



HAL
open science

Confinement photonique extrêmement sub-longueur d'onde pour les lasers à cascade quantique térahertz

Élodie Strupiechonski

► **To cite this version:**

Élodie Strupiechonski. Confinement photonique extrêmement sub-longueur d'onde pour les lasers à cascade quantique térahertz. Autre [cond-mat.other]. Université Paris Sud - Paris XI, 2013. Français. NNT : 2013PA112342 . tel-00943200

HAL Id: tel-00943200

<https://theses.hal.science/tel-00943200>

Submitted on 7 Feb 2014

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.



Comprendre le monde,
construire l'avenir®



UNIVERSITÉ PARIS-SUD

ÉCOLE DOCTORALE : Sciences et Technologies de l' Information des
Télécommunications et des Systèmes

LABORATOIRE : Institut d' Électronique Fondamentale
DISCIPLINE : Physique

THÈSE DE DOCTORAT

Soutenue le 18/12/2013

par

Élodie STRUPIECHONSKI

Confinement photonique extrêmement sub-longueur d'onde pour les lasers à cascade quantique térahertz

Composition du jury :

<i>Directeur de thèse :</i>	Raffaele COLOMBELLI	Université Paris-Sud
<i>Président du jury :</i>	François JULIEN	Université Paris-Sud
<i>Rapporteurs :</i>	Jean-Jacques GREFFET	Institut d'Optique
	Roland TEISSIER	Université Montpellier 2
<i>Examineurs :</i>	Jean-François LAMPIN	Université Lille 1
	Giacomo SCALARI	École Poly. Féd. de Zurich
<i>Membre invité :</i>	Aloyse DEGIRON	Université Paris-Sud

Cette thèse a été préparée à l'Institut d'Électronique Fondamentale.



Institut d'Electronique Fondamentale

Université Paris-Sud

Bâtiment 220

91405 ORSAY Cédex - FRANCE

☎ +33 (0) 1 69 15 41 19

FAX +33 (0) 1 69 15 41 15

✉ raffaele.colombelli@u-psud.fr

Site www.ief.u-psud.fr

*Je dédie ce travail
à tous ceux qui m'ont témoigné leur soutien
tout au long de mon parcours universitaire.*

Remerciements

En tout premier lieu, je tiens à remercier Raffaele Colombelli pour m'avoir offert l'opportunité de préparer ma thèse sous sa direction. Ce fut un honneur de bénéficier de son expertise et de sa tutelle. J'ai beaucoup appris et je l'espère, progressé grâce à lui.

Je souhaite également remercier les rapporteurs et examinateurs qui ont accepté de faire partie du jury de ma thèse. Par respect pour eux, j'ai pris soin de sélectionner, d'expliquer et d'illustrer de mon mieux les résultats les plus intéressants de mon travail de thèse. J'espère que malgré les maladresses de style, ils auront trouvé de l'intérêt et du plaisir à lire mon manuscrit.

Je tiens à exprimer ma gratitude à toutes les personnes rencontrées au cours de ma formation universitaire qui m'ont inspirée et donné goût à la physique expérimentale. Je pense en particulier à Arnaud Bournel, Laurie Calvet, Carlo Sirtori, Gottfried Strasser, Mark Reed et Allan Rosenberg, qui m'ont fait confiance à des moments clés de ma formation et m'ont encouragée vers les études doctorales.

Je serai éternellement reconnaissante à Gangyi Xu, qui m'a transmis son savoir faire au quotidien, ainsi qu'à Daniele Costantini, pour son attitude constructive et ses idées "outside the box". Je salue également les trois brillants étudiants avec qui j'ai eu la chance de travailler et que je veux remercier pour leur contribution à mon travail de thèse, Davide Grassani, Tamas Birkner et Manuel Brekenfeld, et leur souhaite tout le succès qu'ils méritent dans leurs projets actuels et futurs. Enfin, un grand merci à Nathalie Isac et à Jean-René Coudevylle, qui ont rendu facile et amusante chaque étape de fabrication et de caractérisation.

Je n'oublie pas tous les amis rencontrés à l'université, durant mes stages à l'étranger, à l'Institut d'Électronique Fondamentale, au travers des collaborations et des conférences. Je les remercie de tout cœur pour leur amitié, et leur souhaite de continuer à s'amuser en faisant ce qu'ils aiment le plus dans la vie.

Résumé

Les deux grands défis actuels pour l'optoélectronique térahertz sont d'une part, le besoin de miniaturiser les sources de rayonnement térahertz, et d'autre part, la nécessité d'améliorer leurs performances actuelles. Parmi les sources de rayonnement térahertz existantes, le laser à cascade quantique est à ce jour le meilleur candidat pour remplir ces critères. Afin d'y parvenir, il faut cependant apporter des solutions aux verrous qui limitent la miniaturisation de ces lasers. Le premier est d'ordre fondamental, et tient au fait que les dimensions des cavités photoniques usuelles sont soumises à la limite de diffraction. Le second verrou provient du fait que la recherche de compacité des sources se traduit généralement par la détérioration de leur puissance optique de sortie et de la directionnalité du faisceau laser.

Dans ce manuscrit, une nouvelle famille de résonateurs térahertz métal - semi-conducteur - métal est présentée de façon théorique et expérimentale. Ces dispositifs, inspirés des oscillateurs électroniques LC , ont permis d'atteindre un volume effectif record $V_{\text{eff}} = L_x L_y L_z / \lambda_{\text{eff}}^3 = 5 \cdot 10^{-6}$ [140, 139], où $L_{x,y,z}$ sont les dimensions de la cavité et λ_{eff} est la longueur d'onde de résonance dans le cœur du résonateur (GaAs). Ces résonateurs hybrides photoniques-électroniques ont la particularité d'être libérés de la limite de diffraction dans les trois dimensions spatiales, et bénéficient pour la première fois de toutes les fonctionnalités habituellement réservées aux dispositifs électroniques. Une application aux polaritons inter-sous-bandes térahertz a permis d'obtenir un couplage fort lumière-matière, démontrant que ces résonateurs hybrides conservent leurs "propriétés photoniques".

Le très fort confinement électromagnétique à l'intérieur de tels résonateurs fournit également l'opportunité d'étudier des phénomènes d'électrodynamique quantique, comme l'effet Purcell [4] ou le couplage fort lumière-matière [143, 50]. Les premières démonstrations de lasers THz ultra compacts utilisent des cavités "patch" de quelques dizaines de micromètres carrés [18, 153]. Ces résultats extrêmement stimulants sont bien sûr modérés par la forte divergence, ainsi que la faible puissance du faisceau de sortie. Toutefois, ces points peuvent être adressés séparément en fonction de l'application visée. La divergence du faisceau de sortie est inévitable dès que l'une des trois dimensions du résonateur approche la longueur d'onde effective de la résonance. Elle peut cependant être améliorée en aval grâce à un système optique approprié [91],

ou encore en développant des réseaux phasés (*phased arrays*). La puissance, quant à elle, peut être améliorée en amont en insérant une région active plus performante dans le résonateur [19, 44].

En parallèle de ce travail, la faisabilité d'un laser à cascade quantique térahertz avec une région active extrêmement fine est démontrée expérimentalement. Une étude systématique des caractéristiques du laser en fonction de l'épaisseur de la région active a permis la réduction de l'épaisseur de la région active $L_z = 10 \mu\text{m}$ ($\approx \lambda_{\text{eff}}/2.7$) jusqu'à la valeur record de $L_z = 1.75 \mu\text{m}$ ($\approx \lambda_{\text{eff}}/13$) dans une cavité Fabry-Pérot métal - semiconducteur - métal [138]. Malgré l'augmentation des pertes optiques dans le guide liée à la réduction de L_z , l'effet laser est obtenu au-dessus de la température de l'azote liquide (78 K), même pour la région active la plus fine. La comparaison entre le calcul des pertes dans le guide et la densité du courant de seuil du laser mesurée expérimentalement suggère l'existence d'un large courant de fuite à travers la région active qui persiste au-delà du seuil laser. Ces résultats sont très encourageants pour le développement de nouvelles régions actives plus performantes, ainsi que pour la réduction du temps d'épitaxie par jet moléculaire de la région active des lasers à cascade quantique térahertz. Ils permettent d'envisager le développement de micro-cavités lasers avec des volumes effectifs extrêmement sub-longueur d'onde tels que des cristaux photoniques de dimensions réduites, des micro-cavités "patch" ou des résonateurs hybrides.

Les perspectives de ce travail de thèse sont nombreuses : elles s'étendent de l'électrodynamique quantique en cavité au nanolaser. Les applications potentielles varient énormément en fonction de la configuration des résonateurs hybrides. Ils peuvent être utilisés comme des éléments passifs pour la détection, ou encore comme des éléments actifs tels que des antennes. Enfin, l'utilisation d'une région active fine en combinaison avec un résonateur hybride optimisé devrait permettre d'obtenir un laser térahertz ultra-compact libéré de la limite de diffraction, tout en introduisant pour la première fois la possibilité d'accorder la fréquence du laser en adaptant l'impédance équivalente de la combinaison d'éléments LC.

Ce travail a été réalisé dans le groupe "Quantum Cascade Lasers and Plasmonic Devices" à l'Institut d'Electronique Fondamentale (IEF) de l'Université Paris-Sud, en collaboration avec l'*Institute of Microwaves and Photonics* de l'*University of Leeds*, le groupe "Terahertz" au Laboratoire Pierre Aigrain de l'École Nationale Supérieure, le laboratoire "Matériaux et Phénomènes Quantiques" de l'Université Paris Diderot, et le groupe "CRISTAUX photoniques et METamatériaux" de l'Université Paris-Sud.

Abstract

The development of terahertz (THz) optoelectronics faces two major challenges: first, a need for miniaturization of the existing radiative sources, and second, an improvement of their performances. Amongst the current sources of THz radiation, quantum cascade lasers (QCLs) represent to date the best candidates to match these two requirements.

The integration of compact sources necessarily results in decreased optical output power and laser beam directionality. Therefore, a considerable amelioration of the active region performances must be achieved in parallel with the miniaturization of the dimensions of the photonic cavity. Because the latter are subject to the diffraction limit, which imposes on at least one dimension to be of the order of the effective half-wavelength, further miniaturization of photonic devices requires a new approach.

In this manuscript, a new class of metal-semiconductor-metal (M-SC-M) THz resonators is presented, both theoretically and experimentally. These devices, inspired by electronic LC resonators, allow to achieve a record effective volume $V_{\text{eff}} = L_x L_y L_z / \lambda_{\text{eff}} = 5 \cdot 10^{-6}$, where $L_{x,y,z}$ are the cavity dimensions and λ_{eff} is the effective wavelength resonance inside of the resonator core (GaAs). These devices are intrinsically free from the diffraction limit in the three spatial dimensions, and present the typical functionalities which are usually found only in a resonant electronic circuit. In order to demonstrate that their photonic properties are preserved, these devices have been successfully applied to THz intersubband polariton, demonstrating at the same time that they can be used for strong light-matter coupling.

In parallel to this work, the feasibility of a THz QCL operating at $\lambda = 100$ microns with an extremely thin active region is demonstrated experimentally. A systematic study of the laser characteristics for different thicknesses of the active region (L_z) resulted in the reduction of $L_z = 10$ microns ($\approx \lambda_{\text{eff}}/2.7$) down to the record value of $L_z = 1.75$ microns ($\approx \lambda_{\text{eff}}/13$) in a M-SC-M Fabry-Perot waveguide. Despite a strong increase in optical losses, lasing is maintained above liquid nitrogen temperature (78 K) in the device with thinnest active region. This unexpected behavior is attributed to the existence of a large fraction of the current flowing through the active region at laser threshold being non-radiative. These results are very promising for future developments of efficient THz QCL active regions, as well as for fabrication of micro-

cavity lasers with extremely low effective volumes.

The perspectives of this work extend from cavity quantum electrodynamics to the development of a nanolasers. Potential applications of hybrid resonators can span over a broad range, depending on the chosen configuration. They can be used as passive elements for detection, as well as active elements such as antennas. Finally, the use of a thin active region in combination with an optimized version of these hybrid resonators should allow for the realization of an ultra-compact THz QCL free from the diffraction limit, with the possibility of fine tuning the laser frequency by adapting the equivalent complex impedance combination of the LC elements.

Table des matières

Introduction générale	xv
Le domaine des fréquences térahertz	xvi
DéTECTEURS térahertz	xvii
Sources térahertz	xix
Transitions inter-sous-bandes	xxii
État de l'art des lasers à cascade quantique	xxiii
I Nouveaux résonateurs hybrides photoniques-électroniques pour le TéraHertz	1
1 Photonique pour les résonateurs térahertz	3
1.1 Position du problème	3
1.1.1 Résonateur photonique	3
1.1.2 Miniaturisation des résonateurs térahertz : Verrous fondamentaux	4
1.1.3 Métamatériaux	7
1.1.4 Vers un résonateur hybride	8
1.2 Notions de base pour la photonique	9
1.2.1 Équations aux valeurs propres	9
1.2.2 Ondes planes	10
1.2.3 Propagation d'une onde plane monochromatique	13
1.2.4 Vecteur d'onde complexe	13
1.2.5 Relation de dispersion	14
1.3 Ondes guidées : Méthode de calcul analytique	15
1.3.1 Guide d'onde unidimensionnel	16
1.3.2 Méthode de l'indice effectif	19

1.3.3	Conclusion	21
1.4	Modèles pour le calcul de la fonction diélectrique	21
1.4.1	Modèle de Debye	22
1.4.2	Modèle de Lorentz	23
1.4.3	Modèle de Drude	25
1.5	Permittivité diélectrique des matériaux :	
	Quelques expressions utiles	26
1.5.1	Permittivité diélectrique du GaAs	26
1.5.2	Permittivité diélectrique des métaux dans la littérature	29
1.5.3	Permittivité d'autres matériaux diélectriques	30
2	Propriétés spectrales des microcavités métal-métal THz	31
2.1	Confinement sub-longueur d'onde dans un guide métal-métal THz	32
2.1.1	Confiner la lumière THz	32
2.1.2	Plasmons de surface	32
2.1.3	Confinement sub-longueur d'onde dans une dimension	36
2.1.4	Réflectivité induite par le métal en bord de cavité	39
2.2	Simulation du confinement dans une micro-cavité purement photonique	42
2.2.1	Modes de résonance d'une micro-cavité	42
2.2.2	Facteur de qualité	45
2.2.3	Excitation des modes de cavité par un faisceau incident	46
2.3	Fabrication et caractérisation	48
2.3.1	Fabrication	48
2.3.2	Banc de caractérisation optique	50
2.3.3	Résultats expérimentaux	51
2.4	Limite fondamentale pour le confinement :	
	La limite de diffraction	53
3	Résonateur hybride électronique-photonique sub-longueur d'onde	57
3.1	Résonateurs THz à faible volume effectif	57
3.1.1	Origine de l'oscillation électromagnétique dans une cavité sub-longueur d'onde	57
3.1.2	Le résonateur <i>LC</i> THz dans la littérature	59
3.1.3	Vers un véritable résonateur <i>LC</i> fonctionnel pour le THz	62
3.2	Nouveau résonateur hybride THz	64
3.2.1	Nouveau mode fondamental	64
3.2.2	Fabrication et caractérisation	67
3.2.3	Résultats expérimentaux	67
3.2.4	Conclusions et perspectives	68
3.3	Application à l'électrodynamique quantique	71
3.3.1	Polaritons inter-sous-bande THz	71

3.3.2	Résultats expérimentaux	73
3.4	Résonateur hybride : exploitation des fonctionnalités LC	77
3.4.1	Principe	77
3.4.2	Résultats expérimentaux	81
3.4.3	Fabrication des résonateurs "Two loops"	81
3.4.4	Caractérisation du résonateur "Two loops" d'épaisseur 3 μm	82
3.4.5	Conclusion	84
3.5	Modèle analytique simple LC	86
3.6	Simulations "full wave" avec COMSOL	90
3.7	Perspectives	94
3.7.1	Amélioration du couplage entre l'onde incidente et le résonateur hybride	95
3.7.2	Généralisation du principe du résonateur hybride	95
3.7.3	Vers le nanolaser THz	95
 II Vers la miniaturisation des Lasers à Cascade Quantique Téra-		
hertz		97
 4	Notions de base pour les lasers à cascade quantique THz	99
4.1	Guides d'onde Fabry-Pérot pour les QCLs THz	101
4.1.1	Facteur de confinement et pertes optiques	101
4.1.2	Comparaison entre le guide SP et le guide MM	104
4.1.3	Conclusion	107
4.2	Propriétés électroniques et optiques des semiconducteurs III-V	109
4.2.1	Structure cristalline	109
4.2.2	Structure de bande électronique	111
4.2.3	Densité d'états à l'équilibre et porteurs de charge extrinsèques	113
4.3	Structure électronique des hétérostructures	114
4.3.1	Approximation de la fonction enveloppe	115
4.3.2	Méthode numérique de résolution Schrödinger-Poisson	116
4.4	Transitions inter-sous-bandes	117
4.4.1	Transitions radiatives	117
4.4.2	Transitions non radiatives	120
4.5	Transport électronique et gain optique dans la région active	126
4.5.1	Transport électronique tunnel résonant	128
4.5.2	Densité de courant à travers une structure à deux niveaux	131
4.5.3	Équations de population pour les lasers à cascade quantique	132
4.5.4	Gain dans la région active	136

5 QCLs THz avec une région active extrêmement sub-longueur d'onde	139
5.1 Conception de la région active	140
5.1.1 Modèle phonon-résonant	140
5.1.2 Alignement radiatif	142
5.1.3 Alignement parasite	144
5.1.4 Effet du dopage	147
5.2 Étude théorique de l'effet de la réduction de l'épaisseur de la région active	147
5.2.1 Choix de la région active	147
5.2.2 Pertes optiques dans un guide métal-métal Fabry-Pérot	149
5.2.3 Lien avec la densité de courant de seuil	153
5.3 Résultats expérimentaux	154
5.3.1 Caractéristiques de la région active de 10 μm d'épaisseur	154
5.3.2 Réduction de l'épaisseur de la région active	162
5.3.3 Laser ultra-fin et validation du modèle	165
5.4 Perspectives d'amélioration des performances des QCLs THz	168
5.4.1 Systèmes de matériaux et masse effective	169
5.4.2 Performances en température	172
5.4.3 Conclusion	174
Conclusion générale et Perspectives	175
Conclusion générale et Perspectives	177
Bibliographie	181
Bibliographie	183

Introduction générale

Le domaine des fréquences térahertz

La gamme de fréquences térahertz (THz) désigne la région du spectre électromagnétique située entre la plage de fonctionnement des systèmes électroniques (radio fréquences, micro-ondes), et celle des systèmes optiques (infrarouge, lumière visible). Elle est généralement définie comme étant la gamme de fréquences comprises entre 300 GHz et 30 THz, c'est-à-dire correspondant aux longueurs d'onde comprises entre 1000 μm et 10 μm . Les principales grandeurs physiques associées au térahertz sont rappelées dans la table 1.

La désignation *térahertz* pour cette plage de fréquences n'est que très récente. Historiquement, elle était souvent appelée *lointain-infrarouge*, ou encore *ondes sub-millimétriques*. Récemment la terminologie *rayons T* ("*T-Rays*") est apparue par analogie avec les *rayons X*, principalement dans le domaine de l'imagerie térahertz.

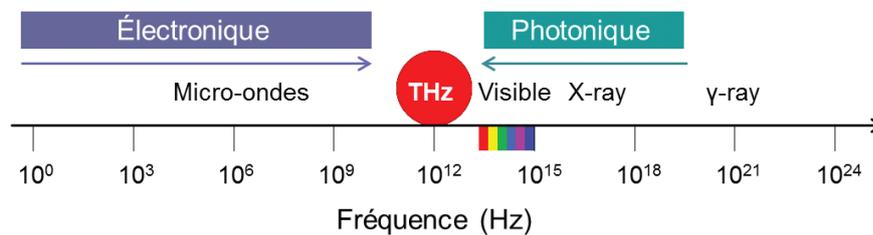


FIGURE 1 – Spectre électromagnétique. Le domaine fréquentiel térahertz se situe entre les régions de prédilection de l'électronique et de la photonique.

