

_



Synthèse DE LA THÈSE DE DOCTORAT

UNIVERSITE PARIS-SUD

ÉCOLE DOCTORALE : STITS

Institut d'Électronique Fondamentale

DISCIPLINE PHYSIQUE

soutenue le 1 Février 2013

Présentée par :

Lei CAO

Sujet :

Optimisation de la détection THz par plasmons bidimensionnels dans des hétérostructures et de la propagation THz dans des guides d'onde planaires

Directeur de thèse : Co-encadrante de thèse :

Composition du jury :

Rapporteurs :

Examinateurs :

Frédéric Aniel Anne-sophie Grimault Jacquin IEF, UPSUD IEF, UPSUD

Dominique Coquillat Jean-François Lampin Philippe Ferrari Béatrice Dagens L2C, Université Montpellier 2 IEMN, Université Lille 1 IMEP-LAHC, Grenoble IEF, UPSUD

Synthèse de la thèse

1. Introduction et Objectif

Les sources et les détecteurs courramment utilisés en optique et en électronique ont une chute de la performance dans la gamme de fréquence térahertz (THz). Actuellement, ce type de dispositifs a subi des avancées spectaculaires dans les domaines tels que la physique, la chimie, la biologie et l'astronomie. L'objectif de la thèse est de réaliser des composants THz peu onéreux, compacts, accordables en fréquence et facile à intégrer. Ce travail comprend deux parties :

1/ Analyse et optimisation de la détection THz et 2/ optimisation de la propagation THz dans des guides planaires dans [10-1000] GHz. Chacune de ces études a un volet de modélisation, de fabrication et de caractérisation.

2.Optimisation de la détection THz Résonante en utilisant les Plasmon-Polariton dans des puits quantiques (QWs)

2.1. Principe : couplage entre radiation THz (photon) et plasmon 2D

Un plasmon correspond à des oscillations collectives de charges dans un environnement à trois ou deux dimensions (3D ou 2D). Nous avons analysés les plasmons issus d'un gaz 2D d'électrons (2DEG) dans des hétérostructures semi-conductrices. Dans la limite des grandes longueurs d'onde ($k < \sqrt{2\pi N_s}$), la dispersion des plasmons 2D dans un diélectrique homogène infini

(permittivité ε_s) est dérivée de la relation suivante [Stern1967]: $k^2 = \frac{\varepsilon_s \omega^2}{c^2} + \left(\frac{2\varepsilon_s \varepsilon_0 m * \omega^2}{N_s c^2}\right)^2$, $f = \frac{\omega}{2\pi}$,

où k est le vecteur d'onde de plasmon et ω est la fréquence de plasmon. La dispersion de la radiation THz est $f = \frac{1}{2\pi} \frac{c}{\sin \theta} k$. À 1 THz, le vecteur d'onde est d'environ 4.10⁵ m⁻¹ pour plasmon 2D dans GaN ($\varepsilon_s = 9,7$, N_s = 1,7.10¹⁶ m⁻²), tandis que le vecteur d'onde incident de maximum

est d'environ 2.10⁴ m⁻¹. Par conséquent, le couplage ne peut avoir lieu. Pour compenser le décalage du vecteur d'onde, un réseau métallique de période L et de largeur de ruban métallique W est placé au-dessus de l'hétérostructure (Figure 1).



Figure 1: Réseau métallique sur hétéro-jonction AlGaN/GaN

Ainsi le vecteur d'onde de l'onde diffractée par le réseau peut être défini par $k_{xn} = k_x + \frac{2\pi n}{L}, n = 0, \pm 1, \pm 2...$. Si la période du réseau L est choisie à un micromètre alors le vecteur d'onde k_{xn} est de l'ordre de 10⁵ ou 10⁶ m⁻¹, ce qui rend le plasmons-polaritons (PP, couplage de l'onde avec le plasmon 2D) désormais possible. Le champ électrique de l'onde incidente doit suivre une polarisation transverse magnétique (TM), qui est une condition nécessaire au couplage PP. Pour traiter ce type d'hétérostructure corruguée, nous avons développé sous Matlab un code numérique basé sur la méthode des ondes couplées (CWM, coupled wave method) [Wendler1999, Wendler2005]. Le 2DEG y est modélisé par une conductivité de type Drude soit quasi 2D si on le considère comme une couche mince, soit 2D si on le considère d'épaisseur nulle. Ceci nous permet de calculer les spectres de transmission, de réflexion et d'absorption des hétérostructures en tant que systèmes multicouches et de déceler les résonances de PP à partir desquelles nous avons tracé la dispersion de PP. Un autre moyen pratique pour modéliser ces dispositifs est d'utiliser le logiciel commercial Ansoft HFSS. Les deux méthodes de calculs (CWM et HFSS) ont été comparées validant ainsi l'utilisation de notre code écrit sous Matlab pour ce type d'application.



Figure 2: Dispersions des PP avec film métallique (W/L = 1), sans réseau (W/L = 0) et avec réseau (W/L = 0,75) sur une hétérostructure d'AlGaN/GaN avec 2DEG quasi-2D ($d_{2DEG} = 12$ nm) et 2D. $N_S = 1,2 \times 10^{17}$ m⁻², $L = 2,2 \mu$ m, et d = 25 nm. La dispersion du plasmon 2D dans le GaN est également tracée pour comparaison ($N_S = 1,2 \times 10^{17}$ m⁻²)

