \mu m$.

Un exemple de diagramme Puissance-Période, en fonction de la longueur d'onde d'émission $\lambda = c/\nu$, est montré à la figure 4.9(b) pour des cavités d'épaisseur $L = 3.7 \ \mu m$. On voit que l'allure des courbes $NP_{18}(d)$, notamment la position des maxima, change considérablement pour une variation de la longueur d'onde de 10 μm . Cette variation correspond en effet à un changement de la longueur d'onde dans le GaAs de $\Delta\lambda/n_1 = 2.8 \ \mu m$, comparable avec les variations du pas du réseau. L'étude expérimentale de la diagramme Puissance-Période permettrait ainsi de déterminer la fréquence d'émission inconnue ν_0 du dispositif, par des mesures non-résolues spectralement.

Notre but est cependant d'étudier les variations de la puissance émise, pour une fréquence donnée, en fonction de l'épaisseur L de la zone active. Par ailleurs, les dispositifs étudiés expérimentalement ont tous des fréquences ν_0 (quasi-) identiques, imposées par la structure de la cascade quantique.

Sur la figure 4.10(a),(b) on a reporté les diagrammes Puissance-Période pour quatre épaisseurs de la zone active : $L = 0.46 \ \mu m$, 0.92 μm , 1.85 μm et 3.7 μm . Ces épaisseurs correspondent aux dispositifs fabriqués de nombre de périodes N = 5, 10, 20 et 40 de la cascade. A remarquer les variations logarithmiques de l'épaisseur (nombre des périodes), qui double à chaque fois. La figure 4.10(a) correspond à une longueur d'onde d'émission de $\lambda = 70 \ \mu m \ (\nu_0 = 4.28 \text{ THz})$ et 4.10(b) correspond à $\lambda = 90 \ \mu m \ (\nu_0 = 3.33 \text{ THz})$. On peut remarquer que moins la cavité est épaisse, plus la position du maximum de la puissance extraite est sensible aux variations de la longueur d'onde, ce qui peut être corrélé à un indice effectif des modes guidés de la cavité accru (voir paragraphe 2.2.4, figure 2.6(b)).

Pour les deux longueurs d'onde utilisées dans la figure 4.10(a),(b), on a constaté numériquement que le maximum de la puissance découplée NP_{18max} suit assez bien une loi en puissance :

$$NP_{18max} \propto L^{-0.62}$$
 (4.33)

Pour pouvoir avancer davantage dans l'interprétation des résultats, il faut maintenant examiner le taux d'émission spontanée de la source à l'intérieur de la cavité complexe.

4.4.5 Champ rétro-réfléchi et interprétation des résultats

Afin de comprendre la physique qui se cache derrière les diagrammes puissance-période présentés dans le paragraphe précédent, nous devons examiner la dynamique de désexcitation de la source dipolaire. D'après les résultats généraux du chapitre 1, cette dynamique est fournie par le champ rétro-réfléchi sur le dipôle. Ceci nous permettra de découpler la contribution du taux d'émission spontanée Γ_{sp} et l'efficacité de collection η_{col} dans la puissance émise.

En s'appuyant sur l'étude du chapitre 2 et le paragraphe 4.3.4, on peut écrire le taux de l'émission spontanée normalisé comme une somme des trois termes :

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_{0cl}} = \frac{\Gamma}{\Gamma_{0cl}}\Big|_{mode} + \frac{\Gamma}{\Gamma_{0cl}}\Big|_{evan} + \frac{\Gamma}{\Gamma_{0cl}}\Big|_{res}$$
(4.34)

Le premier terme est le taux d'émission spontanée dans le mode guidé dans la cavité plane fictive, dans laquelle on a remplacé le réseau par un miroir métallique²³. Cette contribution est explicitée dans le paragraphe 2.3.3. Le second terme décrit la désexcitation non-radiative par les plasmons de surface des couches dopées (paragraphe 2.3.2). Le troisième terme est la modification de la dynamique apportée par la présence du réseau métallique (formule 4.27), que nous examinons plus bas.

Pour cette étude, l'intégrale (4.27) à été calculé numériquement, d'abord comme une fonction de la position du dipôle à l'intérieur de la cavité, et pour la fréquence 3.55 THz 4.27(a), puis en fonction de la fréquence pour une position particulière dans la cavité 4.27(b).

La cavité envisagée est toujours la cavité d'épaisseur $L = 3.7 \ \mu m$. Cependant, pour le calcul numérique, seulement $M_e = 3$ modes guidés sont retenus et $2 \times N + 1 = 11$ ordres de Rayleigh, pour obtenir des résultats numériques plus rapidement. Le calcul numérique de l'intégrale, ainsi qu'une discussion sur la convergence sont donnés dans l'annexe E.

D'après la figure 4.11(a), la contribution du terme du réseau n'est significative qu'au voisinage immédiat du réseau, dans la position proche du coin métallique, qui maximise également la puissance extraite. Cependant, cette contribution liée au coin est beaucoup plus localisée que celle associée à la puissance extraite (à comparer avec la figure 4.6(b)), et reste égale à zéro sur la quasi-totalité de la zone active.

A la figure 4.11(b) le dipôle est placé au voisinage immédiat du coin du réseau (position $x_0 = a$ et $L_1 = 4 \times 10^{-5} \lambda$), et on a tracé les différents termes de l'équation (4.34) en fonction de la fréquence d'émission. On observe que la contribution du réseau reste dans cette position au plus du même ordre de grandeur que le taux modal. Cependant, rappelons que le taux modal varie très peu en fonction de la position de la source (le mode TM₀ étant homogène), alors que la contribution du réseau décroît très rapidement en s'éloignant du réseau. On remarque que la contribution du réseau croit plus rapidement que le taux modal, lorsque la fréquence d'émission diminue. Un fit logarithmique de $\Gamma/\Gamma_{0cl}|_{res}$ en fonction de la fréquence fournit une loi en puissance :

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_{0cl}}\Big|_{res} \sim \nu^{-2.8} \tag{4.35}$$

L'exposante $\beta \approx -3$ rappelle l'équation (2.39) et suggère un mécanisme d'interaction local via les ondes évanescentes du dipôle, ce qui confirme la conclusion du paragraphe 4.4.2.

En conclusion, pour les dispositifs que nous avons envisagés, le terme $\Gamma/\Gamma_{0cl}|_{res}$ est négligeable, et la dynamique de désexcitation dans les cavités complexes reste quasiment

²³On va se restreindre au cas des cavité sub-longueur d'onde, avec un seul mode TM guidé.



FIG. 4.11 – (a) Le terme $\Gamma/\Gamma_{0cl}|_{res}$ (contribution du réseau métallique à l'émission spontanée) en fonction de la position du dipôle. (b) Le dipôle est placé dans la position $x_0 = a$ et $L_1 = 4 \times 10^{-5} \lambda$ (voisinage immédiat du coin métallique). On a tracé les trois contributions de l'équation (4.34) en fonction de la fréquence.

identique à celle des cavités planaires.

En plus, la dynamique de couplage résonant avec les plasmons d'interface décrite par le terme $\Gamma/\Gamma_{0cl}|_{evs}$, et qui donne le renforcement le plus élevée figure 4.11(b), ne devrait pas intervenir non plus, car la puissance rayonnée ne contient pas de trace de cette dynamique (paragraphe 4.4.1, voir la figure 4.4 et les explications correspondantes).

Nous pouvons maintenant donner une interprétation des diagrammes puissance-période présentés précédemment. Rappelons que d'après l'expression 4.21, la puissance rayonnée est proportionnelle au produit du taux d'émission spontanée Γ_{sp} et l'efficacité de collection η_{col} . Le taux d'émission spontanée est principalement le taux modal de la cavité planaire Γ_{mode} , qui, pour les cavités sub-longueur d'onde, décroît comme l'inverse de l'épaisseur de la cavité :

$$\Gamma_{sp} \approx \Gamma_{mode} \sim L^{-1} \tag{4.36}$$

Par ailleurs, l'efficacité de collection η_{col} est une fonction de l'épaisseur de la cavité, et également de la période du réseau d. Les résultats du paragraphe précédent peuvent être résumés dans l'équation :

$$\eta_{col}(d,L)|_{max}\Gamma_{sp} \sim L^{-0.62} \tag{4.37}$$

On en déduit que l'efficacité de collection maximale $\eta_{col}(d, L)|_{max}$ est une fonction croissante de l'épaisseur, et suit la loi en puissance :

$$\eta_{col}(d,L)|_{max} \sim L^{0.38}$$
 (4.38)

Nous avons ainsi découplé la dynamique de la source des effets de collection, dus au réseau. Résumons nos conclusions principales :

La puissance récoltée par un dispositif inter-sous-bande, par dipôle unique, mis en cavité complexe, s'écrit de manière générale sous la forme :

$$\langle P \rangle = \eta_{col} \Gamma_{sp} \hbar \omega \tag{4.39}$$

avec η_{col} l'efficacité de collection, dépendant de la géométrie de la cavité complexe, et Γ_{sp} le taux de l'émission spontanée. La modélisation théorique de la cavité complexe permet de tirer les conclusions suivantes :

- Pour les cavités sub-longueurs d'onde qu'on a envisagées, le taux de l'émission spontanée Γ_{sp} intervenant dans cette formule est quasiment identique au taux modal Γ_{mode} dans le mode TM₀ fondamental de la cavité planaire fictive. En effet, comme on a vu dans le paragraphe 4.4.2, le mode de la cavité complexe tend vers le mode TM₀ de la cavité planaire. Par conséquence, Γ_{sp} diminue comme l'inverse de l'épaisseur de la cavité L.

-L'efficacité de collection η_{col} est une fonction résonante de la période du réseau métallique. Pour la maximum de l'extraction, la puissance récoltée suit la loi :

$$\langle P \rangle \sim L^{-0.62} \tag{4.40}$$

Si les mesures expérimentales, notamment la construction des diagrammes puissancepériode, sont conformes avec les prédictions théoriques, alors nous pourrons conclure que la dynamique de la source suit la loi en L^{-1} , ce qui est la traduction de l'effet Purcell dans le domaine THz. La confrontation entre la théorie et l'expérience est l'objet da la seconde partie de ce manuscrit. Chapitre 4. Source en microcavité complexe

Deuxième partie

Réalisation technologique et mesures sur les cascades quantiques en microcavités

Chapitre 5

Sources à cascade quantique

Dans ce chapitre nous abordons plus en détails les sources de rayonnement THz utilisées pour les vérifications expérimentales, dont la discussion a été déjà entamée au paragraphe 1.5 du chapitre 1. Dans le premier paragraphe 5.1, on aborde l'effet tunnel résonnant qui est le mécanisme fondamental pour le transport électronique dans les cascades quantiques, en conjonction avec une brève présentation des phénomènes physiques dans les super-réseaux de semi-conducteurs qui sont les précurseurs des cascades quantiques. Dans le paragraphe 5.2, on aborde les cascades quantiques proprement dites, en mettant l'accent sur la structure à quatre puits quantiques, utilisée dans nos expériences.

5.1 Effet tunnel résonnant ; super-réseaux

5.1.1 Illustration de l'effet tunnel résonnant

Le système le plus simple qui illustre l'effet tunnel résonnant est la double barrière quantique, montrée à la figure 5.1(a). Il s'agit d'une hétéro-structure constituée d'un puits quantique en GaAs, séparé par deux barrières en AlGaAs des régions en GaAs dopé de type n+. Une telle hétéro-structure (échantillon "05de12") a été épitaxiée par Ulf Gennser au LPN, dans le réacteur MBE VEECO (Gen II). La description de cette structure est donnée dans le tableau suivant :

Couche	Matériau	Dopage (cm^{-3})	Épaisseur (Å)
Substrat	GaAs	Si 1×10^{18}	< 5000
émetteur	GaAs	Si 2×10^{17}	2000
espaceur	GaAs	n.i.d.	150
barrière	$Al_{0.33}Ga_{0.67}As$	n.i.d.	87
puits	GaAs	n.i.d.	50
barrière	$Al_{0.33}Ga_{0.67}As$	n.i.d.	87
espaceur	GaAs	n.i.d.	150
collecteur	GaAs	Si 2×10^{17}	2000
final	GaAs	Si 1×10^{18}	5000


FIG. 5.1 – (a) Diagramme de la bande de conduction à l'équilibre de la structure à double barrière. Le puits quantique est suffisamment étroit pour ne comporter qu'un seul niveau d'énergie E_1 . Les zones autour du puits, appelées émetteur (à gauche) et collecteur (à droite) sont dopées de type n+ (zones hachurées). Le niveau de Fermi E_F est également indiqué. (A) : état d'équilibre. (B) : la structure soumise à une tension électrique V. (b) Caractéristique I-V expérimentale en continu. Les deux état (A) et (B) sont indiqués sur la courbe.

Les régions dopées sont appelées respectivement "émetteur" (à gauche) et "collecteur" (à droite sur la figure). Elles permettent le contact électrique avec l'extérieur. A cause du dopage, l'énergie de Fermi E_F est à l'intérieur de la bande de conduction, dont le diagramme est représenté à la figure 5.1(a). Sur la figure, on a pris en compte les effets de déformation de la bande dus au dopage.

Le puits quantique de 5 nm est suffisamment étroit pour ne comporter qu'un seul niveau d'énergie E_1 . On a $E_1 \approx 94 \ meV$ avec les paramètres du tableau.

L'échantillon a été procédé en mésas de taille typique $200 \times 800 \ \mu m^2$ par une gravure chimique et des contacts ohmiques ont été évaporés sur les mésas (on décrira ce type de procédé plus en détails dans le chapitre suivant). Des caractérisations I - V en continu à température $T = 140 \ K$ ont été effectuées sur l'échantillon. Le résultat est montré à la figure 5.1(b).

A la figure 5.1(a) deux états ((A) et (B)) sont représentés. L'état (A) est l'état d'équilibre. Le niveau du puits E_1 étant trop haut par rapport à l'énergie de Fermi E_F , il n'est pas peuplé. Lorsqu'on applique une tension V, on ajoute une énergie potentielle -eVpour les électrons et le niveau E_1 avoisine de plus en plus l'énergie de Fermi E_F de l'émetteur. La probabilité de transition des électrons à travers les barrières par effet tunnel augmente, et du courant commence à traverser la structure [135], [136]. Dans le cas (B), où le niveau E_1 est aligné avec le quasi-niveau de Fermi de l'émetteur, le transfert par effet tunnel est maximisé et le courant est maximal. Ceci est illustré par la caractéristique I - V de l'hétéro-structure montrée à la figure 5.1(b). L'alignement arrive pour une tension de 300 mV (la différence avec l'énergie du niveau E_1 provient de la chute de potentiel



FIG. 5.2 – (a) Bande de conduction d'un super-réseau GaAs/Al_xGa_{1-x}As. La direction perpendiculaire aux couches est l'axe de croissance. La dégénérescence des niveaux quantiques $E_1, E_2, ...$ dans un puits unique est levée et il y a formation de "minibandes" d'énergie. (b) Le super-réseau avec un champ électrique F appliqué le long de l'axe de croissance. Le potentiel linéaire -eFz décale les puits l'un par rapport à l'autre et les minibandes se scindent en niveaux de Wannier-Stark discrets.

supplémentaire au niveau des contacts de l'échantillon et aux différentes résistances de charge).

Lorsque la tension V augmente davantage, le niveau E_1 est de nouveau désaligné, et le courant diminue. La résistance différentielle dV/udI devient alors négative, et la caractéristique I - V devient instable [137] (voir la figure 5.1(b), au delà de $\pm 300 \ mV$). Une caractéristique stable peut être mesurée, en prenant certaines précautions, comme par exemple, en prenant une résistance de mesure supérieure à la résistance négative [138]).

5.1.2 Quelques notes sur la physique des super-réseaux

Les super-réseaux sont les précurseurs et souvent aussi des blocs constituants des cascades quantiques qui seront présentées au paragraphe suivant. Le concept de super-réseau naît dans les travaux pionniers de Esaki et Tsu de 1970 [139], [140]. L'effet tunnel résonnant y joue un rôle primordial et est à l'origine des effets de transport et des processus optiques observés sous l'application d'un champ électrique.

Un super-réseau est une alternance périodique de couches épitaxiales de deux matériaux semi-conducteurs, par exemple GaAs et $Al_xGa_{1-x}As$ comme sur la figure 5.2(a)²⁴. Si l'on ne considère que la bande de conduction, on obtient alors un ensemble de puits et de barrières identiques pour les électrons. La dégénérescence des niveaux discrets d'énergie dans les puits est levée par le couplage à travers les barrières et il y a formation de "minibandes" d'énergie, d'autant plus larges que la largeur et la hauteur des barrières est faible [141]. Les fonctions d'ondes électroniques sont délocalisées sur tout le super-réseau. On a créé ainsi un potentiel périodique artificiel pour les porteurs, de période D égale à la somme des épaisseurs d'un puits et d'une barrière (figure 5.2(a)), et dont les pro-

²⁴Cette périodicité artificielle se superpose à la périodicité intrinsèque du potentiel cristallin, d'où le préfixe "super" pour la désignation "super-réseau".

priétés (période, position et largeur des bandes) sont contrôlables par les épaisseurs et la composition des couches.

Les phénomènes les plus intéressants apparaissent lorsqu'on applique un champ électrique perpendiculairement aux couches épitaxiales (figure 5.2(b)). Appelons alors z la direction du champ, qui coincide alors avec l'axe de croissance (figure 5.2(a)). Une énergie potentielle linéaire -eFz s'ajoute à l'hamiltonien qui décrit le mouvement des électrons, et les puits quantiques sont décalés l'un par rapport à l'autre. Les minibandes sont scindées en états discrets. Ces états sont décrits en 1959-1960 dans les travaux de G. Wannier [142], qui a montré que si $\chi(x)$ est une fonction propre de l'hamiltonien pour l'énergie E_0 , alors $\chi(x + kD)$ est aussi une solution pour l'énergie $E_0 - keFD$, avec k un nombre entier. Les fonctions d'onde sont ainsi localisées spatialement dans les puits sous l'effet du champ électrique et sont appelées "fonction d'onde de Wannier-Stark" (ceci est illustré à la figure 5.2(b)). Leur existence a été directement mise en évidence dans une belle expérience reportée par Mendez et Bastard [143] (voir aussi [144], [145]). L'ensemble des niveaux de Wannier est encore appelé "échelle de Wannier-Stark".

La distance entre deux niveaux de Wannier-Stark localisés dans des puits voisins est alors $\Delta E = eFD$. Cette séparation énergétique correspond à une fréquence angulaire ω_B égale à :

$$\omega_B = \frac{eFD}{\hbar} \tag{5.1}$$

La fréquence (5.1) est appelée "fréquence de Bloch". En régime non stationnaire, le paquet d'onde électronique constitué d'états de Wannier-Stark oscille à la fréquence ω_B . Ce phénomène "d'oscillations de Bloch", prédit aussi dans un formalisme semi-classique [37], a été récemment mis en évidence dans les super-réseaux GaAs/AlGaAs [146]. La condition d'observation des oscillations de Bloch est $\omega_B \tau > 1$, avec τ le temps caractéristique de diffusion des porteurs par les phonons, les impuretés ou les imperfections du réseau cristallin ²⁵.

La vision simple développée plus haut n'est plus valable pour des champs électriques F suffisamment forts. En effet, si le champ est tel que la grandeur eFD est égale à la distance entre les niveaux 1 et 2 de la figure 5.2(b), le niveau 1 se voit aligné avec le niveau 2' du puits voisin. On peut alors avoir transfert de porteurs entre les niveaux 1 et 2' par l'effet tunnel résonnant, décrit dans le paragraphe précédent. La première description théorique d'un super-réseau en régime d'effet tunnel résonnant a été donnée par Kazarinov et Suris en 1971-1972 [147],[148]. Leur théorie était basée sur le formalisme de la matrice densité. Ils montrent en particulier que la caractéristique I - V du super-réseau est constituée de pics étroits qui correspondent à l'alignement des niveaux des différentes puits voisins (figure 5.3(a),(b)). Dans l'hypothèse où les minibandes du super-réseau sont suffisamment étroites, Kazarinov et Suris donnent l'expression suivante pour le courant I au voisinage

²⁵En principe, il est possible d'observer les oscillations de Bloch dans un cristal semi-conducteur, car le potentiel cristallin est périodique. Cependant, d'après (5.1) la condition $\omega_B \tau > 1$ demande des champs électriques trop élevés (de l'ordre de 10⁶ V cm⁻¹), du fait de la faible valeur du temps $\tau \approx 10^{-13} s$ et la constante de la maille cristalline $a \approx 1$ Å. L'observation des oscillations de Bloch devient possible dans un super-réseau artificiel de période $D \approx 100$ Å.



FIG. 5.3 – (a)Illustration de l'idée de Kazarinov et Suris [147]. Le super-réseau est soumis à un champ électrique suffisamment fort pour que le niveau 1 passe au dessus du niveau 2', on obtient ainsi inversion de population pour la transition $1 \rightarrow 2'$, parce que les populations des niveaux (ellipses jaunes) diminuent avec l'énergie à l'intérieur d'un même puits. (b) Caractéristique I-F (équivalente à I-V) pour un super-réseau d'après la théorie de Kazarinov et Suris [147]. Pour les champs correspondant à un alignement des niveaux de Wannier-Stark, on observe un pic pour le courant électrique. On a indiqué ici le point de fonctionnement pour lequel on attend une inversion de population. Comme indiqué dans le texte, ce point est en réalité instable.

de la résonance tunnel (par exemple, la résonance 1 - 2' de la figure 5.3) :

$$I = eDn(1 - e^{-\frac{\Delta_{12}}{kT}}) \frac{2|\Omega|^2 \tau_{\perp}}{1 + \Delta^2 \tau_{\perp}^2 + 4|\Omega|^2 \tau_2 \tau_{\perp}}$$
(5.2)

avec *n* la densité de porteurs, $\Delta_{12} = E_2 - E_1$ la différence d'énergie entre les niveaux 1 et 2, $\Delta = eFD - \Delta_{12}$ le décalage à la résonance, *T* la température, *k* la constante de Boltzman, $\hbar\Omega = \langle 1|eFz|2' \rangle$ le couplage entre les niveaux 1 et 2' par le champ électrique, τ_2 la durée de vie du niveau 2 et τ_{\perp} le temps caractéristique de perte de cohérence.

Historiquement, l'équation (5.2) est le premier résultat théorique sur le transport dans les super-réseaux qui prend en compte le mécanisme de l'effet tunnel. Le mécanisme décrit par cette équation est simple : tout d'abord, il y a transfert des électrons être les niveaux 1 et 2' par effet tunnel résonnant, qui est d'autant plus efficace que le couplage $|\Omega|^2 \tau_{\perp}^2$ est grand, et que les niveaux sont alignés $\Delta = 0$. Puis les électrons relaxent dans le niveau 1' (au bout d'un temps caractéristique τ_2), et sont donc prêts à recommencer le cycle par un nouveau transfert tunnel entre les niveaux 1' et 2", etc. Cet "effet tunnel séquentiel" ouvre des voies très efficaces pour le transport des électrons le long de la structure. Ces voies prévues par la théorie de Kazarinov et Suris ont été observées en 1986 par F. Capasso et al. dans des mesures de photo-courant sous excitation par laser He-Ne dans des diodes p-i-n à super-réseau [149].

La motivation principale de l'étude de Kazarinov et Suris était la possibilité d'obtenir du gain optique dans les super-réseaux. Ceci est illustré par la figure 5.3(a). Sur cette dernière, on a indiqué par des ellipses jaunes les populations des différents niveaux de Wannier-Stark. Pour un quasi-équilibre thermique, la population diminue pour les niveaux



FIG. 5.4 - (a) Résultat expérimental de Choi et al. [150], qui montre la variation de la conductivité en fonction de la tension appliquée le long d'un super-réseau de 49 périodes. Le nombre de pics observés corespond au nombre de périodes. (b) Interprétation schématique du résultat expérimental. A cause du phénomène de charge d'espace, les puits s'alignent successivement. Le champ électrique n'est plus homogène dans la structure, mais il y a formation de domaines de champ fort (puits alignés) et de champ faible (puits désalignés). Chaque pic dans la courbe de conductance correspond à l'alignement d'un puits et donc à la progression du champ fort dans la structure. Les deux figures sont tirées de la référence [150].

excités successifs à l'intérieur d'un puits. Pour un champ suffisamment fort, le niveau 1 passe au dessus du niveau 2', et on obtient ainsi une inversion de la population qui peut mener à un gain optique pour la transition $1 \rightarrow 2'$ d'énergie $\Delta = eFD - \Delta_{12}$.

La défaillance de cette idée est que le point de fonctionnement du dispositif doit se trouver entre deux pics du courant tunnel 1 - 2' et 1 - 3' (figure 5.3(b)), c'est à dire dans la zone de la caractéristique I - V qui est instable. Cette instabilité est liée à la formation de domaines du champ électrique et à l'apparition de zones de charge dans la structure.

La formation des domaines de champ a été évoquée par Esaki et Chang en 1974 [140], pour le cas d'un super-réseau GaAs/AlAs de barrières fines (40 Å), et donc de minibandes assez larges (5 meV). Plus tard, en 1987, Choi et al. ont donné une démonstration spectaculaire pour le cas d'un super-réseau GaAs/Al_{0.27}Ga_{0.73}As de barrières fines (88 Å) dans le cas du régime de couplage inter-puits faible [150]. Leurs résultats sont donnés à la figure 5.4(a),(b). A la figure 5.4(a), on montre les mesures de conductance pour le super-réseau à basse température T < 20 K. On observe une série de pics réguliers en fonction de la tension. Le nombre de pics correspond exactement au nombre N de puits du super-réseau (N = 49). L'interprétation des mesures est donnée à la figure 5.4(b). Tout d'abord, lorsqu'on transfère des électrons d'un puits à l'autre par effet tunnel, on détruit localement l'électroneutralité de la structure. Des zones de charge d'espace se forment autour de la barrière entre les puits. Tous les puits ne s'alignent pas simultanément (cas idéal), mais successivement lorsqu'on augmente le champ électrique, au fur et à mesure que la frontière des charges d'espace progresse le long de la structure. Ainsi, il y a formation



FIG. 5.5 – (a) Caractéristique I-V de la structure à super-réseau GaAs/AlGaAs utilisée par Helm et al. [52] pour des expériences d'électroluminescence. Les pics observées sur la caractéristique I-V correspondent à l'alignement entre le niveau fondamental et les différents niveaux excités. (b) Spectres d'émission pour différentes tensions. Les spectres sont obtenus en utilisant un filtre en InSb accordable sous champ magnétique, les minima du signal correspondent alors à des maxima pour l'émission. Les maxima spectraux coïncident avec les énergies des transitions inter-sous-bande calculées pour le super-réseau. Les figures sont tirées à partir de la référence [52].

d'une zone de champ faible (puits non-alignés), et d'une zone de champ fort (puits alignés), qui progresse le long de la structure lorsque la tension appliquée sur la structure augmente (figure 5.4(b)). Le résultat observé est que le système garde un courant quasi-constant, malgré l'augmentation de la tension, et contourne le point de fonctionnement indiqué sur la figure 5.3(b)(flèche noire).

Les idées de Kazarinov et Suris ont motivé l'exploration des super-réseaux en tant que sources de rayonnement. La première observation expérimentale du rayonnement produit par des transitions inter-sous-bandes a été donnée par Helm en 1988 [53], [52]. Les résultats de son article de 1989 [52] sont repris à la figure 5.5(a),(b) (voir aussi paragraphe 1.5). L'idée est d'utiliser l'effet tunnel résonnant pour exalter les transitions inter-sous-bandes et maximiser ainsi le rendement quantique pour l'émission. Cette exaltation est en effet contenue qualitativement dans l'équation (5.2) : dans le cas de l'alignement $\Delta = 0$ et lorsque l'effet tunnel est efficace $|\Omega|^2 \tau_{\perp}^2 \gg 1$, le temps caractéristique qui gère le transport n'est plus que le temps τ_2 de transition $2 \rightarrow 1$, transition qui peut se faire aussi par la voie radiative. Les fréquences des transitions observées par Helm étaient, par ailleurs, dans le domaine THz.

Une année plus tôt (1987), Liu a proposé un dispositif pour la génération du rayonnement plus compliqué qu'un super-réseau : il comportait une séquence périodique de deux puits de largeur différente, plutôt qu'un seul [151]. Dans ce dispositif, les électrons tunnellent entre les niveaux 1 et 2' du puits large, à travers un niveau du puits étroit qui sert alors de relais. Cette proposition est en fait la première cascade quantique qu'on trouve dans la littérature.

5.2 Les sources à cascades quantiques

Les cascades quantiques sont, comme les super-réseaux, des séquences périodiques de puits quantiques, mais, au lieu d'avoir un seul puits, on a un ensemble de puits différents qui se répète. Ce design plus complexe permet une très grande flexibilité dans la conception des états quantiques du système et de leur durée de vie non-radiative. Ceci permet ainsi d'obtenir du gain optique et donc l'effet laser sur des transitions inter-sous-bandes.