Grandeurs physiques		
Fréquence	ν	$1 \cdot 10^{12}$ Hz
Temps	$\tau = 1/\nu$	1 ps
Longueur d'onde	$\lambda = c/\nu$	300 μm
Nombre d'onde	$\tilde{\nu} = 1/\lambda$	33.3 cm^{-1}
Énergie	$E = h\nu$	4.1 meV
Température	$T = E/k_B$	48 K

TABLE 1 – Principales grandeurs physiques associée à la fréquence $\nu = 1$ THz.

L'une des caractéristiques les plus remarquables du rayonnement térahertz est qu'un grand nombre de matériaux sont transparents dans cette gamme spectrale, tandis qu'il est fortement absorbé par l'eau et quasiment totalement réfléchi par le métal. Le rayonnement THz peut ainsi traverser la plupart des matériaux diélectriques secs qui sont opaques aux rayonnements du visible et du proche infra-rouge, faisant

de l'imagerie térahertz une technique complémentaire aux techniques traditionnelles d'imageries pour les domaines de la santé, de la défense et de la communication.

La seconde spécificité du rayonnement térahertz tient au fait que la plupart des énergies de vibration et de rotation des molécules appartiennent à cette gamme de fréquences. Ces résonances se manifestent par exemple par des raies d'absorption dans un spectre en transmission. Chaque molécule possède ainsi une signature spectrale unique qui permet de l'identifier sans ambiguïté. Grâce à cette spécificité, la spectroscopie térahertz s'est révélée être une méthode de grand intérêt pour la détection de gaz toxiques, la surveillance atmosphérique, ou encore l'astronomie.

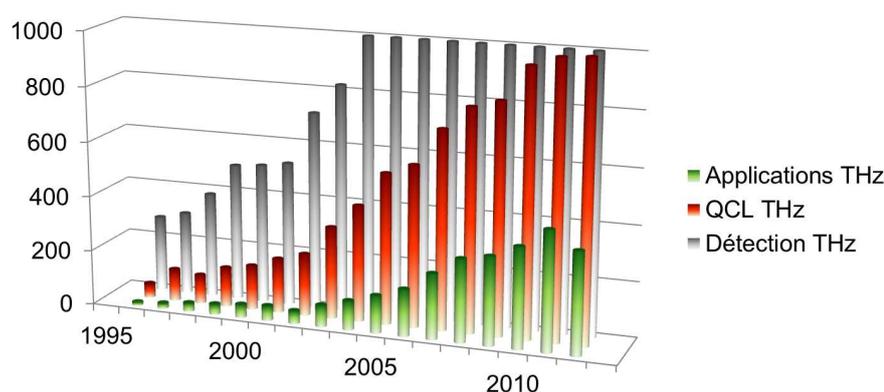


FIGURE 2 – État des publications scientifiques concernant la détection, les lasers à cascade quantique et les applications dans le domaine fréquentiel térahertz (base de données *Google Scholar*, logiciel d'analyse *Publish or Perish* [115]).

Aujourd'hui encore, ce domaine spectral reste fortement sous-développé, principalement à cause du manque de sources puissantes et compactes. Il est cependant en expansion rapide depuis une quinzaine d'années, et les applications potentielles sont nombreuses. Pour illustrer cette tendance, le nombre de publications annuelles concernant ces problématiques est reporté dans la figure 2.

Détecteurs térahertz

Comme le montre la table 1, l'énergie associée aux photons THz est très faible (typiquement inférieure à 20 meV). Cela signifie que le bruit lié au rayonnement thermique à température ambiante est le principal facteur limitant la sensibilité des détecteurs.

Historiquement, le système de détection le plus fréquemment utilisé est la détection hétérodyne. Dans ce cas, la détection THz est possible grâce à une conversion de fréquence vers les micro-ondes (150 GHz) où des amplificateurs à faible bruit sont

disponibles. Le paramètre généralement utilisé comme figure de mérite est l'écart minimum de température détectable δT . Ce paramètre est donnée par :

$$\delta T = \frac{T_r}{\sqrt{B_p \tau}} \quad (1)$$

où T_r est le bruit thermique, B_p la bande passante, et τ le temps d'intégration. Plus le temps d'intégration est long, meilleure est la sensibilité du système. Le mécanisme de conversion vers les micro-ondes utilise généralement un mixeur basé sur une diode Schottky, qui exploite une forte non-linéarité des caractéristiques électriques. À température ambiante, pour un temps d'intégration d'une seconde et pour une bande passante de 1 GHz, l'écart minimum de température détectable est $\delta T = 0.05$ K à $\nu = 500$ GHz, et $\delta T = 0.5$ K à $\nu = 2.5$ THz.

La sensibilité des détecteurs fonctionnant à température cryogénique est bien meilleure. Il existe plusieurs type de détecteurs à température cryogénique, que l'on peut classer en deux catégories : les détecteurs utilisant des systèmes hybrides supra-conducteur /semiconducteur ou supra-conducteur /isolant, et les systèmes de type bolomètre.

Les détecteurs SIS (Supra-conducteur /Isolant /Supra-conducteur) fonctionnent sur le même principe que les diodes Schottky. Dans ces systèmes, la limite de sensibilité est gouvernée par le principe d'Heisenberg, et la fréquence limite est liée au gap supra-conducteur. Le plus souvent, un système à base de Niobium (Nb-Al-oxide-Nb) est utilisé. La température critique (T_c) est de 9.3 K, ce qui correspond à une fréquence maximale d'utilisation de $\nu = 1.35$ THz environ. D'autres matériaux, comme le niobium-nitride ($T_c = 16$ K), ou les supra-conducteurs à haute température critique du type YBaCuO ($T_c > 90$ K), ont des fréquences limites d'opération plus élevées, cependant la qualité des jonctions tunnels doit encore être améliorée.

Plus récemment, le bolomètre à électron chaud (HEB, *Hot Electron Bolometer*) est apparu comme une alternative aux détecteurs SIS pour la gamme THz. Ils consistent en un micro-pont de supra-conducteur (Niobium, ou YBa- CuO) qui présente une réponse thermique à la radiation THz. Ces HEBs peuvent avoir une réponse très rapide pouvant atteindre quelques gigahertz.

Il existe une autre famille de détecteurs THz : les détecteurs directs. Ceux-ci tendent à remplacer les systèmes hétérodynes pour les applications ne nécessitant pas une très forte résolution spectrale. On peut citer par exemple, les diodes Schottky en GaAs de taille réduite, des bolomètres fonctionnant sur une absorption directe du rayonnement THz qui induit un changement de résistivité, les microbolomètres, les cellules de Golay, qui comportent une chambre remplie d'un gaz et qui détecte la variation de volume grâce à un miroir mobile.

Les détecteurs directs prennent différentes formes : les plus courants sont les bolomètres à base de Silicium, Germanium ou encore InSb. Ils sont refroidis à l'Hélium

liquide. On peut aussi citer certains détecteurs infrarouge qui fournissent une réponse dans le térahertz, comme par exemple les pyroélectriques, ou encore les détecteurs à base de Germanium dopé au Gallium stressés mécaniquement. Plus de détails sur les détecteurs THz peuvent être trouvés dans l'article de revue [130] et les références associées.

Durant cette thèse, j'ai utilisé principalement trois détecteurs THz : un bolomètre Si refroidi à l'Hélium liquide, une cellule de Golay, et un DTGS dans l'infra-rouge lointain (Far-IR) (détecteur interne du spectromètre à transformée de Fourier (FTIR)). Les principales caractéristiques techniques sont reportées dans la table 2.

Détecteur	D^*	T_{\max}	Avantage	Inconvénient
Bolomètre Si	10^{12}	4 K	Haute sensibilité	Hélium liquide
Cellule de Golay	10^{10}	300 K	Bonne sensibilité	-
DTGS Far-IR	$2 \cdot 10^8$	300 K	Détecteur interne du FTIR	Faible sensibilité

TABLE 2 – Principales caractéristiques techniques des trois détecteurs utilisés au cours de cette thèse. D^* représente la détectivité (en $\text{cmHz}^{1/2}\text{W}^{-1}$), et T_{\max} la température maximale de fonctionnement.

Sources térahertz

On désigne souvent la gamme des fréquences THz par l'expression *gap térahertz* en référence au manque de sources performantes dans cette région spectrale. Durant une longue période, les dispositifs électroniques semiconducteurs sont restés hors de la région des longueurs d'onde $\lambda = 0.2 - 2$ mm, les premiers émetteurs dans cette gamme étant inefficaces ou trop difficiles à mettre en œuvre.

La course au développement de sources radiatives dans cette gamme n'a réellement débuté qu'à la fin du XX^e siècle. La figure 3 répertorie les différents types de sources térahertz existant en 2005 en fonction de leur puissance et de leur longueur d'onde d'émission. Cette figure illustre et justifie l'expression *gap térahertz*, qui est aujourd'hui encore d'actualité, malgré les différents types de lasers THz développés.

Le laser à électrons libres (*free electron laser*) (FEL) est un type de laser qui fonctionne en utilisant des électrons qui ne sont pas liés à un atome. Les électrons sont d'abord accélérés grâce à un accélérateur de particules, puis ils traversent un onduleur qui permet de modifier leur trajectoire en ajoutant une composante oscillatoire. La radiation ainsi émise par rayonnement synchrotron est à la fois cohérente, intense et sa longueur d'onde est accordable dans une très large gamme spectrale qui s'étend des micro-ondes jusqu'aux rayons X durs, en passant par le THz. Cette source de rayonnement THz est très performante, mais les installations de grande dimension nécessaires à son fonctionnement sont prohibitives.

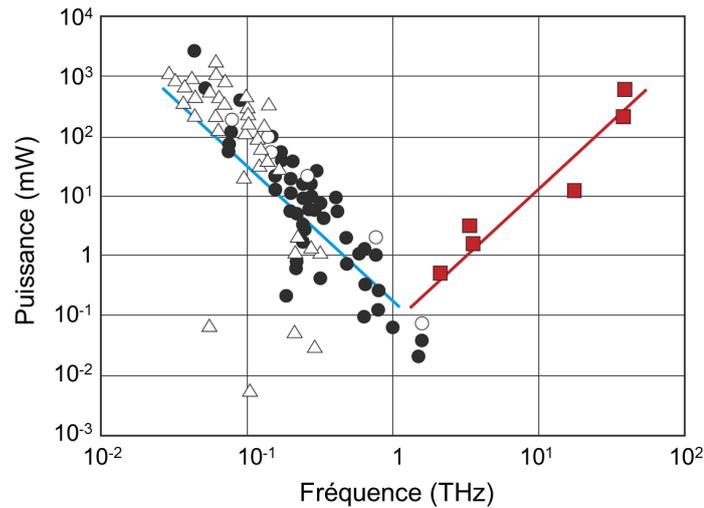


FIGURE 3 – *Gap térahertz* : expression qui désigne le manque de sources performantes dans la région spectrale du térahertz. Carrés rouges pleins : lasers à cascade quantique. Ronds noirs pleins : Convertisseurs de fréquence. Triangles noirs vides : Autres sources électroniques. Ronds noirs vides : Sources cryogéniques. Ligne bleue : $P \propto \nu^{-2}$. Ligne rouge : $P \propto \nu^2$. [26].

Les lasers à gaz sont la source de rayonnement THz la plus couramment utilisée. Ils sont principalement constitués de deux lasers. Le premier est généralement un laser CO_2 , délivrant typiquement 50 W de puissance en continu à une longueur d'onde de 10 μm environ. Le faisceau issu de ce premier laser est à son tour injecté dans un second laser à gaz. Le type de gaz utilisé dans ce dernier déterminera la fréquence d'émission. Par exemple le plus courant, à base de Méthanol, permet de générer une émission à $\lambda = 118.8 \mu\text{m}$ avec une puissance de sortie pouvant atteindre la centaine de milliwatts.

La génération de radiation THz peut également être obtenue en utilisant une multiplication non-linéaire de fréquence à partir d'un oscillateur fonctionnant dans les micro-ondes (typiquement autour de 100 GHz). La multiplication de fréquence utilise des chaînes de doubleurs ou de tripleurs Schottky. Cette technique de génération de radiation THz est efficace pour les fréquences inférieures à 0.5 THz, cependant la puissance de sortie décroît proportionnellement à la racine carrée de la fréquence. Ainsi, à la fréquence $\nu = 1$ THz, la puissance générée est d'environ 30 μW , ce qui est suffisant pour un oscillateur local seulement.

Récemment, une méthode alternative basée sur un transistor à électrons à haute mobilité a été démontrée [78]. L'interprétation proposée par les auteurs de ce phénomène d'émission est qu'elle provient d'une instabilité du courant qui génère une oscillation de plasma dans le canal du transistor (instabilité de Dyakonov- Shur).

Les tubes laser peuvent quant à eux générer plusieurs milliwatts de puissance jusqu'à la fréquence de 1.2 THz. Cependant, ils ne fonctionnent que sous fort champ magnétique. Le carcinotron (*backward wave oscillator*) (BWO) en est un exemple. Ces sources offrent une grande accordabilité en fréquence, mais leur durée de vie limitée rend leur utilisation peu fréquente.

La technique du photo-mélange consiste à illuminer une antenne photoconductrice très rapide par deux lasers dont la différence de fréquence correspond à la fréquence THz désirée. Cette technique, facile à mettre en œuvre, produit une émission THz spectralement étroite et fonctionne à température ambiante. La fréquence THz est accordable par modification de la fréquence de l'un des deux lasers sources [98]. Toutefois, le rendement est assez faible : les puissances typiques sont de l'ordre de quelques microwatts pour des fréquences inférieures à 1 THz, et inférieures à 1 μ W à 1 THz.

En imagerie, une autre technique est souvent utilisée pour générer du rayonnement THz large bande : la spectroscopie dans le domaine temporel (*time domain spectroscopy*) (TDS). Dans ces systèmes, un cristal non-linéaire ou une antenne photoconductive est soumis(e) à une impulsion ultra-courte. La largeur spectrale de bande est directement déterminée par la largeur temporelle du pulse. La puissance de sortie typique est comprise entre le nanowatt et le microwatt. Pour plus de précisions, on pourra se référer au livre de K. Sakai [120].

Ainsi durant une longue période, les lasers p-Ge ont été les seuls lasers semiconducteurs fonctionnant dans la gamme spectrale THz. Dans ces systèmes, l'effet laser provient d'une inversion de population en bande de valence qui se produit par l'application d'un champ magnétique et d'un champ électrique croisés. La puissance crête peut atteindre plusieurs watts et le gain laser est compris entre 1 et 4 THz. Toutefois, la nécessité de forts champs électrique et magnétique est une contrainte qui limite fortement leur utilisation.

C'est en 2001 que le premier laser à cascade quantique fut démontré dans la gamme de fréquences térahertz ($\nu = 4.4$ THz) [80]. Les premiers lasers à cascade quantique THz produisaient seulement quelques milliwatts de puissance crête en régime pulsé, et leur température maximale d'opération atteignaient à peine quelques dizaines de Kelvins. Aujourd'hui, ils couvrent la gamme spectrale 0.8 – 5.0 THz. Le record actuel de température est de 199.5 K en régime pulsé [45] et de 117 K en régime continu [81]. De plus, sous fort champ magnétique, les lasers à cascade quantique peuvent opérer à plus haute température, avec un record à $T = 225$ K à la fréquence $\nu = 3$ THz [151], sans toutefois atteindre le fonctionnement à température ambiante. Le principe de fonctionnement de ces lasers repose sur des transitions inter-sous-bandes. Ils représentent aujourd'hui les meilleurs candidats pour l'émission laser dans la gamme térahertz.

Transitions inter-sous-bandes

Dans les cristaux semiconducteurs, un puits quantique peut être obtenu par un empilement de trois couches planes de différents matériaux. Dans le cas le plus simple des puits quantiques de type I, la bande de conduction et la bande de valence du matériau central se situent à l'intérieur du gap du matériau qui compose les deux couches externes. Les bandes de conduction et de valence présentent alors un profil de puits quantique pour les électrons (e^-) en bande de conduction, et pour les trous (h^+) en bande de valence. Des niveaux d'énergie confinés, appelés également *sous-bandes*, apparaissent dans la direction perpendiculaire au plans des couches. Une transition inter-sous-bande (*inter-subband*) (ISB) est une transition énergétique d'un électron entre deux sous-bandes de la bande de conduction, ou d'un trou entre deux sous-bandes de la bande de valence. Ces transitions sont dites *uni-polaires* car elles ne mettent en jeu qu'un seul type de charge (e^- ou h^+). Ce phénomène peut également se manifester dans les fils quantiques (confinement 2D) ainsi que dans les boîtes quantiques (confinement 3D). Une transition interbande est, quant à elle, une recombinaison entre un électron en bande de conduction et un trou en bande de valence. La plus grande majorité des diodes électroluminescentes (LEDs) et des lasers à base de semiconducteurs font intervenir des transitions interbandes.

On doit la première observation du phénomène transition ISB à *Esaki et Tsu* dans un super-réseau.[39] Un an plus tard, *R. F. Kazarinov et R.A. Suris* ont proposé une structure qui permet l'amplification du champ électromagnétique émis par un super-réseau.[74] Ce n'est qu'en 1985 qu'a été observée la première absorption ISB [156], suivie, en 1986, par la première observation d'un mécanisme de transport tunnel résonnant par *F. Capasso, K. Mohammed et A. Cho*. [17] Le transport tunnel résonnant correspond à la transition des électrons entre deux niveaux électroniques, chacun des niveaux étant confinés dans un puits quantique différent, de telle sorte qu'ils aient la même énergie, à l'énergie de couplage près. C'est la brique de base pour tous les phénomènes de transport électronique dans les structures ISB.

Le photo-détecteur infra-rouge à puits quantique (*quantum well infrared photodetector*) (QWIP), démontré pour la première fois en 1987 [88], est un détecteur infrarouge exploitant une transition ISB. La figure 4 illustre le principe général du QWIP. Dans cette structure, un puits quantique est conçu dans lequel deux niveaux électroniques E_1 et E_2 sont confinés. Le niveau excité E_2 est assez proche en énergie du continuum E_b . Sous l'application d'un champ électrique, le niveau excité E_2 se couple au continuum E_b par effet tunnel. Le même principe peut être appliqué au transport de trous.

Si le système est dopé n (excès d'électrons), alors ceux-ci vont principalement peupler le niveau fondamental du puits quantique. Un photon d'énergie $h\nu$ résonnant avec l'écart énergétique entre les deux niveaux ($h\nu = E_2 - E_1$) peut être absorbé, et dans

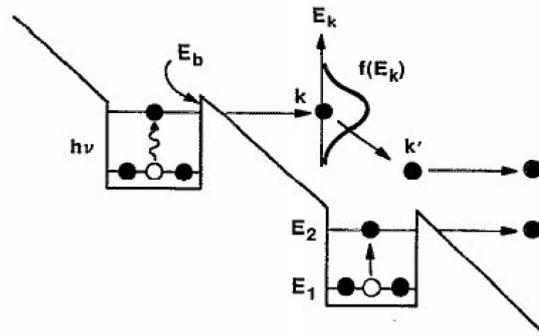


FIGURE 4 – Principe général d'un QWIP [87].

ce cas, un électron sur le niveau E_1 sera excité vers le niveau d'énergie supérieure E_2 . Il existe alors une probabilité non nulle pour l'électron de passer par transport tunnel dans le continuum, c'est-à-dire de générer un courant électrique, qui pourra alors être mesuré. L'utilisation de plusieurs puits quantiques en série permet d'augmenter le courant généré dans le QWIP. De plus ample détails sur les QWIPs peuvent être trouvés dans l'article de revue par *B. F. Levine* [87]. Des matrices de QWIPs sont actuellement utilisées dans des caméras thermiques à très haute sensibilité que l'on peut trouver dans le commerce.

État de l'art des lasers à cascade quantique

Le premier laser à cascade quantique a été démontré par Jérôme Faist en 1994 à *Bells Labs* dans le groupe de Federico Capasso [42]. Ce premier laser à cascade, opérant à la longueur d'onde $\lambda = 4.2 \mu\text{m}$, ne fonctionnait qu'à température cryogénique, en mode pulsé et avec une densité de courant de seuil laser élevée ($J_{\text{th}} = 14 \text{ kA/cm}^2$). L'inversion de population est obtenue grâce à la diffusion électron - phonon LO, qui est un processus très rapide.