A titre d'ilustration sur la Figure 2, la dispersion du PP pour trois configurations différentes dans le cas d'un puits quantique d'AlGaN/GaN ont été tracées : 1/ hétérostructure métallisée totalement en surface (avec film métallique, W/L=1), 2/ hétérostructure sans réseau métallique (W/L=0) et 3/ hétérostructure avec réseau avec W/L = 0,75, par exemple. Les métallisations sont en or, leur épaisseur est fixée à t = 200 nm et la conductivité vaut $\sigma_{or} = 4,1.10^7$ S/m. On peut voir que la courbe de dispersion d'un PP pour un QW sans réseau est proche de la dispersion des plasmons 2D dans GaN. La courbe de dispersion d'un PP avec un 2DEG d'épaisseur nulle suit une allure proche de la courbe correspondant à l'expression de la dispersion

décrite par Okisu ($\omega = \sqrt{\frac{e^2 N_s k}{m^* \varepsilon_0}} \frac{1}{\varepsilon_4 + \varepsilon_2 \tanh(kd)}$) [Okisu1986]. Ceci signifie que les hypothèses établies pour cette relation de dispersion : $k d_{2DEG} \ll 1$, $k \gg \sqrt{\varepsilon_{AIGaN,GaN}} \omega/c$, $\omega \tau \gg 1$ et $|\varepsilon_0 / \alpha_0| \ll |\varepsilon_{AIGaN} / \alpha_{AIGaN}|$, où α est la constante d'atténuation définie comme $\alpha = \sqrt{k^2 - \varepsilon \frac{\omega^2}{c^2}}$, peuvent être appliquées à ce type de configuration.

Dans le cas d'un QW recouvert d'un film métallique, la fréquence PP est directement proportionnelle au vecteur d'onde ($\omega \propto k$) à condition que ce dernier reste inférieur à 5.10⁶ m⁻¹ audelà la relation dispersion est proportionnelle à la racine carrée du vecteur d'onde ($\omega \propto \sqrt{k}$). De plus, nous pouvons constater que la prise en compte ou non de l'épaisseur du gaz 2D, ($d_{2DEG} =$ 12 nm et $d_{2DEG} = 0$ nm) n'induit pas de modifications remarquables de la courbe de dispersion du PP et que dans les deux cas elle répond à l'hypothèse citée précédemment où $k.d_{2DEG}$ reste inférieur à 1. La dispersion d'un PP avec W/L = 0,75 a un comportement proche de celle du PP dans le cas 1/. Dès lors que la relation k × d << 1 n'est plus vérifiée, la formule d'approximation linéaire ne peut prédire la dispersion d'un PP car k augmente trop. Les courbes de dispersions de PP avec un réseau métallique 2D (sans épaisseur, t = 0) sont équivalentes à celles obtenues avec un réseau métallique 3D (épaisseur de métal finie fixée à t = 200 nm) pour le rapport W/L = 0,75 et ce quelque soit le gaz 2D modélisé (quasi-2D ou 2D). Seuls les résultats du puits quantique d'AlGaN/GaN sont présentés, les mêmes conclusions ont été vérifiées pour trois autres hétérostructures qui sont décrites dans la section suivante.

2.2. Description des structures étudiées

Les hétérostructures étudiées sont de groupe III-V (type I: AlGaN/GaN, InAlN/GaN et AlGaAs/GaAs) et IV-IV (type II: SiGe/Si/SiGe). Pour cette dernière structure, le silicium (Si) est contraint biaxiallement en tension sur une couche de silicium germanium (SiGe) relaxé. Les matériaux de substrats GaN, GaAs ou SiGe sont modélisés comme des semi-conducteurs semi-infinis sans pertes (les tangentes de pertes sont nulles). Le Tableau 1 répertorie les paramètres géométriques du réseau (L) pour obtenir une résonance PP à 1 THz et les caractéristiques des matériaux pour chaque hétérostructure. Si les paramètres dans les simulations ne sont pas mentionnés explicitement, leurs valeurs par défaut sont : l'épaisseur de la couche 2DEG d_{2DEG} = 12 nm, angle d'incidence $\theta = 0^\circ$, épaisseur du métal t = 200 nm, conductivité du métal $\sigma_{or} = 4,1 \times 10^7$ S/m.

Matériel	m*/m ₀	$N_{\rm S}$ (10 ¹⁶ m ⁻²)	L (µm)	d (nm)	μ _{2DEG} à 300K (m ² /Vs)	μ _{2DEG} à 77K (m ² /Vs)
AlGaN/GaN	0,22	12	2,2	25	0,2	1,0
InAlN/GaN	0,22	12	1,55	10	0,11	0,33
SiGe/Si/SiGe	0,19	5	1,3	25	0,3	3,2
AlGaAs/GaAs	0,063	1	1,0	25	0,8	5

Tableau 1: Paramètres des quatre hétérostructures nominales dans la simulation

2.3. Etude paramétrique pour l'optimisation de la détection THz pour un gaz d'électrons 2D de concentration de porteurs homogène

La Figure 3 montre le spectre d'absorption PP (courbe noire) pour la structure AlGaN / GaN. Il est obtenu en soustrayant l'absorption normale (courbe solide) par les contributions de 2DEG (courbe brisée) et le réseau (courbe discontinue). De manière générale, trois voire quatre pics de résonance PP apparaissent sur les spectres d'absorption. L'amplitude de PP (A_1 , A_2 et A_3) à la fréquence de résonance (f_1 , f_2 et f_3) est utilisée comme un paramètre clé pour évaluer l'efficacité du couplage PP et pour comparer les performances des différentes structures.



Figure 3: Spectres d'absorption de PP pour la structure AlGaN/GaN à 300 K modélisés avec Ansoft HFSS.

Afin de définir la meilleure hétérostructure, la résonance de PP a été analysée en terme d'amplitude, de position en fréquence, de largeur à mi-hauteur (FWHM : Full Width at Half Maximum en anglais) en fonction de plusieurs paramètres: la pérode du réseau L, l'angle d'incidence θ , la température, la concentration d'électrons Ns, l'épaisseur de la barrière d et le rapport du réseau W/L.