5.2.1 Principe de fonctionnement des cascades quantiques; la structure à quatre puits

Nous allons illustrer le principe de fonctionnement des cascades quantiques en s'appuyant sur la structure à quatre puits utilisée par Rochat et al. pour la génération d'électroluminescence THz [55]. C'est par ailleurs cette structure que nous avons utilisée systématiquement dans nos expériences. Le schéma de la structure est donné à la figure 5.6. Il s'agit d'une séquence de quatres puits en GaAs séparés par des barrières de Al_{0.15}Ga_{0.85}As (la discontinuité de la bande de conduction est de 125 meV). La largeur des puits et des barrières est indiquée dans la légende de la figure 5.6. Sur cette structure un champ électrique de F = 1.6kV/cm est appliqué. Le module au carré des fonctions d'ondes des niveaux électroniques est également représenté, ainsi que leur position énergétique. Il s'agit de niveaux localisés par le champ analogues aux niveaux de Wannier-Stark des super-réseaux. Les niveaux entre lesquelles la transition radiative THz s'effectue, sont indiqués en rouge. Le calcul de ce "diagramme de bandes" est précisé ci-après.

L'ensemble des quatre puits se divise en deux zones : zone active, constituée des puits larges de 28 nm et 18 nm, et zone injecteur, constituée des puits de 16 nm et 15.5 nm, (zone grisée sur la figure 5.6). La transition radiative a lieu entre les états 1 et 2 qui sont localisés dans la zone active lorsque le champ électrique est appliqué. Les électrons sont transférés le long de la cascade par effet tunnel séquentiel grâce à l'alignement des états 1, 2' et le niveau g de l'injecteur, qui sert de relais.

Le puits de 16 nm de la zone injecteur est intentionnellement dopé de type n+, à quelques $10^{16} \ cm^{-3}$. Ce dopage est crucial pour la stabilité électrique de la structure. L'injecteur dopé sert de réservoir d'électrons local, son rôle étant de compenser les effets de formation de charge d'espace, qui apparaissent lors du peuplement des niveaux électroniques de la zone active. La formation de zones de charge d'espace localement est alors évitée, tant que le nombre de dopants par unité de surface dans l'injecteur est supérieur au nombre d'électrons par unité de surface dans la zone active. En même temps, il est important de maintenir un dopage résiduel aussi faible que possible dans les parties non-dopées de la structure (actuellement quelques $10^{14} \ cm^{-3}$ pour un réacteur MBE typique "haute mobilité"), afin de minimiser les pertes non-radiatives.

Dans la structure de la figure 5.6, la transition radiative a lieu entre les niveaux 2 et 1, dont les lobes principaux des fonctions d'ondes sont localisés au même endroit de



FIG. 5.6 – Cascade quantique à quatre puits, utilisée par Rochat et al. pour la génération de rayonnement THz [55]. La séquence des puits et barrières est, donnée en nm (de gauche à droite) : 28/2.5/18/4/16/2.5/15.5/6. Les barrières sont indiquées en gras. Le diagramme de bande est donné pour un champ électrique F = 1.6 kV/cm. La transition radiative a lieu entre les niveaux 1 et 2 indiqués en rouge. Pour cette valeur du champ, les niveaux 1 et 2' sont alignés avec le niveau g dans la zone injecteur.

l'espace (le puits de 28 nm). On parle alors de "transition verticale". Lorsque les lobes des deux fonctions d'ondes sont localisés dans des puits différents de la zone active, on parle de "transition diagonale". Cette dernière est caractérisée par un moment dipolaire de la transition plus faible, mais aussi d'un taux des transitions non-radiatives plus faible à cause du moindre recouvrement entre les fonctions d'ondes [152].

Pour calculer le diagramme de bande et trouver la fonction d'onde enveloppe $\chi_i(z)$ de la *i*-ème sous-bande, on résoud l'équation de Schrödinger [54] :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\chi_i(z) + [V_{bande}(z) - eFz + V_e(z)]\chi_i(z) = E_i\chi_i(z)$$
(5.3)

Ici m^* est la masse effective des électrons de conduction²⁶, $V_{bande}(z)$ est le potentiel rectangulaire donné par les puits et les barrières, F est le champ électrique appliqué, et $V_e(z)$ est le potentiel créé par les charges présentes dans la structure. Ce potentiel est

²⁶La masse effective est considéré comme étant la même $(m^* = 0.067m_e)$ pour les couches de GaAs et de Al_xGa_{1-x}As, ce qui est approximativement vrai pour les petites valeurs de x, comme dans le cas nos structures (x = 0.15). Dans certains calculs plus complexes, on utilise le modèle de Kane [54] qui s'affranchit cette hypothèse.



FIG. 5.7 – Diagramme de bandes pour deux types de lasers THz. (a) Le premier laser THz reporté dans la littérature [30]. L'effet laser a lieu entre les niveaux 1 et 2. Le niveau 1 est couplé par une "minibande" aux niveaux g de la zone injecteur large. La "minibande" relativement large offre un grand nombre de voies de transfert, minimisant ainsi le temps de vie du niveau 1 et permettant l'inversion de population. (b) Type de laser introduit par l'équipe de Q. Hu au MIT en 2004. L'effet laser se produit entre les niveaux 5 et 6 de la cascade. Le niveau 5 est dépeuplé par émission de phonons-LO vers les niveaux inférieurs, alignés avec le niveau 6' [67]. Les figures sont extraites des références correspondantes.

donné par l'équation de Poisson :

$$-\frac{\partial^2}{\partial z^2} V_e(z) = \frac{e^2}{\varepsilon \varepsilon_0} [\rho(z) - \sum_i n_i |\chi_i(z)|^2]$$
(5.4)

Dans l'équation (5.4), $\rho(z)$ est la densité de donneurs (supposés entièrement ionisés), $\varepsilon \approx 12.96$ est la constante diélectrique des couches et n_i est la population de la *i*-ème sous-bande.

En général, on commence par résoudre l'équation (5.3) numériquement, sans le terme $V_e(z)$ (voir par exemple [153], [154] pour une méthode de résolution possible). On obtient ainsi les fonctions d'ondes $\chi_i(z)^0$ en première approximation. Ensuite on utilise (5.4) pour calculer $V_e(z)^0$ et utiliser ce potentiel dans (5.3) pour corriger les fonctions d'onde. Les nouvelles fonctions $\chi_i(z)^1$ sont utilisées dans (5.4) pour la nouvelle correction du potentiel, etc., jusqu'à la convergence. La connaissance des fonctions d'onde permet d'estimer le moment dipolaire de transition, sa force d'oscillateur, et éventuellement le temps caractéristique de certains mécanismes non-radiatifs.

La cascade quantique décrite ici est un système à trois niveaux (1, 2, g), qui permet donc en principe d'obtenir effet laser. Pour conclure ce paragraphe, nous allons donner des schémas de bandes qui ont récemment donné un effet laser dans le domaine THz (la discussion des lasers à cascades dans le proche et moyen infrarouge va au delà du cadre de ce manuscrit).

Le premier laser THz a été obtenu par Köhler et al. [30] en 2002 (fréquence 4.4 THz). Le diagramme de bandes du laser est montré à la figure 5.7(a). La structure laser est similaire à la structure décrite jusqu'ici, la différence importante étant que la zone injec-

teur comporte quatre puits au lieu de deux. La largeur des puits de l'injecteur augmente progressivement de telle manière que, lorsqu'on applique un champ électrique, leurs niveaux fondamentaux s'alignent pour former une "minibande" quasi-continue. L'extraction d'électrons du niveau 1 par effet tunnel est ainsi optimisée, et devient plus rapide que le temps de vidage du niveau 2, temps dominé par les processus non-radiatifs "usuels" (qui sont les phonons optiques, les collisions électron-électron) qu'on discutera au paragraphe suivant. L'inversion de population est ainsi obtenue.

L'autre type de laser, introduit par Williams et al. en 2003 [67], est montré à la figure 5.7(b) (fréquence 3 THz). La transition laser a lieu ici entre les niveaux supérieurs 5 et 6 de la structure. Le niveau inférieur 5 est dépeuplé par émission de phonons-LO vers les niveaux inférieurs, ce qui constitue une voie de désexcitation très efficace (cf. paragraphe suivant). L'énergie du phonon-LO pour le GaAs est de 36 meV, et est dons considérablement plus grande que l'énergie de la transition laser (11 meV), ce qui implique un champ électrique appliqué plus fort pour les structures faisant appel à ce mécanisme de désexcitation. Cependant, comme le laser opère sur des niveaux excités, l'inversion de population est moins sensible à la température et ce type de laser opère en pulse jusqu'à des températures de 160 K, ce qui est actuellement (octobre 2006) l'état d'art en terms de performance à haute température pour les lasers THz.

D'autres types de design existent actuellement ([69], [155]), qui sont des variantes de ceux qu'on vient de décrire. Remarquons qu'un aspect important de la conception du laser est le choix du type de guide d'onde. Les lasers THz les plus performant en termes de courant de seuil et de température utilisent des guides d'ondes métalliques, dont la fabrication sera décrite au chapitre suivant.

5.2.2 Processus de désexcitation non-radiatif des niveaux électroniques

Comme on l'a déjà remarqué au paragraphe 1.5, les processus non-radiatifs, responsables de la durée de vie finie des niveaux, sont beaucoup plus efficaces que la voie radiative pour les transitions inter-sous-bandes. Ces processus sont essentiellement : l'interaction avec les phonons optiques longitudinaux ("phonons LO"), l'interaction avec les phonons acoustiques, les collisions électron-électron et éventuellement la diffusion sur les défauts des interfaces épitaxiales.

Le dépeuplement des niveaux par émission de phonon LO est un mécanisme très rapide pour les transitions inter-sous-bandes dans le proche et le moyen infrarouge, dont le temps caractéristique est estimé de l'ordre de 1 ps [156], [57]. Ce processus devient très efficace lorsque la séparation en énergie des sous-bandes $\Delta E = E_2 - E_1$ est égale à l'énergie du phonon LO (E_{LO}). Cependant, cette énergie est estimée à $E_{LO} = 36$ meV pour GaAs, ce qui est une valeur plus importante que les valeurs typiques de ΔE dans le domaine THz. Dans ce cas là, comme indiqué à la figure 5.8(a), seulement les électrons qui possèdent une énergie cinétique supérieur à $E_{LO} - \Delta E$ peuvent participer à l'émission des phonons LO. Le taux non-radiatif Γ_{LO} correspondant est alors très sensible à la distribution des porteurs, et dépend fortement de la température pour une distribution thermique selon



FIG. 5.8 – (a) Dispersion parabolique des deux sous-bandes 1 et 2 dans le plan des couches épitaxiales. Le vecteur $k_{||}$ est la composante du vecteur dans le plan des couches. Lorsque la séparation $E_2 - E_1$ en énergie des sous-bandes est inférieure à l'énergie E_{LO} du phonon LO, seulement les électrons dont l'énergie cinétique satisfait $E_2 - E_1 + \hbar^2 k_{||}^2/2m^* > E_{LO}$ peuvent émettre des phonons LO. (b) Deux processus de collision électron-électron, avec départ de la sous-bande 2 sont présentés.

la loi [55] :

$$\Gamma_{LO} = G \exp\left\{-\frac{E_{LO} - \Delta E}{kT}\right\}$$
(5.5)

Ici G est un préfacteur qui dépend entre autre du recouvrement entre les fonctions d'onde des deux sous-bandes. Cette équation montre que l'émission de phonons LO est bloquée à basse température ("goulot d'étranglement" pour les phonons LO).

Quant aux phonons acoustiques, le temps de désexcitation typique a été estimé [157] et mesuré [156] de l'ordre de 100 ps. Ce mécanisme est en général négligé pour les transitions inter-sous-bandes.

L'autre mécanisme non-radiatif qui s'avère jouer un rôle important, est véhiculé par les collisions électron-électron illustrées à la figure 5.8(b) (seulement quelques processus au départ du niveau 2 sont montrés). Les travaux théoriques [158],[159] et expérimentaux [160] fournissent des valeurs entre 0.1 ps et 10 ps, ce qui est de même ordre que le temps d'émission des phonons LO. Le taux de collisions électron-électron Γ_{ee} peut être considéré comme proportionnel à la population du niveau supérieur n_2 [55],[159] :

$$\Gamma_{ee} = An_2 \tag{5.6}$$

Dans la suite, on admettra que les phonons LO et les collisions électron-électron sont les mécanismes dominants de désexcitation non-radiative, et on utilisera les formules (5.5)et (5.6) pour décrire le comportement de nos dispositifs.



FIG. 5.9 – Système "ouvert" à trois niveaux, constitué par les niveaux 1, 2 et le niveau injecteur g au sein d'une période de la cascade. On injecte du courant électrique dans la sous-bande 2 à partir du niveau injecteur g' de la période précédente. Les différents temps de transition sont indiqués. Le temps d'émission spontanée $1/\Gamma_{sp}$ est intégré dans le temps de transition τ_{21} .

5.2.3 Equations de bilan pour les populations; puissance émise

Revenons sur la figure 5.6. Les deux sous-bandes 1 et 2, ainsi que le niveau injecteur g forment un système à trois niveaux ouvert, décrit à la figure 5.9. Sur la même figure, on a introduit les populations n_2 et n_1 des sous-bandes, et on a défini les temps de transition entre les niveaux τ_{21} , τ_{2g} et τ_{1g} . Le courant électrique est noté par I, alors le rapport I/e est le nombre d'électrons injectés dans la sous-bande excitée 2 par unité de temps. Les équations de taux pour le système s'écrivent :

$$\frac{\mathrm{d}n_2}{\mathrm{d}t} = \frac{I}{e} - \frac{n_2}{\tau_{21}} - \frac{n_2}{\tau_{2q}} \tag{5.7}$$

$$\frac{\mathrm{d}n_1}{\mathrm{d}t} = \frac{n_2}{\tau_{21}} - \frac{n_1}{\tau_{1g}} \tag{5.8}$$

$$\frac{\mathrm{d}n_g}{\mathrm{d}t} = \frac{n_2}{\tau_{2g}} + \frac{n_1}{\tau_{1g}} - \frac{I}{e}$$
(5.9)

en introduisant la population de l'injecteur n_g . A partir de ces équation on peut calculer facilement les populations des sous-bandes en régime permanent d/dt = 0, ainsi que l'inversion de population $n_2 - n_1$:

$$n_2 = \tau_2 \frac{I}{e}, \quad n_1 = n_2 \frac{\tau_{1g}}{\tau_{21}}, \quad n_2 - n_1 = \tau_2 \frac{I}{e} \left(1 - \frac{\tau_{1g}}{\tau_{21}}\right)$$
 (5.10)

On a introduit la durée de vie τ_2 du niveau 2 donnée par la formule $1/\tau_2 = 1/\tau_{21}+1/\tau_{2g}$. La dernière équation (5.10) exprime simplement le fait que pour obtenir l'inversion de population dans les lasers à cascades quantiques, il faut augmenter le temps de vie du niveau 2 et minimiser le temps d'extraction de la sous-bande 1. Ceci est obtenu soit par une sous-bande injecteur, large en énergie, pour augmenter la probabilité de l'effet tunnel comme dans le design de la figure 5.7(a), soit par le couplage avec la voie de désexcitation rapide par les phonons LO comme dans le design de la figure 5.7(b).

En régime d'électroluminescence $(n_2 - n_1 < 0)$, la puissance récoltée par le dispositif de N périodes dans la cascade s'exprime comme :

$$P_{tot} = \eta_{col} \Gamma_{sp} N n_2 \hbar \omega = \eta_{col} \Gamma_{sp} \tau_2 N \frac{I}{e} \hbar \omega$$
(5.11)

Ici η_{col} est le coefficient de collection introduit au chapitre précédent et $\hbar\omega = \Delta E$ est l'énergie du photon émis. La durée de vie τ_2 se compose des différentes voies de désexcitation possibles :

$$\frac{1}{\tau_2} = \Gamma_{sp} + \Gamma_{ee} + \Gamma_{LO} \approx \Gamma_{ee} + \Gamma_{LO} = \Gamma_{nr}$$
(5.12)

On a utilisé ici le fait que le taux de l'émission spontanée Γ_{sp} est beaucoup plus faible que le taux des processus non-radiatifs $\Gamma_{nr} = \Gamma_{ee} + \Gamma_{LO}$. On arrive ainsi à une première expression pour la puissance émise :

$$P_{tot} = \eta_{col} \frac{\Gamma_{sp}}{\Gamma_{nr}} N \frac{I}{e} \hbar \omega$$
(5.13)

qui n'est rien d'autre qu'un résumé des résultats (4.20) et (4.21) présentés au chapitre 4. En effet, la population totale de la sous-bande 2, $N \times n_2 = N\tau_2 I/e = NI/(\Gamma_{nr}e)$, est égale au nombre de dipôles présents dans le dispositif.

Maintenant, considérons la situation des températures proches de zéro T = 0 K, où la voie des phonons LO est bloquée. On a alors $1/\tau_2 \approx \Gamma_{ee}$, et d'après (5.6) et (5.10), on obtient le lien suivant entre n_2 et le courant I:

$$An_2^2 = \frac{I}{e} \tag{5.14}$$

On peut maintenant réécrire la formule pour la puissance émise (5.11):

$$P_{tot} = (\eta_{col} \Gamma_{sp} \hbar \omega) N \sqrt{\frac{I}{eA}} = \langle P \rangle N \sqrt{\frac{I}{eA}}$$
(5.15)

On a introduit ici "la puissance moyenne par dipôle" $\langle P \rangle$ définie par l'équation (4.21). Le dernier résultat se résume par les conclusions suivantes :

- A basse température, lorsque la voie par émission de phonons LO est bloquée, la puissance récoltée du dispositif P_{tot} est proportionnelle à la racine carrée du courant injecté I.

- La pente de la droite $P_{tot}(\sqrt{I})$ est proportionnelle à la "puissance moyenne par dipôle" $\langle P \rangle = \eta_{col} \Gamma_{sp} \hbar \omega$, qui a été étudiée théoriquement au chapitre 4, et qui contient les empreintes des effets d'électrodynamique en cavité.

L'équation (5.15) fournit ainsi une stratégie expérimentale pour l'étude de l'effet Purcell dans nos dispositifs THz.

Chapitre 6

Fabrication et caractérisation des dispositifs

6.1 Fabrication des dispositifs

Notre but est de réaliser technologiquement des dispositifs à cascade quantique dans une cavité métallique à fort confinement du champ électromagnétique. La procédure de fabrication, effectuée exclusivement en salle blanche, est décrite dans le premier paragraphe de ce chapitre. Une description suffisamment détaillée est fournie en annexe F. Les caractérisations électriques qui ont permis de valider l'évolution des dispositifs sont brièvement décrites dans le deuxième paragraphe.

Une étape importante de la fabrication est le report du substrat par brasure Au-In. Ce procédé, permettant de créer des dispositifs avec un miroir métallique inférieur, a été introduit et développé au laboratoire dans le cadre d'études similaires aux nôtres, dans le domaine de proche infrarouge [15]. Parmi d'autres applications, il est aujourd'hui utilisé pour la fabrication des guides d'ondes entièrement métalliques dans le domaine THz [60], [67].

Un défi supplémentaire qui a été relevé est le type de croissance épitaxiale choisie. La croissance constitue "l'étape zero" de la fabrication. Ansi, commençons donc par une brève description des techniques de croissance.

6.1.1 Croissance épitaxiale

Durant ma thèse, la croissance épitaxiale des dispositifs a entièrement été assurée au LPN par Isabelle Sagnes et Ulf Gennser.

Les croissances MOCVD et MBE

Grâce au développement des techniques de croissance, on est actuellement capable de créer artificiellement des cristaux semiconducteurs dont les compositions varient à l'échelle atomique, et fabriquer ainsi différentes hétérostructures, comme des puits et des boîtes quantiques. Les hétérostructures les plus complexes sont probablement les cascades quantiques, qui contiennent typiquement quelques centaines d'interfaces entre couches de composition différente. De plus, un contrôle précis est demandé sur les épaisseurs des couches (souvent de l'ordre de quelques nanomètres pour les barrières les plus fines), et sur le dopage intentionnel et résiduel, ce qui fait des cascades quantiques une tâche éprouvante pour les épitaxieurs.

La plupart des cascades quantiques pour le domaine THz, et en particulier celle utilisée pour nos expériences d'électrodynamique quantique en cavité, sont réalisé dans le système de matériaux $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. Le deux techniques principales, utilisées pour la croissance de telles hétérostructures sont la MBE et la MOCVD.

Dans l'épitaxie à jets moléculaires MBE ("Molecular Beam Epitaxy"), les éléments à épitaxier (comme Ga, Al, As, Si) sont placés dans des cellules à effusion chauffées ("cellules de Knudsen"), et sont évaporés dans une chambre à ultra-vide ($< 10^{-9} Pa$), sous forme de faisceaux moléculaires bien collimatés, sur un substrat lui même chauffé [37]. Le cristal est ainsi construit couche atomique par couche atomique, à une vitesse typique de 1 $\mu m/h$.

La composition stœchiométrique des flux est contrôlée par la température des cellules à effusion. Des caches pilotés par ordinateur sur les cellules permettent, du fait du temps d'ouverture court ($\approx 1 s$), de contrôler les épaisseurs des couches avec une précision à la monocouche atomique près. Le dopage intentionnel peut aussi être varié de manière abrupte. Le dopage résiduel, qui dépend de la propreté du réacteur, peut être très faible ($< 10^{15} cm^{-3}$).

Cette qualité est cependant obtenue au prix d'une croissance lente (une journée pour un laser à cascade de 90 périodes !), et d'une maintenance lourde et coûteuse du réacteur de croissance, ce rend difficile l'utilisation de la MBE au niveau industriel. Cependant, à cause de la complexité des cascades quantiques, la MBE est actuellement largement utilisée pour la croissance de ces structures.

L'autre technique est l'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques MOCVD ("Metalo-Organic Chemical Vapeur Deposition") [37]. Comme son nom l'indique, les atomes à déposer proviennent des sources organométalliques ("précurseurs"), tels que le tryméthil gallium $Ga(CH_3)_3$ et l'arsine AsH₃, qui sont envoyé dans le réacteur sous forme gazeuse (le gaz porteur est l'hydrogène). La croissance d'une couche de GaAs sur le substrat s'effectue par une réaction chimique de type :

$$Ga(CH_3)_3(g) + AsH_3(g) \rightarrow GaAs(s) + 3CH_4(g)$$

(6.1)

La composition des couches épitaxiales est alors contrôlée par les principaux facteurs influençant la cinétique de la réaction chimique : pression, température et composition du mélange gazeux dans le réacteur MOCVD. Une plus grande flexibilité, de plus grandes vitesses de croissance $(5-10 \ \mu m/h)$, et aussi une plus grande reproductibilité par rapport à la MBE, sont les avantages caractéristiques de cette technique. Dans les meilleurs réacteurs MOCVD, la qualité des interfaces et le contrôle de la composition des couches permet à la technique MOCVD de rivaliser avec la technique MBE [161]. Cependant, la croissance MOCVD ne permet à priori pas de maîtriser, comme en MBE, des profils de dopage intentionnel faible (de l'ordre de $10^{16} \ cm^{-3}$ dans les structures à cascades), ainsi qu'un très faible dopage résiduel, due à l'incorporation de carbone dans les couches, provenant de la décomposition des précurseurs organométalliques. Notons, en ce qui concerne les profils de dopage, qu'il est quasi impossible de maintenir un dopage abrupte en MOCVD

Couche	Matériau	Dopage (cm^{-3})	Nb. de cycles	Épaisseur visée(Å)
Couche de contact	GaAs n+	3×10^{18}	1	3000
Puits	GaAs	$x \times 10^{16}$	1	160
Barrière	$\mathrm{Al}_{0.15}\mathrm{Ga}_{0.85}\mathrm{As}$		1	25
Puits	GaAs	$y imes 10^{16}$	1	150
Barrière	$\mathrm{Al}_{0.15}\mathrm{Ga}_{0.85}\mathrm{As}$		1	60
Puits	GaAs		N	280
Barrière	$\mathrm{Al}_{0.15}\mathrm{Ga}_{0.85}\mathrm{As}$		N	25
Puits	GaAs		N	180
Barrière	$\mathrm{Al}_{0.15}\mathrm{Ga}_{0.85}\mathrm{As}$		N	40
Puits	GaAs	$x \times 10^{16}$	N	160
Barrière	$\mathrm{Al}_{0.15}\mathrm{Ga}_{0.85}\mathrm{As}$		N	25
Puits	GaAs	$y imes 10^{16}$	N	155
Barrière	$\mathrm{Al}_{0.15}\mathrm{Ga}_{0.85}\mathrm{As}$		N	60
Puits	GaAs		1	280
Barrière	$Al_{0.15}Ga_{0.85}As$		1	25
Couche de contact	GaAs n+	$C_a \times 10^{18}$	1	La
Couche d'arrêt	$Al_{0.91}Ga_{0.09}As$		1	10000
Substrat	GaAs n+	2×10^{18}		

TAB. 6.1 - Tableau décrivant les couches épitaxiales des échantillons MOCVD, épitaxiés d'après la référence [55]. Les paramètres x (dopage dans le puits à 155 nm), y (dopage dans le puits à 160 nm), C_a (dopage de la couche de contact supérieure) et L_a (épaisseur de la couche de contact supérieure) et N (nombre de périodes dans la cascade) changent en fonction de l'échantillon. Les différences sont résumées dans le tableau 6.2. Le code de couleurs est expliqué dans le texte.

sur quelques monocouches, même lorsque le dopage est important. C'est l'une des raisons pour laquelle la MOCVD à été peu explorée dans la croissance de structures à cascades.

Les structures que nous allons présenter sont innovatrices dans le sens où ce sont les premières cascades quantiques obtenues par la MOCVD et opérant dans le domaine THz. Par leur nature (faibles nombres de périodes, comparaison systématique entre un grand nombre de dispositifs en différents endroits de l'échantillon), nos études expérimentales ont fourni, à posteriori, un bon test pour cette technique de croissance. L'épitaxie MOCVD à été réalisée au LPN par Isabelle Sagnes, dans le bâti EMCORE D125 à réacteur vertical.

Tableau de croissance

Durant ma thèse, un grand nombre d'échantillons MOCVD a été fabriqué d'après la structure électroluminescente de Rochat et al. [55]. La séquence générique des couches de cette structure est résumée dans le tableau 6.1. D'autres structures MOCVD (de type "laser") et quelques structures MBE ont été étudiées, mais les résultats ne sont pas présentés dans ce manuscrit.

Tous les échantillons sont épitaxiés sur un substrat de GaAs dopé de type n. Ils

Échantillon	$x (\times cm^{-3})$	$y (\times cm^{-3})$	$C_a (\times cm^{-3})$	$L_a (nm)$	N	Diff. (%)
MOR5135	0	0	3.0	300	35	?
MOR5429	0	0	3.0	300	8	?
MOR5431	0	0	3.0	300	35	?
MOR5513	0	0	3.0	300	8	?
MOR5581	0	0	3.0	300	8	?
MOR5584*	0	0	3.0	300	8	?
MOR5585*	0	0	3.0	300	35	?
MOR5607	0	3.0	3.0	300	35	-15%
MOR5608	0	6.0	3.0	300	35	-15%
MOR5613	0	12.0	3.0	300	35	-15%
MOR5614	0	0	3.0	300	35	-15%
MOR5618	0	3.0	3.0	300	35	-15%
MOR5620	0	3.0	3.0	300	35	-5% (TEM)
MOR5621	0	3.0	3.0	300	8	-5% (TEM)
MOR5634	3.0	0.0	3.0	300	8	-5%
MOR5635	3.0	0.0	3.0	300	35	-5%
MOR5698	3.0	0.0	2.0	200	4	-5% (Dektak)
MOR5699	3.0	0.0	2.0	200	19	-5% (Dektak)
MOR5670	3.0	0.0	2.0	200	39	-5% (Dektak)
MOR5671	3.0	0.0	2.0	200	9	-5% (Dektak)

TAB. 6.2 – Liste avec les échantillons MOCVD et les valeurs des paramètres x, y, C_a, L_a et N. Les échantillons MOR5584 et MOR5585 désigné par étoile * ne comportent pas de couche d'arrêt, et la séquence des couches épitaxiales est inversée par rapport au tableau 6.1.

comportent des couches de contact dopées de type n+ pour les contacts électriques de la cascade. Ces couches sont indiquées en gris sur le tableau 6.1. Une couche riche en aluminum, appelée "couche d'arrêt", d'épaisseur $\approx 1 \ \mu m$ est insérée entre le substrat et la couche de contact L_a (en rouge sur le tableau 6.1). Cette couche sert lors de l'étape de report de la cascade sur un substrat hôte, qui sera décrite décrite dans le paragraphe suivant.

La cascade quantique proprement dite se trouve entre les deux couches de contact. Les puits et les barrières constituant la zone active sont indiqués en jaune, et ceux de la zone injecteur en vert. Le nombre N de répétitions des couches définit le nombre de périodes de la cascade. On peut remarquer que la cascade commence avec un injecteur, et se termine avec une "demi-zone" active.

Dans le tableau 6.1 on a également indiqué les paramètres qui changent en fonction des échantillons. Ces changements ont été opérés pour optimiser la structure finale. Une liste détaillée des valeurs des paramètres en fonction des échantillons est donnée au tableau 6.2. Les paramètres qui changent sont : x et y qui sont les dopages intentionnels dans les puits à 15.5 nm et 16.0 nm respectivement, le dopage C_a et l'épaisseur L_a de la couche

de contact proche de la couche d'arrêt, et le nombre de cycles de répétition des couches N, le dernier paramètre étant lié aux effets de confinement.