À l'heure actuelle, dans l'infra-rouge moyen (Mid-IR), les lasers à cascade quantique couvrent la gamme spectrale de $2.75 \mu\text{m}$ jusqu'à $24 \mu\text{m}$ [33, 24]. Dans cette gamme, de nombreux lasers fonctionnent à température ambiante, en régime continu, avec des puissances optiques pouvant atteindre quelques Watt et des rendements à la prise qui montent jusqu'à 28 % à l'azote liquide. La maturité des lasers à cascades fonctionnant dans l'infra rouge moyen est suffisante pour l'industrie et ils sont largement commercialisés.

Dans la gamme spectrale du THz, le premier laser à cascade quantique a été démontré en 2002 par Ruedeger Köhler, à la Scuola Normale Superiore de Pise, dans le groupe d' Alessandro Tredicucci [80]. À l'heure actuelle, les lasers à cascade THz couvrent la gamme de fréquences de 1.2 à 4.9 THz ($250 \mu\text{m}$ à $61 \mu\text{m}$) [152, 85] (sans champ magnétique). La température maximale de fonctionnement est $T = 199.5 \text{ K}$

[44]. La puissance crête maximale est de 248 mW à 10 K [160].

Au cours de ma thèse, je me suis attachée à développer des solutions aux deux grands défis actuels pour l'optoélectronique THz, qui sont d'une part, le besoin de miniaturiser ces dispositifs en vue de leur intégration, d'autre part la nécessité d'améliorer leurs performances actuelles.

Première partie

Nouveaux résonateurs hybrides photoniques-électroniques pour le Térahertz

Photonique pour les résonateurs térahertz

Dans cette première partie, nous nous intéresserons aux propriétés spectrales des résonateurs photoniques passifs, qui pourront par la suite être utilisés en fonction de leurs propriétés pour des applications diverses, allant du détecteur à la source laser, en passant par l'électrodynamique quantique.

1.1 Position du problème

1.1.1 Résonateur photonique

Un résonateur photonique permet de confiner la lumière dans une, deux, ou trois dimensions de l'espace. Il est généralement composé d'un diélectrique de haut indice de réfraction, le cœur, entouré d'un milieu de plus faible indice de réfraction, la gaine ou le substrat, et est utilisé pour confiner la lumière dans la région active du dispositif. L'exemple de guide d'onde le plus courant est la fibre optique. Bien qu'elle soit un très bon guide pour les fréquences du domaine des télécommunications ($\lambda = 1.3 - 1.5 \mu\text{m}$), son utilisation est inappropriée pour les fréquences THz car, pour obtenir un confinement satisfaisant, les épaisseurs de la région active et de la gaine devraient être cent fois plus grandes ($\lambda \sim 100 \mu\text{m}$). Nous verrons dans la partie suivante qu'il est l'un des deux éléments fondamentaux constitutifs d'un laser.

Dans le domaine des lasers à cascade quantique (*quantum cascade lasers*) (QCLs) térahertz, la cavité Fabry-Pérot est probablement le résonateur photonique le plus simple à mettre en œuvre. Cette cavité est en général composée d'un matériau diélectrique pris entre deux couches d'indice de réfraction plus faible, façonné en un ridge dont les extrémités agissent comme des miroirs semi-réfléchissants. Pour concevoir

des QCLs THz, il est préférable de remplacer le matériau semiconducteur de gaine par une couche métallique (cf. Chap.2).

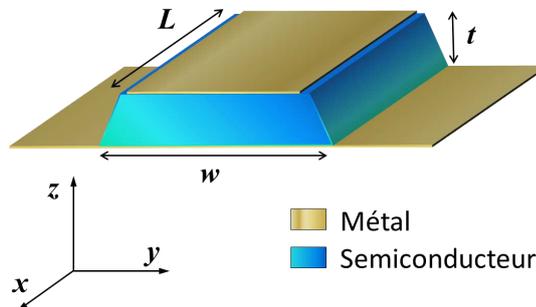


FIGURE 1.1 – Schéma d'une cavité Fabry-Pérot métal-métal. Dans le domaine fréquentiel THz ($\lambda \sim 100 \mu\text{m}$), les longueurs caractéristiques du guide sont $L = 2 \text{ mm}$, $w = 200 \mu\text{m}$ et $t = 10 \mu\text{m}$.

Les deux principaux types de cavité Fabry-Pérot utilisés pour les lasers THz sont d'une part, le guide plasmonique, dans lequel un mode TM est simplement guidé à l'interface entre la région active et une couche métallique, et d'autre part le guide métal-métal, constitué de deux couches métalliques en contact respectivement avec les surfaces inférieure et supérieure du cœur du guide (cf. Fig.1.1). On pourra se référer à la seconde partie pour une étude des propriétés optiques de ces guides d'onde.

1.1.2 Miniaturisation des résonateurs térahertz : Verrous fondamentaux

L'objectif à long terme du travail présenté dans cette première partie est de libérer les résonateurs photoniques de la limite de diffraction. Une telle avancée permettrait de bénéficier des avantages généralement attribués aux domaines actuellement distincts de l'optique et de l'électronique. Cela permettrait de concevoir un laser térahertz extrêmement compact. Un tel laser se comporterait comme une source ponctuelle de rayonnement laser térahertz [102].

Du point de vue des applications, la taille des laser à cascade quantique (*quantum cascade laser*s) (QCLs) actuelle -quelques centaines de micromètres carrés- les rend relativement difficiles à intégrer dans des circuits photoniques [155]. Par ailleurs, le très fort confinement électromagnétique à l'intérieur de tels résonateurs fournit également l'opportunité d'étudier des phénomènes d'électrodynamique quantique, comme l'effet Purcell [4] ou le couplage fort lumière-matière [143, 50]. Les premières démonstrations de lasers THz ultra compacts utilisent des cavités "patch" de quelques dizaines de micromètres carrés [18, 153]. Ces résultats extrêmement stimulants sont bien sûr modérés par la forte divergence, ainsi que la faible puissance du faisceau de

sortie, mais ces points pourront être adressés séparément en fonction de l'application visée. Par exemple, la puissance pourrait être améliorée en amont en insérant une région active plus performante dans le résonateur [82, 19, 44], tandis que la divergence, inévitable dès que l'une des trois dimensions du résonateur approche la longueur d'onde effective de la résonance, pourra être améliorée en aval grâce à un système optique approprié [91], ou encore en développant des réseaux à commande de phase (*phased arrays*).

Confiner la lumière de façon sub-longueur d'onde dans les trois dimensions de l'espace est en principe impossible pour une cavité photonique à cause de la limite de diffraction. En effet, l'équation à satisfaire pour une onde électromagnétique confinée entre deux miroirs (cf. équation 2.21 page 38) impose une condition de phase qui se traduit par la nécessité qu'au moins l'une de ses trois dimensions soit au moins égale à une demi longueur d'onde effective. Il existe des solutions pour contourner cette limitation géométrique, en travaillant sur la phase du faisceau réfléchi[125]. Néanmoins, on pourra noter que dans le cas où un miroir de Bragg est utilisé pour induire un déphasage de l'onde à la réflexion, l'espace occupé par le miroir lui-même est non-négligeable.

Il n'existe aucun exemple à ce jour de laser térahertz qui soit strictement sub-longueur d'onde dans les trois dimensions de l'espace. Quelques dispositifs lasers parmi les plus intéressants en terme de confinement sont reportés dans la figure 1.2. Les références (a-f) correspondent à des dispositifs tirés de la littérature caractérisés par un très faible volume modal. Ils sont classés selon deux catégories en fonction de leur mode de pompage, électrique (cercles) ou optique (triangles). La longueur d'onde considérée est la longueur d'onde effective $\lambda_{\text{eff}} = \frac{\lambda_0}{n_{\text{eff}}}$, où λ_0 est la longueur d'onde de résonance et n_{eff} , l'indice effectif "vu" par le mode.

Le long de l'axe des abscisses, la dimension la plus grande du résonateur, par exemple le diamètre dans le cas d'un micro-disque métallique[18], est comparée à la limite de diffraction Λ_{eff} . Le long de l'axe des ordonnées, le volume total de la cavité $V_{\text{tot}} = \prod_i L_i$ est comparé à Λ_{eff}^3 . La zone grisée correspond à la partie non physique du graphe. La condition imposée par la limite de diffraction sur la géométrie du résonateur est donc remplie lorsque :

$$\frac{L_i}{\Lambda_{\text{eff}}} \geq 1 \quad (1.1)$$

pour une direction donnée i .

Dans le graphe, la condition imposée par la limite de diffraction est respectée pour tous les dispositifs figurant à droite de la ligne pointillée bleue (zone blanche). Ces dispositifs appartiennent ainsi à la classe des dispositifs *purement photoniques*. Les dispositifs qui échappent à cette condition appartiennent à la zone colorée en jaune. L'on peut ainsi remarquer que seul le spaser[103] viole cette condition, ce qui n'est

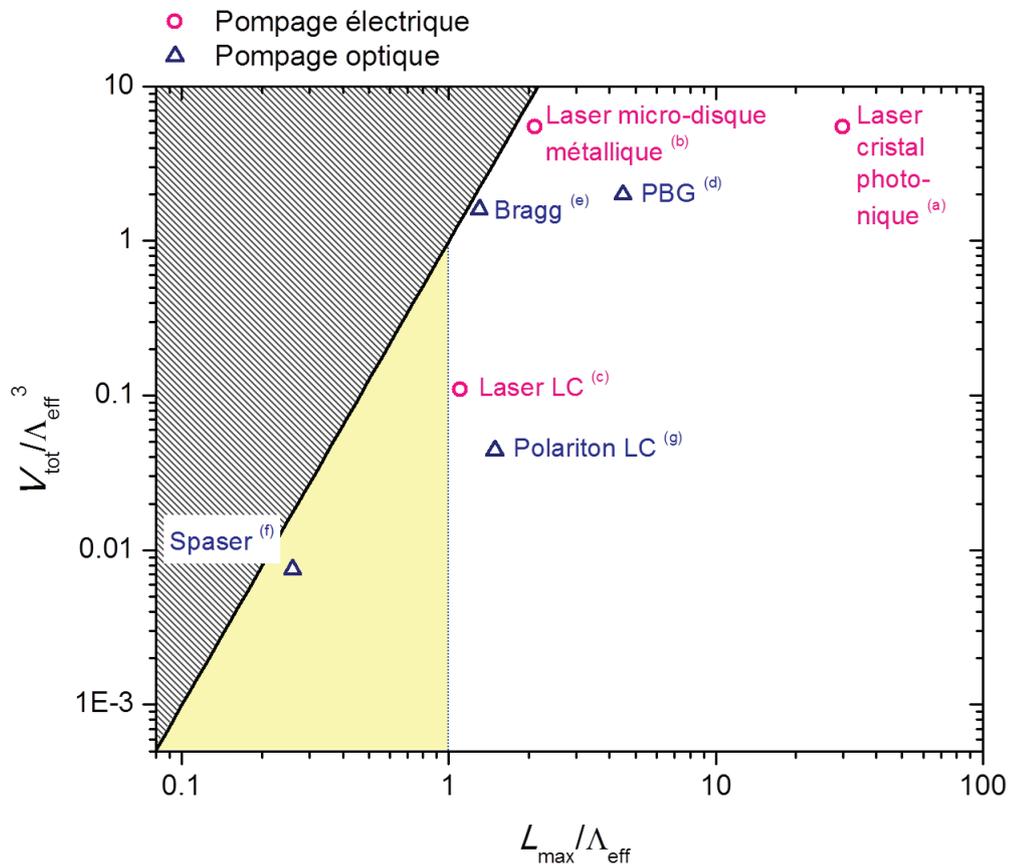


FIGURE 1.2 – Classement des dispositifs lasers qui présentent de très faibles volumes effectifs, en comparant leur volume total V_{tot} ainsi que la plus grande dimension L_{max} à la limite de diffraction Λ_{eff} . Lasers pompés électriquement : (a) laser à cristal photonique monomode [111], (b) micro-disque laser métal-métal [18], (c) laser dit *LC laser* [153]. Lasers pompés optiquement : (d) laser opérant sur le mode de défaut de bande interdite (PBG) d'un cristal photonique [104], (e) nano-cavité laser utilisant un réflecteur de Bragg radial [125], (f) spaser fonctionnant sur le régime plasmonique [103], (g) : polariton dit *LC polariton* [52]. Les dispositifs fonctionnant sur un régime purement photonique apparaissent dans la zone blanche.

pas étonnant car en fait, il opère sur le régime plasmonique, est n'appartient pas, de fait, à la classe des dispositifs *purement photoniques*.

1.1.3 Métamatériaux

Les métamatériaux sont des matériaux artificiels généralement composés d'un ensemble de petits éléments métalliques disposés périodiquement à l'interface de deux matériaux diélectriques, qui peut être vu comme un ensemble de méta-atomes [166]. Si l'on éclaire cet ensemble avec une lumière dont la longueur d'onde est suffisamment grande devant la taille de ces éléments, l'ensemble se comporte comme un matériau effectif composé de méta-atomes qui lui confèrent des propriétés exotiques [113]. Nombre de phénomènes intrigants et d'applications astucieuses, tels que la réfraction négative [114], dérivent de ces métamatériaux.

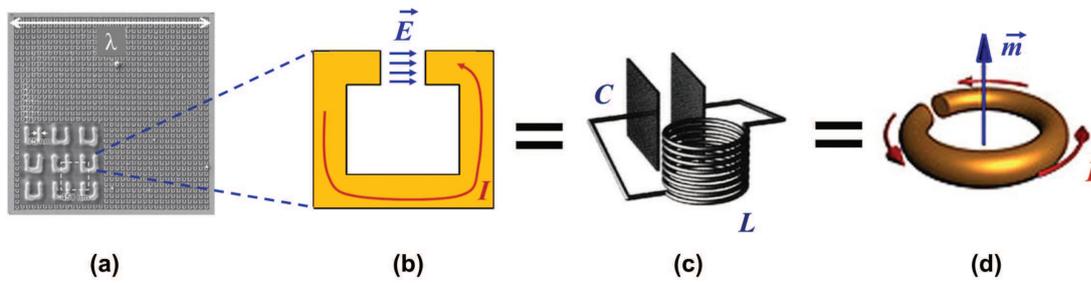


FIGURE 1.3 – Illustration du modèle LC utilisé pour expliquer la résonance linéaire des métamatériaux. (a) Image SEM d'un ensemble de SRRs opérant à $\lambda = 16 \mu\text{m}$ [38]. (b) Schéma de principe d'un SRR. (c,d) Schémas comparant un SRR à un résonateur LC (c), et à un méta-atome (d).

Le plus simple exemple de méta-atome est le SRR. Comme son nom l'indique, un SRR est un anneau métallique circulaire ouvert, à la surface duquel un courant peut osciller, induisant un moment magnétique parallèle à l'axe de l'anneau à la manière d'un solénoïde à une spire. Une oscillation de charges se produit autour de l'espace vide entre les deux extrémités du fil qui se font face, générant un champ électrique dirigé perpendiculairement aux lignes équipotentielles, comme aux bornes d'un condensateur (cf. Fig.1.3(b)). Ses dimensions extrêmement sub-longueur d'onde ($\lambda_{eff}/10$) permettent de travailler dans l'approximation des régimes quasi-stationnaires (ARQS) [137], et ainsi de développer des modèles analytiques simples permettant une meilleure compréhension des résonances magnétiques des SRRs. [97, 5, 128] Ainsi, ces résonateurs peuvent être vus individuellement comme un circuit analogique composé d'une ou plusieurs résistances, inductances et capacités (cf. Fig.1.3(c)).

Historiquement, la gamme de fréquences de prédilection des métamatériaux correspond aux fréquences radio (GHz). Ce sont généralement des objets planaires, dont la cellule élémentaire peut occuper jusqu'à plusieurs centimètres carrés [129].

Des géométries 3D ont également été réalisées avec succès et ont permis d'obtenir une micro-bobine 3D opérant à $\lambda = 1 - 6$ mm [154], un polariseur circulaire compact à $\lambda = 3.5 - 7.5$ μm [48], ou encore un indice de réfraction négatif à $\lambda = 1.2 - 1.8$ μm [149].

Des SRRs ont récemment été démontrés théoriquement et expérimentalement dans la gamme THz [164, 90, 21, 43]. Actuellement, un effort est en cours pour atteindre la gamme spectrale du rayonnement visible [38, 119, 154]. Ce travail n'est pas aussi simple que le suggère la loi d'échelle qui caractérise les équations de Maxwell, d'après laquelle un déplacement de la fréquence de résonance vers les plus courtes longueurs d'onde peut en principe être atteint simplement en miniaturisant la cellule élémentaire. En théorie, la géométrie d'un arrangement de matériaux destiné à fonctionner dans le domaine des micro-ondes peut être reprise pour fonctionner dans le domaine visible : les structures millimétriques servent d'ailleurs souvent de démonstrateurs avant la réalisation d'objets nanométriques.

Outre les difficultés de fabrication d'objets de telles dimensions, la résonance fondamentale d'un SRR est réalisée grâce à un déplacement de charges à la surface d'un métal. Lors de la réduction des dimensions d'un SRR, un problème fondamental apparaît : la fréquence caractéristique est de plus en plus proche de la fréquence plasmon ω_p des électrons libres dans le métal, et donc une partie de l'énergie contenue dans le résonateur est dissipée dans le métal. Plus les dimensions sont réduites, et plus la longueur de pénétration du rayonnement électromagnétique à l'intérieur du métal est importante en comparaison avec les dimensions typiques du résonateur. Ainsi, à cause du comportement de la fonction diélectrique dans le domaine des très hautes fréquences, la loi d'échelle ne s'applique pas, et il faut repenser la géométrie des résonateurs [148].

Cependant, dans le domaine de fréquences térahertz, les métaux sont encore de "bons métaux" [106] (cf. 1.5.2 page 29) et la longueur de pénétration dans le métal reste négligeable par rapport aux dimensions du résonateur, ce qui permet d'appliquer la loi d'échelle. Si l'on procède ainsi, on obtient un SRR re-dimensionné de quelques micromètres carrés [121, 43], qui est de plus, d'un point de vue technologique, réalisable en utilisant les techniques conventionnelles de micro-fabrication en salle blanche (lithographie optique).

1.1.4 Vers un résonateur hybride

Dans la perspective d'apporter une contribution décisive à la réalisation d'une source de rayonnement laser THz ultra-compacte, la solution développée au cours de ma thèse est de concevoir une nouvelle famille de résonateurs térahertz : une classe de résonateurs *hybrides* photonique-électronique inspirés par les SRRs. J'ai ainsi

développé un résonateur sub-longueur d'onde, dont le mode fondamental recouvre la fréquence d'opération ainsi que la polarisation du gain présent dans la région active d'un QCL THz, tout en intégrant les fonctionnalités d'un résonateur *purement électronique*.

Les résultats présentés dans cette première partie démontrent la réalisation de résonateurs hybrides photoniques-électroniques libérés de la limite de diffraction qui appartiennent à la zone colorée en jaune de la figure 1.2. Une étude approfondie de la région active du QCL sera détaillée dans la seconde partie. Au cours de cette étude, différentes voies sont explorées avec à pour objectif l'amélioration des performances des QCLs THz. Ces deux directions de travail, qui paraissent indépendantes, sont les deux clés qui permettront de réaliser cette source de rayonnement laser térahertz ultra-compacte.

1.2 Notions de base pour la photonique

L'objectif de cette section est d'introduire les notions de base nécessaires à la description des propriétés spectrales des guides d'onde en général, et des microcavités métal-semiconducteur-métal dans le domaine des fréquences THz en particulier. Elle s'inspire des livres de référence qui traitent d'électromagnétisme [69, 135], ainsi que du cours "Electromagnétisme" par J.J. Greffet à l'Ecole Centrale Paris.