2.3.1. Influence de la période L et de l'angle d'incidence θ sur le spectre d'absorption

La Figure 4 (a) représente la position en fréquence f_1 en fonction de la période L pour les quatre matériaux nominaux à 300K. La relation $f_1 \sim 1/L$ [Muravjov2010, Hirakawa1995] est vérifiée pour W/L = 0,75.

Les résonances d'ordre plus élevé (f_2 ou f_3) peuvent également être adaptées en fonction de la période du réseau L ou par un vecteur d'onde d'ordre élevé $k_{xn} = kx + 2\pi n/L$ (n = 2 ou 3). Dans la plupart des cas, la résonance PP à f_1 est la plus intense en amplitude. L'ajustement de la fréquence de résonance dans la gamme THz [0,3-3] THz s'effectue par le choix de L comprise entre 0,5 et 5 µm. Les périodes du réseau pour chacune des quatre hétérostructures correspondant à une résonance PP f_1 fixée à 1 THz sont énumérées dans le Tableau 1.



Figure 4: (a) Accordabilité en fréquence f_1 de la première résonance PP en fonction de la période du réseau L pour les quatre hétérostructures à 300 K et pour W/L = 0,75. (b) Spectres d'absorption pour la structure AlGaN/GaN à 300 K avec différents angles d'incidence modélisés avec Ansoft HFSS.

Cependant, deux cas limites pour la période L doivent être distingués et discutés:

(1) Lorsque L est extrêmement faible ($\leq 0,5 \,\mu$ m), les champs évanescents seront plus confinés au voisinage de l'interface métal/barrière, rendant inefficace le couplage entre l'onde et le plamson 2D. Par exemple, si L = 0,1 μ m, le vecteur d'onde de la première onde évanescente dans la direction x s'écrit $k_{x1} = 2\pi/L = 2\pi \times 10^7 \,\mathrm{m}^{-1}$. La composante du vecteur d'onde dans la direction z est égale à $\sqrt{\varepsilon_b \omega^2 / c^2 - k_{x1}^2} \approx jk_{x1} \,\mathrm{m}^{-1}$, où ε_b est la permittivité de la barrière. Ainsi, la profondeur de propagation est $D_1 = |k_{z1}|^{-1} = 16 \,\mathrm{nm}$. Elle est plus petite voire comparable à l'épaisseur de la barrière d=10 nm (InAlN/GaN) ou 25 nm pour les trois autres matériaux. Pour des ondes d'ordres supérieurs (n> 1), la profondeur de propagation D_n est encore plus petite et l'observation des résonances PP devient difficile.

(2) Lorsque L est supérieure ou égale à 5 μ m, aucun résonance sur le spectre n'apparaît. La raison est liée à la condition de détection de résonance [Knap2002-1] $\omega \tau >> 1$ (où ω est la pulsation et τ est le temps de relaxation). Cette relation n'est plus satisfaite lorsque ω est petite. Par exemple, pour AlGaN/GaN à 300 K, si L = 5 μ m, f₁ = 0,34 THz, et τ = 2,5×10⁻¹³ s, ce qui donne le facteur $\omega \tau$ = 0,5 qui bien inférieur à 1.

La Figure 4 (b) représente les spectres d'absorption pour la structure AlGaN/GaN avec θ compris entre 0° et 89°. Le champ électrique E_x qui est essentiel pour l'interaction avec les plasmons longitudinaux 2D, est maximale lorsque que $\theta = 0^\circ$. Ce qui permet d'obtenir les résonances les plus élevées en amplitude. Si on s'intéresse au premier pic de résonance celui-ci passe de 0,48 en incidence normale à 0,12 à 89°. Par conséquent, pour la suite de l'étude nous avons travaillé exclusivement en incidence normale.

La fréquence $f_1 = 1$ THz ne varie quasiment pas du fait que le vecteur d'onde incident ($\omega \sin \theta / c$) reste inférieur à $2\pi/L$.



2.3.2. Influence de la température sur le spectre PP

Figure 5: Spectre d'absorption pour les quatre hétérostructures étudiées avec W/L = 0,75 à (a) 300 K et (b) 77 K.

La Figure 5 montre les spectres d'absorption PP pour les quatre matériaux à tempréature ambiante (300 K) et cryogénique (77 K) pour W/L=0,75. A basse température, les résonances PP sont plus étroits et d'amplitude plus élevée. Par exemple pour AlGaN/GaN, les deux premières résonances PP (A_2 et A_3) augmentent respectivement leur amplitude de 20 % et 40 %. Ceci est attribué à l'absorption de type Drude du 2DEG qui diminue à basse température. Aux résonances PP (f_n), l'absorption dans le matériau SiGe/Si/SiGe et AlGaAs/GaAs augmentent rapidement en raison de la forte augmentation de la mobilité des électrons à 77 K. À 300 K, les matériaux à base de nitrure ont les amplitudes A_n maximales quelque soit l'ordre de la résonance (f_n). L'hétérostructure d'InAlN/GaN apparaît comme optimale en raison de sa grande concentration d'électrons et sa petite épaisseur de barrière comparé à celle d'AlGaN/GaN. Cependant, AlGaAs/GaAs et SiGe/Si/SiGe présentent des absorptions aussi intéressantes notamment à basse température.

À certaines conditions, l'amplitude d'absorption PP (A_n) d'ordre supérieur (n > 1) peut devenir plus grande que celle d'ordre 1 (A_1). Le spectre d'absorptions d'AlGaN/GaN et SiGe/Si/SiGe à 77 K vérifient cette observation où l'amplitude $A_2 > A_1$. Ceci peut s'expliquer avec deux hypothèses : 1/Lorsque le facteur W/L augmente, le champ électrique (E_x) pour l'onde avec n>1a une amplitude plus élevée. 2/Deuxièmement, E_x à basse température peut également être plus fort par référence à leur valeur à 300 K.

Un rapport W/L élevé et une température cryogénique sont deux critères spécifiques et favorables pour intensifier fortement les amplitudes A_n des résonances PP (n>1).