Sur le tableau 6.2, les échantillons MOR5584 et MOR5585 sont particuliers, car ils ne comportent pas de couche d'arrêt, car aucun report de couches ne fait pas partie des étapes de fabrication. Pour ces plaques, la séquence des couches épitaxiales est inversée par rapport au tableau 6.1.

Les épaisseurs des couches données au tableau 6.1 sont les valeurs visées lors de la croissance. La différence entre les valeurs visées et les valeurs réelles, mesurée par différentes techniques de caractérisation, est donnée à la dernière colonne du tableau 6.2. Notons que les épaisseurs réelles étaient plus faibles que les épaisseurs visées.

Caractérisation des plaques

La MOCVD n'ayant, avant cette thèse, jamais réalisé des cascades quantiques, des caractérisations structurales ont été effectuées parallèlement aux études expérimentales. De plus, des caractérisations (TEM, rayons X) ont aussi été effectuées sur des échantillons MBE.

Imagerie TEM. L'imagerie par Microscopie électronique en transmission (d'acronym anglais TEM) permet de mesurer l'épaisseur des couches, ainsi que leur composition (en Aluminium par exemple) en réalisant une coupe transverse. Deux coupes transverses de de l'échantillon MOR5620, réalisées par G. Patriarche au LPN, sont présentées sur les figures 6.1(a),(b). Sur l'image 6.1(a) au moins trois période de la cascade quantique de les quatre puits sont clairement visibles (à comparer avec la figure 5.6). L'image 6.1(b) est un agrandissement sur une période et permet de calculer les épaisseurs des couches. Ces images ont été utilisées pour calibrer les vitesses de croissance, afin d'approcher au maximum les valeurs nominales. De plus, ces images montrent que les interfaces obtenus par MOCVD sont abruptes et de bonne qualité. Par contre, elles relèvent que la quantité d'Aluminium est inférieure par rapport à la valeur visée dans les barrières les plus fines. La hauteur en énergie des barrières est par conséquence modifiée, ce qui provoque une décalage dans la longueur d'onde rayonnée par rapport à la nominale, comme on le verra dans le chapitre suivant.

Analyse SIMS. L'analyse SIMS (Secondary Ion Mass Spectrometry) est une méthode puissante et précise pour la détermination de la composition des échantillons le long de l'axe de croissance, et notamment la concentration en volume des différents dopants. Dans cette technique, la surface de l'échantillon est pulvérisée par le bombardement d'ions Cs+, et les produits de la pulvérisation sont analysés par un spectromètre de masse.

A la figure 6.2(a),(b) les résultats obtenus par SIMS chez la société PROBION ANA-LYSIS sur les deux échantillons MOR5608 et MOR5614 sont présentés. Sur la figure 6.2(a) , pour MOR5608, on observe des oscillations de la composition des éléments Si et Al. Les oscillations de Si proviennent du dopage intentionnel des puits quantiques de la zone de l'injecteur, qui. reste dans la marge voulue entre $10^{15} \ cm^{-3}$ et $10^{16} \ cm^{-3}$.

A la figure 6.2(b), les résultats SIMS pour l'échantillon MOR5614 non-dopé intentionnellement, sauf dans les couches de contact, sont présentés. Le dopage résiduel en Si reste de l'ordre de 10^{15} cm⁻³, mais les mesures révèlent aussi des quantités de carbone C et d'oxygène O de l'ordre de 10^{17} cm⁻³. Ces éléments proviennent des précurseurs or-



FIG. 6.1 - (a) Image TEM en coupe de l'échantillon MOR5620. Les quatre puits quantiques de la structure, comme décrite à la figure 5.6, sont clairement visibles. (b) Grossissement permettant d'obtenir des mesures quantitatives des épaisseurs des barrières et des puits, ainsi que la concentration en aluminium des barrières. On observe deux fois moins d'aluminium dans les barrières les plus fines.



FIG. 6.2 – (a) Résultats de l'analyse SIMS de l'échantillon MOR5608. On voit les oscillations de concentration en Al correspondant aux puits et aux barrières (la résolution de cette technique n'est pas suffisante pour distinguer la structure de la cascade). Une information plus précise est obtenue avec les oscillations du Si qui corresponde à la séquence des zones injecteurs et des zones actives. Les valeurs restent dans la marge voulue entre 10^{15} cm⁻³ et 10^{16} cm⁻³. (b) Résultat de l'analyse SIMS de l'échantillon MOR5614 qui est non-dopé dans la cascade. Ces résultats mettent en évidence un dopage résiduel en Si de 10^{15} cm⁻³, mais aussi une "pollution" en C et O (qui n'est pas gênante à priori car ces impuretés sont loin en énergie de la bande de conduction).



FIG. 6.3 – Profil de dopage de l'échantillon MOR5685, mesuré à l'aide du profilomètre électro-chimique BIO RAD.

ganométalliques utilisés lors de la croissance MOCVD. Pour le GaAs, l'oxygène est un donneur d'électrons, d'énergie $0, 4 \ eV$, proche du milieu du gap, alors que le carbone est un accepteur d'énergie $0,026 \ eV$ en dessous de la bande de valence [162]. Ces impuretés étant loin en énergie du bas de la bande de conduction ou l'on trouve le Si $(0,0058 \ eV)$, on peut admettre en première approximation qu'elles ne jouent aucun rôle dans le dopage intentionnel. En réalité, ces impuretés modifient l'équilibre ionique des dopants, et nous les prenons en compte pour le calcul du dopage effectif réel dans les zones injecteur.

Profilomètre électro-chimique. Il s'agit d'un appareil de mesure qui permet d'obtenir un profil de dopage de l'échantillon. L'échantillon est placé dans une cellule électrochimique, contenant l'électrolyte de Tiron (pour le GaAs) de concentration 0, 1 M. L'électrolyte est en contact avec une surface bien définie de l'échantillon ($\approx 1 \ mm^2$). On mesure alors le courant traversant le circuit formé par un contact ohmique, posé sur la face arrière de l'échantillon, et une électrode en platine placée dans l'électrolyte. En même temps, on mesure la capacité de la couche de déplétion qui se forme à l'interface semiconducteurélectrolyte. La solution grave le semiconducteur au fur et à mesure et l'appareil fournit la tension, le courant et la capacité en fonction de la profondeur de gravure.

Le profil de dopage de l'échantillon MOR5685 ainsi mesuré (avec un injecteur dopé) est donné à la figure 6.3. Les résultats sont obtenus avec l'appareil BIO RAD disponible dans la salle blanche du LPN. On voit sur la figure les couches de contact qui enveloppent la cascade, et une partie du substrat. Les valeurs du dopage sont compatibles avec les



FIG. 6.4 – Diffractogrammes de rayons X obtenues en haute résolution sur les échantillons MOR5607 et MOR5614. Ces deux échantillons ont été réalisés lors de la même campagne de croissance.

mesures SIMS, et le profil est celui visé lors de la croissance. Remarquons cependant que cette technique ne permet pas d'obtenir une grande résolution sur les très faibles dopages à cause de problèmes de calibration.

Diffractométrie de rayons X. Il s'agit d'une technique classique, basée sur la diffraction de rayons X sur les plans cristallins du semiconducteur. On mesure l'intensité des rayons X diffractés sur l'échantillon en fonction de l'angle d'incidence. Une intensité maximale est obtenue pour les angles d'interférences constructives θ_n , donnés par la loi de Bragg :

$$\lambda n = 2d\sin\theta_n \tag{6.2}$$

avec n un entier et d la distance entre les plans cristallins. Pour les structures périodiques, comme les cascades, la périodicité introduit une nouvelle série de pics de l'intensité, qui sont décrits aussi par (6.2) lorsque d est prise égale à la période de la cascade. La diffractométrie de rayons X permet aussi d'obtenir une information sur la composition et les épaisseurs des couches. Cette technique est assurée au LPN par L. Largeau et O. Mauguin.

Les diffractogrammes obtenus sur les échantillons MOR5607 et MOR5614 sont données sur la figure 6.4. Le premier pic bien prononcé (vers 33°) correspond à la couche d'arrêt $Al_{0.91}Ga_{0.09}As$ riche en Al. La série de pics qui suit provient de la cascade, et permettent d'obtenir la période. Les périodes sont respectivement 77 nm pour MOR5607 et 81 nm pour MOR5614. Cette différence de 15% par rapport à la valeur demandée de 92.5 nm à été corrigée lors des croissances suivantes.



FIG. 6.5 - (a) Diagramme de phase du système Au-In [163]. Pour un pourcentage d'indium entre 37% et 54% le mélange Au solide/In liquide est instable (état 1). Le retour à l'équilibre thermique s'effectue par solidification sous forme d'alliages AuIn et AuIn₂ (état 2). Cette transition est indiquée par la flèche bleue sur le diagramme. (b) Image TEM du joint de brasure Au-In entre le substrat et l'échantillon (G.Patriarche). Cette image a été réalisée sur l'un des échantillons fabriqués par C. Nelep dans notre laboratoire lors de sa thèse [15], la procédure de collage utilisée étant équivalente à la nôtre.

6.1.2 Report du substrat. Collage métallique Au-In

L'étape qui suit la croissance des échantillons est un "collage métallique", basé sur une brasure Au-In. Le but est de reporter la cascade quantique GaAs/AlGaAs sur un substrat hôte, en général InP ou GaAs. L'assemblage est assuré par la formation d'une couche d'alliage AuIn entre l'échantillon et le substrat hôte. Grâce à ces propriétés métalliques, cette couche joue le double rôle de miroir plan inférieur pour les dispositifs, et de contact électrique pour l'injection de courant dans la cascade.

Ce type de procédé (et plus généralement la brasure métal-métal, comme Au-Au ou Co-Co) est maintenant devenu standard pour la réalisation des dispositifs THz, qui opèrent dans des guides d'ondes entièrement métalliques. Il est aussi utilisé pour la dissipation de la chaleur dans des dispositifs optoélectroniques comme les VSCELs (lasers à emission verticale) ou les absorbants saturables.

La brasure Au-In a été initialement introduite dans notre laboratoire par C. Nelep dans le cadre de ses études sur l'émission spontanée dans des structures à un puits quantique en cavité métallique pour le proche infrarouge [15]. Ce procédé d'assemblage à été développée dans les années 60 par L. Bershtein [164], puis "redécouvert" par C. C. Lee et C. Y. Wang au début des années 90 [165].

La brasure Au-In est basée sur le phénomène d'interdiffusion solide-liquide (SLID : solid-liquid interdiffusion). La température de fusion de l'indium (In) est faible (T = 157 °C), et celle de l'or (Au) est très élevée (T = 1046 °C). L'étude du diagramme de phase du système Au-In (figure 6.5(a)) montre qu'il est possible d'obtenir des alliages de haute



FIG. 6.6 – Les différentes étapes de report du substrat. A remarquer qu'après le report, la séquence des couches épitaxiales se voit inversée par rapport au tableau 6.1.

température de refonte entre les deux métaux, tout en restant à basse température. La température de formation des alliages, $T \ge 180^{\circ} C$ est supérieure à la température de fusion de l'indium. Lorsqu'on chauffe les deux métaux, mis en contact, à une température $T \ge 180^{\circ} C$, l'indium se liquéfie et diffuse initialement dans l'or solide (d'où la dénomination du procédé). Comme on voit sur le diagramme de phase de la figure 6.5(a), l'établissement de l'équilibre thermique du mélange s'accompagne par "un saut du solidus" qui correspond à la formation des alliages solides AuIn et AuIn₂. Le pourcentage massique de l'indium doit être compris entre 37% et 54%. A la figure 6.5(b) on montre une photo TEM du composé ainsi formé qui est commentée plus bas. Ce phénomène de formation des alliages par SLID est possible aussi pour d'autres couples de métaux [164].

Les étapes du report du substrat sont schématisées à la figure 6.6. Ils consistent en : métallisation de l'échantillon et du substrat hôte, mise en contact et recuit sous pression pour la formation de l'alliage Au-In, et retrait du substrat. Dans la suite, on décrit ces étapes brièvement.

-*Métallisation*. Après un traitement approprié des surfaces de l'échantillon et du substrat (nettoyage à l'alcool, éventuellement sous ultrasons) on dépose 360 nm d'or, après le dépôt de 50 nm de Ti qui forme la couche d'accrochage. Les dépôts sont précédés de désoxydation de la surface par une solution de HCl dilué dans l'eau à 10%. Les dépôts sont effectués dans le bâti d'évaporation SCM 450 de la salle blanche du LPN par L. Leroy et L. Couraud. On dépose ensuite sur le substrat hôte une couche d'indium de 950 nm(bâti BELL). L'indium est recouvert par une couche d'or de 50 nm pour éviter l'oxydation de ce dernier. Les épaisseurs des couches métalliques correspondent aux proportions stœchiométrique de formation de l'alliage de la brasure.

-*Recuit sous pression*. L'échantillon et le substrat hôte, préalablement découpés en morceaux carrés de taille $5 \times 5 mm$ ou $8 \times 8 mm$ sont mis en contact dans une presse

en graphite. La géométrie de la presse est telle qu'elle permet de maintenir une pression mécanique homogène de $\approx 1 MPa$, le substrat et l'échantillon étant bloqués entre deux cales en graphite. Cette pression sert à assurer un contact homogène sur toute la surface, l'échantillon et le substrat ayant des rayons de courbure de quelques dizaines de mètres.

Les échantillons dans la presse sont recuits dans un four à diffusion sous flux d'azote. Le profil de recuit comporte une montée de 8°C/min, avant de demeurer 2 h 30 min sur une plateau à la température de 250°C. La longue durée du plateau facilite l'interdiffusion. A l'issue du recuit, le joint de la brasure se présente comme un ensemble de grains de AuIn et AuIn₂, de taille typique 250 × 700 nm, avec des cavités intergranulaires inférieures à 100 nm [15], comme montré à la figure 6.5(b). Ces dimensions sont bien inférieures aux longueurs d'ondes de travail ($\lambda/n \approx 30 \ \mu m$). Le joint possède une très bonne tenure mécanique, et de bonnes propriétés électriques et thermiques. Il forme le miroir métallique inférieur pour nos dispositifs.

-Retrait de substrat. Le retrait du substrat GaAs commence par son amincissement à l'aide d'une polisseuse électrique PRESI P320. L'échantillon est maintenu, coté substrat, sur un plateau tournant en fonte (30 tr/min), sous flux d'une solution de poudre d'alumine dont les grains ont un diamètre de 3 μm . L'épaisseur initiale du substrat de 450 μm est réduite à $30 - 40 \ \mu m$.

L'épaisseur restante de substrat GaAs est enlevée par une attaque chimique sélective. La solution de la gravure est un mélange en rapport volumique 5 :1 d'une solution aqueuse d'acide citrique $C_4O_7H_8$ de concentration de 1 g/mol, associée à de l'eau oxygéné H_2O_2 à 30%. Cette solution grave les couches contenant peu d'aluminium beaucoup plus vite (100 fois) que la couche $Al_{0.91}Ga_{0.09}As$ riche en Al [166].

Le mécanisme d'attaque chimique par l'acide citrique est commun avec la plupart des réactions de gravure des semiconducteurs. En général, il y a toujours un agent oxydant, comme le peroxyde H_2O_2 pour oxyder la surface du semiconducteur. L'oxyde formé est ensuite dissout par l'acide. Dans le cas de l'acide citrique, les liaisons Ga-O sont plus faibles que Al-O, et se dissolvent plus facilement, ce qui explique la sélectivité [167]. La couche riche en Al ralentit ainsi considérablement la réaction, d'où la désignation de "couche d'arrêt".

La vitesse maximale typique de la gravure est de 1 $\mu m/min$. Elle est atteinte en chauffant la solution (à 40 - 50°C) sous agitation, qui facilite l'accès à la surface du semiconducteur.

La couche d'arrêt Al_{0.91}Ga_{0.01}As est ensuite enlevée dans une solution aqueuse d'acide fluorhydrique HF à 5%, qui possède une très grande sélectivité de gravure de Al_xGa_{1-x}As par rapport à GaAs pour x > 0.5 [168]. Cette étape dure quelques secondes.

A la fin du report du substrat on obtient une surface d'aspect miroir, en général sans défauts.

6.1.3 Mise en forme finale

A partir de l'échantillon collé, on réalise des mésas de différentes tailles (typiquement $200 \times 400 \ \mu m^2$), sur lesquels on dépose des réseaux métalliques de période entre 10 et 22 μm . La fabrication demande plusieurs étapes standards (lithographie, gravure humide) schématisées à la figure 6.7. Au final, on dispose de mésas avec des contacts type n+ sur



FIG. 6.7 – Description schématique des étapes de fabrication des dispositifs à réseau métallique qui sont réalisées sur l'échantillon reporté. Une première lithographie optique et une métallisation permettent de déposer le réseau. Une deuxième lithographie suivie d'une gravure humide définissent les mésas. Des contact électriques peuvent être pris sur le réseau métallique et sur le joint de la brasure par thermocompression.

la surface supérieure et au pied du mésa, ce nous permet d'injecter du courant électrique dans les dispositifs perpendiculairement aux couches. Dans la suite on décrit rapidement les étapes de fabrication.

La première étape est une étape de lithographie optique sur de la résine AZ5214 (épaisseur $1.4 \ \mu m$). Cette étape permet d'imprimer les motifs contenant le réseau à partir d'un masque en Cr, en irradiant la résine par des rayons UV à travers le masque. Au bout du procédé les parties de la résine correspondant à l'emplacement des motifs sont enlevées par une solution appelée developer (ce procédé est appelé "développement"). Il s'agit d'une lithographie "en négatif", car les motifs imprimés sur la résine correspondent au motifs du masque. Une résine dite "négative" signifie que lorsqu'elle est irradiée, elle developer), la résine est dite "positive". La résine AZ5214 peut être comme négative, tant positive, mais pour l'inverser, des étapes d'irradiation et de recuit supplémentaires sont nécessaires.

On évapore ensuite du métal. Puis la résine est entièrement retirée dans un bain d'acétone, emportant le dépôt de métal qui la recouvre (figure 6.7). Deux types de métallisations ont été utilisés pour le réseau métallique : dépôt de contacts ohmiques AuGeNi et dépôt de contacts Schottky Ti/Au ou Pt/Au. Pour les contacts ohmiques, on dépose successivement les métaux Au, Ge, Ni dans des proportions bien définies. Le recuit de 30*s* des couches métalliques vers 420°*C* permet la diffusion partielle de l'or dans le semiconducteur et la formation de divers alliages [169]. Le contact ainsi formé possède une résistivité très faible ($\approx 0.4 \times 10^{-6} \ \Omega cm^{-2}$) [170]. Pour nos échantillons reportés, on a utilisé un recuit "doux" à 320°*C*, qui est suffisant pour la formation des différents eutectiques, mais au prix d'une légère augmentation de la résistivité. Néanmoins, ce procédé s'avérait risqué, car on provoquait souvent l'éclatement du joint de la brasure. Voici la raison pour laquelle on a aussi utilisé les contacts de type Schottky qui seront détaillés par la suite.

Une nouvelle étape de lithographie optique suit le dépôt des contacts. La résine utilisée est AZ4533, d'épaisseur 3.5 μm . Cette fois ci les motifs imprimés sur la résine après le développement sont complémentaires avec le masque (lithographie "positive"). Cette étape sert à couvrir les motifs du réseau avec un chapeau protecteur de résine, afin de les protéger pendant la gravure chimique qui va suivre. La résine est durcie par un recuit à $100^{\circ}C$ pendant 30 min.

Toutes les étapes de lithographie optique sont effectuées avec l'aligneur MJB3 disponible en salle blanche.

Les mésas sont définis par une gravure humide. Parmi les solutions qui ont été utilisées, les meilleurs résultats ont été obtenus avec la solution d'acide sulfurique $H_2SO_3/H_2O_2/H_2O_4$ en proportion 1/8/40. La vitesse de gravure est d'environ 1 $\mu m/min$. Le mécanisme de gravure suit le schéma classique : oxydation par H_2O_2 , puis dissolution (non-sélective) de l'oxyde par l'acide. La vitesse de gravure est limitée par l'étape de dissolution, et peut être facilement ajustée en jouant sur la concentration de l'acide. On a aussi utilisé une solution d'acide phosphorique $H_3PO_4/H_2O_2/H_2O$ en proportion 2/1/40 qui donne une vitesse $\approx 0.06 \ \mu m/min$ plus faible, mais les flanc de la mésa obtenus étaient moins bons.

Le joint de brasure sert de une couche d'arrêt naturelle pour la gravure et ne semble pas être affecté par la solution. A la figure 6.8 on montre des photos obtenus par microscope électronique à balayage, qui montrent les flancs typiques des mésas obtenues après gravure.



FIG. 6.8 – Flancs des mésas obtenus après la gravure humide par l'acide sulfurique (MOR5608). Le sens de la pente dépend des plans cristallins. La sous-gravure importante de la couche de contact à côté du joint de brasure métallique est systématiquement présente sur tous les échantillons observés par MEB. Comme on voit sur les photos, les contacts supérieurs sont suffisamment éloignés des bords sous-gravés.



FIG. 6.9 - (a) Aspect final d'un mésa $200 \times 400 \ \mu m^2$ à l'issue de la fabrication. La photo est obtenue par microscope électronique à balayage. (b) Photo optique d'une région de l'échantillon comportant plusieurs mésas. Sur certains mésas on a soudé par thermocompression des fils d'or de 25 μm de diamètre.

Les pentes $\approx 45^{\circ}$ sont typiques des gravures humides, et ne sont pas gênantes, à cause de la marge d'environ 10 μm entre les contacts métalliques et le bord de l'échantillon. La pente positive ou négative dépend des plans cristallins concernés (en général les motifs du masque de lithographie sont bien alignés avec les plans cristallins).

Il est intéressant de remarquer qu'il apparaît une sous-gravure relativement importante au voisinage immédiat du joint de brasure. La hauteur de la sous-gravure, d'environ 300 nm, correspond à l'épaisseur de la couche de contact avoisinant le joint (figure 6.8). La présence du joint métallique semble donc augmenter considérablement la vitesse de gravure de la couche dopée. Il pourrait s'agir ici d'un effet galvanique [171].



FIG. 6.10 – Schéma expérimental de caractérisation des échantillons en courant continu.

L'avancement de la gravure est suivi à l'aide d'un profilomètre DekTak³ST. Cet appareil scanne la surface mécaniquement avec une pointe de diamètre $\approx 10 \ \mu m$ et enregistre les variations de hauteur avec une résolution de 2 *nm*. Par ce moyen, on a des mesures précises de l'épaisseur de l'échantillon que l'on peut comparer à la valeur nominale. On a mesuré ainsi une différence relative systématique de -5%, reportée sur le tableau 6.2.

Les dispositifs qu'on obtient à la fin de la fabrication sont montrés à la figure 6.9(a),(b). La figure 6.9(a) est une photo obtenue par microscope électronique à balayage d'une mésa de taille $200 \times 400 \ \mu m^2$, montrant la qualité du dispositif. Une photo prise au microscope optique d'un ensemble de mésas est montrée à la figure 6.9(b). Cette photo permet de juger de la qualité d'ensemble du procédé de fabrication. On voit des fils d'or de diamètre $25 \ \mu m$, soudés sur les plots métalliques des dispositifs par thermocompression. Ces fils assurent la connexion électrique avec l'extérieur.

6.2 Caractérisation électrique des dispositifs

6.2.1 Schéma expérimental

Dans cette section, nous allons présenter des mesures électriques en courant continu sur les échantillons à cascades. Des mesures en électroluminescence seront présentées au chapitre suivant.

Le schéma du dispositif expérimental est donné à la figure 6.10. L'échantillon est placé dans un cryostat à circulation d'He, dont la température peut descendre jusqu'à 4 K. Pour s'assurer de la bonne thermalisation, l'échantillon est collé sur une embase de cuivre avec de la laque à l'argent (colle conductrice). Un boîtier électrique permet d'imposer une tension continu sur l'échantillon. On mesure la tension aux bornes de l'échantillon et le courant le traversant indépendamment. Le courant maximal que l'on peut mesurer est 300 mA.

Dans ce type de mesures, la masse du cryostat (reliée à l'embase de cuivre) et du

boîtier de mesure sont indépendantes, ce qui permet de mesurer l'échantillon soit "en positif" (masse du boîtier reliée à la masse du cryostat, le courant parcourt la cascade du haut vers le bas du tableau 6.1), soit en "négatif" (branchement inverse, sens du courant opposé). Le diagramme de bandes à la figure 5.6 du chapitre précédent, qui décrit le fonctionnement de nos cascades, correspond à un branchement "en positif".

6.2.2 Évolution de la courbe I-V avec les paramètres de croissance

Dans le but d'obtenir un échantillon MOCVD optimal, dont les caractéristiques sont semblables à celles de l'échantillon MBE de la référence [55], certains paramètres de la croissance ont été changés en fonction des échantillons, comme on peut le constater sur le tableau 6.2. L'évolution des échantillons est corrélée au comportement des courbes I - Và basse température.

A la figure 6.11(a),(b) on montre des caractéristiques I-V de l'échantillon MOR5635, qui fait partie des dernières générations de croissance. Ses caractéristiques possèdent le comportement voulu. La figure 6.11(a) est la caractéristique V - J en fonction de la température. La densité de courant J (en A/cm^2), plutôt que le courant, est utilisée pour que les courbes soient indépendantes de la surface des mésas. A basse température, on observe l'apparition d'un *plateau de courant* à partir de $J = 56 A/cm^2$ et V = 2 V.

Ce plateau de courant est une indication que les phénomènes de transport sont bien régis par l'effet tunnel résonnant. Le plateau peut être expliqué par la formation de deux zones de champ électrique dans la structure, par analogie avec le phénomène illustré à la figure 5.4. La première zone ("champ faible") correspond à l'alignement des bandes selon le diagramme de la figure 5.6, alors que la seconde ("champ fort") correspond à un alignement entre niveaux qui apparaît à champ plus fort²⁷. La structure bascule alors période par période de la zone de champ faible dans la zone de champ fort, par la progression d'une frontière de charge d'espace qui ne peut plus être contenue par le dopage de la zone injecteur. Comme les périodes passe d'une alignement à l'autre successivement, l'étendue en tension de la zone de plateau est proportionnelle au nombre de périodes de la cascade.

Cette analyse est complétée et confirmée par les mesures d'électroluminesce, présentées dans le chapitre suivant. Nous y reviendrons alors.

Les caractéristiques V - J à basse température sont très similaires de celles fournies dans la référence [55], la différence étant que, pour les courbes de la référence, le plateau apparaît pour un courant $J = 75 \ A/cm^2$ est une tension $V = 1 \ V$. Ces différences sont commentées plus bas.

Il est intéressant de remarquer qu'à partir d'une température de 40K, les caractéristiques V - J ne changent plus avec la température. Cette température correspond à une échelle d'énergie de $kT \approx 3.5 \ meV$, en dessous de l'énergie du premier niveau excité, qui est de l'ordre de $10 - 20 \ meV$. On peut conclure qu'à partir de cette température la distribution électronique est majoritairement thermalisée sur le niveau fondamental, et que le transport est conditionné par la population des deux premiers niveaux, comme expliqué au chapitre précédent.

²⁷Remarquons que la structure de bandes est beaucoup plus compliquée dans une cascade quantique que dans un super-réseau, et donc que la formation de domaines est également plus complexe.



FIG. 6.11 – (a) Caractéristique tension - densité de courant (branchement en positif) en fonction de la température pour l'échantillon MOR5635. Le plateau du courant est clairement visible à partir de 40 K. (b) La caractéristique complète avec le tracé de la résistance différentielle dV/dJ. Les plateaux de courant, en positif et négatif, apparaissent comme des pics sur la courbe dV/dJ.

6.2. Caractérisation électrique des dispositifs

A la figure 6.11(b) on a représenté la caractéristique V - J de l'échantillon MOR5635 dans sa totalité, ainsi que la résistance différentielle dV/dJ (en $\Omega.cm^2$). Le tracé de dV/dJest obtenu à partir du résultat expérimental après un lissage²⁸ pour éliminer les fluctuations de la mesure. Le plateau de courant est marqué par un pic bien prononcé de la résistance différentielle; ainsi, plutôt que d'étudier les caractéristiques V - J on peut suivre l'évolution des courbes de la résistance différentielle dV/dJ, sur lesquelles les phénomènes d'alignement des bandes sont plus clairement visibles.

Comme cela a déjà été noté au paragraphe 6.1.1, le niveau du dopage résiduel et intentionnel est un enjeu majeur pour les échantillons de type MOCVD. Voilà pourquoi des échantillons avec des dopages intentionnels différents à l'intérieur de la cascade ont été comparés.

A la figure 6.12(a) on compare les courbes de résistance différentielle dV/dJ en fonction de la tension V pour les échantillons MOR5620 et MOR5635 à une température T < 10K. Les échantillons sont identiques, sauf pour le puits dopé de la zone injecteur : dans l'échantillon MOR5620 c'est le puits de 15.5 nm qui est dopé, alors que dans le MOR5635 c'est le puits de 16.0 nm qui est dopé²⁹. Le niveau de dopage 3×10^{16} cm⁻³ est le même pour les deux échantillons. Pour MOR5635 un pic très prononcé de dV/dJ est visible *en positif*, alors que pour MOR5620 le pic se trouve dans la région des tensions négatives. La possibilité de contrôler le comportement des cascades MOCVD par la localisation du dopage intentionnel est ainsi bien démontrée.