1.2.1 Équations aux valeurs propres

Historiquement, les équations de Maxwell peuvent ont été écrites sous le formalisme des quaternions [99, 99], mais la notation vectorielle de Gibbs-Heaviside [53, 63] est très pratique pour décrire la plupart des phénomènes électromagnétiques mis en jeu dans le domaine de la photonique. En utilisant cette notation pour les champs vectoriels, elles sont réduites à un système de quatre équations, écrites ici dans le système d'unités mètre - kilogramme- seconde (MKS) :

$$\nabla \wedge \vec{E}(\vec{r}, t) = -\frac{\partial \vec{B}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (1.2)$$

$$\nabla \wedge \vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{j}(\vec{r}, t) + \frac{\partial \vec{D}(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (1.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) \quad (1.4)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) = 0 \quad (1.5)$$

où \vec{E} et \vec{H} représentent les champs électrique et magnétique respectivement, \vec{D} et \vec{B} les densités de flux électrique et magnétique, \vec{j} la densité de courant, ρ la densité de

charge, et l'opérateur ∇ correspond à la transformation vectorielle $\vec{u}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{u}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{u}_z \frac{\partial}{\partial z}$ par exemple en coordonnées cartésiennes.

L'équation 1.2 signifie que le produit croisé entre ∇ et \vec{E} est lié en tout point et tout instant à la variation temporelle de la densité de flux magnétique. C'est-à-dire que si le champ \vec{B} varie au cours du temps, une force rotationnelle modifiera le champ \vec{E} . Tous les générateurs sont basés sur cet effet : c'est la loi locale de Faraday, selon laquelle tout champ magnétique produit un effet électrique. L'équation 1.3 est similaire à l'équation 1.2, appliquée cette fois au champ magnétique \vec{H} , même si le membre de droite est un peu plus compliqué. Le terme \vec{j} représente la densité de courant, ou courant galvanique (c'est le nombre d'Ampères par unité de surface dans une direction spécifique), qui est équivalente à un champ. Rappelons que la loi d'Ampère peut s'écrire sous sa forme locale : $\nabla \wedge \vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{j}(\vec{r}, t)$. Le terme de droite, $\frac{\partial}{\partial t} \vec{D}(\vec{r}, t)$, représente le courant de déplacement : toute variation temporelle de la densité de flux électrique crée également une force rotationnelle qui modifie le champ \vec{H} .

Les équations 1.4 et 1.5 sont des équations de divergence. L'équation 1.4 indique que la densité de flux électrique est en tout point et tout instant égale à la densité de charge ρ (c'est le nombre de Coulombs par unité de volume). Le terme de divergence, par opposition à la convergence, décrit ce qui s'échappe hors d'un volume. Ainsi, une charge électrique positive est une source ponctuelle de champ électrique, tandis que l'électron en est un puits. L'équation 1.5 indique que la densité de flux magnétique est partout et toujours nulle, c'est-à-dire que la densité de charge magnétique vaut zéro en tout point et tout instant, et donc qu'il n'existe pas de charges ponctuelles magnétiques. Un aimant est bien une source de champ magnétique, mais il peut en effet être vu comme un dipôle magnétique dont les pôles positif et négatif seraient si rapprochés qu'on ne peut les séparer.

Il s'agit désormais de trouver les ondes électromagnétiques solutions des équations de Maxwell pour une situation donnée.

1.2.2 Ondes planes

On s'intéressera en particulier aux ondes planes monochromatiques. Les ondes large bande pouvant toujours être décomposées sous la forme d'une superposition d'ondes monochromatiques, il suffit pour les traiter d'en faire l'analyse fréquentielle, puis de procéder à une transformée de Fourier.

Considérons un champ dont l'amplitude varie dans le temps avec la périodicité T . Les paramètres importants sont alors la fréquence $f = \frac{1}{T}$, ou la fréquence angulaire $\omega = 2\pi f$. La dépendance temporelle du champ peut être décrite par la fonction $\sin(\omega t)$ ou bien par la fonction $\cos(\omega t)$, les deux fonctions différant par une phase de 90° . Plus cette variation est rapide, plus forte est l'amplitude de la dérivée : $\frac{\partial}{\partial t} \sin(\omega t) = \omega \cos(\omega t)$, et $\frac{\partial}{\partial t} \cos(\omega t) = -\omega \sin(\omega t)$.

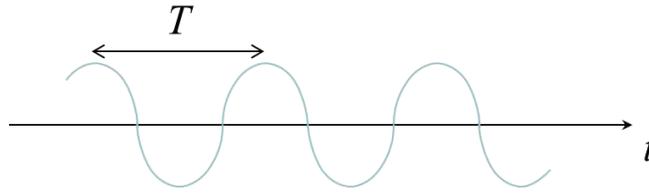


FIGURE 1.4 – Représentation temporelle d'une onde électromagnétique plane, progressive, sinusoïdale et monochromatique de période T .

On peut également décrire cette onde plane avec la fonction complexe $e^{j\omega t}$. Ce choix permet de passer par des variables spatiales complexes plutôt que de résoudre des équations qui dépendent de variables réelles et temporelles. L'intérêt tient au fait que sa dérivée temporelle s'écrit $\frac{\partial}{\partial t}(e^{j\omega t}) = j\omega e^{j\omega t}$, ce qui permet de supprimer les termes $e^{j\omega t}$ des équations. En contrepartie, les vecteurs et les scalaires deviennent complexes : prendre la dérivée temporelle revient à multiplier par $j\omega$, et multiplier par j équivaut à un déphasage de 90° . Pour revenir à la notation réelle, il suffit de multiplier à nouveau chacun des membres des équations par $e^{j\omega t}$, puis de ne considérer que la partie réelle des champs, qui retrouvent ainsi leur dépendance temporelle : $\vec{E}(\vec{r}, t) = \text{Re}(\vec{E}(\vec{r})e^{j\omega t})$. Par exemple, pour un vecteur complexe \vec{A} tel que $\vec{A} = \vec{A}_r + j\vec{A}_i$ (cf. Fig. 1.5, en bleu) :

$$\vec{A}(t) = \text{Re}(\vec{A}_r + j\vec{A}_i)e^{j\omega t} \quad (1.6)$$

$$= \vec{A}_r \cos \omega t - \vec{A}_i \sin \omega t. \quad (1.7)$$

Sa représentation dans le domaine temporel est une ellipse (cf. Fig. 1.5, en rouge).

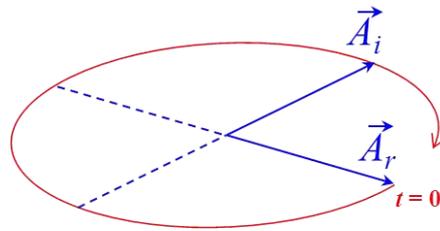


FIGURE 1.5 – Représentation complexe (en bleu) et temporelle (en rouge) du vecteur \vec{A} .

Dans toute la suite, la transformée de Fourier des quantités sera effectuée selon la convention suivante :

$$\vec{A}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \vec{A}(t) e^{j\omega t} dt \quad (1.8)$$

Les équations de Maxwell deviennent :

$$\nabla \wedge \vec{E}(\vec{r}) = -j\omega \vec{B}(\vec{r}) \quad (1.9)$$

$$\nabla \wedge \vec{H}(\vec{r}) = \vec{j}(\vec{r}) + j\omega \vec{D}(\vec{r}) \quad (1.10)$$

$$\nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}) = \rho(\vec{r}) \quad (1.11)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}) = 0 \quad (1.12)$$

Trouvons une solution simple des équations de Maxwell dans un milieu linéaire, homogène et isotrope, où $\rho = 0$ et $\vec{j} = \vec{0}$. Les relations constitutives du milieu lient \vec{D} à \vec{E} et \vec{B} à \vec{H} de la façon suivante :

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad (1.13)$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (1.14)$$

avec

$$\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r \quad (1.15)$$

$$\mu = \mu_0 \mu_r \quad (1.16)$$

où ϵ_0 est la permittivité diélectrique du vide ($\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12}$ As/Vm), μ_0 la perméabilité magnétique du vide ($\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7}$ Vs/Am), et ϵ_r et μ_r les permittivité et perméabilité relatives (sans unité). Dans ce cas, les équations de Maxwell deviennent :

$$\nabla \wedge \vec{E}(\vec{r}) = -j\omega \vec{B}(\vec{r}) \quad (1.17)$$

$$\nabla \wedge \vec{H}(\vec{r}) = j\omega \vec{D}(\vec{r}) \quad (1.18)$$

$$\nabla \cdot \vec{D}(\vec{r}) = 0 \quad (1.19)$$

$$\nabla \cdot \vec{B}(\vec{r}) = 0 \quad (1.20)$$

et se réduisent ainsi à une système de deux équations à deux inconnues. En prenant le rotationnel de l'équation 1.17 puis en utilisant les relations 1.13, 1.14 et 1.18, on obtient rapidement :

$$\nabla \wedge (\nabla \wedge \vec{E}(\vec{r})) = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 n^2 \vec{E}(\vec{r}) \quad (1.21)$$

où c est la célérité de la lumière dans le vide et n l'indice complexe, qui par définition valent respectivement $c = (\epsilon_0 \mu_0)^{-\frac{1}{2}}$ et $n^2 = \mu_r \left(\epsilon_r + i \frac{\sigma}{\omega \epsilon_0} \right)$ dans le cas d'un milieu de conductivité σ telle que $\vec{j} = \sigma \vec{E} \neq \vec{0}$, d'où $n^2 = \mu_r \epsilon_r$ dans ce cas simple. En appliquant la propriété $\vec{a} \wedge (\vec{b} \wedge \vec{c}) = \vec{b} \cdot (\vec{a} \cdot \vec{c}) - \vec{c} \cdot (\vec{a} \cdot \vec{b})$ à l'équation 1.21 ainsi que le résultat de l'équation 1.19, on retrouve l'équation de Helmholtz :

$$\nabla^2 \vec{E}(\vec{r}) + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 n^2 \vec{E}(\vec{r}) = \vec{0} \quad (1.22)$$

1.2.3 Propagation d'une onde plane monochromatique

Cherchons les solutions pour une onde plane, dont l'amplitude varie par exemple selon x , polarisée selon la direction du vecteur \vec{u} ($\vec{u} \in (y, z)$ et $|\vec{u}| = 1$), telle que $\vec{E}(x) = \vec{u}E_{\perp}(x)$, où $E_{\perp}(x)$ représente l'amplitude du champ électrique dans le plan (y, z) . Cette solution est très utile car, dans beaucoup de cas pratiques, l'onde sphérique émise par une source se situant loin du point d'observation peut être approximée à une onde plane. L'équation 1.22 devient dans ce cas :

$$\frac{\partial^2 E_{\perp}(x)}{\partial x^2} + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 n^2 E_{\perp}(x) = 0 \quad (1.23)$$

Cette équation du second ordre admet des solutions de la forme e^{ax} , avec $a^2 = -\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 n^2$. Nous pouvons donc écrire la solution générale comme une superposition des deux solutions, en distinguant deux cas :

— cas $n^2 > 0$:

$$\vec{E}_{\perp}(x) = \vec{u}_1 E_{1,\perp}(x) e^{-j\frac{\omega}{c}\sqrt{n^2}x} + \vec{u}_2 E_{2,\perp}(x) e^{+j\frac{\omega}{c}\sqrt{n^2}x} \quad (1.24)$$

— cas $n^2 < 0$:

$$\vec{E}_{\perp}(x) = \vec{u}_1 E_{1,\perp}(x) e^{-j\frac{\omega}{c}\sqrt{-n^2}x} + \vec{u}_2 E_{2,\perp}(x) e^{+j\frac{\omega}{c}\sqrt{-n^2}x} \quad (1.25)$$

Repassons en notation réelle :

$$\vec{E}(x, t) = \text{Re} \left(\vec{E}_{\perp}(x) e^{j\omega t} \right) \quad (1.26)$$

Dans le cas $n^2 > 0$, cette solution est de la forme $f(x - \frac{ct}{n})$. Elle décrit une onde qui se propage à la vitesse $v_{\phi} = \frac{\omega}{k} = \frac{c}{n}$ sans atténuation, où k est le nombre d'ondes défini par $k = \frac{\omega}{c}n$. Ainsi, nous avons défini v_{ϕ} comme la vitesse de phase, qui est égale à la constante de célérité c dans le vide.

Dans le cas $n^2 < 0$, la solution est de la forme $f(x)g(t)$. L'onde ne se propage pas, et subit une atténuation selon une loi exponentielle $e^{-\frac{x}{d}}$ avec $d = \frac{c}{\omega\sqrt{-n^2}}$, distance caractéristique de la profondeur de pénétration de l'onde, ou "épaisseur de peau". Ceci correspond au cas physique d'une réflexion (à distinguer de tout phénomène d'absorption).

1.2.4 Vecteur d'onde complexe

S'il est souvent pratique de résoudre une équation différentielle classique comme nous venons de le faire dans le cas très simple présenté ci-dessus, il existe une méthode

équivalente qui permet de traiter les cas plus complexes. Il peut en effet s'avérer plus simple de chercher une solution de la forme :

$$\vec{E}_\perp(x) = \vec{u} E_\perp e^{-j(kx - \omega t)} \quad (1.27)$$

Dans ce cas, l'équation de Helmholtz 1.22 devient :

$$-k^2 E_\perp + \frac{\omega^2}{c^2} n^2 E_\perp = 0 \quad (1.28)$$

$$\text{soit } k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} n^2 \quad (1.29)$$

Il faut là aussi distinguer deux cas :

— cas $n^2 > 0$:

$$k = \pm \frac{\omega}{c} \sqrt{n^2} \quad (1.30)$$

— cas $n^2 < 0$:

$$k = \pm \frac{\omega}{c} \sqrt{-n^2} \quad (1.31)$$

Les solutions fournies par ces deux méthodes sont équivalentes. Cette méthode montre que le nombre d'ondes k peut prendre des valeurs complexes, dont la partie imaginaire décrit l'atténuation de l'onde. L'équation 1.29 est appelée "relation de dispersion". Les conditions aux limites permettent ensuite de trouver les amplitudes de chaque onde plane, puis par intégration de la transformée de Fourier $\vec{E}(\vec{k})$ du champ, on retrouve le champ $\vec{E}(\vec{r})$.

1.2.5 Relation de dispersion

Plus généralement, dans un milieu linéaire et isotrope, la relation de dispersion s'écrit :

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} n^2(\omega) = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon_r(\omega) \mu_r(\omega) \quad (1.32)$$

avec $\epsilon_r(\omega)$ et $\mu_r(\omega)$ complexes. Posons $n = \eta + j\kappa$. Dans ce cas, l'équation 1.29 implique que $k = \pm \frac{\omega}{c} (\eta + j\kappa)$. La solution s'écrit alors :

$$\vec{E}_\perp(x) = \vec{u} E_\perp e^{\pm \frac{\omega}{c} \kappa x} e^{-j(\pm \frac{\omega}{c} \eta x - \omega t)} \quad (1.33)$$

Ainsi l'on peut comprendre les sens physiques de la partie réelle et de la partie imaginaire de n : κ décrit l'atténuation de l'onde par le milieu, par absorption (échauffement du matériau) ou par réflexion (l'énergie prélevée par les particules chargées

qui constituent le matériau est restituée dans l'onde réfléchie), tandis que η détermine la vitesse de propagation, ces deux caractéristiques du milieu pouvant dépendre de ω . On peut noter deux cas particuliers que l'on rencontre très fréquemment dans les cas pratiques :

- $\epsilon\mu$ réel positif (n est réel) : La solution est de la forme $e^{-j(\pm\frac{\omega}{c}\eta x - \omega t)}$. C'est une onde progressive non atténuée, qui se propage à la vitesse $\frac{c}{\eta}$.
- $\epsilon\mu$ réel négatif (n est un imaginaire pur) : La solution est de la forme $e^{\pm\frac{\omega}{c}\kappa x} e^{j\omega t}$. C'est une onde évanescente.

Enfin, dans le cas particulier d'un milieu diélectrique non magnétique ($\mu_r = 1$ et $\epsilon_r = \epsilon'_r + j\epsilon''_r$), ce qui sera le cas dans la suite de ce travail, on a :

$$n^2 = \epsilon_r \mu_r \quad (1.34)$$

$$= \epsilon_r = \epsilon'_r + j\epsilon''_r \quad (1.35)$$

ce qui implique les relations :

$$\epsilon'_r = \eta^2 - \kappa^2 \quad (1.36)$$

$$\text{et } \epsilon''_r = 2\eta\kappa \quad (1.37)$$

1.3 Ondes guidées : Méthode de calcul analytique

Localiser une onde électromagnétique dans un espace fini, par exemple dans une cavité photonique, se traduit par la quantification du vecteur d'onde \vec{k} , c'est-à-dire par l'existence de modes propres de résonance de la cavité. Bien que les modes ne soient pas des ondes planes, la structure des champs peut toujours être analysée en termes d'ondes planes superposées. De grands progrès ont été réalisés dans les domaines de la modélisation et de la simulation des différents types de composants optiques de l'optique intégrée. Dans cette section, je résume les méthodes numériques et analytiques qui permettent de calculer la fréquence propre, ainsi que la distribution spatiale des champs électriques et magnétiques, des modes de résonance des guides et cavités photoniques présentées dans cette thèse.

La méthode numérique de calcul utilisée pour la simulation des guides d'ondes présentés dans cette thèse est une méthode assistée par ordinateur. Le logiciel principalement utilisé est le logiciel commercial COMSOL Multiphysics, et dans certains cas, FIMMAVE. Ces logiciels utilisent une méthode de calcul numérique basée sur une analyse par éléments finis. Cette méthode de calcul est très efficace et, pour une structure bien préparée, permet d'obtenir une bonne estimation des modes propres du guide d'onde réel.

Il existe plusieurs méthodes analytiques pour résoudre les équations d'onde dans un guide d'onde, chacune présentant des caractéristiques différentes qui permettent de traiter différents problèmes de façon efficace. On pourra trouver par exemple la résolution des matrices de transfert dans la thèse de Yannick Chassagneux (ajouter référence). La méthode analytique présentée ici est la méthode de calcul de l'indice effectif.

1.3.1 Guide d'onde unidimensionnel

Soit un guide d'onde dont la structure est uniforme dans la direction de propagation x ainsi que dans la direction y , composé d'une superposition de trois couches diélectriques d'indices de réfraction n_1 , n_2 et n_3 dans la direction z . Les régions 1 et 3 sont des couches de gaine, et la région 2 est le corps du guide. On suppose que ces matériaux sont isotropes et non magnétiques. Dans ce cas, la dérivée d'un champ

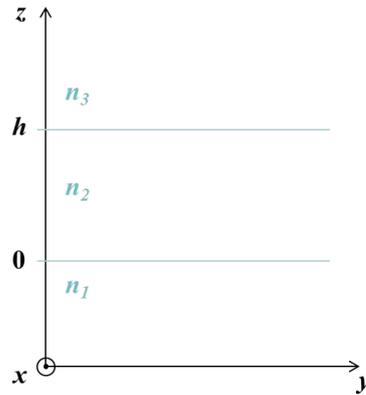


FIGURE 1.6 – Schéma d'une structure unidimensionnelle composée de trois couches superposées dans la direction z , d'indices n_1 , n_2 et n_3 . Les interfaces entre les matériaux se situent en $z = 0$ et $z = h$. On considère une onde de pulsation ω se propageant selon la direction x .