Figure 6: Influences de (a) la concentration homogène Ns , (b) l'épaisseur de la barrière d et (c) le rapport W/L sur des amplitudes (A₁, A₂, A₃) des résonances PP à 300 K.

Dans cette section on étudie, la variation des amplitudes (A_1, A_2, A_3) (Figure 6 (a)) des résonances PP en fonction de la la concentration N_s. Une forte absorption s'obtient à partir de l'augmentation du nombre d'électrons par unité de surface qui intéragissent davantage avec les ondes évanescentes. Avec la même Ns (par exemple, 10^{16} m⁻²), la structure AlGaAs/GaAs présente une amplitude de maximale A₁ en raison de sa grande mobilité d'électron.

En ce qui concerne la fréquence PP $(f_1, f_2 \text{ et } f_3)$, elle suit une loi en racine carrée qui peut être prédite par la dispersion d'un plasmon 2D recouvert d'un réseau (« gated » en anglais)

$$f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{e^2 N_s k}{m^* \varepsilon_0}} \frac{1}{\varepsilon_s + \varepsilon_b \coth(kd)}$$
 [Eguiluz1975]

L'influence de l'épaisseur de la barrière (d) sur la fréquence PP peut être également prédite par $f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{e^2 N_s k}{m^* \varepsilon_0} \frac{1}{\varepsilon_s + \varepsilon_b \coth(kd)}}$ [Eguiluz1975]. Lorsque kd<<1, f est proportionelle à la racine carrée de l'épaisseur d

de l'épaisseur d.

Sur la Figure 6 (b), l'amplitude des résonances PP diminue lorsque d est au-delà de 50 nm. L'amplitude maximale A₁ a été obtenue avec d_{opt} = 50 nm pour AlGaN/GaN et d_{opt} = 25 nm pour InAlN/GaN. Pour les deux autres matériaux, A₁ ne fait que décroître en fonction de d. A ces distances optimales, le facteur $\omega \tau$ est de 1,98 (AlGaN/GaN), 1,2 (InAlN/GaN). Quand d < d_{opt}, $\omega \tau$ chute rapidement et devient inférieure à 1 d'après la dispersion PP. La détection deviendra le type non résonant [Knap2002-2], résultant de l'amortissement de l'oscillation de plasma, en particulier à une haute concentration d'électrons. Si N_s augmente à 5.10¹⁶ m⁻² dans AlGaAs/GaAs, une distance optimale (d_{opt} = 20 nm) apparaît également.

Avec la même d (par exemple, 50 nm), la structure basée sur nitrure présente l'amplitude de maximale A_1 en raison de sa grande concentration d'électrons Ns.

La Figure 6 (c) représente la variation des amplitudes (A₁, A₂, A₃) des résonances PP en fonction du rapport W/L du réseau.

 A_n ont tendance à augmenter significativement avec W/L en raison de l'amélioration du champ électrique longitudinal E_x . Par exemple, A_1 est de 0,045 pour W/L=0,25 et de 0,16 pour W/L=0,9. Nous avons calculé E_x au voisinage du réseau avec W/L variant de 0.25 à 0.95 pour une période de réseau L fixée à 1 µm. Avec la diminution de la largeur du gap entre deux métallisations successives, E_x devient plus intense à l'interface air/hétérostructure et il s'étend plus profondément vers l'hétérostructure, ce qui rend le couplage avec les plasmons 2D plus fort.

Quand W/L augmente de 0.25 à 0.9, la position en fréquence de la résonance PP décroît de façon monotone. Au-delà de 0,6, f_n est quasiment constante. Par exemple, f_1 est de 1.76, 1.16, 1.06,1.0 et 1.0 THz pour W/L=0.25, 0.5, 0.6,0.75 et 0.9, respectivement.

Pour la même valeur de W/L (par exemple, 0,75), la structure basée sur nitrure présente l'amplitude de maximale A_1 en raison de sa grande concentration d'électrons Ns.

2.4. Résonances PP : comparaison modélisation/mesure

Un échantillon $Al_{0.25}$ Ga_{0.75} N/GaN sur substrat saphir avec réseau périodique métallique a été mesuré par spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (Fourier Transform Infrared en anglais (FTIR)) à température ambiante et cryogénique. Ce travail a été réalisé en collaboration avec Marie-Antoinette Poisson de III/V Lab à Marcoussis qui nous a fourni l'hétérostructure et Isabelle Sagnes et Luc Le Gratiet du Laboratoire de Photonique et Nanostructures (LPN) à Marcoussis qui ont réalisé le dépôt des réseaux métalliques par lithographie électronique. Les spectres de transmission expérimentaux ont ainsi pu être comparés à ceux obtenus numériquement pour différentes valeurs du rapport W/L = [0.25, 0.5, 0.6, 0.75] de 0.6 à 1.8 THz.



Figure 7: Comparaison des spectres de transmission mesurés (Mes) et modélisés via la méthode CWM (Simu) à 300, 78 et 10 K pour la structure $AI_{0.25} Ga_{0.75} N/GaN (W/L = 0,6, Ns = 8.10¹⁶ m⁻²)$