A la figure 6.12(b) on a comparé les courbes dV/dJ en fonction de la densité de courant J (T < 10K) pour les trois échantillons MOR5513, MOR5620 et MOR5608, qui ont le puits de 15.5 nm dopé respectivement à 0, 3 et $6 \times 10^{16} cm^{-3}$. Le dopage dans la cascade MOR5513 correspond donc au dopage résiduel. Rappelons aussi que d'après le tableau 6.2 les épaisseurs du MOR5520 correspondent mieux aux valeurs nominales que les deux autres échantillons. Les trois échantillons ont été mesurés dans des conditions identiques.

A la figure 6.12(b), on peut voir que pour l'échantillon MOR5513 non-dopé, les variations dV/dJ sont très faibles même à basse température, alors que la résistance différentielle est assez faible. En dopant le puits de 15.5 nm, on crée des pics de résistance différentielle, surtout pour des tensions négatives. Pour MOR5620 de dopage 3×10^{16} cm^{-3} des pics apparaissent pour des densités de courant de 18 A/cm^2 et 44 A/cm^2 , alors que pour MOR5608 (dopage $6 \times 10^{16} cm^{-3}$) un pic apparaît pour une densité de courant bien plus élevée : 110 A/cm^2 . Les tensions respectives sont rangées dans le même ordre.

Ces observations confirment le rôle de l'injecteur comme réservoir de porteurs pour la cascade. En effet, d'une part, le phénomène de l'effet tunnel résonant n'est que très peu visible dans l'échantillon non dopé et le transport doit s'y effectuer principalement par d'autres voies. Le fait que les pics apparaissent avec l'augmentation du dopage intentionnel montre que l'on peut effectivement spécifier le niveau de ce type de dopage par rapport au niveau du résiduel pour la MOCVD. D'autre part, la comparaison entre les cascades dopées MOR5620 et MOR5608 montre que la densité de courant maximale que l'on peut injecter dans l'échantillon juste avant le désalignement des périodes en champ

²⁸Il s'agit de la fonction "Adjacent Averaging" du logiciel Origin qui a été utilisé pour tracer les courbes.

²⁹Cette différence était due à une erreur dans la demande de la croissance, qui est fortuite, parce qu'elle a permis d'effectuer cette comparaison.



FIG. 6.12 - (a) Comparaison entre les courbes dV/dJ en fonction de la tension appliquée, selon le puits dopé de la zone injecteur. Le pic correspondant au plateau passe de la région des tensions négatives (puits 15.5 nm) à la région des tensions positives (puits 16.0 nm). (b) Courbes dV/dJ pour différentes valeur du dopage du puits 15.5 nm, en fonction de la densité de courant. Les tensions des pics sont également indiquées. Toutes les courbes sont obtenues à basse température, entre 4 et 15 K.



FIG. 6.13 – (a) Caractéristiques V - J à basse température pour mesas de différentes surfaces : 200 × 800 μm^2 , 200 × 400 μm^2 et 200 × 200 μm^2 . Les courbes se superposent bien, ce qui confirme que le courant est bien proportionnel à la surface. (b) Courant en fonction de la surface de la mesa à température ambiante. Les données sont obtenues immédiatement après la fabrication des dispositifs.

faible augmente du fait de l'augmentation du nombre de porteurs disponibles dans la cascade.

Pour les échantillons de la dernière génération de croissance, on a choisi un dopage de $3 \times 10^{16} \ cm^{-3}$ (plutôt que $6 \times 10^{16} \ cm^{-3}$) pour éviter d'éventuels problèmes d'absorption par porteurs libres.

Nous commentons maintenant les différences observées entre l'échantillon MOR5635 et l'échantillon MBE de la référence [55]. Dans MOR5635 le puits de 16.0 nm est dopé à $3 \times 10^{16} \ cm^{-3}$ et on a un courant de plateau $J = 56 \ A/cm^2$, alors que le dopage de l'échantillon MBE est de $0.8 \times 10^{16} \ cm^{-3}$ pour un courant de plateau $J = 75 \ A/cm^2$. Nous attribuons cette différence à la présence de carbone dans les plaques MOCVD, qui est une impureté accepteur [162]. Une partie des électrons du dopage sert alors à compenser ces impuretés, et n'est plus disponible pour le transport. Cette conclusion a été confirmée par une étude numérique de l'équilibre ionique des trois espèces O, C et Si décrite dans l'annexe G. L'étude montre aussi que le dopage résiduel MOCVD reste néanmoins de type n.

Finalement, il est important de vérifier que le courant traversant un mésa donné est bien proportionnel à la surface. Ceci est une vérification de la qualité de la fabrication. En particulier, elle montre la bonne qualité des flancs de gravure humide, qui ne doivent pas engendrer de court-circuits par une éventuelle sous-gravure trop importante, ni de courants de périmètre parasites.

Une telle vérification se trouve sur la figure 6.13(a), qui est une superposition des courbes V - J à basse température (T = 10K) pour des mésas de l'échantillon MOR5635 de taille $200 \times 200 \ \mu m^2$, $200 \times 400 \ \mu m^2$ et $200 \times 800 \ \mu m^2$. Les trois courbes se superposent bien, ce qui montre que le courant est bien proportionnel à la surface. A la figure 6.13(b) on montre les résultats d'un test sous pointes réalisé sur l'échantillon MOR5608 à température ambiante en salle blanche immédiatement après la fabrication. La loi linéaire pour le courant en fonction de la surface est vérifiée pour les deux types de contact AuGeNi recuit et PtAu.

6.2.3 Contact Schottky

Un contact Schottky est le contact formé par une jonction métal-semiconducteur. Considérons d'abord le cas d'une interface métal-semiconducteur parfaite, i.e. sans défauts ni impuretés. Une barrière de potentiel apparaît alors à l'interface car le travail de sortie d'un électron du métal $q\phi_m$ est supérieur à l'affinité électronique du semiconducteur $q\chi$ (q = |-e| est la charge de l'électron). En première approximation, cette barrière de potentiel $q\phi_{B0}$ est donnée par $q\phi_{B0} = q(\phi_m - \chi)$ [162] (figure 6.14(a)).

A l'équilibre, lorsque la tension appliquée à la jonction V est nulle, le niveau de Fermi E_F doit être le même dans le métal et dans le semi-conducteur. Comme dans le cas d'une jonction p-n [172] une redistribution des charges a lieu : de la charge négative est induite sur le métal est une couche de déplétion de largeur W apparaît sur la jonction. Cette épaisseur est inversement proportionnelle à la racine carré du dopage $W \propto 1/\sqrt{n}$ [162]. Du fait des charges induites à la surface métallique, la barrière se voit légèrement déformée, et sa vraie hauteur $q\phi_{Bn}$ est plus basse que la valeur $q\phi_{B0}$ [162].

Lorsque la valeur de la tension appliquée n'est pas nulle, la hauteur de la barrière baisse



FIG. 6.14 – (a) Diagramme d'énergie pour une jonction métal-semiconducteur parfaite, reproduite de la référence [162]. (b) Comparaison entre les caractéristiques J - V à basse température, pour l'échantillon MOR5608, pour les contacts type Schottky (PtAu) et ohmique (AuGeNi recuit).
si V > 0 et augmente si V < 0 (figure 6.14(a)). Respectivement, la largeur W diminue si V > 0 et augmente si V < 0. La jonction possède ainsi des propriétés d'une diode rectificatrice, et le courant J qui la traverse s'exprime (théorie d'émission thermoionique [162]) :

$$J = J_0 e^{-q\phi_{Bn}/kT} (e^{qV/kT} - 1)$$
(6.3)

avec J_0 une constante qui dépend de la température et des propriétés des matériaux. Cette expression signifie simplement que pour obtenir un courant significatif à travers la jonction, il faut franchir en direct une tension de seuil égale à la hauteur de la barrière ϕ_{Bn} . En inverse, le courant finit par passer à travers la barrière par effet tunnel lorsque la tension est suffisante.

La description idéalisée qu'on vient de donner n'est plus totalement vraie dans le cas d'une vraie jonction métal-semiconducteur. En particulier, pour le GaAs on a établi l'existence d'états de surface chargés, qui "accrochent" le niveau de Fermi au milieu du gap [173], [169]. La barrière de potentiel ϕ_{Bn} est alors plutôt égale à 0.8 eV, qui est approximativement la valeur de la moitié de l'énergie du gap de GaAs.

Dans le cas des contacts ohmiques de type AuGeNi, un recuit permet de faire diffuser du germanium dans le semi-conducteur, permettant de "court-circuiter" la barrière de potentiel [169].

A la figure 6.14(b) nous comparons les caractéristiques J-V à basse température pour l'échantillon MOR5608, fabriqué avec deux types de contact : AuGeNi recuit et PtAu. Le phénomène de seuil pour les contacts Schottky est clairement visible : on retrouve la barrière de 0.8 V pour le branchement en positif. Une tension à 2.4 V apparaît en négatif. Cette tension est considérablement plus faible que les valeurs de tension de rupture (10-15 V) reportées pour les contacts Schottky Au-GaAs [174]. Cette différence provient très probablement de la présence de Ti comme couche d'accrochage, qui est connu pour former des composés chimiques avec le GaAs (non-uniformément à l'interface Ti-GaAs) [175].

L'interface entre le joint de la brasure et le semiconducteur, qui a subi un recuit à 200° C, ne semble pas limiter le courant.

Notre échantillon est supposé fonctionner en positif, ce qui justifie le choix de la séquence de couches épitaxiales du tableau 6.1.

Chapitre 7

Résultats expérimentaux

Dans ce dernier chapitre du manuscrit nous présentons les résultats expérimentaux concernant les variations de l'électroluminescence des cascades quantiques en fonction de l'épaisseur de la cavité métallique. Notamment, le diagramme puissance-période pour des cavités d'épaisseurs différentes sera construit et confronté aux résultats théoriques de la première partie. La comparaison entre la modélisation et l'expérience va permettre d'évaluer le taux d'émission spontanée (normalisé) Γ_{sp}/Γ_0 en fonction de l'épaisseur, et de mettre ainsi en évidence les effets d'électrodynamique en cavité dans le domaine THz, donnant un résultat concluant à ce travail de thèse.

Des mesures d'électroluminescence résolues spéctralement seront présentées dans le dernier paragraphe du chapitre. Outre une justification de la démarche entreprise pour la construction du diagramme puissance-période, les spectres ont été un test sur la qualité des structures à cascade quantique obtenues par la MOCVD, ouvrant la voie à une future exploitation de ce type de croissance pour le domaine THz.

7.1 Dispositif expérimental

Le dispositif expérimental pour la mesure de l'électroluminescence THz des cascades quantiques est présenté dans ce paragraphe. Le principe du dispositif est le plus simple possible : il comporte la source (dans le cryostat He à circulation) placée en face d'un détecteur. Deux éléments clés ont joué un rôle crucial pour le type de mesure qu'on a voulu effectuer : un détecteur bolométrique, adapté pour le rayonnement THz, et un cône de Winston, qui est un élément optique permettant d'obtenir une très bonne efficacité de collection pour nos échantillons délivrant des intensités optiques assez faibles (quelques dizaines de pW).

7.1.1 Schéma électrique

Le schéma simplifié du dispositif expérimental est montré à la figure 7.1. Les mesures d'électroluminescence sont effectuées en régime pulsé. Un générateur d'impulsions délivre des créneaux de fréquence 300 Hz et de rapport cyclique 50 % qui alimentent l'échantillon, et servent aussi de signal de référence pour une détection synchrone de signal optique. Un



FIG. 7.1 – Schéma simplifié du dispositif expérimental pour la mesure de l'électroluminescence THz (non résolue spéctralement). Les mesures sont effectuées en régime pulsé. Les boîtiers électriques permettant de mesurer la tension appliquée sur l'échantillon et le courant ne sont pas indiqués sur la figure.

ensemble des boîtiers électriques (non indiqués sur la figure) permet de suivre la tension V appliquée sur l'échantillon et le courant I prélevé sur une résistance de 4 Ω , et de tracer ainsi des caractéristiques électriques conjointement avec les mesures optiques. La valeur maximale mesurable du courant est $I = 300 \ mA$.

Le signal optique, qu'on notera \mathcal{L} , est acheminé par un cône collecteur de Winston vers un photomètre à bolomètre Ge (voir le paragraphe 7.1.3) alimenté en tension continue. Sur chaque point de mesure le signal est une moyenne temporelle sur 3 *sec*, pour minimiser le niveau du bruit. La phase de détection est optimisée en minimisant le signal en quadrature dans la détection synchrone.

Pour les mesures en pulsé, la masse du cryostat n'est plus dissociée de celle des boîtiers de mesure. Les mesures qu'on présentera ne sont effectuées que pour les tensions positives, correspondant au "bon sens" de fonctionnement de la cascade.

7.1.2 Cône de Winston

Le cône de Winston est représenté schématiquement à la figure 7.2(a). Il s'agit d'une surface de révolution réfléchissante autour de l'axe Δ , dont la section méridionale est constituée des deux paraboles décalés. Le foyer F de la parabole supérieure sur la figure 7.2(a) est situé sur le bord inférieur de l'ouverture O' [176]. Les deux ouvertures ont des diamètres respectivement a et a', et la longueur de cône de Winston est notée l.

Par construction, le cône de Winston est un collecteur parfait de lumière pour tous les angles d'incidence entre $-\theta_M$ et $+\theta_M$ [176]. L'angle θ_M est l'angle que fait l'axe d'une des paraboles avec l'axe de révolution Δ . Alors tous les rayons qui sont incidents sous un angle $|\theta| \leq \theta_M$ de l'ouverture O vont se retrouver sur l'ouverture O', alors que tous



FIG. 7.2 – (a) Schéma géométrique d'un cône de Winston. C'est une surface de révolution réfléchissante autour d'un axe Δ , dont la section méridionale est constituée de deux paraboles décalées. Les deux ouvertures du cône sont notées O et O'. Le foyer F de la parabole supérieure est situé sur le bord inférieur de l'ouverture O', et son axe fait un angle θ_M avec l'axe de révolution Δ . C'est aussi l'angle que fait avec Δ un rayon incident (en rouge) reliant les deux ouvertures. (b) Photo d'un échantillon collé sur un embase de cuivre placée devant le cône de Winston. Une système des pièces en cuivre permet de déplacer l'échantillon selon les trois directions de l'espace pour le positionner précisément devant le cône, tout en assurant un bon contact thermique avec le support froid du cryostat.

les autres rayons seront rejetés [176]. L'angle d'arrivée sur l'ouverture O' est un angle quelconque entre $\pm 90^{\circ}$. On a les relations suivantes entre les paramètres a, a' l et θ_M :

$$\frac{a'}{a} = \sin \theta_M, \qquad l = \frac{a+a'}{2} \cot \theta_M \tag{7.1}$$

Le cône de Winston conserve l'étendue optique de l'ensemble des faisceaux incidents pour les angles inférieures à θ_M [176]. En s'appuyant sur la conservation de l'étendue et la réversibilité des trajets optiques on peut supposer que tout rayon, issu de l'ouverture O' (sous un angle quelconque) va repartir de l'ouverture O sous un angle $|\theta| \leq \theta_M$ par rapport à l'axe Δ . Ainsi, on pourrait utiliser le cône de Winston en tant que collimateur pour les échantillons à réseau qui émettent dans un éventail de directions relativement large (voir figure 4.8(a),(b) qui sont les diagrammes de rayonnement typiques pour nos sources aux fréquences THz). Par les propriétés géométriques du cône de Winston l'angle de collimation θ_M est l'angle de collimation minimale pour un cône de taille finie, avec une efficacité de collection maximale pour les rayons issus de l'ouverture O'.

Voici pourquoi nous avons adopté la configuration expérimentale de la figure 7.2(b). Toutes les pièces mécaniques sont fixées et thérmalisées sur le support d'échantillon refroidi du cryostat à circulation. L'échantillon est placé au voisinage de l'ouverture O' d'un cône de Winston³⁰ avec $\theta_M = 5.6^\circ$. Le diamètre a' est égale à 1 mm, la surface de l'ouverture O'est ainsi comparable à la surface de l'échantillon. L'échantillon est collé sur un embasse de cuivre de surface dorée, reposant sur une système de pièces usinées en cuivre qui permet

³⁰Le cône a été acheté au société IRLabs, Inc.



FIG. 7.3 – (a) Photo de l'intérieur de l'enceinte du photomètre. On voit les gardes en température, le cône collecteur et à droite suivie du bolomètre et relié électriquement, le composant contenant la résistance de charge. (b) Caractéristiques V - I du bolomètre refroidi à l'He liquide, en fonction de la pression. Le point de fonctionnement optimal est indiqué. Ce point correspond à une alimentation en tension continue $V \approx 6$ Volts.

de déplacer et fixer précisément l'échantillon devant le cône, au milieu de l'ouverture O'(on voit nettement l'échantillon à travers la grande ouverture O). La bonne position de l'échantillon est confirmée par observation sous microscope, placé au dessus du cryostat. En réalité l'échantillon est légèrement décalé vers l'arrière de l'ouverture O'. Nous avons estimé que seulement les rayons issus de l'échantillon dans un cône d'ouverture 60° autour de la normale de l'échantillon rentrent dans l'ouverture O'. D'après les diagrammes de rayonnement de la figure 4.8(a),(b) le lobe principal d'émission est entièrement contenu dans ces directions.

Le diamètre de l'ouverture O, $a = 1.3 \ cm$ est légèrement inférieur au diamètre des fenêtres optiques du cryostat. La fenêtre en face du cône de Winston est fabriquée en polyméthylpentène, qui un polymère transparent dans le domaine THz [177].

7.1.3 Détecteur bolométrique

Un bolomètre est un détecteur de rayonnement, dans lequel l'énergie du rayonnement incident sert à échauffer un matériaux résisitif et provoque ainsi un changement de sa température. La résistance étant fonction de la température, on détecte le rayonnement par mesures électriques des variations de la résistance [178], par exemple, en mesurant les variations du courant traversant la résistance pour une tension donnée.

Dans notre cas la résistance est un crystal de germanium fortement dopé [179]. Ce bolomètre nous a été fourni par M. Noël Coron de l'Institut d'Astrophysique Spatiale (Orsay), où il a servi à des mesures de spectres de niveaux rotationnels moléculaires [180], [181].

Le bolomètre est monté dans un photomètre refroidi dont l'intérieur est montrée à la figure 7.3(a). Le rayonnement arrive jusqu'à la résistance par un cône collecteur, similaire au cône de Winston décrit précédemment, mais un peu moins sophistiqué (les coupes mé-

ridionales sont de simples droites). Des filtres optiques situés devant la résistance coupent les longueurs d'onde inférieures à 50 μm .

L'enceinte dans laquelle est situé le bolomètre (figure 7.3(a)) est thermiquement isolée de l'extérieur par trois gardes sous vide. En remplissant le réservoir du photomètre avec de l'helium liquide, puis en pompant l'helium on peut refroidir l'enceinte jusqu'à ≈ 1.3 K, pour obtenir une sensibilité maximale du bolomètre. Les caractéristiques V - I du bolomètre pour différentes pressions/températures de l'helium sont données à la figure 7.3(b). Sur la même figure on a indiqué le point de sensibilité maximale du bolomètre, correspondant à une pente maximale de la courbe V - I et un courant minimal ([178]). Le signal du bolomètre est amplifié d'un facteur $\times 10^3$ avant la détection synchrone (figure 7.1).

Initialement nous avions prévu une lentille convergente en quartz, située de telle façon que le détecteur et l'émetteur se situent dans ses foyers. Finalement, il s'avérait plus pratique d'amener l'entrée du photomètre directement en contact avec la fenêtre THz du cryostat. Ainsi, nous avons pu récupérer le maximum de signal, tout en évitant des alignements compliqués. Le trajet dans l'air est également minimisé, ce qui évite au maximum l'absorption des rayons THz par la vapeur d'eau de l'atmosphère, et réduit le niveau de bruit. En outre, cette configuration expérimentale était hautement reproductible. C'est dans ces conditions qu'on a systématiquement effectué nos mesures d'électroluminescence.

7.2 Diagramme puissance-période expérimental

7.2.1 Extraction du taux d'émission spontanée

Nous examinons maintenant les résultats d'électroluminescence (non-résolus spectralement) obtenus sur nos échantillons. Ces résultats, ainsi que les spectres qui seront présentés dans le dernier paragraphe du chapitre constituent le test ultime sur la qualité des cascades quantiques MOCVD. Les échantillons les plus systématiquement étudiés en optique sont ceux décrits dans les 6 dernières lignes du tableau 6.2, car le dispositif expérimental est devenu disponible au moment de leur apparition.

Electroluminescence en fonction du courant

La figure 7.4(a) représente les mesures $\mathcal{L} - V$ et J - V obtenues sur l'échantillon MOR5635 (35 périodes), à basse température ($T \approx 4.5 K$). L'électroluminescence est donnée en unités arbitraires. Une estimation de la sensibilité du bolomètre et le gain des amplificateurs donne une puissance absolue $\approx 20 \ pW$ pour le maximum du signal, qui est supérieure par rapport à la valeur $\approx 1 \ pW$ fournie dans la référence [55] pour les échantillons analogues obtenus par croissance MBE et ayant le même nombre de périodes. Cette différence de plus d'un ordre de grandeur peut être due à une meilleure collection de notre dispositif expérimental, ou aux effets de confinement du mode électromagnétique (voir figure 4.3(b) du chapitre 4 et les commentaires correspondants).

La forme de la courbe $\mathcal{L} - V$, et notamment la corrélation claire avec la caractéristique J - V confirme le comportement de la structure discuté dans le paragraphe 6.2.2 du chapitre 6. On observe que la luminescence croît régulièrement avec la tension *avant* le



FIG. 7.4 – (a) Superposition des courbes \mathcal{L} (luminescence) - V est J-V pour l'échantillon MOR5635. (b) La luminescence en fonction du courant. Le mesa mesuré était de taille $200 \times 400 \ \mu m^2$. La puissance récoltée suit une évolution de type $A\sqrt{I-I_0}$ pour le régime qui correspond à l'alignement de la figure 5.6. Le coefficient A est proportionnel au produit $\eta_{col}\Gamma_{sp}$.

plateau de courant, puis décroît dans la zone de plateau. En effet, avant le plateau, la structure est alignée selon le diagramme de bandes décrit à la figure 5.6 du chapitre 5, et la luminescence provient exclusivement de la transition $2 \rightarrow 1$. Les mesures spectrales présentées dans le paragraphe 7.2.4 confirment cette affirmation. Le signal croît car le courant augmente et donc le nombre de porteurs injectés dans le niveau 2 augmente.

L'électroluminescence apparaît à partir d'une certaine tension de seuil $V_0 \approx 1 V$. En effet, à champ quasiment nul la conduction s'effectue entre les niveaux de bas de bande, sans faire intervenir les niveaux supérieurs. Le tension de seuil correspond alors au début de l'alignement du niveau d'injection sur les niveaux de transition $2 \rightarrow 1$ et l'établissement du régime décrit sur la figure 5.6.

Sur la zone de plateau, il y a formation de domaines de champ, et le domaine à champ faible, contenant l'alignement de type de la figure 5.6 est progressivement réduit, d'où la décroissance de la luminescence. Après le plateau, la caractéristique J - V redevient régulière, ce qui signifie que la structure a entièrement basculé dans un nouveau type d'alignement, à champ plus fort. Les niveaux 2 et g ne sont plus alignés, et les porteurs empruntent d'autres chemins de transport sur des niveaux excités. La luminescence croît de nouveau, mais cette fois elle provient aussi d'autres transitions (par exemple, la transition $3 \rightarrow 2$ sur le diagramme 5.6 a quasiment la même énergie que la transition $2 \rightarrow 1$).

A la figure 7.4(b) l'électroluminescence est tracée en fonction du courant I. L'électroluminescence apparaît à partir d'un certain courant de seuil I_0 , correspondant à la tension V_0 . Entre I_0 et le courant d'apparition du plateau, l'électroluminescence suit bien une loi de la forme $A\sqrt{I-I_0}$. Ce comportement est conforme aux équations de bilan pour la transition $2 \rightarrow 1$ établies dans le paragraphe 5.2.3 du chapitre 5, qui prédisent une telle dépendance à très basse température lorsque la voie de désexcitation par le phonon LO est bloquée (équation (5.15)). Le coefficient A est proportionnel à la quantité $\eta_{col}\Gamma_{sp}N$ qu'on cherche à mesurer pour l'observation d'effets d'électrodynamique en cavité.

Pour certaine échantillons nous avons observé la présence d'un petit signal négatif pour de très faibles courants ($I < I_0$), même après l'optimisation de la phase. L'origine de ce signal, qui apparaît plutôt pour les réseaux de petite période, nous est inconnue. Le même signal apparaît aussi dans des mesures d'électroluminescence sur des échantillons MBE. La valeur négative signifie que le signal apparaît en opposition de phase par rapport au pulse d'excitation, i.e. il surgit après l'extinction du créneau du pulse. Il pourrait ainsi provenir, par exemple, de retour à l'équilibre, par une voie radiative, des électrons présents dans la zone de charge d'espace des couches de contact dopées.

Blocage du phonon LO

Le blocage du phonon LO est illustré par l'étude de courbes luminescence - courant en fonction de la température présentées à la figure 7.5(a),(b). A la figure 7.5(a) on donne l'aspect des courbes $\mathcal{L}-I$ pour différentes températures. La luminescence décroît bien avec l'augmentation de la température, ce qui est une confirmation de son origine inter-sousbande. Notamment le "coude" associé au plateau de courant, qui est clairement visible à basse température, disparaît progressivement et n'est plus visible à partir de $T \geq 50 K$. La courbe $\mathcal{L} - I$ devient quasiment linéaire. Rappelons que le plateau lui même reste visible jusqu'une température sensiblement plus élevée, $T \approx 120 K$ (figure 6.11(a)). Ainsi on



FIG. 7.5 – (a) Evolution des courbes $\mathcal{L} - I$ en fonction de la température pour l'échantillon MOR5670 (39 périodes, mesa 200 × 400 μm^2). Les données expérimentales ont été lissées avec le logiciel Origin. (b) Tracé de l'inverse de l'électroluminescence $1/\mathcal{L}$ en fonction de l'inverse de la température 1/T pour le courant I = 86 mA, qui correspond au maximum de signal optique à basse température.

7.2. Diagramme puissance-période expérimental

peut conclure qu'aux températures élevées l'efficacité quantique Γ_{sp}/Γ_{nr} de la transition $2 \rightarrow 1$ diminue considérablement à cause du branchement de la voie des phonons LO, et le signal peut provenir d'autres transitions excitées par l'échauffement de la distribution électronique. En revanche, la courbe $\mathcal{L}-I$ n'évolue plus pour des températures $T \leq 15 K$, ce qui signifie que la distribution électronique est bien établie dans les premiers niveaux de la cascade.

D'après l'expression (5.13) la puissance récoltée est inversement proportionnelle au taux de transitions non-radiatives Γ_{nr} , qui suit une dépendance en température de la forme (voir (5.5)) :

$$\Gamma_{nr} = \Gamma_{ee} + \Gamma_{LO} = \Gamma_{ee} + G \exp\left\{-\frac{E_{LO} - \Delta E}{kT}\right\}$$
(7.2)

Alors l'inverse de la luminescence $1/\mathcal{L}$ doit être une exponentielle décroissante en fonction de l'inverse de la température 1/T. A la figure 7.5(b) nous avons tracé les mesures de $1/\mathcal{L}$ à $I = 86 \ mA$ en fonction de 1/T à partir des courbes $\mathcal{L} - I$ de la figure 7.5(a) (la valeur $I = 86 \ mA$ correspond au maximum de signal à basse température). Une dépendance exponentielle de type $A + B \exp(-a/T)$ est en effet observée, confirmant le blocage du phonon LO à basse température. Le coefficient $a = (E_{LO} - \Delta E)/k$ permettrait d'accéder à l'énergie de transition ΔE . Cependant, les fits sur les différentes mesures effectuées donnent systématiquement de valeurs $\Delta E \approx 28 \ meV$ trop élevées par rapport à celle qui est mesurée spectralement $\Delta E = 17 \ meV$ (paragraphe 7.2.4). Cette différence peut être expliquée par le fait que le signal ne provient pas exclusivement de la transition $2 \rightarrow 1$ à haute température.

En conclusion, nous avons réussi à atteindre les conditions expérimentales optimales, décrites dans le paragraphe 5.2.3, pour l'extraction du taux d'émission spontanée à partir des mesures effectuées sur nos échantillons.

7.2.2 Réduction de l'épaisseur de la cascade

Nous explorons maintenant l'évolution des caractéristiques de la structure lorsque le nombre de périodes N change. Les mesures sont effectuées sur les échantillons MOR5698 (N = 4), MOR5671 (N = 9), MOR5699 (N = 19) et MOR5670 (N = 39) (tableau 6.2). On peut remarquer la variation logarithmique de nombre de périodes. Ces échantillons ont été obtenus dans une même campagne de croissance, pour éviter au maximum les dérives dans les conditions de croissance.

Les caractéristiques J - V (à température T < 15 K) sont données à la figure 7.6(a). La grandeur pertinente pour la comparaison des échantillon est l'étendue en voltage du plateau de courant, qui est, comme on peut le constater avec les chiffres données à la figure 7.6(a), bien proportionnelle au nombre de périodes N. Le décalage en tension des courbes J - V est probablement dû aux différences sur les contacts Schottky, qui dépendent de l'état de surface métal-semiconducteur. Ces décalages ne sont pas importants pour l'extraction du taux de l'émission spontanée, car ce qui compte ce sont les variations de la luminescence en fonction du courant, et non pas de la tension.