électromagnétique par rapport à x est constante, et est telle que :

$$\frac{\partial}{\partial x} = -j\beta \quad (1.38)$$

où β est la constante de propagation de l'onde dans le matériau, c'est-à-dire la composante selon x du nombre d'ondes k . On appelle *indice effectif*, noté n_{eff} , le rapport entre la constante de propagation β , et le nombre d'ondes dans le vide k_0 :

$$n_{\text{eff}} = \frac{\beta}{k_0} \quad (1.39)$$

avec $k_0 = \omega\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$. Soit λ_0 la longueur d'onde dans le vide, alors la constante de propagation peut s'écrire ainsi :

$$\beta = \frac{2\pi}{\lambda_0} n_{\text{eff}} = \frac{2\pi}{\lambda_{\text{eff}}} \quad (1.40)$$

où $\lambda_{\text{eff}} = \frac{\lambda_0}{n_{\text{eff}}}$ est la composante selon x de la longueur d'onde dans le matériau. Le sens physique de la constante de propagation β est la rotation de phase par unité de distance de propagation. Donc l'indice effectif n_{eff} peut être vu comme le rapport entre la longueur d'onde dans le matériau et celle dans le vide, ou encore comme le rapport entre la rotation de phase dans le matériau et celle dans le vide. Dans une telle structure, qui est uniforme dans la direction y , l'équation de Helmholtz 1.22 devient :

$$\frac{d^2\vec{E}}{dz^2} + (k^2 - \beta^2)\vec{E} = \vec{0} \quad (1.41)$$

$$\frac{d^2\vec{E}}{dz^2} + k_0^2(\epsilon_r - n_{\text{eff}}^2)\vec{E} = \vec{0} \quad (1.42)$$

car on peut considérer que $\frac{\partial}{\partial y} = 0$. De la même façon, pour le champ magnétique :

$$\frac{d^2\vec{H}}{dz^2} + k_0^2(\epsilon_r - n_{\text{eff}}^2)\vec{H} = \vec{0} \quad (1.43)$$

Les conditions de continuité des champs à l'interface entre deux matériaux imposent que les composantes tangentielles des champs \vec{E} et \vec{H} , ainsi que les composantes normales des vecteurs \vec{D} et \vec{B} , doivent être continues. Deux modes peuvent se propager dans le guide d'onde : le mode *transverse électrique* (TE) et le mode *transverse magnétique* (TM).

- **Mode TE :** Le champ \vec{E} n'est pas dans la direction longitudinale ($E_x = 0$), mais dans la direction transverse ($E_y \neq 0$). En utilisant les équations 1.42, 1.43 avec 1.17 et 1.18, on retrouve les caractéristiques du mode TE dans un guide d'onde unidimensionnel :

$$E_x = E_z = H_y = 0 \quad (1.44)$$

$$H_x = \frac{1}{j\omega\mu_0} \frac{dE_y}{dz} \quad (1.45)$$

$$H_z = \frac{\beta}{\omega\mu_0} E_y \quad (1.46)$$

L'équation des ondes pour E_y s'écrit alors :

$$\frac{d^2E_y}{dz^2} + k_0^2(\epsilon_r - n_{\text{eff}}^2)E_y = 0 \quad (1.47)$$

On peut alors en déduire l'expression de l'indice de réfraction n_{eff} . En effet, la composante principale du champ électrique E_y s'écrit dans chacune des trois régions :

$$\text{région 1 : } E_{y1}(z) = C_1 e^{\gamma_1 z} \quad \text{avec } \gamma_1 = k_0 \sqrt{n_{\text{eff}}^2 - n_1^2} \quad (1.48)$$

$$\text{région 2 : } E_{y2}(z) = C_2 \cos(\gamma_2 z + \alpha) \quad \text{avec } \gamma_2 = k_0 \sqrt{n_2^2 - n_{\text{eff}}^2} \quad (1.49)$$

$$\text{région 3 : } E_{y3}(z) = C_3 e^{-\gamma_3(z-h)} \quad \text{avec } \gamma_3 = k_0 \sqrt{n_{\text{eff}}^2 - n_3^2} \quad (1.50)$$

tandis que la composante H_x du champ magnétique se déduit dans chaque région à partir de la connaissance de E_y :

$$H_x(z) = \frac{1}{j\omega\mu_0} \frac{dE_y}{dz} \quad (1.51)$$

En utilisant les conditions aux interfaces en $z = 0$ et $z = h$, on obtient un système de quatre équations pour quatre inconnues (C_1 , C_2 , C_3 et n_{eff}) :

$$C_1 = C_2 \cos \alpha \quad (1.52)$$

$$= -\frac{\gamma_2}{\gamma_1} C_2 \sin \alpha \quad (1.53)$$

$$C_3 = C_2 \cos(\gamma_2 h + \alpha) \quad (1.54)$$

$$= \frac{\gamma_2}{\gamma_3} C_2 \sin(\gamma_2 h + \alpha) \quad (1.55)$$

qui aboutit à la quantification de l'indice effectif :

$$\alpha = -\tan^{-1}\left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2}\right) + p\pi, \quad (1.56)$$

$$\text{et } \gamma_2 h = -\tan^{-1}\left(\frac{\gamma_2}{\gamma_1}\right) - \tan^{-1}\left(\frac{\gamma_2}{\gamma_3}\right) + (q+1)\pi \quad (1.57)$$

où p et q sont des nombres entiers.

- **Mode TM** : Le champ \vec{H} n'est pas dans la direction longitudinale ($H_x = 0$), mais dans la direction transverse ($H_y \neq 0$). De la même façon que précédemment, on peut retrouver les caractéristiques du mode TM dans un guide d'onde unidimensionnel :

$$H_x = H_z = E_y = 0 \quad (1.58)$$

$$E_x = -\frac{j}{\omega\epsilon_0\epsilon_r} \frac{dH_y}{dz} \quad (1.59)$$

$$E_z = \frac{\beta}{\omega\epsilon_0\epsilon_r} H_y \quad (1.60)$$

L'équation des ondes pour H_y s'écrit alors :

$$\frac{d^2 H_y}{dz^2} + k_0^2 (\epsilon_r - n_{\text{eff}}^2) H_y = 0 \quad (1.61)$$

ce qui aboutit dans ce cas à la quantification de l'indice effectif suivante :

$$\alpha = -\tan^{-1} \left(\frac{\epsilon_{r2} \gamma_1}{\epsilon_{r1} \gamma_2} \right) + p\pi, \quad (1.62)$$

$$\text{et } \gamma_2 h = -\tan^{-1} \left(\frac{\epsilon_{r1} \gamma_2}{\epsilon_{r2} \gamma_1} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{\epsilon_{r3} \gamma_2}{\epsilon_{r2} \gamma_3} \right) + (q+1)\pi \quad (1.63)$$

où p et q sont des nombres entiers.

1.3.2 Méthode de l'indice effectif

Cette méthode permet d'analyser des structures de guides d'onde bi-dimensionnelles (2D) par simple répétition de la méthode utilisée pour les guides 1D. Cette méthode consiste à remplacer la structure 2D en une combinaison de structures 1D superposées selon une direction, dans lesquelles on aura calculé l'indice effectif n_{j} , puis de reproduire l'analyse selon l'autre direction.

La figure 1.7 illustre le concept de cette méthode pour un guide d'onde 2D composé à partir de quatre matériaux d'indices n_i , que l'on peut diviser en trois guides d'ondes indépendants 1D dont on peut calculer les indices effectifs $n_{\text{eff},j}$. Considérons l'équation d'onde scalaire :

$$\frac{\partial^2 \Phi(y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Phi(y, z)}{\partial z^2} + k_0^2 (\epsilon_r(y, z) - n_{\text{eff}}^2) \Phi(y, z) = 0 \quad (1.64)$$

où n_{eff} es l'inconnue du système. En faisant l'hypothèse que les variables x et y sont indépendantes, la fonction d'onde $\Phi(y, z)$ peut être séparée en deux fonctions :

$$\Phi(y, z) = f(y) \cdot g(z) \quad (1.65)$$

L'équation 1.64 devient alors :

$$\frac{1}{f(y)} \frac{d^2 f(y)}{dy^2} + \frac{1}{g(z)} \frac{d^2 g(z)}{dz^2} + k_0^2 (\epsilon_r(y, z) - n_{\text{eff}}^2) = 0 \quad (1.66)$$

En posant :

$$\frac{1}{g(z)} \frac{d^2 g(z)}{dz^2} + k_0^2 \epsilon_r(y, z) = k_0^2 N(y)^2 \quad (1.67)$$

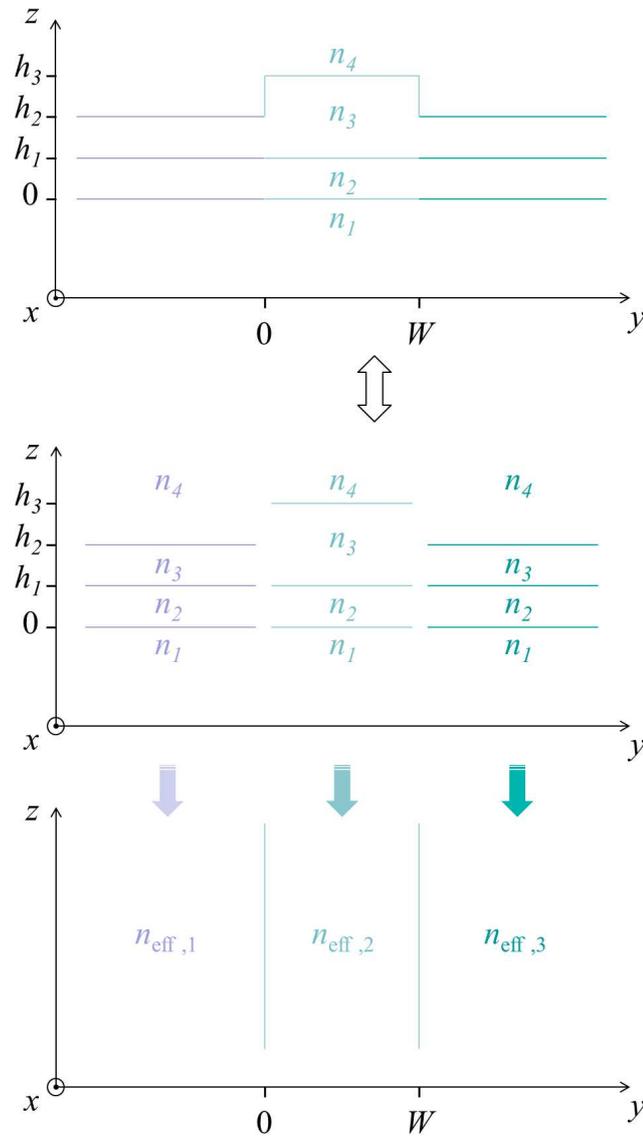


FIGURE 1.7 – Méthode de l'indice effectif : exemple d'un guide d'onde 2D composé à partir de quatre matériaux d'indices n_i , que l'on peut diviser en trois guides d'ondes indépendants 1D dont on peut calculer les indices effectifs $n_{\text{eff},j}$

il vient :

$$\frac{1}{g(z)} \frac{d^2 g(z)}{dz^2} - k_0^2 n_{\text{eff}}^2 = -k_0^2 N(y)^2 \quad (1.68)$$

On obtient de cette façon un système de deux équations indépendantes du second ordre :

$$\frac{d^2 g(z)}{dz^2} + k_0^2 (\epsilon_r(y, z) - N(y)^2) g(z) = 0 \quad (1.69)$$

$$\frac{d^2 f(y)}{dy^2} + k_0^2 (N(y)^2 - n_{\text{eff}}^2) f(y) = 0 \quad (1.70)$$

Ainsi l'on peut obtenir l'indice effectif final pour cette structure 2D à partir des indices effectifs calculés par la méthode décrite précédemment pour chacun des guides d'ondes 1D disposés selon l'axe y .

1.3.3 Conclusion

Dans cette section, j'ai détaillé une méthode analytique qui s'applique aux guides d'ondes diélectriques planaires, qui représentent les briques de base des composants optiques intégrés, tels que les réseaux accordables [REF.] ou les cristaux photoniques [REF.]. Dans la suite de ce chapitre, je résume les paramètres des matériaux importants pour la modélisation et la simulation des cavités photoniques étudiées pendant ma thèse : les micro-cavités métal-métal pour l'optoélectronique térahertz.

1.4 Modèles pour le calcul de la fonction diélectrique

Afin de déterminer les modes propres d'un guide d'onde le plus fidèlement possible par rapport au cas réel, il est indispensable de définir correctement les paramètres des matériaux qui la composent. Dans cette section, je décris les principaux modèles utiles pour la définition des constantes diélectriques des matériaux :

- le modèle de Debye pour les matériaux formés de dipôles électriques, comme l'eau ou encore les métamatériaux,
- le modèle de Lorentz utile pour les cas plus spécifiques au domaine de la physique du solide, comme le SiO_2 ou le GaAs massif ou contenant un puits quantique,
- et le modèle de Drude pour les matériaux métalliques ou les semiconducteurs fortement dopés.

1.4.1 Modèle de Debye

L'équation de Debye pour la permittivité diélectrique complexe est utile pour décrire les matériaux, fluides ou solides, dont les composants élémentaires possèdent un moment dipolaire électrique permanent. Ces composants élémentaires peuvent être des atomes ou des molécules, naturels ou artificiels (comme dans le cas des métamatériaux). Dans l'approximation d'un matériau pur formé de composants élémentaires polaires qui relaxent tous au bout du temps τ_d , la théorie classique de Debye prévoit pour la permittivité diélectrique complexe $\epsilon(\omega)$ (définie par la relation 1.35) :

$$\epsilon_{\text{Debye}}(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon(0) - \epsilon_\infty}{1 + j\omega\tau_d} = \epsilon'_r(\omega) + j\epsilon''_r(\omega) \quad (1.71)$$

où :

$$\begin{aligned} \epsilon(0) &= \lim_{\omega \rightarrow 0} \epsilon(\omega) \\ \epsilon_\infty &= \lim_{\omega \rightarrow \infty} \epsilon(\omega) \end{aligned}$$

Le temps de relaxation τ_d est lié au coefficient de viscosité η ressenti par la molécule. Pour une molécule sphérique de rayon a dans un système à la température T :

$$\tau_d = \frac{4\pi a^2 \eta}{k_B T} \quad (1.72)$$

La partie réelle $\epsilon'_r(\omega)$, la permittivité relative, et la partie imaginaire $\epsilon''_r(\omega)$, le facteur de pertes, de la permittivité diélectrique ont pour expressions respectives :

$$\epsilon'_r(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon(0) - \epsilon_\infty}{1 + (\omega\tau_d)^2}, \quad (1.73)$$

$$\text{et } \epsilon''_r(\omega) = -\frac{(\epsilon(0) - \epsilon_\infty)\omega\tau_d}{1 + (\omega\tau_d)^2}. \quad (1.74)$$

Leur dépendance en fréquence est reportée dans la partie de gauche de la figure 1.8 respectivement en rouge et en bleu.

Pour des fréquences $f \ll \frac{1}{2\pi\tau_d}$, la molécule a le temps de relaxer et de s'orienter selon le champ appliqué, et donc la permittivité tend vers $\epsilon(0)$ tandis que ϵ''_r tend vers zéro.

A très haute fréquence ($f \gg \frac{1}{2\pi\tau_d}$), les dipôles n'ont pas le temps de s'orienter avec le champ. La permittivité tend vers ϵ_∞ , tandis que ϵ''_r tend de nouveau vers zéro.

A la fréquence $f \simeq \frac{1}{2\pi\tau_d}$, la permittivité ϵ'_r est décroissante de $\epsilon(0)$ vers ϵ_∞ pour f croissante, et le facteur de pertes présente un pic dont la valeur est $\epsilon''_r = \frac{\epsilon(0) - \epsilon_\infty}{2}$.

1.4.2 Modèle de Lorentz

L'équation de Lorentz pour la permittivité diélectrique complexe est plus couramment utilisée en physique du solide. Ce modèle antérieur à la mécanique quantique offre une bonne description classique à travers une approche physique inspirée du domaine de la mécanique. Le point de départ est une description des électrons liés au noyau atomiques comme un système d'oscillateurs mécaniques. Dans cette analogie, le champ incident $E(t)$ induit un déplacement d'électrons, qui ressentent une force de rappel vers le noyau. L'équation de mouvement pour l'électron peut être écrite ainsi :

$$\frac{\partial^2 \vec{r}(t)}{\partial t^2} + \gamma \frac{\partial \vec{r}(t)}{\partial t} + \omega_0^2 \vec{r}(t) = -\frac{e}{m} E(t) \quad (1.75)$$

où γ est un coefficient d'atténuation, ω_0 est la fréquence de résonance du système, et m et e sont la masse et la charge respectives de l'électron. La fréquence ω_0 rend compte de la capacité du matériau à stocker de l'énergie, tandis que le facteur γ , qui a également la dimension d'une fréquence, mesure la dissipation d'énergie dans le matériau.

A partir de cette équation, on obtient facilement des solutions dans le domaine fréquentiel en passant par des variables spatiales complexes, puis dans domaine temporel par une transformation de Fourier selon la convention définie par la relation 1.8 page 11. Ces solutions correspondent à la réponse microscopique du matériau, au niveau atomique. Le comportement macroscopique d'un élément de volume fini est obtenu en calculant la polarisation induite \vec{P} par l'ensemble des N moments dipolaires individuels \vec{p} induits par un déplacement de charge $\vec{\delta r}$:

$$\vec{p} = -e \vec{\delta r} \quad (1.76)$$

$$\vec{P} = N \langle \vec{p} \rangle \quad (1.77)$$

où N est la concentration volumique de dipôles qui contribuent à la réponse du matériau et m^* leur masse effective. En utilisant les équations 1.75, 1.76 et 1.77, la polarisation induite \vec{P} s'écrit :

$$P(\omega) = \frac{Ne^2}{m^*} \frac{E(\omega)}{\omega_0^2 + j\gamma\omega - \omega^2} \quad (1.78)$$

Par ailleurs, la polarisation induite dans le matériau est indépendante de toute contribution du vide et s'écrit :

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E} \quad (1.79)$$

où χ est la susceptibilité diélectrique du milieu supposé isotrope définie par la relation :

$$\epsilon(\omega) - \epsilon_\infty = \int_{-\infty}^{\infty} \chi(t) e^{j\omega t} dt \quad (1.80)$$

On aboutit ainsi à l'équation de Lorentz pour la permittivité diélectrique complexe :

$$\epsilon_{\text{Lorentz}}(\omega) = \epsilon_{\infty} + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + j\gamma\omega} = \epsilon_r'(\omega) + j\epsilon_r''(\omega) \quad (1.81)$$

avec $\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{m^*\epsilon_0}}$, la fréquence plasma.

La partie réelle $\epsilon_r'(\omega)$ et la partie imaginaire $\epsilon_r''(\omega)$ de la permittivité diélectrique ont pour expressions respectives :

$$\epsilon_r'(\omega) = \epsilon_{\infty} + \omega_p^2 \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}, \quad (1.82)$$

$$\text{et } \epsilon_r''(\omega) = -\omega_p^2 \frac{\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}. \quad (1.83)$$

Leur dépendance en fréquence est reportée dans la partie centrale de la figure 1.8 respectivement en rouge et en bleu. Pour des fréquences très petites devant la fréquence de résonance ($\omega \ll \omega_0$), les équations 1.82 et 1.83 peuvent être simplifiées ainsi :

$$\epsilon_r'(\omega) \approx \epsilon_{\infty} + \left(\frac{\omega_p}{\omega_0}\right)^2 \left(1 - \frac{2\omega^2}{\omega_0^2}\right)^{-1} \quad (1.84)$$

$$\text{et } \epsilon_r''(\omega) \approx -\frac{\gamma\omega}{\omega_0^2} \left(\frac{\omega_p}{\omega_0}\right)^2 \left(1 - \frac{2\omega^2}{\omega_0^2}\right)^{-1} \quad (1.85)$$

Si $\gamma\omega \ll \omega_0^2$, la partie réelle de la permittivité est plus grande que sa partie imaginaire. L'absorption est alors négligeable et le matériau est presque transparent. De plus, $\frac{d\epsilon_r'}{d\omega} > 0$, donc la dispersion est normale dans cette région.