Sur la Figure 7 sont montrés les spectres de transmission simulés (Sim) et mesurés (Mes) de 0,6 à 1,7 THz à différentes températures (300 K, 78 K et 10 K) pour un rapport W/L = 0,6. Lorsque la température baisse de 300 K à 10 K, l'amplitude de la premier résonance apparaît de plus en plus. A température ambiante, la faible absorption est causée principalement par la faible mobilité des électrons, on ne peut distinguer précisément en amplitude et en position de fréquence la première résonance. Les mobilités des électrons dans la simulation ont été fixées à 0.1 m²/Vs pour 300 K, 0.35 m²/Vs pour 78 K et 0.45 m²/Vs pour 10 K. La position en fréquence notée f₁ de cette résonance PP se situe à 0.81 THz (± 0.05 THz comme la résolution de la fréquence dans la mesure) expérimentalement alors qu'elle était prédite à 0.88 THz numériquement à 10K. La fréquence et l'amplitude en transmission T₁ relevée expérimentalement est équivalente à celle calculée. L'amplitude descend jusqu'à 0.5 en unité arbitraire à 10 K et 0.55 à 300 K. Comme la mobilité est plus importante à 10 K, un second pic de résonance PP commence à se dessiner sur le spectre de transmission, avec une position en fréquence f2 égale à 1.6 THz et une amplitude en transmission T₁ à 0.8. On ne la distingue pas à 78 K et 300 K sur la gamme de fréquence choisie. Cette confrontation modélisation/expérience se montre très prometteuse pour l'optimisation de la détection THz notamment dans la prédiction des résonances PP à des fréquences THz prédéfinies.



Figure 8: Spectres de transmission avec différents rapport W/L pour la structure Al_{0.25} Ga_{0.75} N/GaN (Ns = 8. 10¹⁶ m⁻²) à 78 K, (a) mesure et (b) simulation avec $\mu_{2DEG} = 0,3 \text{ m}^2/\text{Vs}$ avec la méthode CWM

La Figure 8 représente les spectres de transmission mesurés (a) et modélisés (simulation) (b) pour différents rapport W/L à 78 K, avec $\mu_{2DEG} = 0.3 \text{ m}^2/\text{Vs}$ sur l'intervalle de fréquence [0.6 -1.8] THz. Expérimentalement, lorsque le rapport W/L croît, la position en fréquence f₁ du premier pic de résonance se déplace vers les basses fréquences. On a une diminution de 0.5 THz entre la position obtenue pour le rapport W/L=0.25 et celui de 0.75. Une deuxième résonance PP n'est observable que pour les deux plus grands rapports W/L c'est-à-dire 0.75 et 0.6 dont les positions en fréquences respectives sont f₂ = 1.40 THz et 1.76 THz. De plus, lorsque le rapport W/L augmente on s'aperçoit que l'amplitude T₁ du premier pic de résonance s'accentue atteignant une valeur minimale de 0.48 pour W/L = 0.75. Si on compare ces données avec celles calculées numériquement, on retrouve un bon accord entre les positions en fréquence et les amplitudes des résonances. Par conséquent, l'utilisation d'une fonction de distribution homogène pour la concentration des porteurs dans la direction x, N_s (x) = N_s semble être une hypothèse raisonnable dans le cas d'une hétérostructure de type AlGaN/GaN.

2.5. Modélisation d'un gaz d'électron 2D héterogène

Dans les sections qui vont suivre, nous allons aborder l'influence de la modulation d'un gaz d'électron 2D par l'intermédiaire de la modification de la concentration des porteurs en-dessous (N_1) et entre (N_2) les métallisations du réseau notamment sous l'effet d'une polarisation en tension appliquée sur les métallisations. Nous n'aborderons ici que le cas de l'hétérostructure d'AlGaAs/GaAs. Ceci est dû à la différence entre la hauteur de barrière à l'interface métal/semiconducteur et le niveau de Fermi à l'interface air/semi-conducteur, qui conduit à $N_1 \neq N_2$. A chaque variation de la concentration N_1 correspond une tension de polarisation notée V_G qui est appliquée sur le réseau métallique. La méthode CWM et le logiciel HFSS d'Ansoft peuvent être utilisés pour calculer les spectres d'absorption de ce type de configurations où $N_1 \neq N_2$.



Figure 9: Spectre d'absorption de la structure AlGaAs/GaAs pour différentes concentrations d'électron N_1 à 300 K et W/L = 0.75 avec N_2 fixée à 1,65.10¹⁶ m⁻².

Sur la Figure 9, est représentée l'influence de la concentration N_1 (respectivemnt V_G) sur le spectre d'absorption pour une hétérostructure d'AlGaAs/GaAs à température ambiante avec W/L = 0,75 et une concentration N_2 fixée à $1,65.10^{16}$ m⁻².

En fixant la concentration N_2 , un peu plus élevé (inférieur) N_1 décale l'amplitude et la fréquence de résonance à haute (basse) valeur. L'accordabilité en fréquence est possible par la tension.

Pour la plus petite des concentrations $N_1 = 0,12 \times 10^{16} \text{ m}^{-2}$ ($N_1 << N_2$), la forme du spectre d'absorption est complètement modifiée : on ne retrouve pas de minimum d'absorption à 0,3 THz par contre nous obtenons un seul pic de résonance qui est décalé vers les hautes fréquences à 2,3 THz avec une amplitude de 0,12. Avec ce fort contraste entre N_1 et N_2 , l'absorption est comparable avec le cas homogène ($N_1 = N_2$). La simulation montre que la fréquence et l'amplitude de l'absorption peut également être modifiées par le rapport W/L.

3.Optimisation de la transmission THz dans les guides d'onde planaires

La deuxième partie de ce travail de thèse concerne l'optimisation de la transmision THz via l'étude de la dispersion et de l'atténuation de quatre types de guide d'ondes (coplanaire (CPW), microruban, Slotline et triplaque) en fonction des dimensions géométriques, des propriétés des matériaux (diélectriques et métallisation) avec des logiciels commerciaux Ansoft HFSS (http://www.ansys.com/) et MWS CST (http://www.cst. com /). Une comparaison de leurs pertes et de leur dispersion pour une même impédance caractéristique de 100 Ω à 20 GHz est aussi présentée. Les avantages et les limites de chaque guide sont présentés afin de proposer une structure optimale. Une comparaison des résultats numériques avec des mesures électriques réalisées en Allemagne à l'institut Fraunhoffer de Fribourg a pu être effectuée entre 340-500 GHz.