On peut ainsi conclure que l'on a réussi à réduire l'épaisseur de la cavité sans altération majeure de la source inter-sous-bande, et en particulier des champs électriques associées



FIG. 7.6 – (a) Courbes J - V pour les échantillons de différent nombre de périodes N. Pour chaque courbe on a indiqué l'étendue en voltage du plateau de courant, qui s'avère d'être proportionnelle au nombre de périodes dans la cascade, comme attendu. (b) Electroluminescence en fonction du courant pour les échantillons de différent nombre de périodes. Le code des couleurs de la figure précédente est respecté.

à ses différents régimes de fonctionnement tels qu'ils sont décrits au paragraphe 5.2.

A la figure 7.6(b) on a tracé les signaux de luminescence en fonction du courant, obtenus pour des mesas $200 \times 400 \ \mu m^2$ fabriqués à partir des quatre échantillons. Le réseau métallique est toujours le même, de période 14 μm . Il est remarquable d'observer que les signaux restent quasiment de même niveau quel que soit le nombre de périodes de la cascade, alors que la puissance donnée par la formule (5.15) est bien proportionnelle au nombre de périodes. Ces résultats sont déjà une indication pour les effets d'électrodynamique en cavité, car seulement ces effets peuvent provoquer une exaltation du taux d'émission spontanée Γ_{sp} suffisante pour contrer la diminution de nombre de périodes N(nombres des sources), à taux de transitions non-radiatives Γ_{nr} constants. Par ailleurs, on a observé pour des structures sans confinement du champ électromagnétique (sans miroir métallique inférieur) que la puissance récoltée est bien proportionnelle au nombre de périodes de la cascade [182].

7.2.3 Diagramme puissance-période

D'après les résultats théoriques de chapitre 4 (paragraphe 4.4.4), le diagramme puissancepériode pour des cavités complexes de différentes épaisseurs contient les empreintes d'effets d'électrodynamique en cavité. Voilà pourquoi nous avons entrepris de construire ce diagramme expérimentalement pour les cavités fabriquées à partir de nos échantillons.

Le diagramme à été obtenu par des mesures systématiques du coefficient A de la loi $A\sqrt{I-I_0}$, utilisée pour ajuster la courbe $\mathcal{L} - I$ expérimentale entre I_0 et la zone du plateau. Le coefficient A étant proportionnel au produit $\eta_{col}\Gamma_{sp}N$, pour avoir uniquement la grandeur $\eta_{col}\Gamma_{sp}$ on a divisé le signal de l'électroluminescence par le nombre de périodes N de la cascade. Le taux d'émission spontanée qu'on obtient ainsi est une intégrale sur toutes les positions possibles des sources inter-sous-bandes, réparties à l'intérieur de la cavité.

Rappelons que pour la construction théorique du diagramme, on calcule numériquement la puissance rayonnée $\Delta P(L, d)$ en fonction de l'épaisseur de la cascade L et la période du réseau d (on rappelle que la puissance est moyennée sur toutes les positions possibles du dipôle rayonnant à l'intérieur de la cavité). La grandeur $\Delta P(L, d)$ ainsi obtenue est normalisée à la valeur $\Delta P(L = 3.7 \mu m, d = 18 \mu m)$ qui est la puissance calculée numériquement pour une cavité d'épaisseur $L = 3.7 \mu m$ avec un réseau métallique de période $d = 18 \mu m$, choisie comme référence. On obtient ainsi la fonction sans dimension $\Delta P(L, d) / \Delta P(L = 3.7 \mu m, d = 18 \mu m)$ des paramètres L et d, qui joue en quelque sorte le rôle de facteur de Purcell (paragraphe 1.2.2, formule (1.44)) pour les cavités complexes³¹. La grandeur $\Delta P(L, d)$ est aussi une moyenne sur les fréquences, pondérée par le profil d'émission lorentzien de la source inter-sous-bande, centré sur une certaine fréquence ν_0 (longueur d'onde $\lambda = c/\nu_0$), ce qui correspond à la situation expérimentale (voir le paragraphe suivant). Dans le calcul, la puissance à été également intégrée sur toutes les directions dans un cône d'angle d'ouverture $\theta = 60^{\circ}$ autour de la normale du réseau. Cet angle correspond aux directions des rayons issus de l'échantillon et récoltés par le cône de

³¹Il s'agit plus précisément d'un facteur de Purcell "contaminé" par les effets de collection par le réseau métallique, contenus dans le coefficient d'extraction η_{col} .



FIG. 7.7 – Diagrammes puissance-période théorique et expérimental. Les points ronds sont les mesures expérimentales. Les courbes continues sont les calculs théoriques. Le code des couleurs des figures précédentes (7.6(a),(b)) est respecté. (a) Comparaison entre la théorie et l'expérience pour tous les échantillons. (b) Le diagramme sans le résultat pour l'échantillon MOR5698 avec N = 4 périodes de la cascade.

Winston (paragraphe 7.1.2).

De la même façon, pour obtenir une grandeur expérimentale, sans dimension, correspondant à la grandeur théorique $\Delta P(L,d)/\Delta P(L = 3.7\mu m, d = 18\mu m)$, on a divisé les pentes $\eta_{col}\Gamma_{sp}$ par la valeur mesurée pour l'échantillon de N = 39 périodes, avec un réseau de période $d = 18 \ \mu m^{32}$.

Les résultats des différentes mesures et la comparaison avec le modèle théorique sont résumés à la figure 7.7(a),(b). La figure 7.7(a) est le diagramme puissance-période complet obtenu sour toute la série des échantillons MOR5698-MOR56701. La figure 7.7(b) est le diagramme sans l'échantillon MOR5698 le moins épais (N = 4 périodes de la cascade), sur lequel, faute de temps, on n'a pas effectué des mesures systématiques. Remarquons également que les calculs théoriques ont été effectués avec les épaisseurs nominales des cavités, alors qu'en réalité les couches épitaxiales étaient légèrement moins épaisses, de 5%.

Le meilleur fit du nuage de points expérimentaux à été obtenu avec les courbes théoriques calculées pour une longueur d'onde $\lambda = 70 \ \mu m$ (fréquence $\nu_0 = 4.3 \text{ THz}$). Cette valeur n'est pas loin de la valeur obtenue par mesures spectrales $\lambda = 73 \ \mu m$. Une fluctuation relativement importante des points expérimentaux est également visible, mais clairement les points suivent bien les prédictions théoriques. Sur la figure 7.7(b) on a également donné, pour N = 9 périodes, une courbe en pointillé correspondant à la longueur d'onde $\lambda = 80 \ \mu m$.

Avant de discuter les différences entre la théorie et l'expérience, nous allons dégager les conclusions des mesures sur les effets d'électrodynamique en cavité dans le domaine THz. Tout d'abord, les résultats montrent que le modèle théorique exposé dans la première partie du manuscrit rend bien compte des phénomènes de diffraction dus au réseau métallique dans les cavités complexes. Notamment le maximum de la puissance collectée en fonction de la période du réseau d est correctement prédit.

En plus, le modèle fournit correctement la dépendance de la grandeur $\eta_{col}\Gamma_{sp}$ en fonction de l'épaisseur L de la cavité. L'exposant $\beta \approx 0.6$ de la loi en puissance (4.40) pour le maximum de la puissance récoltée en fonction de la période du réseau est alors correctement prédit.

Ainsi un accord satisfaisant est obtenu entre le modèle et l'expérience sur les variations de la puissance collectée en fonctions des trois paramètres principaux : d, L et la longueur d'onde d'emission λ . Nous pouvons donc nous appuyer sur le modèle pour nous affranchir de l'efficacité de collection η_{col} et évaluer les valeurs du taux d'émission spontanée Γ_{sp}/Γ_0 "interne" pour chacune de nos cavités. Les résultats pour la fréquence 4.1 THz ($\lambda \approx 73$ μm) sont donnés dans le tableau suivant (pour le calcul, on a utilisé les épaisseurs de cavité mesurées pendant la fabrication) :

 $^{^{32}}$ Il s'agit d'une moyenne sur plusieurs mesures obtenues sur différents mesas 200 × 400 μm^2 avec le même réseau de période $d = 18 \ \mu m$.

Nombre de périodes N	Épaisseur de la zone active (μm)	Γ_{sp}/Γ_0
39	3.5	4.2
19	1.76	8.7
9	0.88	20.0
4	0.44	48.5

Conformément à la discussion du paragraphe 4.4.5 du chapitre 4, on a reporté ici comme valeur de Γ_{sp}/Γ_0 la valeur calculée pour le taux modal d'une cavité planaire équivalente (paragraphe 2.3.3, chapitre 2), dans laquelle le réseau métallique a été remplacé par un miroir métallique plan.

Résumons alors nos conclusions, qui sont le bilan de ce travail de thèse :

Le diagramme puissance-période de la cavité, qui fournit les variations de la grandeur $\eta_{col}\Gamma_{sp}$ en fonction de la période de réseau d et l'épaisseur de la cavité L a été construit expérimentalement. Le diagramme est compatible avec les prédictions théoriques, obtenues à partir du modèle développé dans la partie I du manuscrit (chapitres 3 et 4), pour une longueur d'onde d'émission $\lambda = 70 \ \mu m$, également confirmée par l'expérience.

Le modèle théorique fournit à la fois la puissance rayonnée par une source à l'extérieur de la cavité, à travers le réseau, et la modification du taux d'émission spontanée de la source (TES). Les deux grandeurs étant intriquées, et le modèle ayant reçu confirmation par les mesures qu'il donne le bon comportement de la puissance émise, on peut s'appuyer sur le modèle pour estimer le TES Γ_{sp} de la source.

On prédit en particulier que le TES est peu modifié par la présence du réseau métallique, et qu'il est pratiquement celui d'un cavité planaire. En effet, le mode de la cavité complexe, d'épaisseur sub-longueur d'onde et des ouvertures entre les fentes de réseau métallique inférieures à la longueur d'onde, tend vers le mode TM_0 d'une cavité planaire à la limite des grandes longueurs d'onde.

La partie utile du TES (qui n'est pas associée à l'absorption des électrons libres dans les couches de contact dopées) est donnée par la règle d'or de Fermi, et ses valeurs pour nos cavités sont données dans le tableau plus haut. La valeur la plus élevée, $\Gamma_{sp}/\Gamma_0 = 48.5$ obtenue pour l'échantillon MOR5668 à quatre périodes, montre plus d'un ordre de grandeur d'amélioration de l'efficacité quantique Γ_{sp}/Γ_{nr} de la transition inter-sous-bande, due à la réduction de l'épaisseur de la cavité.

A présent, faisons un bilan des sources des fluctuations dans les mesures expérimentales, visibles sur la figure 7.7.

En ce qui concerne le dispositif expérimental, une très bonne reproductibilité des mesures en fonction de la position de l'échantillon devant le cône de Winston (figure 7.2(b)) a été constaté. Pour ce faire, on a effectué plusieurs mesures sur la même mesa après plusieurs montages et démontages de l'échantillon dans le cryostat.

Les fluctuations dues à la structure épitaxiale proviennent d'une part des fluctuations du dopage, qui peuvent modifier le signal récolté par variation de l'absorption des couches dopées de la structure. Une autre source de bruit sont les variations latérales des épaisseurs des couches épitaxiales. En effet, dans le cas le plus simple d'un puits quantique infini l'énergie des transitions entre deux niveaux est inversement proportionnelle au carré de la largeur w du puits [54]. Les variations relatives de l'énergie de la transition (et donc de la fréquence d'émission) sont alors données par la formule :

$$\frac{\delta E}{E} = -2\frac{\delta w}{w} \tag{7.3}$$

Pour la MOCVD, les variations latérales sont de 2% sur la plaque, ce qui donne une variation latérale de la fréquence d'émission d'au moins 4%. Autres que les variations des épaisseurs, les niveaux dans la cascade dépendent de la composition d'Al dans les barriers [161]. Pour nos structures la composition d'Al est moins importante dans les barrières les plus fines comme on le voit sur les images TEM (figure 6.1) du chapitre précédent ce qui peut induire un décalage dans l'énergie de la transition $2 \rightarrow 1$ et donc des fluctuations dans la longueur d'onde émise. Ainsi le fit en pointillés à la figure 7.7(b) sur les données de l'échantillon à N = 9 périodes suggère que certains mesa rayonnent une longueur d'onde plutôt égale à 80 μm .

La fabrication est également une source de fluctuations. Les motifs métalliques obtenus par lithographie optique n'ont pas exactement les paramètres géométriques visés. Nous avons estimé des différences relatives de l'ordre de 2%, mais les fluctuations dans la puissance émise doivent être encore plus importantes, surtout pour les échantillons de faible épaisseur qui sont plus sensibles aux fluctuations de la période du réseau d.

Néanmoins, en s'appuyant sur les résultats expérimentaux de la figure 7.7, on peut affirmer que l'accord entre l'expérience et la théorie est constaté au delà des fluctuations des mesures.

7.2.4 Mesures résolues spectralement

Pour conclure ce chapitre, nous présentons les mesures spectrales obtenues sur l'échantillon MOR5700. Ces mesures ont été effectuées par G. Scalari à l'Université de Neuchâtel ³³. L'appareil qui permet d'obtenir une résolution spectrale dans le domaine THz est un Spectromètre Infrarouge à Transformée de Fourier (FT-IT), qui est un interoféromètre de Michelson [182]. Dans ce type de spectromètre on détecte l'interférogramme obtenu par l'interférence entre les signaux dans les deux bras de l'interoféromètre de Michelson en fonction de la différence de marche. Le spectre est ensuite obtenu par une transformée de Fourier numérique (FFT). Le signal est détecté dans un bolomètre, avec une moyenne sur plusieurs secondes pour chaque valeur de la différence de marche. Pour éviter l'absorption des rayons THz par les vapeurs d'eau dans l'atmosphère et maximiser le niveau du signal, l'air est évacué tout le long des trajets des faisceaux. Également importante est l'optique de collection, usuellement constituée de miroirs paraboliques, qui amène le signal optique dans le spectromètre à partir de l'échantillon.

Les résultats obtenus sur une mesa de taille $200 \times 800 \ \mu m^2$ de l'échantillon MOR5700 sont donnés à la figure 7.8(a),(b). Le spectre 7.8(a) à été enregistré pour un densité de courant faible $J = 40 \ A/cm^2$, alors que le spectre 7.8(b) correspond à la densité de courant $J = 186 \ A/cm^2$, juste avant l'apparition du plateau pour cette mesa. Le creux à 16 meV visible à la figure 7.8(b) est dû à une raie d'absorption du bolomètre. La mesure de la

³³Institute of Physics, University of Neuchâtel, CH-2000 Neuchâtel, Switzerland



FIG. 7.8 – Spectres d'émission pour l'échantillon MOR5700 (N = 39 périodes) pour différentes densités de courant. (a) $J = 40 \ A/cm^2$. Un fit lorentzien de la raie d'émission est donné en rouge. (b) $J = 186 \ A/cm^2$, juste avant le plateau du courant. Le creux vers 16 meV est dû à une raie d'absorption propre au détecteur.

puissance intégrée est en accord avec notre estimations (voir 7.2.1, pour une mesa de surface moitié) : 20 pW à $J = 40 \ A/cm^2$ et 55 pW à $J = 186 \ A/cm^2$.

Le spectre apparaît comme une raie lorentzienne centrée sur l'énergie $\approx 17 \text{ meV}$ (fréquence 4.1 THz, longueur d'onde $\lambda = 73 \ \mu m$). La fréquence attendue pour la structure est plutôt 3.4 THz [55], ce qui est une différence de 20%. Comme expliquée précédemment, les variations dans les épaisseurs et la composition d'Al par rapport au nominal peuvent expliquer cette différence.

En comparaison avec les échantillons MBE analogues [55], les spectres présentés ici sont plus nets (le fond parasite est beaucoup moins prononcé), et la raie d'émission est plus fine. Ceci est du à la meilleure répétabilité de la croissance MOCVD par rapport à la MBE. La largeur de la raie augmente avec le courant injecté dans la structure, car le nombre des porteurs injectés augmente, et par conséquence le taux de transitions nonradiatives (voir 5.2.2).

Ces résultats spectraux confirment la longueur d'onde prévue par les diagrammes puissance - période ($\lambda = 70 \ \mu m$). L'aspect des spectres est également une justification de la démarche utilisée pour la construction des diagrammes théoriques présentée au chapitre 4, qui était fondée sur l'hypothèse d'un profil lorentzien de la source inter-sous-bande.

Par ailleurs, ces résultats sont très encourageants vis-à-vis de la réalisation d'un laser THz par croissance MOCVD, qui a été entamée à la fin de ce travail de thèse.

Chapitre 7. Résultats expérimentaux

Conclusion générale

L'objectif principal de ce travail de thèse consistait à mettre en évidence les effets d'électrodynamique quantique en cavité dans le domaine THz. Compte tenu de l'accord entre les résultats expérimentaux dans nos études d'électroluminescence et les prédictions théoriques, on peut conclure que l'objectif est atteint. Nous résumons maintenant les résultats obtenus en chemin et les perspectives qui s'ensuivent.

Tout d'abord, nous avons proposé une analyse détaillé de l'émission spontanée pour les dispositifs qui fonctionnent dans le domaine THz. Cette analyse a été possible par l'exploitation de la complémentarité entre les approches classique et quantique du calcul de l'émission spontanée, expliquée au chapitre 1.

La particularité des dispositifs THz est la présence des couches de contact dopées, dont la contribution aux propriétés optiques d'une structure multicouches ne peut être négligée dans le domaine THz. Notamment, le couplage entre les oscillations plasma des électrons libres dans les couches dopées et le mode optique de la cavité engendre un mode mixte, de type plasmon, dont la fréquence de saturation se situe dans le domaine THz. Pour rendre compte de ces effets, et plus généralement pour obtenir le champ électromagnétique des modes d'une cavité multicouche, une approche numérique a été proposée (paragraphe 2.2, chapitre 2). Cette approche pourrait servir pour l'analyse des cavités lasers, notamment pour le calcul de la dispersion et l'absorption de la cavité. Les effets d'inversion de population dans la zone active pourraient facilement être pris en compte par une constante diélectrique complexe.

Une première conséquence de l'existence du mode plasmon est une absorption accrue, surtout pour les cavités de faible épaisseur. Les couches de contact pouvant être déplétées par l'application d'une tension électrique dans un design approprié, on pourrait envisager un dispositif électro-optique THz fonctionnant avec modulation de l'absorption.

Une deuxième conséquence est l'apparition d'une contribution non-radiative de l'émission spontanée, qui apparaît comme une désexcitation résonnante vers le plasmon des couches dopées. Dans notre analyse le taux d'émission spontanée dans la cavité planaire apparaît ainsi comme une somme des deux contributions. On distingue une partie "utile" de l'émission spontanée, qui s'effectue dans le mode TM fondamental, et qui croît comme l'inverse de l'épaisseur de la cavité. C'est cette contribution, fournie par la règle d'or de Fermi, qui conditionne la puissance extraite du dispositif. La seconde contribution, "nonexploitable", est associée à l'absorption dans les couches dopées et peut être évaluée par le calcul du champ rétro-réfléchi.

Ayant écarté la géométrie purement planaire avec l'extraction par la tranche comme peu efficace au point de vue de l'extraction de l'électroluminescence, nous avons envisagé une géométrie de la cavité plus complexe, le miroir métallique supérieur de la cavité étant remplacé par un réseau métallique de fentes rectangulaires. Dans un premier temps, la diffraction sous incidence oblique d'une onde électromagnétique par un réseau métallique, posé sur un système multicouche, a été calculée dans l'approximation d'impédance de surface (chapitre 3). Le modèle, confirmé dans le domaine THz par des mesures sur des dispositifs passifs, pourrait servir également pour l'étude des systèmes photoniques dans le moyen et proche infrarouge. Un développement possible est la généralisation du calcul pour le cas d'un réseau 2D : par exemple un réseau d'ouvertures rectangulaires, en ne retenant que les premiers modes TM ou TE dans les ouvertures.

Le problème d'une source dans une cavité avec réseau a ensuite été traité dans le chapitre 4, l'accent étant portée par le calcul de la puissance rayonnée par la source à travers le réseau. Le modèle fournit tant le champ proche, que le champ lointain rayonné par la source.

Là également une généralisation immédiate pour une source de polarisation TM serait le calcul pour un réseau 2D d'ouvertures rectangulaires, en ne retenant que le mode TM_{11} dans les ouvertures, qui est homologue avec la source. La validité de notre modèle n'est également pas restreinte au domaine THz, et pourrait être étendue, par exemple, au problème des molécules fluorescentes.

Pour nos sources dans le domaine THz, le modèle montre que la contribution dans l'émission spontanée associée au réseau métallique est négligeable. La dynamique de la source peut être traitée alors comme dans la cas de la cavité métallique planaire. On peut séparer ainsi dans la puissance récoltée par le réseau les effets géométriques de collection, qui dépendent de la période du réseau métallique, et les effets de dynamique, qui sont conditionnés par le taux d'émission spontanée dans le mode TM fondamental de la cavité planaire. Les effets de l'électrodynamique en cavité sont ainsi contenus dans le diagramme puissance-période, sur lequel on reporte la puissance extraite en fonction de la période du réseau pour différentes épaisseurs de la cavité.

Nous avons entrepris la vérification expérimentale de nos prédictions théoriques. Le chemin est passé par un développement de la croissance MOCVD des dispositifs à cascade quantique THz, jusqu'à maintenant peu exploitée pour ce genre de structures. Le but ultime de cette voie est d'obtenir une structure laser MOCVD. Un dispositif expérimental adapté pour la mesure de l'électroluminescence, suffisamment sensible compte tenu des intensités faibles ($\approx 10 \ pW$) qu'on était amené a détecter, a également été mis en place au sein du laboratoire. Avec ce dispositif le diagramme puissance-période a été construit. Grâce à l'accord des résultats expérimentaux avec la modélisation théorique, on peut déduire un facteur de renforcement $\Gamma_{sp}/\Gamma_0 \approx 50$ pour la structure à cascade quantique de plus faible épaisseur (N = 4 périodes de la cascade), qui représente plus d'un ordre de grandeur d'amélioration de l'efficacité quantique de la transition inter-sous-bande.

Comme perspective de cette étude, on pourrait envisager une exploration des effets d'électrodynamique dans le cas du régime laser. Bien qu'il soit largement admis que le gain modal n'est pas affecté par les effets EDQC, car indépendant de la densité d'états du mode [68], dans notre cas il pourrait y avoir un effet, car le renforcement de l'émission provient non pas de la densité d'états, mais du renforcement de l'élément de matrice d'interaction dipolaire normalisé ³⁴.

Une autre perspective est l'exploration d'autres types de géométries avec un confinement 2D ou 3D du champ électromagnétique. De telles structures, comme disques ou rectangles seraient également faciles à fabriquer aux échelles inférieures à la longueurs d'onde rayonnée et aurait des facteurs de renforcement encore meilleurs. On pourrait envisager des rangées de telles structures pour obtenir une efficacité de rayonnement par unité de surface équivalente. En utilisant des disques comme des briques élémentaires, combinées avec des éléments diffractifs comme de réseaux métalliques, des nombreux dispositifs photoniques intéressantes peuvent être envisagés...

 $^{^{34}\}mathrm{Comme}$ l'absorption dans les couches de contacts augmente également avec la réduction de l'épaisseur, et donc il n'y aura pas d'effets sur les performances en termes de courant de seuil du laser. Mais un dispositif plus compact pourrait ainsi être obtenu.

Conclusion générale

Annexe A

Calcul détaillé du taux d'émission dans les modes liés



FIG. A.1 – Système multi-couches pour le calcul du taux d'émission spontanée dans un mode guidé. Chaque couche est caractérisée par ses épaisseur L_i et dopage C_i . P_i et Q_i sont les amplitudes de la composante E_z des deux ondes planes contra-propageantes dans la couche. Un dipôle vertical est placé à l'intérieur de la couche k, à une distance L_{kd} de la face supérieure. Cette couche est supposée non-dopée $C_k = 0$.

Dans cette annexe on donne plus de détails sur le calcul du taux d'émission spontanée dans un mode particulier du champ, décrit dans le chapitre 2. Le système est décrit à la figure A.1. Il s'agit d'un ensemble des couches, délimitées par un miroir métallique M_1 et un substrat infini M_2 . Les épaisseurs des couches sont notées L_i et les dopages C_i . Le dipôle est placé dans la couche L_k , supposée non dopée : $C_k = 0$. Soient P_i et Q_i les amplitudes des ondes planes contra-propageantes dans la couche *i*, l'origine des phases est prise sur la face supérieure de la couche. Le champ E_{zi} dans la couche s'écrit alors : Annexe A. Calcul détaillé du taux d'émission dans les modes liés

$$E_{zi}(z, \mathbf{r}_p) = P_i e^{i\mathbf{k}_p \mathbf{r}_p + i\gamma_i z} + Q_i e^{i\mathbf{k}_p \mathbf{r}_p - i\gamma_i z}$$
(A.1)

avec \mathbf{k}_p la composante du vecteur d'onde dans le plan, et γ_i obtenu à partir de la relation :

$$\gamma_i^2 + \mathbf{k}_p^2 = \varepsilon_i \frac{\omega^2}{c^2} \tag{A.2}$$

avec ω la fréquence, c la vitesse de la lumière et ε_i la constante diélectrique de la couche.

La première étape dans le calcul numérique du taux d'émission spontanée est le calcul de la relation de dispersion :

$$\frac{1}{R_{M_1M_2}}(\omega, \mathbf{k}_p) = 0 \tag{A.3}$$

 $R_{M_1M_2}$ est la réflectivité totale du système obtenue par la procédure itérative décrite dans le chapitre 2. Par invariance de rotation dans le plan des couches, la fréquence n'est fonction que du module $k = |\mathbf{k}_p|$ du vecteur d'onde. La fréquence obtenue est généralement un nombre complexe. Toutes les grandeurs calculées ici seront exprimées comme fonction du paramètre réel k.

Pour normaliser le mode, on va exprimer toutes les amplitudes du champ à partir d'un paramètre unique. On choisira l'amplitude A du champ sortant dans le substrat. Avec les résultats du chapitre 2, on peut exprimer toutes les amplitudes :

$$Q_i = \frac{A}{T_{iM_2} e^{i\gamma_i L_i}} \tag{A.4}$$

$$P_i = Q_i R_{iM_2} e^{2i\gamma_i L_i} \tag{A.5}$$

On peut alors calculer l'énergie par unité de surface dans la couche i:

$$I_{i} = \frac{\varepsilon_{0}}{2} \int_{0}^{-L_{i}} \Pi_{i} |E_{z}|^{2} dz = \frac{\varepsilon_{0}}{2} |A|^{2} \frac{\Pi_{i} G_{i}}{|T_{iM_{2}} e^{i\gamma_{i} L_{i}}|^{2}}$$
(A.6)

On a introduit ici les notations :

$$G_{i} = G(L_{i}, \gamma_{i}, R_{iM_{2}}) = \int_{-L_{i}}^{0} |e^{-i\gamma_{i}z} + R_{iM_{2}}e^{i\gamma_{i}(2L_{i}+z)}|^{2} dz$$
(A.7)

$$\int_{-L_{i}}^{0} |e^{-i\gamma_{i}z} + R_{iM_{2}}e^{i\gamma_{i}(2L_{i}+z)}|^{2} dz =$$

$$L_{i}e^{-\operatorname{Im}(\gamma_{i})L_{i}} \{\operatorname{shc}(\operatorname{Im}(\gamma_{i})L_{i})[1 + |R_{iM_{2}}e^{i\gamma_{i}L_{i}}|^{2}] + 2\operatorname{sinc}(\operatorname{Re}(\gamma_{i})L_{i})\operatorname{Re}(R_{iM_{2}}e^{i\gamma_{i}L_{i}})\}$$
(A.8)

194

$$\operatorname{shc}(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{2x} \quad \operatorname{sinc}(x) = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2ix}$$
(A.9)

$$\Pi_{i} = \Pi(\gamma_{i}, C_{i}) = \left(\frac{\mathrm{d}\omega\varepsilon_{i}(\omega)}{\mathrm{d}\omega} + \varepsilon_{\infty}\frac{\omega_{pi}^{2}}{\omega^{2}}\right)\left(1 + \frac{|\gamma_{i}|^{2}}{k^{2}}\right) + \frac{|\varepsilon_{i}(\omega)|^{2}k_{0}^{2}}{k^{2}} \tag{A.10}$$

La densité d'énergie dans le métal est prise comme nulle. Alors la condition de normalisation du champ sur les M couches s'écrira :

$$S(\sum_{i=1}^{M} I_i + I_{M_2}) = \frac{\hbar\omega}{2}$$
 (A.11)

L'intégral I_{M_2} est l'énergie par unité de surface dans la couche M_2 :

$$I_{M_2} = \frac{\varepsilon_0}{2} \Pi_{M_2} \frac{1}{-2 \operatorname{Im}(\gamma_i)} \tag{A.12}$$

Si la couche M_2 est métallique, on a $I_{M_2} = 0$. Nous sommes alors en mesure d'écrire l'expression du taux modal pour le système multi-couches :

$$\frac{\Gamma_{mode}(L_{kd})}{\Gamma_{0}} = \frac{3}{2n_{1}k_{0}^{3}} \frac{|e^{i\gamma_{k}L_{kd}} + R_{kM_{2}}e^{i\gamma_{k}(2L_{k}-L_{kd})}|^{2}/|T_{kM_{2}}e^{i\gamma_{k}L_{k}}|^{2}}{\sum_{\text{couches }i}(G_{i}\Pi_{i})/|T_{iM_{2}}e^{i\gamma_{i}L_{i}}|^{2}} \times \frac{\omega'}{\xi} \left(\arctan\frac{\xi\bar{k}^{2}}{2|\omega''|} + \arctan\frac{\xi(k_{max}^{2} - \bar{k}^{2})}{2|\omega''|}\right) \tag{A.13}$$

Dans cette dernière expression on a ajouté la densité d'états calculée dans le chapitre 2. Dans la somme sur les couches au dénominateur il faut ajouter la densité d'énergie dans la couche M_2 si celle-là n'est pas métallique. Si des couches intermédiaires dans l'empilement 1, 2, 3, ... sont métalliques, il faut poser leur densité d'énergie égale à zéro. On rappelle que ξ désigne la dérivée :

$$\xi = \frac{\mathrm{d}\omega'}{\mathrm{d}k^2} \tag{A.14}$$

Le résultat (A.13) est très général, applicable pour une ensemble arbitraire des couches planes dopées, diélectriques ou métalliques.