A la résonance, pour ω proche de ω_0 , les équations 1.82 et 1.83 peuvent être simplifiées ainsi :

$$\epsilon_r'(\omega) \approx \epsilon_{\infty} + \frac{\omega_p^2}{2\omega_0} \frac{\omega - \omega_0}{1 + \left(\frac{\omega - \omega_0}{\gamma/2}\right)^2}, \quad (1.86)$$

$$\text{et } \epsilon_r''(\omega) \approx -\frac{\omega_p^2}{2\omega_0} \frac{\gamma/2}{1 + \left(\frac{\omega - \omega_0}{\gamma/2}\right)^2}. \quad (1.87)$$

Dans ce cas, l'absorption devient significative : $\omega - \omega_0 < \gamma$. La ligne d'absorption décrit une Lorentzienne centrée en ω_0 avec une largeur à mi-hauteur égale à γ . La dispersion est anormale dans cette région car $\frac{d\epsilon_r'}{d\omega} < 0$. Pour les fréquences supérieures

à la fréquence de résonance, les équations 1.82 et 1.83 peuvent être simplifiées ainsi :

$$\epsilon'_r(\omega) \approx \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad (1.88)$$

$$\text{et } \epsilon''_r(\omega) \approx -\frac{\gamma\omega_p^2}{\omega^3 + \gamma^2\omega}. \quad (1.89)$$

De nouveau, l'absorption diminue et la dispersion redevient normale.

1.4.3 Modèle de Drude

Ce modèle a été développé par Drude à partir du modèle de Lorentz pour décrire les propriétés optiques des métaux, dans lesquels la charge se déplace librement. Dans ce cas, le terme $m\omega_0^2x$ disparaît de l'équation de mouvement des électrons (1.75 page 23), ce qui revient à travailler dans la limite $\omega_0 \rightarrow 0$ de l'équation 1.81 :

$$\epsilon_{\text{Drude}}(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + j\gamma\omega} = \epsilon'_r(\omega) + j\epsilon''_r(\omega) \quad (1.90)$$

d'où :

$$\epsilon'_r(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2}, \quad (1.91)$$

$$\text{et } \epsilon''_r(\omega) = \frac{\gamma}{\omega} \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2}. \quad (1.92)$$

Leur dépendance en fréquence est reportée dans la partie de droite de la figure 1.8 respectivement en rouge et en bleu.

Pour des fréquences très petites devant la fréquence plasmonique ($\omega < \omega_p$), l'indice de réfraction n est complexe et la radiation est amortie.

Dans la limite des hautes fréquences ($\omega > \omega_p$), les expressions des parties réelle et imaginaire peuvent être approximées à :

$$\epsilon'_r(\omega) \approx \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}, \quad (1.93)$$

$$\text{et } \epsilon''_r(\omega) \approx \frac{\gamma\omega_p^2}{\omega^3}. \quad (1.94)$$

Dans ce cas, l'indice de réfraction n est réel, et le matériau devient presque transparent.

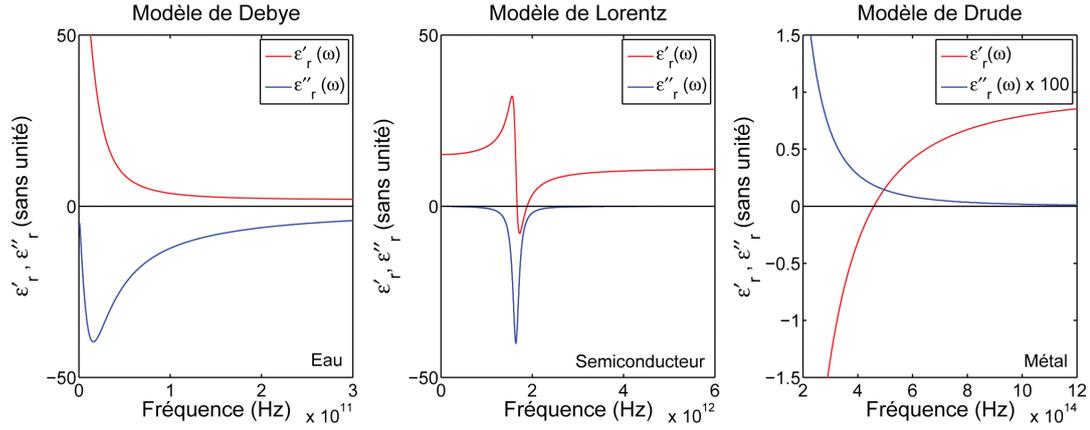


FIGURE 1.8 – A gauche : Modèle de Debye. Partie réelle (courbe rouge) et partie imaginaire (courbe bleu) de la fonction de permittivité diélectrique de l’eau calculée par la méthode de Debye, avec $\epsilon(0) = 81$, $\epsilon_\infty = 1.8$ et $\tau_d = 10$ ps, en fonction de la fréquence. Au milieu : Modèle de Lorentz. Partie réelle (courbe rouge) et partie imaginaire (courbe bleu) de la fonction de permittivité diélectrique d’un matériau semiconducteur calculée par la méthode de Lorentz, avec $N = 1e^{15} \text{ cm}^{-3}$, $\epsilon_\infty = 11$, $\omega_0 = \frac{\omega_p}{2}$ et $\gamma = \frac{\omega_0}{10}$, en fonction de la fréquence. A droite : Modèle de Drude. Partie réelle (courbe rouge) et partie imaginaire (courbe bleu) de la fonction de permittivité diélectrique d’un matériau métallique calculée par la méthode de Drude, avec $\epsilon_\infty = 1$, $\hbar\omega_p = 1.9$ eV et $\tau_d = 30$ fs, en fonction de la fréquence.

1.5 Permittivité diélectrique des matériaux : Quelques expressions utiles

1.5.1 Permittivité diélectrique du GaAs

Dans cette section sont détaillées les différentes expressions de $\epsilon(\omega)$ qui correspondent aux différents cas étudiés pour la simulation des modes dans les guides d’onde dont le matériau de cœur est du GaAs massif, en tenant compte si besoin de l’effet du dopage, des interactions avec le phonon LO et le phonon TO, ou de la présence d’un puits quantique.

1. Constante diélectrique dans le GaAs massif en tenant compte de l’absorption par les porteurs libres, modélisée avec le modèle de Drude :

$$\epsilon_{\text{GaAs, pl}}(\omega) = \epsilon_\infty \left(1 - \frac{\omega_{p, \text{GaAs}}^2}{\omega^2 + j\omega/\tau} \right) \quad (1.95)$$

où τ est le temps caractéristique de diffusion de électrons ($\tau = \gamma^{-1} \sim 0.15$ ps) ; la pulsation plasma des porteurs libres $\omega_{p, \text{GaAs}}$ est définie de façon à tenir compte

GaAs massif	Phonon LO	Phonon TO
Énergie E	36.1 meV	32.2 meV
Fréquence ν	8.75 THz	8.05 THz
Pulsation ω	54.8 THz	50.4 THz
Nombre d'onde $\tilde{\nu}$	291.1 cm ⁻¹	267.7 cm ⁻¹

TABLE 1.1 – Énergie des phonons dans le GaAs massif.

de l'écrantage par la constante diélectrique ϵ_∞ dans le GaAs :

$$\omega_{p, \text{GaAs}}^2 = \frac{Ne^2}{m^* \epsilon_0 \epsilon_\infty} \quad (1.96)$$

N est la concentration volumique de porteurs libres et m^* leur masse effective.

2. Constante diélectrique dans le GaAs massif en tenant compte des interactions avec les phonons :

$$\epsilon_{\text{GaAs,ph}}(\omega) = \epsilon_\infty \left(1 + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - j\omega\gamma_{\text{ph}}} \right) \quad (1.97)$$

où γ_{ph} est le facteur d'atténuation de l'amplitude par les phonons, et où ω_L et ω_T sont les pulsations respectives des phonons longitudinal optique (LO) et transverse optique (TO). L'indice effectif du GaAs est de fréquences [8.05 – 8.75 THz] est appelée la bande *Reststrahlen*.

3. Constante diélectrique dans le GaAs massif en tenant compte de l'effet plasmonique et des interactions avec les phonons :

$$\epsilon_{\text{GaAs,pl-ph}}(\omega) = \epsilon_\infty \left(1 + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - j\omega\gamma_{\text{ph}}} - \frac{\omega_{p, \text{GaAs}}^2}{\omega^2 + j\omega/\tau} \right) \quad (1.98)$$

4. Constante diélectrique dans un puits quantique de GaAs avec une transition inter-sous-bande :

Considérons un empilement de trois couches épitaxiées selon l'axe de croissance z et d'épaisseurs nanométriques, formant un puits quantique de GaAs entre deux fines barrières de potentiel en AlGaAs. Dans ce cas, le milieu n'est plus isotrope et l'on doit définir les composantes ϵ_{xx} , ϵ_{yy} et ϵ_{zz} du tenseur $\epsilon_{ij}(\omega)$.

$$\epsilon_{xx}(\omega) = \epsilon_{yy}(\omega) = \epsilon_\infty \left(1 - \frac{\omega_{p, \text{GaAs}}^2}{\omega^2 + j\omega/\tau_{\parallel}} \right) \quad (1.99)$$

$$\epsilon_{zz}(\omega) = \epsilon_\infty \left(1 - \frac{f_{12} \omega_{p, \text{QW}}^2}{\omega^2 - \omega_{12}^2 + 2j\omega\gamma_{\text{ISB}}} \right) \quad (1.100)$$

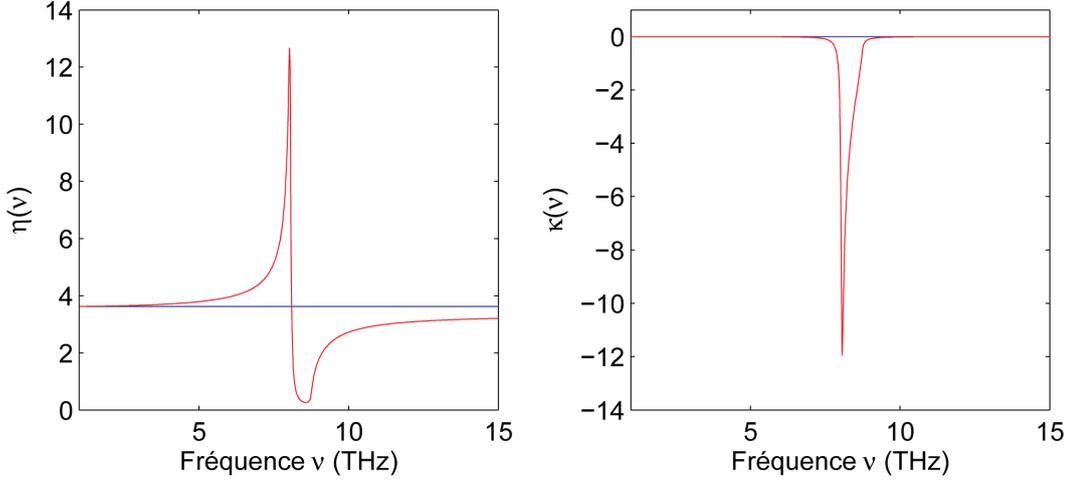


FIGURE 1.9 – Calcul de l'indice de réfraction du GaAs massif. Courbe bleue : modèle de Drude (Eq.1.95). Courbe rouge : modèle de Drude incluant les interactions avec les phonons (Eq.1.98).

où τ_{\parallel} est le temps caractéristique de diffusion des électrons dans le plan des couches et γ_{ISB} correspond de manière phénoménologique à la largeur à mi-hauteur de la transition inter-sous-bande, ω_{12} .

La force d'oscillateur f_{12} est liée à l'élément de matrice dipolaire d entre les fonctions enveloppe des deux sous-bandes. On pourra se reporter au chapitre 4 page 99 de la partie II pour plus d'explications sur ces aspects.

La pulsation plasma des porteurs libres $\omega_{p, \text{QW}}$ est définie de façon à tenir compte de l'écrantage par la constante diélectrique ϵ_{∞} dans le GaAs ainsi que de la largeur effective du QW L_{eff} , liée au confinement des fonctions d'ondes dans la direction z :

$$\omega_{p, \text{QW}}^2 = \frac{N_{2\text{D}} e^2}{m^* \epsilon_0 \epsilon_{\infty} L_{\text{eff}}} \quad (1.101)$$

avec $N_{2\text{D}}$, la concentration surfacique de porteurs libres dans le puits. En tenant compte des interactions avec les phonons, ces expressions deviennent :

$$\epsilon_{xx}(\omega) = \epsilon_{yy}(\omega) = \epsilon_{\infty} \left(1 - \frac{\omega_{p, \text{GaAs}}^2}{\omega^2 + j\omega/\tau_{\parallel}} + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - j\omega\gamma_{\text{ph}}} \right) \quad (1.102)$$

$$\epsilon_{zz}(\omega) = \epsilon_{\infty} \left(1 - \frac{f_{12} \omega_{p, \text{QW}}^2}{\omega^2 - \omega_{12}^2 + 2j\omega\gamma_{\text{ISB}}} + \frac{\omega_L^2 - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 - j\omega\gamma_{\text{ph}}} \right) \quad (1.103)$$

Ces relations simples fournissent une bonne approximation de la fonction diélectrique dans la gamme de fréquence d'intérêt (500 GHz – 10 THz). Elles seront utilisées dans la plupart des simulations présentées dans ce manuscrit.

1.5.2 Permittivité diélectrique des métaux dans la littérature

Les propriétés optiques des métaux ont été largement documentées dans la littérature. Pour la gamme de fréquences THz, nous utilisons les paramètres issus de l'article par *Ordal et al.* [106], qui rassemble les valeurs de ϵ_r' , ϵ_r'' , η et κ dans des tables de données pour la plupart des métaux.

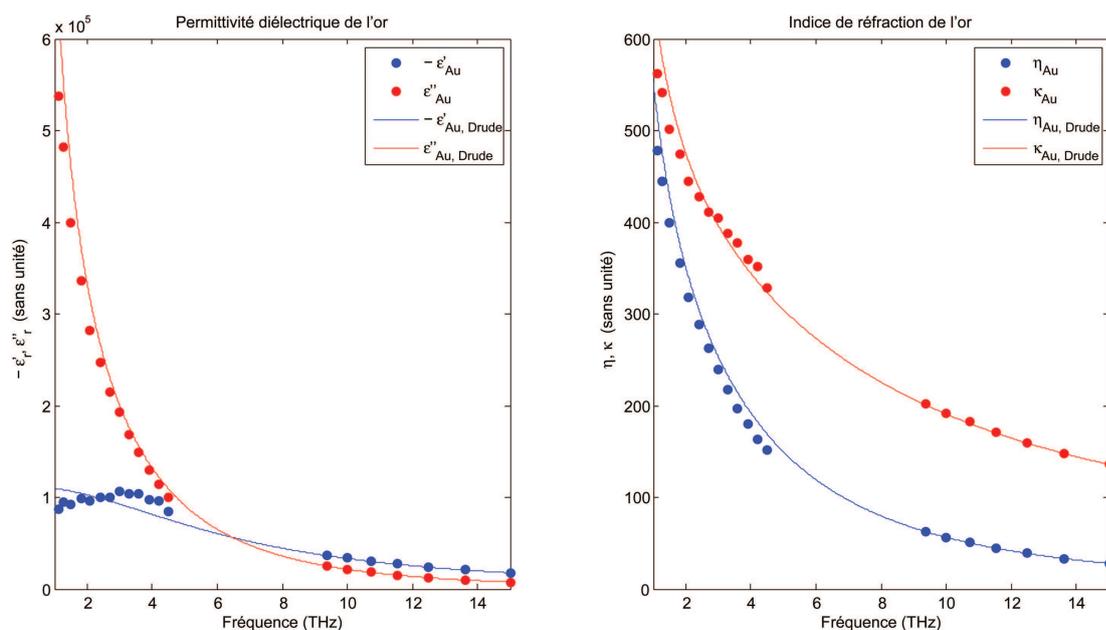


FIGURE 1.10 – A gauche : Parties réelle et imaginaire de la permittivité diélectrique de l'or dans la gamme de fréquences THz. A droite : Indice de réfraction et coefficient d'extinction de l'or dans la gamme de fréquences THz. Les points sont issus de mesures de réflectivité. Les courbes sont obtenues par calcul en utilisant le modèle de Drude avec $\epsilon_\infty = 1$, $\omega_p = 7.25 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$ et $\gamma = 216 \text{ cm}^{-1}$ [106].

Pour donner un exemple, j'ai reporté dans la figure 1.10 le cas de l'or. Les points correspondent aux valeurs collectées expérimentalement, les lignes correspondent quant à elles aux valeurs calculées à partir de la fonction diélectrique donnée par le modèle de Drude (cf. équation 1.90 page 25) en ajustant ω_p , γ et ϵ_∞ . Par la suite, lors des simulations de modes des guides et des résonateurs, j'utiliserai les résultats obtenus par le modèle de Drude pour la fonction diélectrique avec les paramètres phénoménologiques issus de cet article [110] pour la définition des indices de réfraction des métaux, en notant tout de même que, bien que l'approximation soit bonne pour les hautes fréquences, elle devient moins valable pour les fréquences inférieures à 6 THz pour ϵ_r'' et η .

1.5.3 Permittivité d'autres matériaux diélectriques

Pour les matériaux diélectriques en général, on se réfèrera au manuel [111]. Ainsi par exemple, pour le SiO_2 dans la gamme des fréquences THz, on trouve les valeurs suivantes pour ϵ'_r , ϵ''_r , η et κ : Par la suite, puisque ces valeurs varient assez lentement

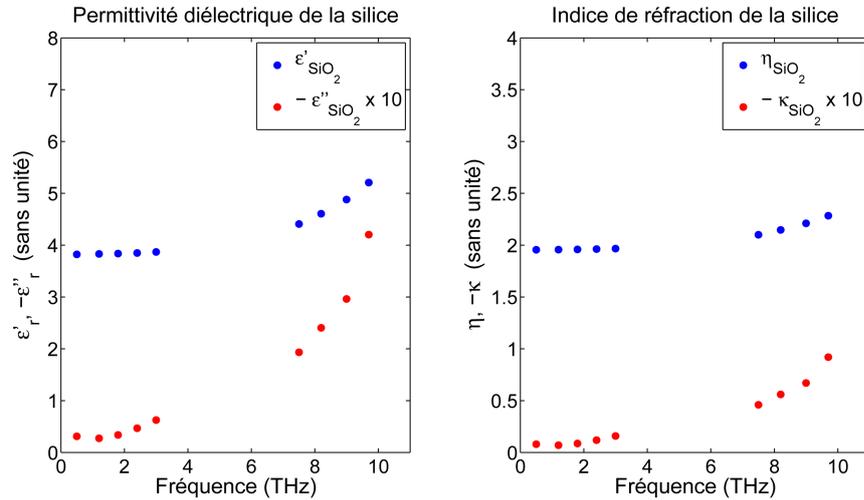


FIGURE 1.11 – A gauche : Parties réelle et imaginaire de la permittivité diélectrique de la silice dans la gamme de fréquences THz. A droite : Indice de réfraction et coefficient d'extinction de la silice dans la gamme de fréquences THz. Ces points sont issus de mesures de réflectivité reportées dans l'article par *Palik et al.*.

pas rapport à la fréquence, j'ai utilisé les valeurs approchées de ϵ'_r et ϵ''_r (ou η et κ) dans l'intervalle de fréquences d'intérêt lors des simulations de modes des guides et des résonateurs.

Propriétés spectrales des microcavités métal-métal THz

Un résonateur photonique est un objet qui permet de confiner la lumière dans une, deux, ou trois dimension(s), résultant en une quantification des modes optiques à un, deux ou trois nombre(s) de quantification. Dans le domaine de l'optoélectronique térahertz, et plus spécifiquement en ce qui concerne le guidage de la lumière dans un matériau semiconducteur, les trois principaux types de guides d'onde à une dimension sont :

- le guide d'onde diélectrique, couramment utilisé dans la gamme spectrale du visible au moyen infra-rouge,
- le guide d'onde plasmonique, longtemps utilisé dans la gamme du térahertz,
- et enfin le guide d'onde métal-métal, qui s'est finalement imposé comme le guide de prédilection pour le THz.

Dans cette partie, je présenterai la description mathématique des ondes de surface dans le cas d'une interface plane entre deux milieux qui possèdent des propriétés optiques différentes. Le cas particulier du guide d'onde unidimensionnel métal-métal sub-longueur d'onde dans la direction de confinement sera ensuite détaillé. Enfin, je décrirai les modes électromagnétiques confinés dans des micro-disques métalliques, puis je présenterai les étapes de fabrication ainsi que la caractérisation expérimentale de ces résonateurs.