L'étude des guides a été réalisée principalement sur substrat polymère : le benzocyclobutène (BCB). Elle s'inscrit dans la continuité d'une première analyse appliquée à la transmission THz via des lignes coplanaires sur substrat semi-conducteur semi-isolant de phosphure d'indium (InP) utilisées pour des photocommutateur d'InGaAs qui fût effectuée dans notre groupe [Grimault2012].

3.1. CPW

Un guide coplanaire (CPW) est défini par trois rubans métalliques : deux plans de masse externes et un ruban central (Figure 10). Chaque ruban est espacé de la dimension W. Les plans de masse sont supposés infinis et le ruban central de dimension finie notée S₁. L'ensemble repose sur substrat diélectrique. Le guide CPW sur InP (ε_r =12,5) avec W = 6,6 µm a une impédance caractéristique (Z_c) de 50 Ω . L'influence de W sur la dispersion et les pertes a été analysée. Dans le cas avec le substrat BCB (ε_r =2,42), les mêmes dimensions de W sont utilisées pour étudier l'influence de la nature du substrat.



Figure 10: Configuration de CPW

3.1.1.Dispersion

La Figure 11 (a) représente la dispersion des deux modes (symétrique (CPW) et antisymétrique (Slotline)) qui se propagent dans la structure CPW sur BCB et InP en fonction de la fréquence pour W = 6,6 um. La ligne TEM représente la dispersion de l'onde de type tranverse électromagnétique (TEM) dans substrat semi-infini.

Pour la ligne CPW sur BCB, la courbe de dispersion du mode CPW ne croise pas celle du mode slotline sur toute la gamme de fréquence considérée et ce jusqu'à 3 THz. Contrairement à la ligne CPW sur InP, le mode CPW ne peut pas tranférer de l'énergie avec le mode slotline à partir de 600 GHz. Il convient de noter également que pour la structure sur InP un mode d'ordre supérieur apparaît avec une fréquence de coupure de 800 GHz, il n'est pas repésenté ici. Pour le BCB, le premier mode d'ordre supérieur apparaît au-delà de 1,5 THz.

Le coefficient de couplage est calculé à 0,0033 à 3 THz pour CPW sur BCB, tandis que pour CPW sur InP, la courbe de dispersion du mode Slotline couple celle du mode CPW à 0,6 THz. Ceci laisse présage une possibilité d'échange d'énergie entre les deux modes, car le coefficient de couplage vaut 0,2764 à 600 GHz et augmente ensuite..

D'ailleurs, le mode CPW peut rayonner vers le substrat parce que la vitesse de phase du mode CPW est toujours plus grande que l'onde TEM dans le substrat [Kasilingam1983]. Plus l'angle de radiation (Ψ) est élevé, plus le rayonnement augmente. Ψ est calculée à 33,87° pour CPW sur BCB et 40,62° pour CPW sur InP.



Figure 11: Comparaisons pour la configuration, CPW (AB/<u>BC</u>) pour différents substrats BCB et InP: (a) dispersion avec $W = 6,6 \mu m$, (b) perte par rayonnement, (c) perte métallique ($\sigma_{0r} = 4,1.10^7$ S/m), (d) perte diélectrique ($tan\delta_{BCB}=0,007$ et $\sigma_{InP}=2,4$ S/m), et (e) pertes totales.

3.1.2. Perte par rayonnement α_R

D'après la littérature, deux principaux effets contribuent aux pertes par rayonnement. Le premier est le transfert d'énergie de l'onde guidée dans le substrat telle une onde de choc [Kasilingam1983].

Le second effet est dû au couplage entre l'onde guidée et d'autres ondes ou modes existants comme on le voit dans les courbes de dispersion. Plusieurs modes peuvent se propager dans le guide CPW il est dit multi-modes. Le coefficient de couplage entre le mode CPW et le mode Slotline est cent fois plus petit que dans le cas d'un CPW sur InP.

La Figure 11 (b) montre les pertes par rayonnement par rapport à la fréquence avec les deux types de substrats. Pour une fréquence située en-dessous de 400 GHz, la dépendance des pertes en fonction de la fréquence est faible, alors qu'au-delà les pertes suivent une relation polynomiale dépendant du cube de la fréquence f^3 . La courbe analytique a été reportée sur la figure dans le cas de W = 6,6 µm pour les deux substrats. Les pertes calculées suivent globalement la tendance de la courbe analytique à basse fréquence (<400 GHz) mais on s'aperçoit qu'au-delà de 400 GHz les pertes par rayonnement d'une ligne coplanaire sur substrat InP sont sous estimées.

Les pertes par rayonnement dépendent également de la géométrie de la ligne et elles sont proportionnelles au facteur $(S_1+2W)^2$. La perte de rayonnement augmente drastiquement avec W. L'avantage du substrat BCB est sa permittivité faible dans la gamme de fréquence THz, ce qui conduit à des plus faibles pertes.

Nous verrons par la suite que les pertes par rayonnement contribuent significativement dans les pertes totales notamment à hautes fréquences.

3.1.3. Perte de conduction α_C

Dans la Figure 11 (c), les pertes de conduction ($\sigma_{Or} = 4,1.10^7 \text{ S/m}$) sont tracées en fonction de la fréquence à différents W. L'expression analytique a également été ajoutée pour W = 6,6 µm, et on peut remarquer qu'elle sous-estime les pertes par conduction. Quand W diminue, la densité de courant est plus limitée à la surface du ruban central entraînant l'augmentation des pertes ohmiques (α_C) qui évoluent en 1/ $\sigma\delta$ où δ est l'épaisseur de peau qui est proportionnelle à la racine carrée de la fréquence (δ =79 nm à 1 THz). Pour un même espacement W, si l'on compare le CPW sur InP avec le CPW sur BCB on s'aperçoit que les pertes par conduction sont atténuées en raison de la nature du substrat. Cela confirme encore une fois l'avantage d'utiliser le BCB. Les pertes par conduction sont les pertes qui contribuent le plus aux pertes totales dans un guide CPW à basses fréquences passant le relai aux pertes par rayonnement ensuite.