Annexe B

Calcul du coefficient d'extraction d'une cavité planaire

Diffraction sur la facette de la cavité



FIG. B.1 – (a) Géométrie dans laquelle on vas examiner l'extraction par le bord de la cavité. Pour simplifier, les interfaces métalliques sont considérées comme métal parfait. (b)Source dans une cavité de longueur L

Dans cette annexe on present un calcul de coefficient de transmission à travers la facet d'un cavité planaire. Ceci est un problème de diffraction dont la géométrie est montrée à la figure B.1(a). Le corp de la cavité est constitué d'un diélectrique d'indice n_1 , d'épaisseur w. A la sortie se trouve un milieux diélectrique semi-infini d'indice n_3 . Les miroirs de la cavité seront supposés constitué du métal parfait. Ceci simplifie beaucoup le problème, en autre on fera l'hypothèse que l'effet dominant dans la diffraction est contenue dans la géométrie du système. Un repère Oxyz direct est placé comme à la figure. Le système sera supposée infinie dans la direction Ox.

Le champ électrique E_z dans la cavité (y < 0) est supposé de la forme :

$$E_z = E_0 e^{ik_{mode}y} + E_r e^{-ik_{mode}y} \tag{B.1}$$

Ici k_{mode} est le nombre d'onde (constante de propagation) du mode dans la cavité. Dans l'esprit de notre approximation, on négligera la partie imaginaire de k_{mode} . On supposera en fait qu'il est pas loin du celui du mode fondamental qui se propage entre dans un cavité fermée par miroirs parfaits :

$$k_{mode} \approx n_1 k_0 \tag{B.2}$$

En autre on négligera la dependance du champ en z, ce qui est un bon approximation même pour des cavité plus réalistes. Alors à partir des équation de Maxwell on peut facilement montrer que la seule composante non-null du champ magnétique est H_x qui s'écrit :

$$H_x = \frac{n_1 k_0}{\mu_0 \omega} (E_0 e^{i n_1 k_0 y} - E_r e^{-i n_1 k_0 y})$$
(B.3)

Dans la région y > 0 on écrira le champ électrique E_z comme une décomposition en ondes planes :

$$E_z = \int_{-\infty}^{\infty} R(k) e^{iky + i\gamma_3 z} \mathrm{d}k \tag{B.4}$$

avec la définition habituelle de γ_3 :

$$\gamma_3 = \sqrt{\varepsilon_3 k_0^2 - k^2} \tag{B.5}$$

Les équation de Maxwell fournissent le champ magnétique dans cette région :

$$H_x = \frac{\varepsilon_3 k_0^2}{\mu_0 \omega} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{R(k)}{\gamma_3} e^{iky + i\gamma_3 z} \mathrm{d}k \tag{B.6}$$

La demarche pour déterminer la fonction R(k) est similaire à celle du chapitre 4. Les conditions aux limites pour le champ électrique E_z sur l'interface z = 0 imposent :

$$\int_{-\infty}^{\infty} R(k)e^{iky} dk = \begin{cases} E_0 + E_r & \text{pour} - w/2 \le y \le w/2\\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On inverse facilement l'intégral de Fourier pour obtenir :

$$R(k) = \frac{w}{2\pi}\operatorname{sinc}(\frac{kw}{2})(E_0 + E_r)$$
(B.7)

La condition aux limites pour le champ magnétique s'écrit (projection sur l'ouverture) :

$$\int_{-L/2}^{L/2} H_x(y=0^-) dy = \int_{-L/2}^{L/2} H_x(y=0^+) dy$$
(B.8)

On en déduit la relation :

$$(E_0 + E_r)\frac{\varepsilon_3 k_0 L}{2\pi n_1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sinc}^2(\frac{kL}{2})}{\gamma_3} \mathrm{d}k = E_0 - E_r$$
(B.9)

Posons :

$$r = \frac{\varepsilon_3 k_0 w}{2\pi n_1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sinc}^2(\frac{kw}{2})}{\gamma_3} \mathrm{d}k \tag{B.10}$$

et notons :

$$x = \frac{n_3 k_0 w}{2} \tag{B.11}$$

Avec un changement de variable on peut écrire :

$$r = \frac{n_3}{n_1} \frac{x}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sinc}^2(xk)}{\sqrt{1 - k^2}} \mathrm{d}k$$
(B.12)

La fonction R(k) s'écrit maintenant :

$$R(k) = \frac{2}{1+r} \frac{w}{2\pi} \operatorname{sinc}(\frac{kw}{2}) E_0$$
(B.13)

Notre but est maintenant de calculer le champ lointain. Dans l'équation (B.4), on appliquera le théorème de la phase stationnaire. La quantité importante ici est la phase :

$$\Phi(k) = kz + \gamma_3 y \tag{B.14}$$

Les expressions asymptotiques des champs E_z et H_x sont alors :

$$E_z = R(\overline{k}) \sqrt{\frac{2\pi}{|\Phi''(\overline{k})|}} e^{i\Phi(\overline{k}) - i\frac{\pi}{2}\operatorname{sign}(\Phi''(\overline{k}))}$$
(B.15)

$$H_z = \frac{\varepsilon_3 k_0^2}{\mu_0 \omega} \frac{R(\overline{k})}{\gamma_3} \sqrt{\frac{2\pi}{|\Phi''(\overline{k})|}} e^{i\Phi(\overline{k}) - i\frac{\pi}{2}\operatorname{sign}(\Phi''(\overline{k}))}$$
(B.16)

et $\overline{k} = n_3 k_0 \sin \theta$ est la solution de l'équation :

$$\Phi'(\overline{k}) = 0 \tag{B.17}$$

et θ est l'angle de la direction d'observation (figure B.1(a)) les équations qu'on vient d'établir permettent de calculer (après quelques étapes algébriques) le vecteur de Poynting :

$$\mathbf{S} = \operatorname{Re}\{\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*\} = \hat{\mathbf{y}} \frac{|R(n_3 k_0 \sin \theta)|^2}{\mu_0 \omega} \frac{2\pi\varepsilon_3 k_0^2}{D} \cos \theta$$
(B.18)

En calculant le flux de vecteur de Poynting à travers une surface élémentaire $d\Sigma = hDd\theta \cos\theta$ (*h* est la largeur du dispositif) et en integrant dans toutes les directions de l'espace on peut en déduire l'intensité totale sortant du dispositif I_{out} :

$$I_{out} = \frac{w2\pi\varepsilon_3 k_0^2}{\mu_0 \omega} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} |R(n_3 k_0 \sin \theta)|^2 \cos^2 \theta d\theta$$
(B.19)

On va normaliser cette quantité à l'intensité transportée par l'onde incidente à l'interface I_{in} :

$$I_{in} = \frac{k_0}{\mu_0 \omega} |E_0|^2 hw$$
 (B.20)

On définit ainsi le coefficient de transmission T :

$$T = \frac{I_{out}}{I_{in}} = \frac{4}{|1+r|^2} \frac{n_3}{n_1} \frac{x}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \operatorname{sinc}^2(x\sin\theta) \cos^2\theta d\theta$$
(B.21)

Pour verifier la pertinence du résultat examinons cette expression dans le cas limit $L \to \infty$. En utilisant la formule :

$$\operatorname{sinc}^{2}(\frac{kw}{2}) \to \frac{2\pi}{w}\delta(k)$$
 (B.22)

on montre facilement que (B.21) devient l'expression habituel de la transmission à l'interface entre deux diélectriques :

$$T = \frac{4n_1n_3}{(n_1 + n_3)^2} \tag{B.23}$$

Le cas limit qui nous intéresse ici est $L \to 0$. Pour simplifier, on négligera la quantité r de l'équation (B.12) qui est proportionnel à w. Ensuite, dans l'équation (B.21) la fonction sinus cardinal est pratiquement égale à 1. On arrive ainsi à l'expression :

$$T \approx \frac{2n_3}{n_1} \frac{\pi w}{\lambda} \tag{B.24}$$

avec λ la longueur d'onde dans le vide. Cette expression est valable pour $n_3 \pi w / \lambda \ll$ 1.0.

Enfin, lorsqu'on considère une cavité avec des couches dopées en plus, il faut remplacer partout l'indice n_1 par l'indice effective du mode n_{eff} dans la cavité :

$$T \approx \frac{2n_3}{n_{eff}} \frac{\pi w}{\lambda} \tag{B.25}$$

Puissance extraite à travers la facette

En réalité la puissance extraite depend autre que du coefficient de transmission T, du coefficient d'absorption α de la cavité. Considérons une source à l'intérieure de la cavité de longueur L, à une distance x de la facette, comme à la figure B.1(b). La source rayonne une puissance P_0 dans le mode, dans les deux directions de propagation. A partir du coefficient de transmission T on a le coefficient de reflection R = 1 - T, d'où la puissance récupérée à la sortie après les allées-retours multiples dans la cavité :

$$P_{out}(x) = TP_0 \frac{e^{-\alpha x} + (1-T)e^{-2\alpha L}e^{\alpha x}}{1 - (1-T)^2 e^{-2\alpha L}}$$
(B.26)

En moyennant sur la longueur L de la cavité on obtient :

$$P_{out} = \frac{1}{L} \int_0^L P_{out}(x) dx = P_0 \frac{T}{\alpha L} \frac{1 - e^{-\alpha L}}{1 - (1 - T)e^{-\alpha L}}$$
(B.27)

Dans la limite de très grand absorption $\alpha L \gg 1,$ d'où :

$$P_{out} = P_0 \frac{T}{\alpha L} \tag{B.28}$$

Annexe C

Puissance rayonnée à l'extérieur de la cavité complexe

Dans cette annexe le résultat sur la puissance émise par un dipôle dans une cavité complexe (4.17) est démontré. Cette démonstration est basée sur les expressions de flux rayonné de la référence [45], mais elle est adaptée à la résolution numérique de l'équation (4.13).

De manière générale, le champ électrique $\mathbf{E}_m(x, y, z)$ du *m*-ième ordre de Rayleigh $\mathbf{E}_m(x, y, z)$ au point (x, y, z) s'écrit :

$$\mathbf{E}_{m}(x,y,z) = \int \int \mathbf{T}_{mA}(\alpha,\beta) e^{i\alpha_{m}x + i\beta y + i\gamma_{Am}z} \mathrm{d}\alpha \mathrm{d}\beta$$
(C.1)

En utilisant le théorème de la phase stationnaire, on obtient le champ rayonné dans le substrat S, à très grandes distances, dans la direction $(\alpha_m, \beta, \gamma_{3m})$:

$$\mathbf{E}_{m}(\mathbf{r}) = -2\pi i \gamma_{Am} \mathbf{T}_{mA}(\alpha, \beta) \frac{e^{in_{A}k_{0}r}}{r}$$
(C.2)

avec $r = |\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. Cette expression n'a de sens que si $\operatorname{Re}\gamma_{Am} \neq 0$. Nous allons nous intéresser plutôt au champ rayonnée dans la direction $(\alpha_m, \beta, \gamma_{Am})$. En utilisant :

$$\gamma_{Am}(\alpha_{-m},\beta) = \gamma_{A0}(\alpha,\beta) \tag{C.3}$$

on obtient l'expression voulue :

$$\mathbf{E}_{m}(\mathbf{r}) = -2\pi i \gamma_{A0} \mathbf{T}_{mA}(\alpha_{-m}, \beta) \frac{e^{in_{A}k_{0}r}}{r}$$
(C.4)

Par le principe de superposition, il faut sommer sur tous les ordres de Rayleigh :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -2\pi i \gamma_{a0} \sum_{m} \mathbf{T}_{mA}(\alpha_{-m}, \beta) \frac{e^{in_{A}k_{0}r}}{r}$$
(C.5)

Ainsi, lorsqu'il s'agit des amplitudes de Rayleigh "ordinaires", tous les ordres contribuent dans le champ lointain de la source. En effet, comme $\alpha \in [-\infty, \infty]$, il existe toujours une valeur de α tel que Re $\gamma_{3m} \neq 0$ (en d'autres termes, α_m est dans le cercle radiatif).



FIG. C.1 – Cercle radiatif de rayon n_3 et les trois premières zones de Brillouin.

La somme sur l'indice *m* rappelle la définition des amplitudes quasi-périodiques (4.7). Cependant, il faut faire attention car la variable α de l'équation (C.5) appartient au cercle radiatif $\alpha^2 + \beta^2 \leq \varepsilon_3$, alors que l'argument de la fonction $\tilde{T}_{mA}(\alpha)$ doit varier dans la première zone de Brillouin $\alpha \in [-\lambda/2d, \lambda/2d]$. On peut choisir un nombre entier *n*, de façon unique, tel que :

$$\alpha = \alpha_{ZB} + n\frac{\lambda}{d} \tag{C.6}$$

et α_{ZB} appartient à la 1ère zone de Brillouin. Le choix de l'indice n est expliqué graphiquement à la figure C.1. Sur le cercle radiatif C, donné par l'équation $\alpha^2 + \beta^2 \leq \varepsilon_A$, on trace les zones de Brillouin de largeur λ/d . La première zone de Brillouin est centré sur le cercle. Dans l'intersection entre cette zone et le cercle il faut prendre n = 0. Dans l'intersection entre la seconde zone de Brillouin "à droite" (pour $\alpha > 0$) et le cercle il faut prendre n = +1, respectivement n = -1 pour la zone "à gauche" (pour $\alpha < 0$), etc.

En appliquant la formule (4.7) on peut maintenant réécrire le champ rayonné à l'infini avec l'amplitude quasi-périodique $\tilde{\mathbf{T}}_n(\alpha_{ZB})$:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -2\pi i \gamma_{a0} \tilde{\mathbf{T}}_{nA}(\alpha_{ZB}, \beta) \frac{e^{in_3 k_0 r}}{r}$$
(C.7)

Le vecteur d'onde γ_{a0} satisfait :

$$\gamma_{A0}(\alpha) = \gamma_{An}(\alpha_{ZB}) \tag{C.8}$$

D'après la construction graphique de la figure C.1, une seule amplitude quasi-périodique $\tilde{\mathbf{T}}_0$ suffit pour décrire la puissance rayonnée, lorsque le réseau est sub-longueur d'onde $\lambda > 2dn_A$.

La puissance rayonnée dans l'angle solide d Ω s'obtient à partir du flux de Poynting à travers la surface $r^2 \mathrm{d}\Omega$:

$$\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}\Omega} = 2\pi^2 \sqrt{\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_A}{\mu_0}} |\gamma_{A0} \tilde{\mathbf{T}}_{nA}|^2 \tag{C.9}$$

En exprimant le carré vectoriel avec les composantes $\tilde{T}_{nA}^{e,h}$, et en normalisant la puissance par l'expression (4.15) on obtient le résultat voulu :

$$\frac{1}{P_1}\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}\Omega} = \frac{3}{8\pi}\frac{n_A}{n_1}\gamma_{An}^2(\alpha_{ZB})\frac{\varepsilon_A|\tilde{T}_{nA}^e(\alpha_{ZB},\beta)|^2 + |\tilde{T}_{nA}^h(\alpha_{ZB},\beta)|^2}{\varepsilon_A - \gamma_{An}^2(\alpha_{ZB})} \tag{C.10}$$
Annexe D

Champ rayonné par un dipôle horizontal

Dans cette annexe on considère le cas d'un dipôle horizontal, i.e. appartenant au plan Oxy. L'angle entre le moment dipolaire et l'axe Ox sera noté φ . Le dipôle est placé dans un système multi-couches, fermé par un réseau métallique, comme à la figure 4.1(a) du chapitre 4. La dernière couche de l'empilement, avant le réseau, sera notée k, la couche contenant le dipôle est la couche 1.

Le vecteur de droite pour l'équation (3.59), pour une source située dans le milieu 1 s'écrit, de manière générale :

$$\frac{1}{\alpha^2 + \beta^2} \begin{bmatrix} -I_{0m'}^+ [\alpha \eta \varepsilon_1 \gamma_1 T_{M1}^e u^e + \beta \gamma_1 T_{M1}^h u^h] \\ 0 \\ J_{0m'}^+ [\beta \eta \varepsilon_1 \gamma_1 T_{M1}^e u^e + \alpha \gamma_1 T_{M1}^h u^h] \\ 0 \end{bmatrix}$$
(D.1)

Cette expression peut être obtenue facilement en exprimant les coefficients $(1-\rho_{Ma}^e)$ et $(1+\rho_{Ma}^h)$ dans le vecteur de droite dans la formule (3.59) par les coefficients de transmission $t_{Ma}^{e,h}$, puis en généralisant pour une traversée quelconque des multicouches.

Les composantes selon z du champ électrique $e_z^{u,d}$ et magnétique $h_z^{u,d}$ de décomposition en ondes planes du champ du dipôle (paragraphe 1.3.3) s'écrivent :

$$e_z^u = \frac{i\mu_0\omega^2 p}{8\pi^2\varepsilon_1 k_0^2} [\alpha\cos\varphi + \beta\sin\varphi] e^{i(\alpha x_0 + \beta y_0 + \gamma_1 L_1)}$$
(D.2)

$$e_z^u = -\frac{i\mu_0\omega^2 p}{8\pi^2\varepsilon_1 k_0^2} [\alpha\cos\varphi + \beta\sin\varphi] e^{i(\alpha x_0 + \beta y_0 + \gamma_1(L-L_1))}$$
(D.3)

$$h_z^u = \frac{i\omega p}{8\pi^2 \gamma_1} [\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi] e^{i(-\alpha x_0 + \gamma_1 L_1)}$$
(D.4)

$$h_z^d = \frac{i\omega p}{8\pi^2 \gamma_1} [\alpha \sin \varphi - \beta \cos \varphi] e^{i(-\alpha x_0 + \gamma_1 (L - L_1))}$$
(D.5)

Les sources u^e et u^h s'expriment à partir de ces composantes :

$$u^{e} = \frac{e_{z}^{u} + e_{z}^{d} R_{1M_{2}}^{e} e^{2i\gamma_{1}L}}{1 + \rho_{a1}^{e} R_{1M_{2}}^{e} e^{2i\gamma_{1}L}}$$
(D.6)

$$u^{h} = \frac{h_{z}^{u} + h_{z}^{d} R_{1M_{2}}^{h} e^{2i\gamma_{1}L}}{1 + \rho_{a1}^{h} R_{1M_{2}}^{h} e^{2i\gamma_{1}L}}$$
(D.7)

Introduisons les intermédiaires de calcul Ω^e_n et Ω^h_n :

$$\Omega_n^e = \eta T_{M1}^{en} \frac{e^{i\gamma_{1n}L_1} - R_{1M_2}^{en} e^{i\gamma_{1n}(2L-L_1)}}{1 + \rho_{a1}^{en} R_{1M_2}^{en} e^{2i\gamma_{1n}L}} e^{-i\alpha_n x_0}$$
(D.8)

$$\Omega_n^h = T_{M1}^{hn} \frac{e^{i\gamma_{1n}L_1} + R_{1M_2}^{hn} e^{i\gamma_{1n}(2L-L_1)}}{1 + \rho_{a1}^{hn} R_{1M_2}^{hn} e^{2i\gamma_{1n}L}} e^{-i\alpha_n x_0}$$
(D.9)

Alors le vecteur de droite quasi-périodique s'écrit :

$$\sum_{n} \frac{1}{\alpha_n^2 + \beta^2} \begin{bmatrix} -I_{nm'}^+ [(\alpha_n^2 \Omega_n^e - \beta^2 \Omega_n^h) \cos \varphi + \alpha_n \beta (\Omega_n^e + \Omega_n^h) \sin \varphi] \\ 0 \\ J_{nm'}^+ [\alpha_n \beta (\Omega_n^e + \Omega_n^h) \cos \varphi + (\beta^2 \Omega_n^e - \alpha_n^2 \Omega_n^h) \sin \varphi] \\ 0 \end{bmatrix}$$
(D.10)

Les expressions pour la puis sance rayonnée à l'extérieur restent les mêmes que dans le paragraphe 4.3.3.

Annexe E

Calcul numérique des intégrales

Réduction du domaine d'intégration

Dans notre modèle, le taux de l'emission spontanée est fourni sous forme d'une intégrale bi-dimensionnelle (4.27) qui s'entend sur tout le plan (α, β) . Il s'agit de calculer alors de manière générale l'intégrale :

$$\operatorname{Re} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(\alpha, \beta) \mathrm{d}\alpha \mathrm{d}\beta \tag{E.1}$$

avec $\Phi(\alpha, \beta)$ une fonction complexe. Pour le calcul numérique cherchons à réduire le domaine d'intégration. Il est facile de montrer que la fonction $\Phi(\alpha, \beta)$ est paire par rapport à la variable β . Ceci est evident du point de vue physique, car les directions +y et -y sont totalement équivalentes dans notre problème. La démonstration mathématique, fondée sur les équations de diffraction du chapitre 3 est un peu longue, on en donnera les grandes lignes.

D'abord, les différentes réflectivités $R_{:::}(\alpha,\beta)$ sont des fonctions de β^2 , donc paires en β . On montre ensuite que le changement de variables $\beta \to -\beta$ correspond, pour les matrices et les vecteurs dans les équations écrites dans le chapitre 3 à une transformation unitaire, donnée par la matrice :

$$\left(\begin{array}{cc}
1 & 0\\
0 & -1
\end{array}\right)$$
(E.2)

La quantité $\alpha_n \Sigma_{an}^x + \beta \Sigma_{an}^y$ est alors invariant par le changement de variable $\beta \to -\beta$, car elle correspond au produit scalaire des vecteurs $(\Sigma_{kn}^x, -\Sigma_{an}^x, \Sigma_{kn}^y, -\Sigma_{an}^y)^T$ et $(0, \alpha_n, 0, \beta)^T$. Le domaine d'intégration sur β est alors restreint sur l'axe \mathbb{R}^+ .

Quant à la variable α , il n'existe pas de propriétés de symétrie générales dans le cas du problème de la source localisée au voisinage du réseau, hormis pour les valeurs de la position de la source x_0 correspondant aux points de symétrie du réseau. Nous avons utilisé la forme symétrisée $(\Phi(\alpha, \beta) + \Phi(-\alpha, \beta))/2$ pour ramener le domaine d'intégration sur \mathbb{R}^+ .

Il faut vérifier aussi si la fonction $\Phi(\alpha, \beta)$ possède des singularités dans le domaine d'intégration. On peut montrer, pour notre modèle, basé sur l'approximation de métal parfait pour les faces verticales des fentes, que la présence du mode guidé TM_0 fondamental dans les fentes du réseau introduit une singularité intégrable du type :

$$\Phi(\alpha,\beta) = \frac{F(\alpha,\beta)}{\sqrt{\varepsilon_2 - \beta^2}}$$
(E.3)

avec $F(\alpha, \beta)$ une fonction régulière. Ceci est facile à montrer dans le cas (qui est d'ailleurs le plus pathologique) d'un réseau de métal parfait dans l'air ($\varepsilon_n = \varepsilon_2 = \varepsilon_a = 1$). Dans la suite on traite le cas $\varepsilon_2 = 1$, auquel on peut toujours se ramener par une renormalisation appropriée des variables.

Nous sommes alors amenés à effectuer l'intégrale avec une singularité intégrable du type :

$$\operatorname{Re} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{\infty} \frac{F(\alpha, \beta)}{\sqrt{1 - \beta^{2}}} \mathrm{d}\alpha \mathrm{d}\beta$$
(E.4)

Le premier pas est de passer en coordonnées cylindriques, ce qui réduit encore le domaine d'intégration (il y a juste une seule intégrale sur \mathbb{R}^+) :

$$\alpha = \rho \sin \theta \qquad \qquad \beta = \rho \cos \theta \qquad (E.5)$$

Cette substitution convertit l'intégrale en :

$$\operatorname{Re} \int_{0}^{\pi/2} \int_{0}^{\infty} \frac{F(\rho, \theta)}{\sqrt{1 - \rho^{2} \cos^{2} \theta}} \mathrm{d}\theta \rho \mathrm{d}\rho$$
(E.6)

Pour effectuer cette dernière intégrale en tenant compte de la singularité, on divise le domaine d'integration en 5 parties dans le plan (ρ, θ) qui sont définies à la figure E.1. La singularité $\beta^2 = 1$ est décrite par l'équation $\rho \cos \theta = 1$.

-Sur la partie 1 (le rectangle $[0,1] \times [0,\pi/2]$) l'intégrale est non singulière. Elle s'écrit :

$$I_1 = \operatorname{Re} \int_0^{\pi/2} \int_0^1 \frac{F(\rho, \theta)}{\sqrt{1 - \rho^2 \cos^2 \theta}} \mathrm{d}\theta \rho \mathrm{d}\rho$$
(E.7)

C'est d'ailleurs une intégrale du même type qui décrit la puissance rayonnée par la source.

-Sur la partie 2 délimité par la courbe (c) l'intégrale n'est pas singulière. Elle s'écrit, avec $\theta_0 = \arccos(1/\rho)$:

$$I_2 = \operatorname{Re} \int_1^{\sqrt{2}} \int_0^{2\theta_0} \frac{F(\rho, \theta)}{\sqrt{1 - \rho^2 \cos^2 \theta}} \mathrm{d}\theta \rho \mathrm{d}\rho$$
(E.8)

-Sur la partie 3 l'intégrale est singulière sur la courbe (a). Ce domaine est délimité par les courbes $\theta = 0$, $\rho = \sqrt{2}$ et $\rho \cos(\theta/2) = 1$. La courbe de singularité $\rho \cos(\theta) = 1$ est en fait la médiatrice de triangle courbe ainsi obtenu. On transforme l'intégrale de la manière suivante :

$$\int_{1}^{\sqrt{2}} d\rho \int_{0}^{2\theta_{0}} d\theta = \int_{1}^{\sqrt{2}} d\rho (\int_{0}^{\theta_{0}} + \int_{\theta_{0}}^{2\theta_{0}})$$
(E.9)



FIG. E.1 – Division du domaine d'intégration sur le plan (ρ, θ) . La valeur 1,57 correspond à $\pi/2$ et 0,79 à $\pi/4$. La singularité intégrable est sur la courbe (a) $\rho \cos \theta = 1$. Le choix des courbes (c) et (b) est tel que la courbe (a) est la médiatrice des domaines 3 et 4, ce qui permet de symétriser les intégrales autour de (a) et de les rendre régulières.

Dans la première intégrale on fait le changement de variable $\theta = \theta_0 + \phi$ et dans la deuxième $\theta = \theta_0 - \phi$, grâce au choix particulier de la courbe (c) on obtient l'intégrale symétrisée autour de la courbe de la singularité :

$$I_{3} = \operatorname{Re} \int_{1}^{\sqrt{2}} \int_{0}^{\theta_{0}} \left[\frac{F(\rho, \phi + \theta_{0})}{\sqrt{1 - \cos\phi + \sin\phi\sqrt{\rho^{2} - 1}}} + \frac{F(\rho, -\phi + \theta_{0})}{\sqrt{1 - \cos\phi - \sin\phi\sqrt{\rho^{2} - 1}}} \right] \mathrm{d}\phi\rho\mathrm{d}\rho$$
(E.10)

La fonction sous l'intégrale est maintenant régulière sur la singularité, d'après les règles de Cauchy.