2.1 Confinement sub-longueur d'onde dans un guide métal-métal THz

2.1.1 Confiner la lumière THz

Les paramètres cruciaux d'un guide d'onde sont le facteur de confinement Γ et les pertes optiques α du mode guidé. Dans le cas où la taille du résonateur est du même ordre de grandeur que la longueur d'onde de résonance, le mode guidé s'étend hors du volume d'intérêt sous forme d'un champ évanescent. Le facteur de confinement Γ est défini comme le rapport de l'énergie contenue dans le volume du coeur actif du dispositif sur l'énergie totale. Afin d'obtenir un bon confinement d'une onde THz dans un guide d'onde diélectrique, c'est-à-dire une onde électromagnétique de longueur d'onde $\lambda \sim 100 \mu\text{m}$, il faudrait que le coeur du guide (d'indice de réfraction n_c) ainsi que les gaines (d'indice n tel que $n < n_c$) soient de plusieurs dizaines de micromètres d'épaisseur. Ceci n'est pas une solution réaliste pour des dispositifs dont les matériaux diélectriques sont des semiconducteurs III-V obtenus par épitaxie par jet moléculaire (*molecular beam epitaxy*) (MBE).

Le problème est bien connu du domaine des microondes et a été résolu en utilisant un métal pour guider la lumière. Comme nous le verrons dans la partie 2.1.2, il est possible de guider la lumière à l'interface entre un diélectrique et un métal. Dans la gamme des fréquences THz, le métal reste presque idéal.

2.1.2 Plasmons de surface

Nous allons décrire les conditions d'existence des modes plasmoniques de surface, ou plasmons de surface [95]. Pour simplifier le problème, on se limitera dans cette section au cas où ϵ_1 et ϵ_2 sont réels.

Des ondes de surface peuvent exister à l'interface entre un diélectrique et un matériau métallique. Ce sont des polaritons, qui résultent du couplage entre un champ électromagnétique et les oscillations des électrons à la surface du métal. Ils correspondent au cas particulier où les solutions de 1.42 et 1.43 page 17 sont des exponentielles décroissantes de part et d'autre de l'interface.

Étudions le cas simple d'une interface plane séparant deux milieux homogènes, linéaires et non magnétiques ($\mu = 1$), telle que représentée dans la partie de gauche de la figure 2.1. Le milieu 1 est caractérisé par $\epsilon_1 = n_1^2$ dans le demi-espace $z > 0$ et le milieu 2 par $\epsilon_2 = n_2^2$ dans le demi-espace $z < 0$. L'onde se propage selon la direction x

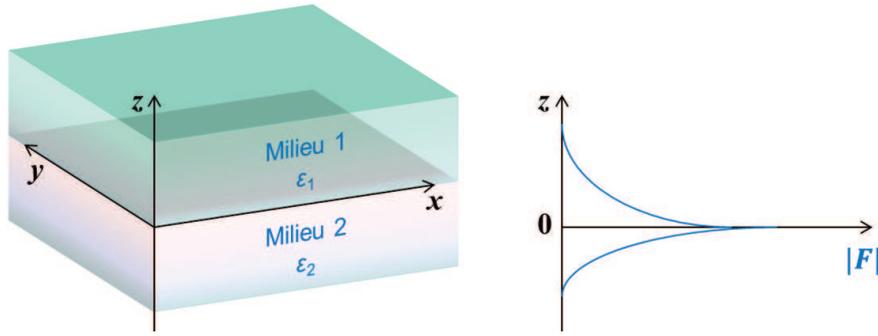


FIGURE 2.1 – A gauche : Interface plane séparant deux milieux isotropes et non magnétiques ($\mu = 1$), de permittivités respectives ϵ_1 pour $z > 0$ et ϵ_2 pour $z < 0$. A droite : Allure des composantes selon z des champs électromagnétiques ($|F| = |\vec{E}|$ ou $|\vec{H}|$) pour une onde de surface confinée à l'interface plane en $z = 0$.

indépendamment de y ($\partial/\partial y = 0$). Posons $\vec{F} = \vec{E}$ ou \vec{H} , . L'équation d'onde s'écrit :

$$\nabla^2 \vec{F} - \frac{\epsilon \mu \omega^2}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{F}}{\partial t^2} = \vec{0} \quad \text{pour } \vec{F} = \vec{E} \text{ ou } \vec{H}, \text{ tel que :} \quad (2.1)$$

$$\vec{F}(\vec{r}, t) = \text{Re} \left(\vec{F}(\vec{r}) e^{j\omega t} \right) \quad (2.2)$$

où $\vec{F}(\vec{r}) = \vec{F}(z) e^{-j\beta x}$ avec β , la constante de propagation de l'onde. Il vient que :

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} \vec{F}(z) + (\epsilon(z) k_0^2 - \beta^2) \vec{F}(z) = \vec{0} \quad (2.3)$$

où $\epsilon(z) = \epsilon_1$ pour $z > 0$ et $\epsilon(z) = \epsilon_2$ pour $z < 0$. La solution particulière recherchée est donc de la forme (cf. fig. 2.1, à droite) :

$$\vec{F}_1(z) = \vec{F}_1 e^{-k_1 z} \text{ pour } z > 0 \quad (2.4)$$

$$\text{et } \vec{F}_2(z) = \vec{F}_2 e^{+k_2 z} \text{ pour } z < 0 \quad (2.5)$$

avec $\text{Re}(k_i) > 0$ pour $i = 1$ et 2 .

Cherchons la relation de dispersion qui correspond à cette solution : **Polarisation TE** : Le champ est caractérisé par ses composantes E_y , H_x et H_z suivant les équations 1.44 à 1.46 page 17. Les conditions de continuité à l'interface en $z = 0$ impliquent que $k_1 = k_2 = 0$, ce qui contredirait l'hypothèse faite au départ que l'on a affaire à des ondes confinées. Donc les modes de surface, s'ils existent, ne peuvent pas être polarisés TE. **Polarisation TM** : Le champ est caractérisé par ses composantes H_y , E_x et E_z suivant les équations 1.58 à 1.60 page 18. En posant

$$k_1^2 = \beta^2 - \epsilon_1 k_0^2 \text{ pour } z > 0 \quad (2.6)$$

$$\text{et } k_2^2 = \beta^2 - \epsilon_2 k_0^2 \text{ pour } z < 0 \quad (2.7)$$

puis en utilisant les conditions de continuité à l'interface en $z = 0$, on trouve notamment que :

$$\frac{k_1}{k_2} = -\frac{\epsilon_1}{\epsilon_2} \quad (2.8)$$

Ayant fait l'hypothèse au départ d'ondes évanescentes en posant $\text{Re}(k_i) > 0$ pour $i = 1$ et 2, d'après 2.8 :

- la condition d'existence de ces ondes en polarisation TM est que ϵ_1 et ϵ_2 soient de signes opposés, c'est-à-dire que l'un de ces deux milieux ait un caractère métallique tandis que l'autre un caractère diélectrique,
- la constante de propagation s'écrit :

$$\beta = k_0 \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}} \quad (2.9)$$

dont la longueur d'onde associée est :

$$\lambda_{\text{onde de surface}} = \frac{2\pi}{\text{Re}(\beta)} = \frac{\lambda_0}{\text{Re}(n_{\text{eff}})} \quad (2.10)$$

avec l'indice effectif ainsi défini :

$$n_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}} \quad (2.11)$$

La généralisation des conditions d'existence des ondes de surface conduit à des conditions sur les indices effectifs. Nous venons de voir que pour une onde confinée, $\text{Re}(k_i) > 0$, autrement dit $\text{Re}\left(\sqrt{n_{\text{eff}}^2 - n_i^2}\right) > 0$ pour $i = 1$ et 2, ce qui n'est possible que pour une onde polarisé TM. Puisque ϵ_1 et ϵ_2 sont réelles, alors $\epsilon_1 < -\epsilon_2$. Un mode de surface peut donc effectivement exister entre un diélectrique et un métal ($\text{Re}(\epsilon_1) > 0$ et $\text{Re}(\epsilon_2) < 0$)

L'amplitude de l'onde évanescente est proportionnelle à l'exponentielle décroissante $e^{-\text{Re}(k_i)|z|}$, avec $i = 1$ du côté des $z > 0$ et $i = 2$ du côté des $z < 0$ (cf. Figure 2.1). Par définition, la longueur de pénétration de l'onde à l'intérieur du milieu i est la distance à laquelle l'amplitude du champ a décrû d'un facteur $1/e$:

$$L_i = \frac{1}{\text{Re}(k_i)} \quad (2.12)$$

Rappelons les relations suivantes :

$$\begin{aligned}\epsilon_i &= n_i^2 \\ n_{\text{eff}} &= \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}} \\ k_0 &= \frac{2\pi}{\lambda_0} \\ \beta &= k_0 n_{\text{eff}} \\ k_i^2 &= \beta^2 - \epsilon_i^2 k_0^2\end{aligned}$$

En posant $\epsilon_d = \epsilon_1$ et $k_d = k_1$ pour $z > 0$ du côté du milieu diélectrique, et $\epsilon_m = \epsilon_2$ et $k_m = k_2$ pour $z < 0$ du côté du métal, et en utilisant les relations rappelées ci-dessus, on écrit facilement les expressions de k_d et k_m :

$$k_d = \frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{n_{\text{eff}}^2 - \epsilon_d} \quad (2.13)$$

$$k_m = \frac{2\pi}{\lambda_0} \sqrt{n_{\text{eff}}^2 - \epsilon_m} \quad (2.14)$$

Dans la gamme des fréquences térahertz, ainsi que dans l'infrarouge moyen, les valeurs des constantes diélectriques des métaux $|\epsilon_m|$ sont très grandes devant les autres constantes diélectriques $|\epsilon_d|$. Dans le cas $|\epsilon_m| \gg |\epsilon_d|$, peut simplifier les expressions de k_d et k_m :

$$k_d \simeq j \frac{2\pi}{\lambda_0} \frac{\epsilon_d}{n_m} \quad (2.15)$$

$$k_m \simeq -j \frac{2\pi}{\lambda_0} n_m \quad (2.16)$$

d'où les expressions des longueurs L_i :

$$L_d \simeq \frac{\lambda_0}{2\pi} \left(\text{Im} \left(\frac{-\epsilon_d}{n_m} \right) \right)^{-1} \quad (2.17)$$

$$L_m \simeq \frac{\lambda_0}{2\pi} (\text{Im}(n_m))^{-1} \quad (2.18)$$

Les résultats numériques de ces deux paramètres sont reportés dans les tables 2.1 et 2.2 pour différentes valeurs de la longueur d'onde. La longueur de pénétration L_{Au} de l'onde électromagnétique dans l'or est calculée avec les valeurs de permittivité diélectrique issues de la référence [106]. La longueur de pénétration L_{GaAs} dans le GaAs est calculée avec les valeurs de permittivité diélectrique issues de la référence [110].

Fréquence ν	Longueur d'onde λ	L_{Au}	L_{Au}/λ
1 MHz	300 m	75 μm	$2.5 \cdot 10^{-7}$
10 MHz	30 m	24 μm	$7.9 \cdot 10^{-7}$
100 MHz	3 m	7.5 μm	$2.5 \cdot 10^{-6}$
1 GHz	30 cm	2.4 μm	$7.9 \cdot 10^{-6}$
10 GHz	3 cm	750 nm	$2.5 \cdot 10^{-5}$
100 GHz	3 mm	240 nm	$7.9 \cdot 10^{-5}$
1.0 THz	300 μm	85 nm	$2.7 \cdot 10^{-4}$
3.0 THz	100 μm	40 nm	$4.0 \cdot 10^{-4}$
300 THz	1 μm	29 nm	$2.9 \cdot 10^{-2}$

TABLE 2.1 – Profondeur de peau à l'intérieur du métal à l'interface semiconducteur/métal L_{Au} en fonction de la fréquence.

Fréquence (THz)	λ (μm)	L_{Au} (nm)	L_{GaAs}	$L_{\text{GaAs}}/L_{\text{Au}}$
0.9	318	85	4.1 mm	$4.8 \cdot 10^4$
3.0	100	40	0.67 mm	$1.7 \cdot 10^4$
4.5	67	32	0.33 mm	$1.0 \cdot 10^4$
300	1	29	69 nm	$2.4 \cdot 10^0$
670	0.45	38	16 nm	$4.2 \cdot 10^{-1}$

TABLE 2.2 – Profondeur de peau à l'intérieur du métal L_{Au} et du semiconducteur L_{GaAs} à l'interface semiconducteur/métal pour la gamme des fréquences du térahertz et de l'infrarouge moyen.

Dans la dernière colonne de la table 2.1, le rapport L_{Au}/λ rend compte de la fraction de la longueur d'onde qui pénètre dans le métal. Négligeable dans le domaine des microondes, il augmente progressivement avec la fréquence. Contrairement à ce que suggèrent les valeurs décroissantes de la profondeurs de pénétration L_{Au} , plus la fréquence se rapproche de la résonance plasmonique du métal, plus ce rapport est important. Il est intéressant de noter que les valeurs de ce paramètre à la fréquence $\nu = 3$ THz ($\lambda = 100 \mu\text{m}$) et à la fréquence $\nu = 300$ THz ($\lambda = 1 \mu\text{m}$) diffèrent de deux ordres de grandeur.

2.1.3 Confinement sub-longueur d'onde dans une dimension

L'étude du confinement dans un guide métal-métal THz est très importante car tous les résonateurs THz étudiés au cours de la présente thèse sont des micro-cavités métal-métal présentant un confinement sub-longueur dans au moins une dimension. D'autre part, la question fondamentale du dépassement de la limite de diffraction

dans les trois dimensions spatiales est au cœur de cette première partie.

Considérons un guide d'onde unidimensionnel composé d'un empilement de trois couches selon la direction z : un cœur diélectrique d'épaisseur L_z et de permittivité ϵ entre deux couches métalliques, comme représenté dans la partie gauche de la figure 2.2. On suppose que le tenseur diélectrique ϵ est isotrope. Un tel guide supporte uniquement des modes polarisés TM (cf. 2.1.2 page 32) caractérisés par les vecteurs de propagation k_z et $k_{\parallel} \in (xy)$, que l'on prendra pour simplifier égal à k_x .

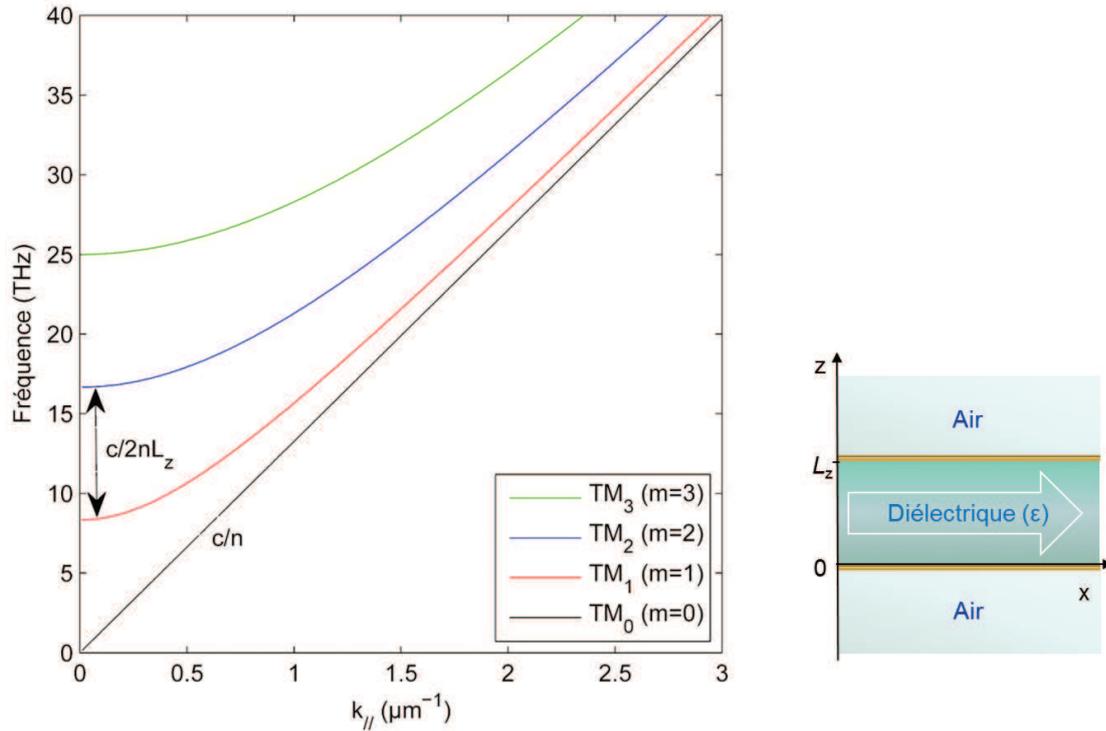


FIGURE 2.2 – Schéma d'un guide métal-métal 1D (à droite) et relation de dispersion des quatre premiers modes guidés TM (à gauche).

L'équation de Helmholtz (1.22 page 12) indique :

$$k_x^2 + k_z^2 = k_0^2 \epsilon = \frac{\omega^2}{c^2} \epsilon \quad (2.19)$$

A l'interface entre deux matériaux d'indices de réfraction différents, sous des conditions d'incidence normale par rapport à la surface, le coefficient de réflectivité R est lié à n et n_{eff} par la relation de Fresnel :

$$\rho = \frac{n_{\text{eff}} - n}{n_{\text{eff}} + n}, \text{ et } R = \rho \rho^* = |\rho|^2 \quad (2.20)$$

Cette définition du coefficient R est valable dans l'approximation des ondes planes, c'est-à-dire tant que l'épaisseur du guide L_z est très grande devant la longueur d'onde du mode confiné : $\lambda_{\text{eff}} = \frac{\lambda_0}{n_{\text{eff}}} < L_z$.

Pour que les modes propres de ce guide d'onde existent, la condition sur la phase doit être réalisée de sorte à ce que, après un aller-retour entre les deux interfaces métal/diélectrique en $z = 0$ et $z = L_z$, les interférences soient constructives, résultant en une onde stationnaire. Cette condition correspond à la partie imaginaire de la relation suivante :

$$\rho_1 \rho_2 e^{-2jk_z L_z} e^{2(\gamma-g)L_z} = 1 \quad (2.21)$$

où, ρ_1 et ρ_2 sont les coefficients de réflectivité aux interfaces semiconducteur/métal en $z = 0$ et $z = L_z$. Le coefficient γ est le coefficient d'atténuation de l'onde à travers le milieu diélectrique de la cavité, et le coefficient g rend compte du gain dans le diélectrique. Dans le cas d'une cavité passive, c'est-à-dire dans laquelle le milieu ne fournit pas de gain, $g = 0$. Si de plus on néglige les pertes par absorption dans le diélectrique, $\gamma = 0$. Dans l'approximation que le métal est parfait aux interfaces métal/diélectrique en $z = 0$ et $z = L_z$ ($\rho = \rho^*$), la condition sur la phase est satisfaite lorsque :

$$\arg(\rho_1) + \arg(\rho_2) + 2k_z L_z = 2m\pi \quad , m = 0, 1, 2, \dots \quad (2.22)$$

avec $\arg(\rho_{1,2}) \equiv \pi \pmod{2\pi}$, d'où :

$$2k_z L_z = 2m\pi \quad (2.23)$$

$$L_z = m \frac{\lambda_0}{2n} \quad (2.24)$$

où λ_0 est la longueur d'onde dans l'espace libre et n , l'indice de réfraction du cœur du guide, la solution $m = 0$ étant permise pour les modes TM. En substituant $k_z = m \frac{\pi}{L_z}$ dans l'équation 2.19, on obtient la relation de dispersion des modes de cette cavité :

$$\frac{\omega^2}{c^2} \epsilon = k_x^2 + \frac{\pi^2}{L_z^2} m^2 \quad (2.25)$$

D'après les équations de Maxwell, en utilisant l'approximation du métal parfait pour les conditions de continuité des composantes tangentielles des champs aux interfaces, les solutions polarisées TM sont de la forme :

$$H_y = C_1 \cos \frac{m\pi z}{L_z} e^{-jk_x x} \quad (2.26)$$

$$E_z = C_2 \cos \frac{m\pi z}{L_z} e^{-jk_x x} \quad (2.27)$$

$$E_x = C_3 \sin \frac{m\pi z}{L_z} e^{-jk_x x} \quad (2.28)$$

La relation de dispersion des quatre premiers modes guidés TM de cette cavité est tracée dans le graphe de droite de la figure 2.2.