3.1.4. Perte diélectrique α_D

Les pertes diélectriques sont proportionnelles au facteur ($f \tan \delta$). Comme le montre la Figure 11 (d), les pertes diélectriques calculées pour un guide CPW sur BCB et InP présentent des caractéristiques différentes. Ceci est dû à la tangente de perte de chaque substrat qui est modélisée de manière différente. Les pertes sur InP restent toujours supérieures à celles obtenues sur BCB. Les pertes diélectriques restent toutefois très faibles par rapport aux deux autres pertes que sont le rayonnement et la conduction. L'approche analytique sous-estime les valeurs calculées numériquement à hautes fréquences.

Un modèle de tangente de perte plus précis pour le BCB (3022-63 Cyclotene résines de Dow Chemical Company) a été obtenu à partir de mesures de spectres transmission mesurés avec un spectromètre FTIR pour des membranes de BCB dans la gamme THz qui ont été réalisées dans notre groupe en 2008 [Perret2008]. On a de ce fait comparé les pertes diélectriques du CPW sur BCB avec le modèle de tangente de perte suivant (tan $\delta = 0,0073 + 0,0017 \times f$ (en THz)) et la valeur constante (tan $\delta = 0,007$) qui a toujours été utilisée jusqu'à présent dans nos modélisations. Le modèle qui dépend de la fréquence produit plus de pertes à hautes fréquences. L'augmentation maximale des pertes diélectriques est d'environ 0,3 dB / mm à 1500 GHz pour W = 12 um. Lorsque l'on compare avec les autres types de pertes dans une structure CPW, cette perte supplémentaire reste cependant négligeable.

3.1.5. Pertes totals $\alpha_{\rm T}$

L'atténuation totale du mode CPW dans la Figure 11 (e) est considérée comme la somme des trois types de pertes ($\alpha_T = \alpha_R + \alpha_D + \alpha_C$). Pour un même espacement W et à une même fréquence, un guide CPW sur BCB présente le moins de pertes et sera plus performant pour la transmission THz. Un guide CPW avec un faible espacement W = 1,6 µm est celui qui a le plus de pertes par conduction alors que le guide large avec W=12 µm est celui qui a le plus de pertes par rayonnement. La structure optimale (pertes totales minimales) est celle dont W = 6,6 µm et ce pour les deux substrats, même si le guide avec W = 12 um a des pertes légèrement inférieures à certaines fréquences c'est-à-dire 800 GHz pour BCB et 600 GHz pour InP où un compromis peut être établi pour choisir ce guide.

Guide	Dimensions à 100 Ω	Mode Dominant (Champ E)	Z _c (Ω) à 20 GHz
CPW S ₂ S ₁ L BCB W t ₁ H	$W = 6,6 \mu m$ $S_1 = 10 \mu m$ $S_2 = 24 \mu m$ t = 500 nm L = 1mm $H = \infty$		73-123 Ω (W =1,6-12 μm)
Microruban L BCB t H	W = 25 μm H = 30 μm t = 500 nm L = 1 mm		210-93 Ω (W =5-30 μm)
Triplaque L BCB t H W	W = 7,3 μm H = 30 μm t = 500 nm L = 1 mm		120-45 Ω (W =5-30 μm)
Ligne à fente (Slotline)	$W = 6 \mu m$ S = 240 \mu m t = 500 nm L = 1 mm H= \pi		95-160 Ω (W =5-30 μm)

3.2. Structure optimale entre guides d'onde THz sur BCB à Z_c fixée

Figure 12: Dimensions des guides d'onde à 100 Ω .

Dans le cadre de cette étude, on a comparé le guide CPW avec trois autres guides d'ondes (microruban, triplaque et slotline) pour une même impédance caractéristique fixée à 100 Ω à basse fréquence (20 GHz). Leurs dimensions géométriques sont indiquées sur la Figure 12.

Du point de vue de la dispersion, la ligne triplaque possède une vitesse de phase égale à la vitesse de phase de l'onde TEM qui se propage dans le substrat polymère BCB. La vitesse de phase des guides CPW et triplaque est quasi-constante avec la fréquence. Les quatre types de guides d'ondes peuvent être triés en fonction de leur dispersion croissante comme suit : Slotline > Microruban > CPW > Triplaque.



Figure 13: Pertes dans les quatre types de guide d'onde. (a) perte par rayonnement, (b) perte métallique ($\sigma_{0r} = 5.10^{\circ}$ S/m) et (c pertes totales ($\sigma_{0r} = 5.10^{\circ}$ S/m)

3.2.1. α_R

Pour les pertes par rayonnement (Figure 13 (a)), la ligne Slotline présente la plus grande atténuation de 7,63 dB/mm à 1 THz bien au-dessus des trois autres lignes à cause de sa grande dispersion. Sans surprise, celles de la ligne triplaque sont quasi nulles de l'ordre de 0,006 dB/mm pour la même fréquence. Microruban et CPW présentent également des performances satisfaisantes, avec 1,48 dB/mm et 0,43 dB/mm respectivement à 1 THz.

3.2.2. α_D

Pour les quatre types de guides d'ondes, les pertes diélectriques maximales observées restent inférieures à 1 dB/mm à 1 THz. Les pertes diélectriques sont faibles et comparables aux pertes par rayonnement dans les lignes CPW et microruban.

3.2.3. α_C

Les lignes qui présentent le moins de pertes par conduction sont les guides slotline et microruban environ 1,6 dB/mm à 1 THz (Figure 13 (b)). La ligne CPW et la ligne triplaque ont une valeur relativement élevée de l'ordre de 4,7 dB/mm à 1 THz.