- On régularise la fonction sous l'intégrale de la même manière dans la domaine 4. Après un changement de variable convenable on obtient l'expression :

$$\operatorname{Re} \int_{\sqrt{2}}^{\infty} \int_{0}^{\pi/2-\theta_{0}} \Big[\frac{F(\rho,\phi+\theta_{0})}{\sqrt{1+\cos\phi-\sin\phi\sqrt{\rho^{2}-1}}} + \frac{F(\rho,-\phi+\theta_{0})}{\sqrt{1+\cos\phi+\sin\phi\sqrt{\rho^{2}-1}}} \Big] \mathrm{d}\phi\rho \mathrm{d}\rho$$
(E.11)

Cette intégrale est infinie dans la variable ρ . Pour la rendre finie, on effectue le chan-



FIG. E.2 – Illustration de l'algorithme d'intégration sur le carré $[0,1] \times [0,1]$. Le carré est initialement divisé en $M \times N$ rectangle. Sur chaque rectangle on applique un algorithme type Simpson itératif.

gement du variable $\rho \to 1/t$ [62], et on obtient l'expression définitive :

$$I_4 = \operatorname{Re} \int_0^{\pi/2 - \theta_0} \int_0^{1/\sqrt{2}} \Big[\frac{F(1/t, \phi + \theta_0)}{\sqrt{t(1 + \cos\phi) - \sin\phi\sqrt{1 - t^2}}} + \frac{F(1/t, -\phi + \theta_0)}{\sqrt{t(1 + \cos\phi) + \sin\phi\sqrt{1 - t^2}}} \Big] \frac{\mathrm{d}\theta \mathrm{d}t}{t^{3/2}}$$
(E.12)

- Dans la domaine 5 la fonction est régulière. Après quelques réarrangements algébriques on obtient :

$$I_{5} = \operatorname{Re} \int_{0}^{\theta_{0}/2 + \pi/4} \int_{0}^{1/\sqrt{2}} \frac{F(1/t,\theta)}{t\sqrt{t^{2} - \cos^{2}\theta}} \mathrm{d}\theta \mathrm{d}t$$
(E.13)

Pour chacune des intégrales ainsi obtenues, on fait un changement de variable affine pour la convertir en une intégrale sur le carré $[0, 1] \times [0, 1]$.

Algorithme numérique d'intégration

L'intégrale obtenue :

$$\int_0^1 \int_0^1 f(x,y) \mathrm{d}x \mathrm{d}y \tag{E.14}$$

on calcule à l'aide de l'algorithme suivant (figure E.2) qui est une généralisation 2D de l'algorithme de Simpson recursif [62].



FIG. E.3 – Application de l'algorithme de Simpson 2D, avec de différents paramètres M, N et k_{max} sur le calcul de l'intégrale (4.27) pour la cavité décrite dans le paragraphe 4.4.5. Le dipôle est situé sur le coin du plot métallique : $x_0 = 0$, $L_1 = 0$.

On divise le carré en $N \times M$ sous-rectangles. Dans chaque rectangle on prend le point au milieu et on calcule l'intégrale comme :

$$M_0 = f(x_p, y_q) \frac{1}{MN} \tag{E.15}$$

On subdivise après le rectangle en 9 sous -rectangle et on fait une seconde évaluation de l'intégrale comme :

$$M_1 = \frac{1}{9}M_0 + \Delta \tag{E.16}$$

$$\Delta = \frac{1}{9MN} \sum_{i=1}^{8} f(X_i) \tag{E.17}$$

Appliquons cette procédure k fois, on obtient ainsi une évaluation sur $M \times N \times 9^k$ points au maximum. On arrête la procédure lorsque la difference $|M_k - M_{k+1}|$ atteint une certaine valeur minimale "prec".

Les paramètres d'entrée pour l'algorithme sont les nombres M, N, k_{max} - nombre maximal d'itérations, et "prec" - la précision sur la valeur de l'intégrale choisie. Nous avons ainsi une grande flexibilité sur le nombre total d'évaluations de la fonction et la précision souhaitée (le temps de calcul total y est directement relié). Le plus grand mérite de cet algorithme est qu'il répartit de manière inhomogène l'effort numérique - il effectue peu d'itérations dans la région où la fonction est régulière, et concentre plus d'efforts (plus d'itérations) sur les régions où elle varie rapidement. Du temps de calcul est ainsi économisé.

Convergence du calcul numérique

A titre d'exemple, on montre à la figure E.3 le calcul effectué pour un dipôle placé au voisinage d'un coin du plot métallique du réseau $(x_0 = 0, L_1 = 0)$. Le taux d'émission, qui est maximal sur cet endroit, est tracé en fonction de la longueur d'onde d'émission.

Sur la figure E.3, on augmente progressivement les paramètres de calcul M, N et k_{max} pour chacune des intégrales I_{1-5} , pour tester la convergence du modèle. Sans surprise, une convergence oscillatoire est observée. Pour le cas M = 20, N = 40, $k_{max} = 3$ le temps typique de calcul d'un point est > 1 heure. Cependant, le bon ordre de grandeur du TES est obtenu déjà avec $k_{max} = 2$. C'est cette valeur qu'on a utilisée pour obtenir les figures 4.11(a),(b).

Il est intéressant de remarquer que la convergence est de plus en plus difficile lorsque la longueur d'onde λ augmente. On peut expliquer ceci de la manière suivante : lorsque λ augmente, les paramètres géométriques effectifs de la cavité diminuent, et l'amplitude des ondes évanescentes réfléchies sur le miroir inférieur ou diffractées sur le réseau devient de plus en plus importante. Donc des ondes avec un vecteur d'onde $k = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2}$ de plus en plus important contribuent à l'intégrale, ce qui revient à augmenter le domaine de l'espace k sur lequel la fonction $\Phi(\alpha, \beta)$ prend des valeurs importantes.

Annexe F

Procédure de fabrication des diodes QC en cavité métallique

Nous donnons ici, à l'exemple de la référence [15], la procédure détaillée de fabrication de nos dispositif. Il s'agit de la procédure finale qui a été utilisée pour les dispositifs de la dernière série de croissance MOCVD. La même procédure a aussi été utilisée pour les échantillons MBE. Certaines étapes, indiquées par "F" sont facultatives, des suggestions pour améliorer le procédé.

	Étape	Conditions / Équipement
1.1	Nettoyage des plaques à la sortie de l'épitaxie.	Acétone sous ultrasons (force 20-30), 5min. Bain de propanol. L'usage du trichloroéthy- lène est déconseillée.
F1	Dépôt des contacts ohmiques Au- GeNi sur l'échantillon GaAs	Désoxydation HCl 10% (1min) + 3min rin- çage eau désionisée. Métallisation en Bâti Al- catel SCM 600/450 (L.Leroy, L.Couraud).
F2	Recuit des contacts	Four AET de recuit rapide, $350^{\circ}C$, $30sec$.
2	Report du substrat	
2.2	Dépôt 50 nm Ti/300 nm Au sur l'échantillon GaAs et le substrat hôte InP. Dépôt In 950 nm + Au 50 nm Découpe de l'échantillon et du	Désoxydation HCl 10% (1min) + 3min rin- çage eau désionisée. Evaporation en bâti Al- catel SCM 600/450 (L.Leroy, L.Couraud). Bâti BELL, Pression < 10 ⁻⁵ mbar. Scriber Karl-Süss face arrière plusieurs pas-
2.3	substrat en morceaux $5 \times 5 \text{ mm}^2$ ou $8 \times 8 \text{ mm}^2$	sages à force maxi.
2.4	Mise en contact dans la presse en graphite	Une goutte d'éthanol sur le substrat permet d'alligner sur les planes cristallins de l'échan- tillon. On appuie avec un coton tige pour évacuer l'air. On met les échantillons dans la presse et on couvre avec une cale en graphite. On serre avec le tournevis dynamométrique gradué : bons résultats à partir de $60cN.m.$

	Étape	Conditions / Équipement
2.5	Recuit	Four AET de recuit lent, sous flux d'N ₂ . Montée $8^{\circ}C/min$ jusqu'à 250°C, plateau
		$250^{\circ}C$ pendant $2h30min$, refroidissement naturel.
	Rodage mécanique	Polisseuse électrique PRESI P320. L'échan- tillon est fixé avec QuickStick sur un support
		cylindrique en métal. Rodage avec plateau
2.6		en fonte $(30tr/min)$ + poids supplémentaire. Des cales en Si $(450\mu m)$ pour éviter le "sur-
		rodage". Flux d'Alumine à $3\mu m$. Réduction
		de l'épaisseur du substrat $350\mu m \rightarrow 40\mu m$.
2.7	Nettoyage de l'échantillon	Trichlo chaud/Acétone/Propanol (plusieurs bains)
	Préparation de l'acide citrique	Mélange de 50g de poudre d'acide citrique
2.8		dans 50ml d'eau (réaction endothermique). Aiout de 20ml d'H ₂ O ₂
		L'échantillon collé par QuickStick sur une
	Retrait du substrat	lame de microscope est placé dans la solu-
		tion. Agitation moyenne, plaque chauffante
2.9		à $50^{\circ}C - 60^{\circ}C$ pour une vitesse de gravure
		de $1\mu m/min$. Fin de la reaction : apparition d'une surface agnest minoir, sculour de rouge
		au vert
0.10		HF à 30% dilué (5-10ml d'acide dans 50ml
2.10	Retrait de la couche d'arrêt	d'eau). Réaction rapide, qq secondes.
9 11	Fin du report du substrat	Décollage de la lame; nettoyage Trichlo
2.11		chaud/Acétone/Propanol.
3	Lithographie optique <u>AZ5214</u>	3ème niveau masque THz3.
3.1	enduction	pgm002 Tournette (3000tr/min, 30sec).
3.2	recuit 1min /125°C	plaque chauffante.
3.3	insolation 6 sec	MJB3.
3.4	recult 45sec/125 C	plaque chaunante.
3.5 3.6	révélation	MJD3. MIF726 20-30 sec
0.0	Gravure légère de la résine (net-	programme OxyAlu 30sec du bâti BIE
4	toyage de la surface libre)	NEXTRAL NE 100.
5	Dépôt métallique (Au/Ge/Ni ou Ti/Au)	Désoxydation HCl 10% (1min) + 3min rin- cage. Bâti Alcatel SCM $600/450$.
6	Lift-off	Acétone + ultrasons (éventuellement), Pro- panol.
7	Nettoyage des restes de la résine	programme DELAQ, 5min, du bâti RIE NEXTRAL NE 100.
F	Recuit rapide des contacts oh- miques	$350^{\circ}C/$ 30 sec

	Étape	Conditions / Équipement
8	Lithographie optique <u>AZ4533</u>	4ème niveau masque THz3.
8.1	désoxydation (important!)	$ m HCl \ 10\% \ (1min) + 3min \ rinçage$
8.2	enduction "rapide"	Tournette, 6000tr/min
8.3	recuit $2min30sec/125$ °C	plaque chauffante.
8.4	insolation 55 sec	MJB3.
8.5	révélation	$AZ400K/H_2O 1 :3, 2min (ni plus, ni moins!)$
8.6	recuit $30 \mathrm{min} / 100^\circ \mathrm{C}$	plaque chauffante.
9	Gravure humide	Acide Sulfurique
9.1	Préparation de la solution	Mélange $H_2SO_4/H_2O_2/H_2O$, proportions 1 :8 :40
9.2	Gravure	Avancement de la gravure suivie par Dek- TaK. Vitesse : $1\mu m/min$. Fin facilement re- pérable : apparition de l'aspect métallique, très brillant, du joint de brasure. La mesure sous pointes de la couche révélée montre une bonne conductivité ($R_{pointe-pointe} \approx 10\Omega$ si contacts recuits, $R_{pointe-pointe} \approx 2k\Omega$ si non).
9.3	Nettoyage de la résine	Bain d'acétone + propanol + éventuellement RIE DELAQ.
F	Dépôt des contacts sur la brasure	Litho AZ5214, niveau 5 du masque THz, mé- tallisation
10	Découpage Scribber en 4 mor- ceaux	Échantillon collé sur scotch bleu. Force maxi. Bain d'acétone pour enlever le scotch.
11	Montage sur une embase de cuivre dorée	Laque à l'argent.
12	Thermocompression fil d'or de 25 μm	KS model 4526. Paramètres : lère sou- dure : power 2.5/time 3-4/ force 0 (plot de contact); power 3-4/time max/force 1- 3 (joint de brasure); 2ème soudure : para- mètres standard.



FIG. F.1 – Dernière version du masque pour la lithographie optique, utilisé dans la fabrication des dispositifs (masque THz3), un quart. Niveau 1 (vert) : dépôt de métal pour les contacts. Niveau 2 (noir) : réseau (dépôt de métal ou gravure). Niveau 3 : 1+2. Niveau 4 (rouge) : mesa pour délimiter la puce. Niveau 5 (violet) : dépôt de métal contact inférieur latéral. Les réseaux ont un rapport cyclique de 0.5 et leur période varie de 10 µm à 22 µm avec pas de 2 µm dans une colonne.

Annexe G

Équilibre ionique des espèces Si, C et O dans des couches MOCVD

Nous avons cherché à estimer l'influence des impuretés Si, C et O sur le dopage résiduel et intentionnel des cascades MOCVD, en se basant sur les résultats SIMS de la figure 6.2. D'après ces résultats, les couches contiennent en moyenne $8.5 \times 10^{16} \ cm^{-3}$ d'oxygène et $3.5 \times 10^{16} \ cm^{-3}$ de carbone, en plus du dopage intentionnel en Si. Dans le GaAs l'espèce Si se comporte comme un donneur d'énergie d'ionization 0.0058 eV en dessous de la bande de conduction et l'oxygène se comporte comme un donneur d'énergie d'ionization 0.40 eV en dessous de la bande de conduction [162]. En fait, les deux atomes possèdent d'autres niveaux donneurs et accepteurs, mais nous avons pris en première approximation les niveaux qui sont les plus proches de la bande de conduction. Le carbone se comporte comme un accepteur d'énergie 0.026 eV au dessus de la bande de valence [162].

La condition d'électroneutralité s'écrira alors :

$$n_c + n_d(Si) + n_d(O) + N_a(C) = p_v + p_a(C) + N_d(Si) + N_d(C)$$
(G.1)

avec n_c l'occupation de la bande de conduction, p_v l'occupation de la bande de valence (nombre de trous), $N_{d/a}(X)$ le nombre d'impuretés donneurs/accepteurs pour l'espèce X, $n_d(X)$ l'occupation du niveau d'impureté pour l'espèce X, et $p_a(X)$ l'occupation du niveau d'impureté accepteur. L'équation (G.1) peut être comprise en remarquant que le nombre des impuretés ionisées, par exemple des impuretés donneurs est $N_d^+ = N_d - n_d$, en faisant ensuite un bilan de charge.

A l'équilibre thermodynamique à la température T, les occupations n_d et p_a s'écrivent :

$$n_d = \frac{N_d}{1 + \frac{1}{2}e^{\beta(E_d - E_F)}}, \qquad p_a = \frac{N_a}{1 + \frac{1}{g}e^{\beta(E_F - E_a)}}$$
(G.2)

avec $\beta = 1/kT$, E_d et E_a les énergies d'ionisation pour les donneurs/accepteurs, E_F le niveau de Fermi (potentiel chimique) et g la dégénérescence du niveau accepteur, égale à 4 pour le GaAs [162].

Les occupations n_c et p_v de la bande de conduction et de la bande de valence sont



FIG. G.1 – Calcul de l'équilibre ionique en présence des impuretés C et O en fonction de la concentration en Si. La température est T = 300 K.

données par les intégrales suivantes, qui découlent de la statistique de Fermi-Dirac :

$$n_c = \int_{E_c}^{\infty} dE g_c(E) \frac{1}{e^{\beta(E-E_F)} + 1}, \qquad p_v = \int_{-\infty}^{E_v} dE g_v(E) \frac{1}{e^{\beta(E_F-E)} + 1}$$
(G.3)

avec E_c et E_v la position de la bande de conduction et de la bande de valence respectivement, et $g_c(E)$ et $g_v(E)$ les densités d'états pour la bande de conduction et la bande de valence.

Les équations (G.1)-(G.3) déterminent de manière implicite la valeur du niveau de Fermi, à partir de laquelle les nombres n_c et p_v peuvent être évalués. Rappelons qu'on parle de semiconducteur dopé de type n si $n_c > n_i$, avec $n_i = 2.8 \times 10^6 \ cm^{-3}$ l'occupation de la bande de conduction en absence d'impuretés (valeur intrinsèque). Ce problème ne peut être résolu que de manière numérique.

Notre but est de faire une évaluation qualitative des effets des impuretés C et O. Voilà pourquoi dans notre approche numérique nous avons profité de quelques hypothèses simplificatrices, employées usuellement. Tout d'abord, on suppose que la valeur de E_F satisfait les conditions :

$$\beta(E_C - E_F) \gg 1, \qquad \beta(E_F - E_V) \gg 1$$
 (G.4)

Dans ce cas là, bien vérifié pour de faibles concentrations de porteurs lorsque le niveau de Fermi n'est pas trop près des bandes, on peut négliger l'unité dans les termes exponentiels de (G.3) en obtenant les expressions suivantes plus simples :

$$n_c = N_c(T)e^{-\beta(E_C - E_F)}, \qquad p_v = P_v(T)e^{-\beta(E_F - E_V)}$$
 (G.5)

avec

$$N_{c}(T) = \int_{E_{c}}^{\infty} dE g_{c}(E) e^{-\beta(E-E_{C})}, \qquad P_{v}(T) = \int_{-\infty}^{E_{v}} dE g_{v}(E) e^{-\beta(E_{V}-E)}$$
(G.6)

des fonctions lentement variables de la température. Les intégrales (G.5) peuvent être évaluées analytiquement lorsque les expressions de densités d'état correspondent aux GaAs massif. Cette approximation n'est cependant pas justifiée lorsqu'on considère le dopage dans les puits de l'injecteur localisé sur quelques dizaines de nanomètres, et l'effet de confinement quantique doit alors être pris en compte.

L'équation (G.1) a été résolue numériquement en utilisant les expressions (G.5), (G.6). Des résultats sont donnés à la figure G.1. On a tracé les populations de la bande de conduction n_C et de la bande de valence p_V en fonction de la concentration en Si. La courbe en noir donne n_C pour les valeurs de l'analyse SIMS. Le dopage reste majoritairement de type n, mais une quantité de $3.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ en Si est nécessaire pour compenser le carbone C qui est une impureté accepteur. Au delà de la compensation, le dopage atteint l'ordre de grandeur voulu 10^{16} cm^{-3} , mais le dopage efficace est moins important que les valeurs programmées pour la concentration de Si, d'un facteur 2 au moins. Les tracés de n_C et p_V en absence d'oxygène (en rouge et vert respectivement) confirment cette conclusion.

Ces résultats sont en accord qualitatif avec nos observations, mais sont à prendre avec précaution. Tout d'abord, les conditions de validité du calcul (G.4) ne sont pas tout à fait satisfaites pour des dopages élevés. Le dopage résiduel est difficilement prévisible par des modélisations, car c'est une grandeur qui dépend fortement des conditions de croissance MOCVD. Pour nos structures, le dopage résiduel était ramené de type n avec un rapport V/III (flux des éléments de type V sur flux de des éléments de type III) élevé.

Bibliographie

- E. M. Purcell. Spontaneous emission probabilities at radio frequencies. *Phys. Rev.*, 69 :681, 1946.
- [2] K. H. Drexhage. Influence of a dielectric interface on fluorescence decay time. J. Lumin., 1,2 :693-701, 1970.
- [3] K. H. Drexhage. Interaction of light with monomolecular dye layers. Progres in Optics(E. Wolf éd.), Noth Holland, Amsterdam, XII :163–232, 1974.
- [4] J. R. Lakowicz, J. Malicka, I. Gryczynski, Z. Gryczynski, and C. D. Geddes. Radiative decay engineering : the role of photonic mode density in biotechnology. J. Phys. D : Appl. Phys., 36 :R240–R249, 2003.
- [5] P. Goy, J. M. Raymond, M. Gross, and S. Haroche. Observation of cavity-enhanced single-atom spontaneous emission. *Phys. Rev. Lett.*, **50** :1903–1906, 1983.
- [6] R. G. Hulet, E. S. Hilfer, and D. Kleppner. Inhibited spontaneous emission by a Rydberg atom. *Phys. Rev. Lett.*, 55 :2137–2140, 1985.
- [7] F. Bernardot, P. Nussenzveig, M.Brune, J. M. Raimond, and S. Haroche. Vacuum Rabi splitting observed on a microscopic atomic sample in a microwave cavity. *Euro. Phys. Lett.*, **17** :33, 1991.
- [8] Y. Yamamoto, S. Machida, and G. Björk. Microcavity semiconductor lasers with controlled spontaneous emission. Opt. and Quant. Elec., 24 :215, 1992.
- [9] C. Weisbuch, M. Nishioka, A. Ishikawa, and Y. Arakawa. Observation of the coupled exciton-photon mode splitting in a semiconductor quantum microcavity. *Phys. Rev. Lett.*, **69** :3314–3317, 1992.
- [10] A. Imamoglu. Cavity-QED using quantum dots. Opt. & Photon. News, August :22– 25, 2002.
- [11] J.-M. Gérard, B. Sermage, B. Gayral, B. Legrand, E. Costard, and V. Thierry-Mieg. Enhanced spontaneous emission by quantum boxes in a monolithic optical microcavity. *Phys. Rev. Lett.*, 81 :1110–1113, 1998.
- [12] B. Gayral, J.-M. Gérard, B. Sermage, A. Lemaître, and C. Dupuis. Time-resolved probing of the Purcell effect for InAs quantum boxes in GaAs microdisks. *Appl. Phys. Lett.*, **78** :2828–2830, 2001.
- [13] G. Bourdon. Dynamique de l'émission spontanée dans des microcavités à semiconducteur à miroirs métalliques. thése de doctorat de l'université d'Orsay, Laboratoire de Photonique et Microstructures, 196 Avenue H. Ravera, F-92220 Bagneux, France, 1999.

- [14] I. Robert. Les microdisques en semiconducteurs et à miroirs métalliques pour le côntrole de l'émission spontanée. thése de doctorat de l'université Paris VI et ENST Paris, Laboratoire de Photonique et Microstructures, 196 Avenue H. Ravera, F-92220 Bagneux, France, 1999.
- [15] C. Nelep. Développement de diodes électroluminescentes à microcavité à miroirs métalliques pour le contrôle de l'émission spontanée. thése de doctorat, CNRS/LPN-UPR 20, Marcoussis, 2002.
- [16] G. Bourdon, I. Robert, R. Adams, K. Nelep, I. Sagnes, J. M. Moison, and I. Abram. Room temperature enhancement and inhibition of spontaneous emission in semiconductor microcavities. *Appl. Phys. Lett.*, 77 :1345–1347, 2000.
- [17] D. Englund, D. Fattal, E. Waks, G. Solomon, B. Zhang, T. Nakaoka, Y. Arakawa, Y. Yamamoto, and J. Vučkovič. Controlling the spontaneous emission rate of single quantum dots in a two-dimensional photonic crystal. *Phys. Rev. Lett.*, **95** :013904, 2005.
- [18] M. Pelton, C. Santori, J. Vučkovič, B. Zhang, G. S. Solomon, J. Plant, and Y. Yamamoto. Efficient source of single photons : A single quantum dot in a micropost microcavity. *Phys. Rev. Lett.*, 89 :233602, 2002.
- [19] O. Benson, C. Santori, M. Pelton, and Y. Yamamoto. Regulated and entangled photons from a single quantum dot. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :2513–2516, 2000.
- [20] G. Davis and E. Lindfield. Bridging the terahertz gap. Physis World, pages 37–41, 2004.
- [21] X-C. Zhang. Terahertz wave imaging : horizons and hurdles. Phys. Med. Biol., 47 :3667–3677, 2002.
- [22] P. H. Siegel. Terahertz technology in biology and medicine. IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, 52 :2438–2447, 2004.
- [23] N. Revoy. Rayons T. Bien mieux que les rayons X! Science & Vie, Juillet :58–63, 2004.
- [24] A. Crocker, H. A. Gebbie, M. F. Kimmitt, and L. E. S. Mathias. Stimulated emission in the far infra-red. *Nature*, **201** :250, 1964.
- [25] G. Ramian. The new UCSB free-electron lasers. Nucl. Instr. Meth., A318 :225–229, 1992.
- [26] E. Bründermann, D. R. Chamberlin, and E. E. Haller. Novel design concepts of widely tunable germanium terahertz lasers. *Infr. Phys. Techn.*, 40 :141–151, 1999.
- [27] W. Knap, J. Lusakowskia, T. Parenty, S. Bollaert, A. Cappy, V. V. Popov, and M. S. Shur. Terahertz emission by plasma waves in 60 nm gate high electron mobility transistors. *Appl. Phys. Lett.*, 84 :2331–2333, 2004.
- [28] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, and A. Y. Cho. Quantum cascade laser. *Science*, 264 :553–556, 1994.
- [29] C. Sirtori, P. Kruck, S. Barbieri, P. Collot, J. Nagle, M. Beck, J. Faist, and U. Oesterle. GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum cascade lasers. *Appl. Phys. Lett.*, **73** :3486–3488, 1998.

- [30] R. Köhler, A. Tredicucci, F.Beltram, H. E. Beere, E.H. Linfield, A.G. Davies, D. A. Ritchie, R. C. Iotti, and Fausto Rossi. Terahertz semiconductor heterostructure laser. *Letters to Nature*, **417** :156–159, 2002.
- [31] G. Strasser. Advanced Device Fabrication for High-Performance Cascade Lasers. exposé oral, POISE Summer School, Cortona, Italy, 2006.
- [32] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg. Photons et atomes : Introduction à l'électrodynamique quantique. Editions CNRS, Paris, 1987.
- [33] S. Haroche. Cavity Quantum Electrodynamics, Course 13 in : Fundamental Systems in Quantum Optics. Elsevier Science Publishers, Paris, 1992.
- [34] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. Mécanique Quantique, tomes I et II. Hermann, Paris, 1980.
- [35] E. Fermi. Quantum theory of radiation. Rev. of Mod. Phys., 4:87–132, 1932.
- [36] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, and G. Grynberg. Processus d'interactions entre photons et atomes. Editions CNRS, Paris, 1997.
- [37] S. Elliot. The physics and chemistry of solids. John Wiley & Sons, Chichester, 1998.
- [38] S. Sajeev and T. Quang. Spontaneous emission near the edge of a photonic band gap. *Phys. Rev. A*, **50** :1764–1769, 1994.
- [39] J. M. Wylie and J. E. Sipe. Quantum electrodynamics near an interface. *Phys. Rev.* A, **30** :1185–1193, 1984.
- [40] L. Landau and L. Lifchitz. *Physique statistique*. Mir, Moscou, 1967.
- [41] L. Landau and L. Lifchitz. *Théorie du champ*. Mir, Moscou, 1966.
- [42] J. D. Jackson. Classical electrodynamics. John Wiley & Sons, New York, 1962.
- [43] R. R. Chance, A. Prock, and R. Silbey. *Molecular Flourescence and Energy Trans*fer Near Interfaces. Advances in Chemical Physics, Vol. XXXVII, John Wiley & Sons, inc., New York, 1978.
- [44] A. Rahmani and F. de Fornel. Emission photonique en espace confiné. Eyrolles, Paris, 2000.
- [45] H. Rigneault, F. Lemarchand, and A. Sentenac. Dipôle radiation into grating structures. J. Opt. Soc. Am. A, 17 :1048–1058, 2000.
- [46] J. E. Sipe. New Green function formalism for surface optics. J. Opt. Soc. Am. B, 4 :481–489, 1987.
- [47] F. J. P. Schuurmans, D. T. N. de Lang, G. H. Wegdam, R. Sprik, and A. Lagendijk. Local-field effects on spontaneous emission in a dense supercritical gas. *Phys. Rev. Lett.*, 80 :5077–5080, 1998.
- [48] M. J. Adams. An introduction to optical waveguides. John Wiley & Sons, Chichester, 1981.
- [49] L. Landau and L. Lifchitz. Electrodynamique des milieux continues. Mir, Moscou, 1969.
- [50] M. S. Yeung and T. K. Gustafson. Spontaneous emission near an absorbing dielectric surface. *Phys. Rev. A*, 54 :5227–5242, 1996.

- [51] J. J. Hopfield. Theory of the contribution of excitons to the complex dielectric function of crystals. *Phys. Rev.*, **112** :1555–1567, 1956.
- [52] M. Helm, E. Colas, P. England, F. DeRosa, and S. J. Allen Jr. Intersubband emission from semiconductor superlattices excited by sequential resonant tunneling. *Phys. Rev. Lett.*, **63**:74–77, 1989.
- [53] M. Helm, E. Colas, P. England, F. DeRosa, and S. J. Allen Jr. Observation of grating-induces intersubband emission from GaAs/AlGaAs superlattices. *Appl. Phys. Lett.*, **53** :1714–1716, 1988.
- [54] G. Bastard. Wave mechanics applied to semiconducor heterostructures. Les editions de physique, Les Ulis, France, 1996.
- [55] M. Rochat, J. Faist, M. Beck, U. Oestrle, and M. Ilegems. Far-infrared ($\lambda = 88 \ \mu m$) electroluminescence in a quantum cascade structure. *Appl. Phys. Lett.*, **73** :3724–3726, 1998.
- [56] M. Rochat, J. Faist, M. Beck, and U. Oestrle. Electrically pumped terahertz quantum well sources. *Physica E*, 7 :44–47, 2000.
- [57] P. Harrison. Quantum Wells, Wires and Dots. John Wiley & Sons, Chichester, 2005.
- [58] G. Bourdon, I. Robert, R. Adams, K. Nelep, I. Sagnes, J. M. Moison, and I. Abram. Room temperature enhancement and inhibition of spontaneous emission in semiconductor microcavities. *Appl. Phys. Lett.*, 77 :1345–1347, 2000.
- [59] M. Bass ed. Handbook of optics II. McGraw-Hill, inc, New York, 1995.
- [60] B. S. Williams, S. Kumar, H. Callebaut, Q. Hu, and J. L. Reno. Terahertz quantumcascade laser operating up to 137 K. Appl. Phys. Lett., 83 :5142–5144, 2003.
- [61] L. Li. A modal analysis of lamellar diffraction gratings in conical mountings. J. Mod. Optics., 40 :553–573, 1993.
- [62] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. Numerical Recipes in C. The art of Scienttific Computing. Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [63] C. Kittel. Physique de l'état solide. Dunod, Paris, 1998.
- [64] H. Raether. Surface plasmons on smmoth and rough surfaces and on gratings. Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [65] J.-M. Lourtioz, H. Bensity, V. Berger, J.-M. Gérard, D. Maystre, and A. Tchelnokov. Les cristaux phoniques ou la lumière en cage. Lavoisier, Paris, 2003.
- [66] B. S. Williams, S. Kumar, H. Callebaut, Q. Hu, and J. L. Reno. 3.4 THz quantum cascade laser based on longitudinal-optical-phonon scattering for depopulation. *Appl. Phys. Lett.*, 82 :1015–1017, 2003.
- [67] B. S. Williams, S. Kumar, H. Callebaut, Q. Hu, and J. L. Reno. Terahertz quantumcascade laser at $\lambda \approx 100 \ \mu m$ using metal waveguide for mode confinement. *Appl. Phys. Lett.*, **83** :2124–2126, 2003.
- [68] L. A. Coldreen and S. W. Corzine. Diode lasers and photonic integrated circuits. John Wiley & Sons, Chichester, 1995.