3.2.4. α_T

Les pertes totales sont illustrées sur la Figure 13 (c). La ligne microruban est la ligne de transmission THz optimale montrant une atténuation de 4,0 dB/mm à 1 THz. Les pertes liées aux différents guides sont répertoriées dans le Tableau 2.

	$\alpha_{\rm R}$ (dB/mm)	$\alpha_{\rm D}$ (dB/mm)	$\alpha_{\rm c}$ (dB/mm)	$\alpha_{\rm T}$ (dB/mm)
CPW	0,43	0,59	4,77	5,84
Microruban	1,48	0,82	1,63	4,00
Triplaque	0,006	1,00	4,68	5,64
Slotline	7,63	0,94	1,71	9,60

Tableau 2: Atténuation dans les	s quatre types de guide à 1 7	THz.
---------------------------------	-------------------------------	------

L'atténuation dans CPW et triplaque est limitée par la perte par conduction. Elle peut être réduite en choisissant la combinaison optimale de S_1/W pour CPW et W/H pour triplaque à $Z_c = 100 \Omega$. Dans le guide slotline, les pertes par rayonnement sont le plus importantes. En déposant une couche de BCB au-dessus de la structure, la réduction du rayonnement et de la dispersion est possible.

3.3. Résultats de la mesure CPW sur BCB



Figure 14: Constante d'atténuation α (dB/mm) mesurée (a) et simulée (b) de CPW avec différentes dimensions (S₁/W) : 36/6, 36/10, 36/3, 70/4,28 et 100/6 µm. Échantillon : Métal (500 nm)/BCB (~30 µm)/substrat Si (300 µm), Modèle: $\sigma_{Or} = 4,1.10^7$ S/m, tan δ (BCB) = 0,007, $\varepsilon_{BCB} = 2,42,30$ µm BCB sur substrat de Si semi-infini ($\varepsilon_{Si} = 11,9, \sigma_{Si} = 10$ S/m).

Suite à cette étude paramétrique réalisée via de multiples modélisations sous HFSS et CST, nous avons décidé de fabriquer des échantillons en salle blanche de la centrale de technologie Minerve de l'IEF. Nous avons mis en place l'ensemble des étapes technologiques pour élaborer des guides coplanaires en vue de les mesurer expérimentalement avec un analyseur de réseau vectoriel dans la gamme de fréquence [340 – 500] GHz. Ces mesures ont été effectuées à l'Institut Fraunhoffer IAF (Allemagne). Les dimensions S_1/W que nous avons fixées pour fabriquer et mesurer des lignes CPW sur BCB (30 µm) sur wafer de Si sont énumérées dans le titre de la Figure 14.

Sur les Figure 14 (a) et (b) sont représentées les atténuations mesurées et modélisées. Un bon accord entre les données numériques et expérimentales a été trouvé pour les cinq dimensions de guide. Si la largeur du ruban central reste fixée à $S_1 = 36 \mu m$, et que l'espacement W augmente de 3 à 10 μ m, l'atténuation augmente. Les pertes évoluent en fonction du cube de la fréquence laissant supposer qu'elles sont directement liées à la croissance des pertes par rayonnnement. Par rapport à la confrontation avec les mesures le choix d'une conductivité pour le métal de $\sigma_{Or} = 4,1.10^7$ S/m dans les modélisations demeure toutefois raisonnable et relativement adaptée.

Si $S_1 > 36 \mu m$ alors nous obtenons des pertes totales plus importantes qui peuvent atteindre 16 dB/mm à 500 GHz avec $S_1 = 100 \mu m$. Ceci est cohérent avec la littérature. L'augmentation des dimensions du guides a une répercussion sur l'évolution principalement soit sur des pertes métalliques soit sur des pertes par rayonnement. Les fluctuations dans les données expérimentales sont attribuées aux incertitudes de mesures mais également à la réalisation technologique. Pour résumer la structure qui apparaît comme la plus satisfaisante en terme de pertes minimales est celle dont les dimensions sont $S_1 = 36 \mu m$ et $W = 3 \mu m$ car nous obtenons une atténuation de 2,7 dB/mm à 400 GHz et 3,5 dB/mm à 500 GHz. Ce qui apparaît à l'état de l'art actuel pour ce type de mesures.

4. Bibliographie

[Stern1967] Frank Stern, Physical Review Letters, Vol.18, No.14, pp.546-548, 1967.

[Wendler1999] L. Wendler, T. Kraft, Physica B, Vol. 271, pp. 33-98, 1999.

[Wendler2005] L.Wendler, N.Finger et E.Gornik, Vol.46, pp.291-307, 2005.

[Okisu1986] Noriyuki Okisu, Yasuo Sambe, et Takeshi Kobayashi, Appl. Phys. Lett., Vol. 48, No.12, 1986.

[Muravjov2010] A.V.Muravjov et al., Applied Physics Letters, 96, 042105, 2010.

[Hirakawa1995] K.Hirakawa, et al., Applied Physics Letters, Vol.67, pp.2326-2328, 1995.

[Knap2002-1] W.Knap, et al., Applied Physics Letters, Vol.81, No.24, pp.4637-4639, 2002.

[Eguiluz1975] Adolfo Eguiluz, et al., Physical Review B, Vol.11, No.12, pp. 4989-4993, 1975.

[Knap2002-2] W.Knap, et al., Journal of Applied Physics, Vol.91, No.11, pp. 9346-9353, 2002.

[Grimault2012] A.-S. Grimault-Jacquin, et al., Micro. Opt. Tech. Lett, Vol. 54, No.1, pp.213-219, 2012.

[Kasilingam1983] Dayalan P.Kasilingam et David B.Rutledge, IEEE MTT-S Digest, pp.113-115, 1983.

[Perret2008] Etienne Perret, et al., Microelectronic Engineering, Vol.85, pp.2276-2281, 2008.