- [69] S. Barbieri, J. Alton, H. E. Beere, J. Fowler, E. H. Linfield, and D. A. Ritchie. 2.9 THz quantum cascade lasers operating up to 70 K in continuous wave. *Appl. Phys. Lett.*, 85 :1674–1676, 2005.
- [70] K. W. Gossen and S. A. Lyon. Grating enhanced quantum well detector. Appl. Phys. Lett., 47 :1257–1259, 1985.
- [71] D. Heitmann and U. Mackens. Grating-coupler-induced intersubband resonances in electron inversion layer of silicon. *Phys. Rev. B*, **33** :8269–8283, 1986.
- [72] W. J. Li and B. D. McCombe. Coupling efficiency of metallic gratings for excitation of intersubband transitions in quantum-well structures. J. Appl. Phys, 71 :1038– 1040, 1992.
- [73] S. Kumar, B. Williams, Q. Hu, and J. Reno. First-order edge-emitting and secondorder surface-emitting distributed feedback terahertz quantum cascade lasers. 8th International Conference on Intersubband Transitions in Quantum Wells, 2005.
- [74] M. Schubert and F. Rana. Design and performance of surface emitting terahertz quantum cascade lasers. 8th International Conference on Intersubband Transitions in Quantum Wells, 2005.
- [75] R. Colombelli, K. Stinivasan, M. Troccoli, O. Painter, C. F. Cmachl, D. M. Trennant, A. M. Sergent, D. L. Sivco, A. Y. Cho, and F. Capasso. Quantum cascade surfaceemitting photonic cristal laser. *Science*, **302** :1374–1377, 2003.
- [76] R. Petit ed. *Electromagnetic theory of gratings*. Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [77] M. G. Moharam, E. B. Grann, D. A. Pommet, and T. K. Gaylord. Formulation for stable and efficient implementation of the rigorous coupled-wave analysis of binary gratings. J. Opt. Soc. Am. A, 12 :1068–1076, 1995.
- [78] I. C. Botten, M. S. Craig, R. C. McPhedran, J. L. Adams, and J. R. Andrewartha. The dielectric lamellar diffraction grating. Opt. Acta, 28 :413–428, 1981.
- [79] I. C. Botten, M. S. Craig, R. C. McPhedran, J. L. Adams, and J. R. Andrewartha. The finitely conducting lamellar diffraction grating. *Opt. Acta*, 28 :1087–1102, 1981.
- [80] I. C. Botten, M. S. Craig, R. C. McPhedran, J. L. Adams, and J. R. Andrewartha. Highly conducting lamellar diffraction grating. *Opt. Acta*, 28 :1103–1106, 1981.
- [81] P. Sheng, R. S. Stepleman, and P. N. Sanda. Exact eigenfunctions for square-wave gratings : Application to diffraction and surface-plasmon calculations. *Phys. Rev.* B, 26 :2907–2917, 1982.
- [82] Lord Rayleigh. Note of the remarkable case of diffraction spectra described be prof. Wood. *Philos. Mag.*, 14 :60–65, 1907.
- [83] Lord Rayleigh. On the dynamical theory of gratings. Proceedings of the Royal Society of London, A 79 :399–416, 1907.
- [84] S. Collin. Résonances photoniques dans les réseaux métalliques : théorie et application à la détéction ultra-rapide. thése de doctorat de Paris IV, CNRS/LPN-UPR 20, Marcoussis, 2002.
- [85] Y.-L. Kok and N. C. Gallagher. Relative phases of electromagnetic waves diffracted by a perfectly conducting rectangular-grooved grating. J. Opt. Soc. Am. A, 5 :65–73, 1988.

- [86] A. Wirgin and T. Lopez-Rios. Can surface-enhanced raman scattering be caused by waveguide resonances? Opt. Commun, 48 :416–420, 1984.
- [87] A. Barbara, P. Quémerais, E. Bustarret, T. López, and T. Fournier. Electromagnetic resonances of sub-wavelength rectangular metallic grating. *Eur. Phys. J. D*, 23 :143– 154, 2003.
- [88] H. Lochbihler. Diffraction from highly conducting lamellar gratings in conical mountings. J. of Mod. Opt., 43 :1867–1890, 1996.
- [89] J. A. Porto, F. J. Garcia-Vidal, and J. P. Pendry. Transmission resonances on metalic gratings with very narrow slits. *Phys. Rev. Lett.*, 83 :2845–2848, 1999.
- [90] Y. Todorov, I. Abram, and C. Minot. Dipole emission into rectangular metallic gratings with subwavelength slits. *Phys. Rev. B*, **71**:075116, 2005.
- [91] R. W. Wood. On a remarkable case of uneven distribution of litgth in a diffraction grating spectrum. *Philos. Mag.*, 4 :396–402, 1902.
- [92] R. W. Wood. Diffraction gratings with controlled groove form and abnormal distribution of intensity. *Philos. Mag.*, 23 :310–317, 1912.
- [93] R. W. Wood. Anomalous diffraction gratings. Phys. Rev., 48 :928–936, 1935.
- [94] F. J. Garcia-Vidal and L. Martin-Moreno. Transmission and focusing of light in onedimensional periodically nanostructured metals. *Phys. Rev. B*, 66 :155412, 2002.
- [95] H. F. Ghaemi, T. Thio, D. E. Grupp, T. W. Ebbesen, and H. J. Lezec. Surface plasmons enhance optical transmission through subwavelength holes. *Phys. Rev. B*, 58 :6779–6782, 1998.
- [96] T. W. Ebbesen, H. J. Lezec, H. F. Ghaemi, T. Thio, and P. A. Wolff. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. *Nature*, **391** :667–669, 1998.
- [97] H. A. Bethe. Theory of diffraction by small holes. *Phys. Rev.*, **66** :163–182, 1944.
- [98] T. J. Kim, T. Thio, T. W. Ebbesen, D. E. Grupp, and H. J. Lezec. Control of optical transmission through metals perforated with subwavelenght hole arrays. *Opt. Lett.*, 24 :256–258, 1999.
- [99] Q. Cao and P. Lalanne. Negative role of surface plasmons in transmission of metallic grating with verry narrow slits. *Phys. Rev. Lett.*, **88** :057403, 2002.
- [100] L. Martin-Moreno, F. J. Garcia-Vidal, H. J. Lezec, K. M. Pellerin, T. Thio, J. B. Pendry, and T. W. Ebbesen. Theory of extraodinary optical transmission through subwavelength hole arrays. *Phys. Rev. Lett.*, 86 :1114–1117, 2001.
- [101] H. J. Lezec and T.Thio. Diffracted evanescent wave model for enhanced and suppressed optical transmission through subwavelength hole arrays. *Optics Express*, 12:3629–3651, 2004.
- [102] S. Collin, F. Pardo, R. Teissier, and J. L. Pelouard. Horizontal and vertical surface resonances in transmission metallic gratings. J. Opt. A, 4 :S154–S160, 2002.
- [103] B. Xu and Q. Hu. Grating coupling to intersubband emission. Appl. Phys. Lett., 70 :2511–2513, 1997.

- [104] G. P. Agrawal and N. K. Dutta. Long-wavelength semiconductor lasers. Van Nostrand Reinhold Company, New York, 1986.
- [105] H. Kogelnik and C. V. Shank. Coupled-wave theory of distributed feedback lasers. J. Appl. Phys., 43 :2327–2335, 1972.
- [106] J.-L. Coutaz, F. Garet, E. Bonnet, A. V. Tishchenko, O. Parriaux, and M. Nazarov. Grating diffraction effects in the THz domain. Acta Physica Polonica A, 107 :26–37, 2005.
- [107] M. van Exter, Ch. Fattinger, and D. Grischkowsky. High-brightenss terahertz beams characterized with an ultrafast detector. Appl. Phys. Lett., 55 :337–339, 1989.
- [108] D. Grischkowsky, S. Keiding, M. van Exter, and Ch. Fattinger. Far-infrared timedomain spectroscopy with terahertz beams of dielectrics and semiconductors. J. Opt. Soc. Am. B, 7 :2006–2015, 1990.
- [109] E. Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. Phys. Rev. Lett., 58 :2059–2062, 1987.
- [110] H. Xu, E. J. Bjerneld, M. Käll, and L. Börjesson. Spectroscopy of single hemoglobin molecules by surface enhanced raman scattering. *Phys. Rev. Lett.*, 83 :4357–4360, 1999.
- [111] H. Xu, J. Aizpurua, M. Käll, and P. Apell. Electromagnetic contributions to singlemolecule sensitivity in surface-enhanced Raman scattering. *Phys. Rev. E*, 62 :4318– 4324, 2000.
- [112] H. Xu and M. Käll. Surface-plasmon-enhanced optical forces in silver nanoaggregates. *Phys. Rev. Lett.*, **62** :246802, 2000.
- [113] S. Nie and S. R. Emory. Probing single molecules and single nanoparticles by surface-enhanced Raman scattering. *Science*, **275** :1102–1106, 1997.
- [114] E. J. Sánchez, L. Novotny, and X. S. Xie. Near-field fluorescence microscopy based on two-photon excitation with metal tips. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :4014–4017, 1999.
- [115] C. Girard, O. J. F. Martin, and A. Dereux. Molecular lifetime changes induced by nanometer scale optical field. *Phys. Rev. Lett.*, **75** :3098–3101, 1995.
- [116] L. Novotny. Single molecule fluorescence in inhomogeneous environments. Appl. Phys. Lett., 69 :3806–3808, 1996.
- [117] A. Rahmani, P. C. Chaumet, and F. de Fornel. Environment-induced modification of spontaneous emission : single-molecule near-field probe. *Phys. Rev. A*, 63 :023819, 2001.
- [118] L. Rogobete and C. Henkel. Spontaneous emission in a subwavelength environment characterized by boundary integral equations. *Phys. Rev. A*, **70** :063815, 2004.
- [119] L. A. Blanco and F. J. García de Abajo. Spontaneous light emission in complex nanostructures. *Phys. Rev. B*, 69 :205414, 2004.
- [120] V. V. Klimov, M. Ducloy, and V. S. Letokhov. Spontaneous emission of an atom placed near a prolate nanospheroid. *Eur. Phys. J. D*, 20 :133–148, 2002.

- [121] A. Neogi, C.-W. Lee, H. O. Everitt and T. Kuroda, A. Tackeuchi, and E. Yablonovitch. Enhancement of spontaneous recombination rate in a quantum well by resonant surface plasmon coupling. *Phys. Rev. B*, 66 :153305, 2002.
- [122] H. Gersen, M. F. García-Parajó, L. Novotny, J. A. Veerman, L. Kuipers, and N. F. van Hulst. Influencing the angular emission of a single molecule. *Phys. Rev. Lett.*, 85 :5312–5315, 2000.
- [123] G. H. Agarwal and C. V. Kunasz. Dipole radiation in the presence of a rough surface. Conversion of a surface-polariton field into radiation. *Phys. Rev. B*, 26 :5832–5842, 1982.
- [124] P. T. Leung, Z. C. Wu, D. A. Zelski, and T. F. George. Molecular lifetimes in the presence of periodically roughenend metallic surfaces. *Phys. Rev. B*, 36 :1475–1479, 1987.
- [125] P. T. Leung and T. F. George. Energy-transfer theory for the classical decay rates of molecules at rough metallic surfaces. *Phys. Rev. B*, 36 :4664–4671, 1987.
- [126] P. T. Leung, Y. S. Kim, and T. F. George. Deacay of molecules at corrugated thin metal films. *Phys. Rev. B*, **39** :9888–9893, 1989.
- [127] R. Amos and W. Barnes. Modification of spontaneous emission lifetimes in the presence of corrugated metallic surfaces. *Phys. Rev. B*, **59** :7708–7714, 1999.
- [128] T. Suzuki and P. K. L. Yu. Emission power of an electric dipole in the photonic band structure of the fcc lattice. J. Opt. Soc. Am. B, 12 :570–582, 1995.
- [129] T. Suzuki and P. K. L. Yu. Experimental and theoretical study of dipole emission in the two-dimensional photonic band structure of the square lattice with dielectric cylinders. J. Appl. Phys., 79 :582–594, 1996.
- [130] D. Delbeke, P. Bienstman, R. Bockstaele, and R. Baets. Rigourous electromagnétic analysis of dipole emission in periodically corrugated layers : the grating-assisted resonant-cavity light-emitting diode. J. Opt. Soc. Am. A, 19 :871–880, 2001.
- [131] M. Borodisky, R. Vrijen, T. F. Krauss, R. Cociolli, R. Bhat, and E. Yablonovitch. Spontaneous emission extraction and purcell enhancement from thin-film 2D photonic crystals. J. Lightwave. Techn., 17 :2096–2112, 1999.
- [132] A.-L. Fehrembach, S. Enoch, and A. Sentenac. Highly directive light sources using two-dimensional photonic crystal slabs. *Appl. Phys. Lett.*, **79** :4280–4282, 2001.
- [133] R. K. Lee, O. J. Painter, B. D'Urso, A. Scherer, and A. Yariv. Measurement of spontaneous emission from a two-dimensional photonic band gap defined microcavity at near-infrared wavelengths. *Appl. Phys. Lett.*, **74** :1522–1524, 1999.
- [134] R. Zengerle. Light propagation in singly and doubly periodic planar waveguides. J. Mod. Opt, 34 :1589–1617, 1987.
- [135] T. C. L. G. Sollner, W. D. Goodhue, P. E. Tannenwald, C. D. Parker, and D. D. Peck. Resonant tunneling through quantum wells at frequencies up to 2.5THz. Appl. Phys. Lett., 43 :588–590, 1983.
- [136] B. Ricco and M. Y. Azbel. Physics of resonant tunneling. the one-dimensional double-barrier case. *Phys. Rev. B*, **29** :1970–1981, 1984.

- [137] H. C. Liu. Circuit simulation of resonant tunneling double-barrier diode. J. App. Phys., 64 :4792–4794, 1988.
- [138] A. Celsete. Etude sous champ magnétique intense du transport vertical dans les hétérojonctions à semiconducteurs III-V. thése de doctorat, CNRS-URA 74, Toulouse, CNRS/SNCI/MPI-UPR 5021, Grenoble, 1990.
- [139] L. Esaki and R. Tsu. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM J. Res. Dev.*, 14 :61, 1970.
- [140] L. Esaki and L. L. Chang. New transport phenomenon in a semiconductor "superlattice". Phys. Rev. Lett., 33 :495–498, 1974.
- [141] P. K. Basu. Theory of Optical Processes in Semiconductors. Bulk and Microstructures. Clarendon press, Oxford, 1997.
- [142] G. H. Wannier. Wave functions and effective Hamiltonian for Bloch electrons in an electric field. *Phys. Rev.*, **117** :432, 1960.
- [143] E. E. Mendez and G. Bastard. Wannier Stark ladders and Bloch ocillations in superlattices. *Phys. Today*, 46 (No.6) :34–42, 1993.
- [144] E. E. Mendez, F. Agullò-Rueda, and J. M. Hong. Stark localisation in GaAs – GaAlAs superlattices under an electric field. *Phys. Rev. Lett.*, **60** :2426– 2429, 1988.
- [145] P. Voisin, J. Bleuse, C. Bouche, S. Gaillard, C. Alibert, and A. Regreny. Observation of the Wannier – Stark quantization in a semiconductor superlattice. *Phys. Rev. Lett.*, **61** :1639–1642, 1988.
- [146] T. Dekorsy, P. Leisching, K. Köhler, and H. Kurtz. Electro-optics detection of Bloch oscillations. *Phys. Rev. B*, **50** :8106–8109, 1994.
- [147] R. F. Kazarinov and R. A. Suris. Possibility of the amplification of electromagnetic waves in a semiconductor with a supperlattice. Sov. Phys.-Semocond., 5 :707–709, 1971.
- [148] R. F. Kazarinov and R. A. Suris. Electric and electromagnetic properties of semiconductors with a supperlattice. Sov. Phys.-Semocond., 6 :120–131, 1972.
- [149] F. Capasso, K. Mohamed, and A. Y. Cho. Sequential resonant tunneling through a multiquantum well superlattice. App. Phys. Lett., 48 :478–480, 1986.
- [150] K. K. Choi, B. F. Levine, R. J. Malik, and C. G. Bethea. Periodic negative conductance by sequantial resonant tunneling through an expanding high-field superlattice domain. *Phys. Rev. B*, **35** :4172–4175, 1987.
- [151] H. C. Liu. A novel superlattice infrared source. J. App. Phys., 63 :2856–2858, 1988.
- [152] J. Ulrich, R. Zobl, W. Schrenk, G. Strasser, K. Unterrainer, and E. Gornik. Terahertz quantum cascade structures : Intra- versus interwell transition. *Appl. Phys. Lett.*, 77 :1928–1930, 2000.
- [153] P. W. A. Mcllroy. Effects of an electric field on electron and hole wave functions in a multiquantum well structure. J. Appl. Phys., 59 :3532–3536, 1986.

- [154] S. Barbieri, F. Beltram, and F. Rossi. Microscopic theory of vertical-transport phenomena in semiconductor heterostructures : Interplay between two- and threedimensional hot-carrier relaxation. *Phys. Rev. B*, 60 :1953–1963, 1999.
- [155] G. Scalari, L. Ajili, J. Faist, H. Beere, E. Linfield, D. Ritchie, and G. Davies. Farinfrared λ =87μm bound-to-continuum quantum-cascade lasers operating up to 90 k. Appl. Phys. Lett., 82 :3165–3167, 2003.
- [156] B. N. Murdin, W. Heiss, C. J. G. M. Langerak, C. S. Lee, I. Galbraith, G. Strasser, E. Gornik, M. Helm, and C. R. Pidgeon. Direct observation of the LO phonon bottleneck in wide GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells. *Phys. Rev. B*, 55 :5171–5176, 1997.
- [157] P. Harrison and R. Kelsall. Population inversion in optically pumped asymetric quantum well THz lasers. J. Appl. Phys, 81 :7135–7140, 1997.
- [158] S. M. Goodnick and P. Lugli. Effect of electron-electron scattering on nonequilibrium transport in quantum-well systems. *Phys. Rev. B*, 37 :2578–2588, 1988.
- [159] P. Hyldgaard and J. W. Wilkins. Electron-electron scattering in far-infrared quantum cascade lasers. *Phys. Rev. B*, 53 :6889–6892, 1996.
- [160] M. Hartig, S. Haacke, P. E. Selbmann, B. Devaud, R. A. Taylor, and L. Rota. Efficient inersubband scattering via carrier-carrier interaction in quantm wells. *Phys. Rev. Lett.*, 80 :1940–1943, 1998.
- [161] J. C. Roberts, R. P. Green, L. R. Wilson, E. A. Zibik, D. G. Revin, J. W. Cockburn, and R. J. Airey. Quantum cascade lasers grown by metalorganic vapor phase epitaxy. *Appl. Phys. Lett.*, 82 :4221–4223, 2003.
- [162] S. M. Sze. Physics of semiconductor devices. John Wiley & Sons, New York, 1981.
- [163] http://web.met.kth.se/dct/pd/element/Au In.html.
- [164] L. Bernstein. Semiconductor joining by the solid-liquid-interdiffusion (SLID) process. J. Electrochem. Soc., 113 :1282–1288, 1966.
- [165] C. C. Lee, C. Y. Wang, and G. S. Matijasevic. Gold-indium alloy bonding below the eutectic temperature. *IEEE Trans. Components, Hybrids, and Manufacturing Tech.*, 16 :311–316, 1993.
- [166] J.-H. Kim, D. H. Lim, and G. M. Yang. Selective etching of AlGaAs/GaAs structures using the solutions of citric acid/H₂O₂ and de-ionized H₂O/buffered oxide etch. J. Vac. Sci. Technol. B, 16 :558–560, 1998.
- [167] R. E. Williams. Gallium Arsenide Processing Techniques. Artech House, Inc, Dedham, MA, 1984.
- [168] X.S. Wu, L.A. Coldren, and J.L. Merz. Selective etching characteristics of HF for Al_xGa_{1-x}As/GaAs. *Electron. Lett.*, **21** :558–559, 1985.
- [169] N. Braslau. Contact and metallisation problems in GaAs intergrated circuits. J. Vac. Sci. Technol., 4 :3085–3090, 1986.
- [170] C. L. Chen, L. J. Mahoney, M. C. Finn, R. C. Brooks, A. Chu, and J. G. Mavroides. Low resistance Pd/Ge/Au and Ge/Pd/Au ohmic contacts to n-type GaAs. *Appl. Phys. Lett.*, 48 :535–537, 1985.

- [171] J. van de Ven and J. J. Kelly. Galvanic effects in the etching of semiconductor p/n structures. J. Electrochem. Soc., 148 :G10–G15, 2001.
- [172] M. Balkanski and R. F. Wallis. Semiconductor physics and applications. Oxford University Press, New York, 2000.
- [173] J. R. Waldrop. Schottky-barrier height of ideal metal contacts to GaAs. Appl. Phys. Lett., 44 :1002–1004, 1984.
- [174] R. Singh, S. K. Arora, R. Tyagi, S. K. Agarwal, and D. Kanjilal. Temperature dependence of current - voltage characteristics of Au/n-GaAs epitaxial Schottky diode. *Bull. Mater. Sci.*, 23 :471–474, 2000.
- [175] J. R. Waldrop and R. W. Grant. Interface chemistry of metal-GaAs Schottky-barrier contacts. Appl. Phys. Lett., 34 :630–632, 1979.
- [176] R. Winston. Light collection within the framework of genetrical optics. J. Opt. Soc. Amer., 60 :245–247, 1970.
- [177] J. Darmo, V. Tamosiunas, G. Fasching, J. Kröll, K. Unterrainer, M. Beck, M. Giovannini, J. Faist, C. Kremser, and P. Debbage. Imaging with a Terahertz quantum cascade laser. *Opt. Expr.*, **12** :1879–1884, 2004.
- [178] R. C. Jones. The general theory of bolometer performance. J. Opt. Soc. Amer., 43 :1-14, 1952.
- [179] F. J. Low and A. R. Hoffman. The detectivity of cryogenic bolometers. Appl. Opt., 2 :649–650, 1962.
- [180] M. Sergent-Rozey, N. Lacome, and A. Levy. Argon and Nitrogen broadening in the pure rotational spectrum of HCl. J. Mol. Spectrosc., 120 :403–413, 1986.
- [181] M. Sergent-Rozey, Nguyen van Thanh, I. Rossi, N. Lacome, and A. Levy. Collisional broadening and line intensities in the pure rotational spectrum of PH₃. J. Mol. Spectrosc., 131 :66–76, 1988.
- [182] S. S. Dhillon. Terahertz intersubband electroluminescence from quantum cascade heterostructures. thése de doctorat, Churchill college, University of Cambridge, 2001.

Bibliographie

234

Résumé

Dans ce travail de thèse, on aborde la manifestation des effets d'Électrodynamique Quantique en Cavité (EDQC) dans le domaine THz. Le domaine THz est définie comme la région des fréquences entre 300 GHz et 30 THz (longueurs d'onde entre 10 μm et 1000 μm). Les sources que nous employons pour la génération rayonnement THz sont des cascades quantiques électroluminescentes GaAs/GaAlAs.

Les longueurs d'ondes rayonnées ($\lambda \approx 100 \mu m$) sont ainsi beaucoup plus grandes que l'épaisseur typique des émetteurs ($\approx 1 \mu m$). Dans ces conditions, lorsque la source est mise dans une cavité métallique planaire, le taux de l'émission spontanée croît comme l'inverse de l'épaisseur de la cavité.

Le travail de thèse comporte d'abord un analyse théorique des dispositifs. Le taux d'émission spontanée est étudié à la fois dans le formalisme classique du champ rétroréfléchi, et dans le formalisme quantique du règle d'or de Fermi. Pour la dernière approche on a développé une méthode numérique pour le calcul et la normalisation des modes optiques supportés par un système multicouches quelconque, qui peut être appliqué à l'étude des dispositifs lasers. L'analyse des cavités planaires sub-longueur d'onde permet de distinguer un effet "utile", qui porte sur le mode TM_0 guidé dans la cavité, et un effet d'absorption, associé aux plasmons de surface supporté par les couches de contact dopées qui sont nécessaires pour l'injection électrique dans la cascade quantique.

Le problème d'extraction de l'émission de la cavité est ensuite analysé. Pour cela on étudie un dispositif photonique de nouveau type, la "cavité complexe", dans lequel on a remplacé le miroir métallique supérieur par un réseau métallique. Un modèle de diffraction conique général est développé pour cette étude. Ce modèle a été vérifié dans le domaine THz par mesures de transmission. Il est appliqué dans le cas de rayonnement dipolaire à l'intérieur de la cavité complexe. Le comportement de la puissance extraite de la cavité en fonction de la période du réseau et de l'épaisseur de la cavité permet de reconnaître les effets d'Électrodynamique Quantique en Cavité dans le domaine THz.

Pour la mise en évidence expérimentale des effets EDQC, nous avons fabriqué et étudié des cavités complexes avec une cascades quantique. La croissance de type MOCVD, peu exploitée jusqu'à maintenant pour la fabrication des dispositifs à cascade quantique, a été mis au point avec la perspective de réalisation des dispositifs lasers. Notre étude expérimentale confirme les prévisions théoriques. Un facteur de renforcement de l'émission spontanée de ≈ 50 est démontré pour la structure de l'épaisseur la plus faible $0.4\mu m$. Nous avons ainsi mis en évidence, pour la première fois, l'effet de réduction de l'épaisseur du dispositif rayonnant sur l'émission spontanée dans le domaine THz.

Parmi les perspectives sur lesquelles cette étude débouche, on peut citer la réduction de la taille latérale des dispositifs pour obtenir un effet Purcell 3D, et également l'exploitation du plasmon des couches des contact dopées pour la conception et la fabrication des dispositifs photoniques THz compacts de nouveau type.

Abstract

The subject of this PhD work is the manifestation of the Quantum Electrodynamics in a Cavity (QED) effects in the THz domain. The THz domain is defined as the frequency region between 300 GHz and 30 THz (in terms of wavelength : between 10 μm and 1000 μm). The sources that we use to generate the THz radiation are electroluminescent GaAs/AlGaAs quantum cascades.

The radiated wavelength ($\lambda \approx 100 \mu m$) is much larger than the typical thickness of the quantum cascade ($\approx 1 \mu m$). Therefore, when the source is inserted into à planar metallic cavity, the spontaneous emission rate increases as the inverse of the cavity thickness.

A part of the PhD work is a theoretical analysis of the devices in a cavity. The spontaneous emission rate is studied both from the classical point of view, in terms of retroreflected field, and from a quantum-mechanical point of view, in terms of the Fermi golden rule. For the latter, we have developed a numerical method for the calculation and normalization of modes supported by an arbitrary multilayered system, that can be applied in lasing regime. The study of sub-wavelength cavities allows to distinguish between an "useful" effect, concerning the fundamental guided TM_0 mode, from an absorption effect of the spontaneous emission rate, that occurs because of the surface plasmon that exist into the doped contact layers, employed for current injection into the quantum cascade structure.

We further analyse the luminescence extraction from the cavity. For this purpose, we study a photonic device of a new type, "a complex cavity", in which the upper metallic mirror is replaced by a metallic grating. A general model of conical diffraction is developed for these studies. The model has been confirmed in transmission measurements in the THz domain. It has been applied to the case of a dipole source inside a complex cavity. The variation of the extracted power as function of the cavity thickness and the grating period are related to the QED effects on the spontaneous emission.

In order to obtain an experimental proof of the QED effects in the THz domain, we have fabricated and studied complex metallic cavities with a quantum cascade. The MOCVD epitaxial growth, so far fairy unexplored for THz quantum cascades, has been optimized with the possibility of growing laser devices. Our experimental studies confirm the theory. A spontaneous emission enhancement factor of ≈ 50 has been deduced for the thinnest device $0.4\mu m$. This is the first time the QED effect of spontaneous emission enhancement by reducing the device thickness has been put into evidence in the THz domain.

As possible further development is the reducing the lateral size of the device to obtain a full 3D Purcell effect. Also, the surface plasmon of the doped layers can be exploited for the conception of compact THz photonic devices of a new kind.