Le mode fondamental, noté TM_0 , coïncide avec le cône de lumière $\omega = \frac{c}{\sqrt{\epsilon}} k_{\parallel}$. Contrairement aux modes d'ordres supérieurs, qui sont des hyperboles séparées par l'intervalle $c/2nL_z$, ce mode n'a pas de fréquence de coupure, et il est indépendant de la dimension L_z . Ainsi, les cavités dont la dimension L_z est inférieure à $\lambda_0/2n$ supportent *uniquement* le mode TM_0 . Dans la suite de cette première partie sur les cavités THz, ainsi que dans la seconde partie sur les lasers à cascade quantique THz, on traitera essentiellement les cas où $L_z < \frac{\lambda_0}{2n}$ (pour $\lambda_0 = 100 \mu\text{m}$ et $n_{GaAs} = 3.6$, cela correspond à la condition $L_z < 13.9 \mu\text{m}$).

2.1.4 Réflectivité induite par le métal en bord de cavité

Dans une telle cavité ($L_z < \frac{\lambda_0}{2n}$), considérons maintenant que le métal présente un bord dans une direction du plan (x, y) , et supposons que le mode TM_0 existe dans le cœur du guide. Notons n_{eff} son indice effectif, et n l'indice du diélectrique dans le demi-espace $z > 0$. Rappelons qu'à l'interface entre deux matériaux d'indices de réfraction différents, le coefficient de réflectivité ρ est décrit par la relation de Fresnel (2.20) : $\rho = \frac{n_{\text{eff}} - n}{n_{\text{eff}} + n}$ et que cette définition du coefficient de réflectivité R (tel que $R = \rho\rho^*$) n'est valable que tant que l'épaisseur du guide L_z est grande devant la longueur d'onde du mode confiné.

Pour le travail présenté dans la section 2.2 page 42, ainsi que pour l'étude des performances des QCLs en fonction de l'épaisseur de la région active présentée dans le chapitre 5 page 139 de la partie II, il est nécessaire de connaître le comportement de R lorsque cette condition sur L_z n'est plus respectée. Comme la valeur de L_z décroît, l'indice effectif n_{eff} dans le cœur du guide augmente, modifiant ainsi les conditions de réflexion sur la phase et l'amplitude du mode à l'interface avec l'espace libre. Cette question a déjà été traitée dans la littérature, et l'on peut ainsi estimer la dépendance $R(L_z)$ à partir de plusieurs méthodes [37, 57]. Les résultats de ces méthodes sont reportés dans le graphe de droite de la figure 2.3 (courbes noire et bleue). Ici, je présente une méthode analytique d'extraction du coefficient R à partir de simulations par une méthode de calcul par éléments finis (*finite elements method*) (FEM).

La méthode consiste à considérer un guide métal-métal bidimensionnel, d'épaisseur variable L_z , tel que représenté par le schéma de gauche de la figure 2.3. On injecte ensuite, loin dans la région des $x < 0$, une onde plane monochromatique polarisée TM de façon à exciter le mode fondamental de ce résonateur (le mode TM_0). Afin d'extraire des informations concernant le coefficient R de l'interface en $x = 0$, on peut par exemple s'intéresser à la composante principale du champ magnétique à l'intérieur du guide pour le mode fondamental, qui est affectée par la valeur du coefficient de

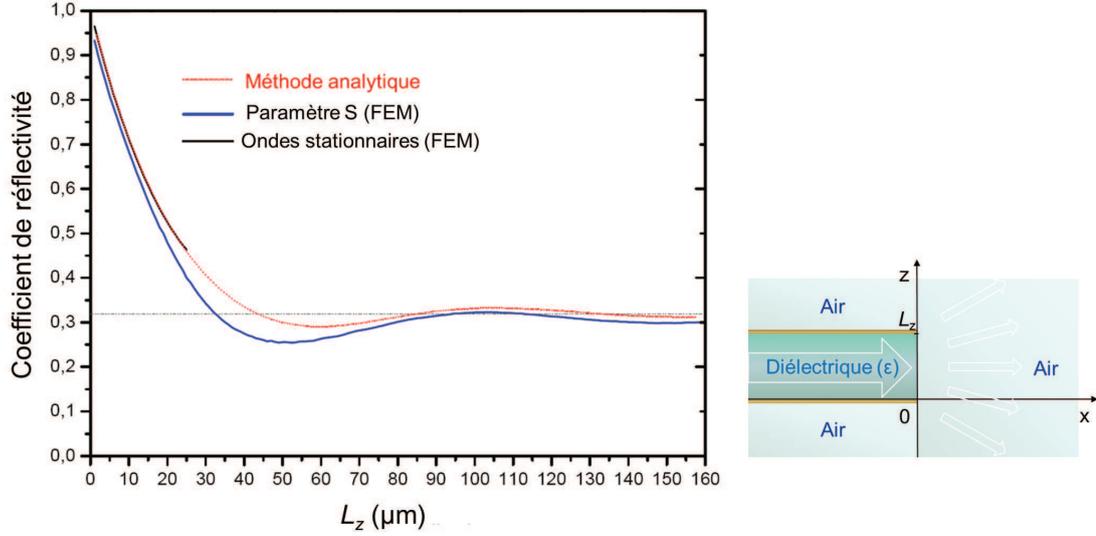


FIGURE 2.3 – A gauche : Étude de la variation du coefficient de réflectivité R en fonction de la valeur de L_z par trois différentes méthodes (courbe en pointillés rouge, courbes noire et bleue), où l'on a fixé la longueur d'onde $\lambda_0 = 100 \mu\text{m}$, l'indice de réfraction $n = 1$ dans l'air et $n = 3.6$ dans le diélectrique (GaAs) ($\lambda_{\text{eff}} \approx 27.8 \mu\text{m}$). La ligne pointillée noire correspond à la valeur obtenue en utilisant la relation de Fresnel 2.20. A droite : Schéma du bord d'un guide métal-métal d'épaisseur L_z . La discontinuité du film de métal en $x = 0$ induit un fort désaccord d'impédance en bord de guide.

réflectivité de la façon suivante :

$$H_y(x, t) = H_y e^{-j(k_x x - \omega t)} + \rho H_y e^{j(k_x x + \omega t)}, \quad (2.29)$$

$$\text{et } |H_y(x, t)|^2 = H_y^2(1 + R) + 2H_y^2 \rho \cos(2k_x x) \quad (2.30)$$

La relation 2.29 n'est valable que tant que $L_z < \lambda_{\text{eff}}$. Sinon, le mode de la cavité est une superposition de plusieurs modes d'ordre supérieur ou égal à zéro (cf. section 2.1.3 page 36), ce qui se traduirait par plus de deux termes dans le membre de droite de l'équation 2.29. La relation 2.30 est valable dans l'approximation que tous les matériaux sont sans pertes et que le métal est un conducteur parfait ($\rho = \rho^*$). Cette fonction décrit l'évolution spatiale du module du champ H_y de l'onde stationnaire. Elle présente des *maxima* et des *minima* avec une périodicité de $\lambda_{\text{eff}}/2$, représentés en échelle de couleurs dans la figure 2.4 (respectivement en rouge et en bleu). Pour connaître R , il reste donc à relever les valeurs prises par ces deux paramètres en fonction de l'épaisseur L_z :

$$\text{Max}[|H_y|^2] = H_y^2(1 + R) + 2H_y^2 \rho = |H_y|_{\text{max}}^2 \quad (2.31)$$

$$\text{Min}[|H_y|^2] = H_y^2(1 + R) - 2H_y^2 \rho = |H_y|_{\text{min}}^2 \quad (2.32)$$

Le coefficient de réflectivité est ainsi connu pour chaque valeur de L_z :

$$R = \left(\frac{|H_y|_{\max}^2 + |H_y|_{\min}^2}{|H_y|_{\max}^2 - |H_y|_{\min}^2} - \sqrt{\left(\frac{|H_y|_{\max}^2 + |H_y|_{\min}^2}{|H_y|_{\max}^2 - |H_y|_{\min}^2} \right)^2 - 1} \right)^2 \quad (2.33)$$

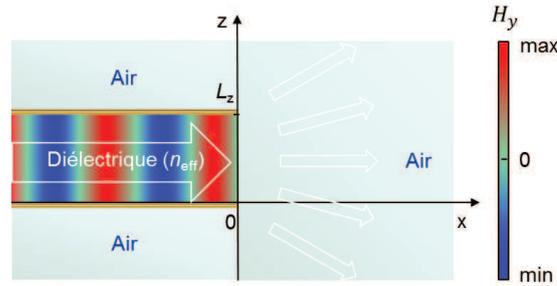


FIGURE 2.4 – Schéma du bord d'un guide métal-métal qui supporte un mode TM pour une valeur de L_z donnée. L'amplitude de la composante selon y du champ magnétique est représentée en échelle de couleurs, du bleu au rouge en changeant de signe avec la périodicité $\lambda_{\text{eff}}/2$. Une coupe en $z = L_z/2$ montrerait une évolution spatiale de l'amplitude du champ sinusoïdale, d'où l'on peut ensuite extraire les amplitudes $\text{Max}[|H_y|^2]$ et $\text{Min}[|H_y|^2]$ pour le calcul de R (2.33).

Le résultat en fonction de L_z obtenu par cette méthode correspond à la courbe en pointillés rouge dans le graphe de droite de la figure 2.3. On peut remarquer que lorsque la valeur de L_z est comparable ou inférieure à la longueur d'onde effective du mode λ_{eff} , la réflectivité de l'interface en $x = 0$ s'éloigne rapidement de la valeur obtenue par la relation de Fresnel, d'après laquelle R est une constante qui vaut $R = 31.95\%$ pour $n_{\text{eff}} = 3.6$ et $n = 1$. Ce résultat est en très bon accord avec les deux autres méthodes tant que $L_z < \lambda_{\text{eff}}$.

On retiendra de ce développement que le coefficient R prend principalement deux valeurs selon l'épaisseur de guide L_z :

$$R \approx 0.32 \quad \text{pour } L_z \geq \lambda_{\text{eff}} \quad (2.34)$$

$$R \rightarrow 1 \quad \text{pour } L_z \ll \lambda_{\text{eff}} \quad (2.35)$$

Ce résultat est extrêmement utile car cela signifie que dans un guide métal-métal sub-longueur d'onde, la quasi-totalité de l'énergie du mode se situe dans le cœur du guide. Pour apprécier cette propriété des guides métal-métal térahertz, l'on pourra se reporter à la figure 4.4 page 106 dans laquelle le profil du mode guidé est tracé pour différentes configurations de guides d'onde térahertz.

2.2 Simulation du confinement dans une micro-cavité purement photonique

Les dimensions des cavités THz *purement photoniques* sont contraintes par la limite de diffraction, condition d'existence d'une onde stationnaire dans la cavité. Selon cette condition, au moins une des dimensions spatiales doit être supérieure ou égale à la demi-longueur d'onde effective de la résonance. La question qui a motivé le travail présenté dans cette partie est la suivante : *A-t-on atteint les limites de confinement avec les micro-cavités THz connues ?*

Après une description du micro-disque métal-métal térahertz *purement photonique* bien connu dans le proche infra-rouge [96] et le térahertz [144], je présenterai la proposition faite par J. Faist et al. [153, 52] pour diminuer le volume effectif du mode de cavité : $V_{\text{eff}} = L_x L_y L_z / \lambda_{\text{eff}}^3$. Cette solution, appelée *résonateur LC*, est remarquable car elle a permis de démontrer le record du micro-laser THz le plus petit. Malgré un volume effectif très réduit, les dimensions de ce dispositif obéissent toujours à la limite de diffraction. Le mode fondamental reste le mode *dipolaire électrique*, et ces cavités restent en conséquence des résonateurs *purement photoniques*. Pour réduire davantage le volume effectif, il faut parvenir à contourner cette limite fondamentale, qui s'applique à tout type de cavité photonique.

Ce problème a inspiré la solution développée pendant ma thèse, qui consiste à développer des *résonateurs hybrides*. Conçus à partir d'une microcavité métal-métal *purement photonique*, ces résonateurs supportent un nouveau mode fondamental : le mode *dipolaire magnétique*. Ces dispositifs feront l'objet du chapitre 3.

2.2.1 Modes de résonance d'une micro-cavité

Dans cette section, je présente la description mathématique des modes confinés dans une micro-cavité métal-métal telle que schématisé par la figure 2.5. Je m'appuierai sur les développements de la section 1.3 page 15 sur les ondes guidées, ainsi que sur les résultats précédents de cette section, en particulier ceux illustrés par les figures 2.2 page 37 et 2.3 page 40.

Cette fois, on s'intéressera à ce qu'impliqueraient de fixer les dimensions de la couche métallique située en $z = L_z$, jusqu'à présent supposées infinies ou semi-infinies dans le plan (x, y) . Supposons que la surface de cette couche soit délimitée de façon à former un rectangle de dimensions L_x et L_y . Dans ce cas, la relation 2.21 devient :

$$\begin{cases} 1 - \rho_1 \rho_2 e^{-2jk_x L_x} \\ 1 - \rho_1 \rho_2 e^{-2jk_y L_y} \end{cases} = \vec{0} \quad (2.36)$$

Ici, on pourra considérer que $\rho_1 = \rho_2 = \rho \approx 1$ [57]. On aboutit ainsi à la quantifica-

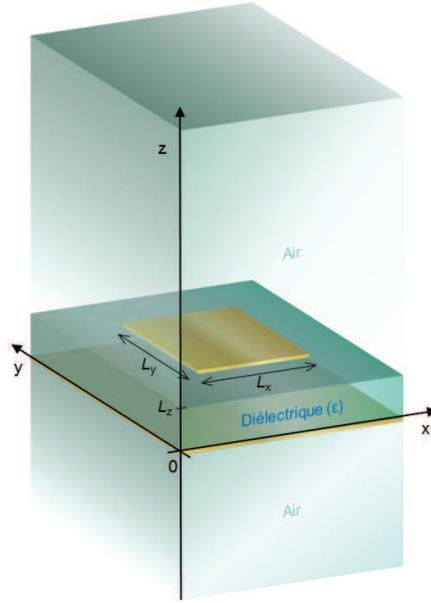


FIGURE 2.5 – Schéma d'une microcavité métal-métal carrée

tion des composantes k_x et k_y du vecteur d'onde k_{\parallel} :

$$k_{\parallel}^2 = k_x^2 + k_y^2 = \frac{p^2 \pi^2}{L_x^2} + \frac{q^2 \pi^2}{L_y^2} \text{ avec } p = 0, 1, 2, \dots \text{ et } q = 1, 2, \dots \quad (2.37)$$

($p = q = 0$ n'étant pas une solution permise car elle impliquerait $k_x = k_y = 0$). La composante principale du champ magnétique peut alors s'écrire :

$$H_y \propto \cos \frac{p\pi x}{L_x} \sin \frac{q\pi y}{L_y} \cos \frac{m\pi z}{L_z} \quad (2.38)$$

et donc pour $L_z < \lambda_{\text{eff}}$, $m = 0$, les modes de cavité sont caractérisés par les deux nombres quantiques p et q (noté TM_{pq}) :

$$H_y \propto \cos \frac{p\pi x}{L_x} \sin \frac{q\pi y}{L_y} \quad (2.39)$$

$$E_z \propto \cos \frac{p\pi x}{L_x} \cos \frac{q\pi y}{L_y} \quad (2.40)$$

Cette méthode analytique, valable pour une microcavité de section rectangulaire, permet de mieux comprendre le rôle de la réflexion à l'interface semiconducteur/air. Or, pour des raisons de simplicité au cours des étapes de micro-fabrication des résonateurs en salle blanche, les cavités fabriquées sont de forme cylindrique. Ce problème est plus difficile à résoudre de façon analytique à cause de la symétrie infinie dans

la direction radiale du micro-disque. Ce type de cavité supporte des modes appelés *modes de galerie*. Comme dans le cas de la microcavité de section rectangulaire, ces modes sont confinés à l'intérieur de la cavité par réflexion totale à l'interface semi-conducteur/air, et doivent également satisfaire à la condition sur la phase après un tour complet dans la cavité. Plusieurs approches ont été proposées pour résoudre ce problème. Par exemple l'article par *Armaroli et al.*[2] décrit une approche vectorielle du problème dans les trois dimensions. La méthode présentée ici est issue de l'article par *Heebner et al.*[64], par laquelle le problème à trois dimensions est réduit à un problème à "deux plus une" dimensions. Repartons de l'équation de Helmholtz 1.22 pour le vecteur \vec{F} , qui peut être indifféremment \vec{E} ou \vec{H} :

$$\nabla^2 \vec{F}(\vec{r}) + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 n^2 \vec{F}(\vec{r}) = \vec{0} \quad (2.41)$$

et écrivons-la en coordonnées cylindriques :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{n^2 \omega^2}{c^2} \right) \vec{F} = \vec{0} \quad (2.42)$$

Faisons comme précédemment l'hypothèse que tous les modes de cette cavités peuvent être classifiés comme des modes purement TE ou TM. Cette approximation permet de réduire la complexité du problème et de découpler le problème planaire du problème vertical, et de procéder ainsi que nous l'avons fait dans la section 1.3.2. Les composantes principales du champ pour les modes TE sont H_z , E_ρ et E_θ , tandis que celles pour les modes TM sont E_z , H_ρ et H_θ . Ces composantes peuvent être factorisées sous la forme d'un produit de trois fonctions indépendantes :

$$F_z = \Phi(\rho)\Theta(\theta)G(z) \quad (2.43)$$

Dans ce cas, l'équation 2.42 appliquée à F_z fournit les trois équations suivantes :

$$\frac{d^2 G}{dz^2} + \frac{\omega^2}{c^2} (n^2 - n_\xi^2) G = 0 \quad (2.44)$$

$$\frac{d^2 \Theta}{d\theta^2} + m^2 \Theta = 0 \quad (2.45)$$

$$\frac{d^2 \Phi}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\Phi}{d\rho} \left(\frac{n_\xi^2 \omega^2}{c^2} - \frac{m^2}{\rho^2} \right) \Phi = 0 \quad (2.46)$$

où l'indice ξ est soit TE, soit TM, et m est le nombre azimutal (entier). Dans l'équation 2.44, on reconnaît $G(z)$ comme la fonction propre du guide plan d'indice effectif n_ξ . Les solutions de l'équation 2.45 sont de type $\Theta(\theta) = e^{-jm\theta}$. L'équation 2.46 décrit la dépendance radiale du mode. Ainsi, pour un disque de rayon r , si $\rho \leq r$, $\Phi(\rho)$ peut

être décrite par des fonctions de Bessel de première espèce, et si $\rho > r$, $\Phi(\rho)$ par des fonctions de Hankel de seconde espèce :

$$\Phi(\rho) = N \mathcal{J}_m(kn_\xi \rho), \text{ pour } \rho \leq r \quad (2.47)$$

$$\Phi(\rho) = NB \mathcal{H}_m^{(2)}(k\rho), \text{ pour } \rho > r \quad (2.48)$$

où N est une constante de normalisation, le vecteur d'onde $k = \frac{\omega}{c}$, en posant $B = \frac{\mathcal{J}_m(kn_\xi r)}{\mathcal{H}_m^{(2)}(kr)}$ et en faisant l'hypothèse que la microcavité est entourée par de l'air ($n = 1$).

En imposant les conditions de continuité aux interfaces aux composantes tangentielles des champs \vec{E} et \vec{H} , on obtient les relations de dispersion suivantes :

$$n_{\text{TM}} \frac{\dot{\mathcal{J}}_m(kn_\xi r)}{\mathcal{J}_m(kn_\xi r)} - \frac{\dot{\mathcal{H}}_m^{(2)}(kr)}{\mathcal{H}_m^{(2)}(kr)} = 0 \text{ pour les modes TM} \quad (2.49)$$

$$\frac{\dot{\mathcal{J}}_m(kn_\xi r)}{\mathcal{J}_m(kn_\xi r)} - n_{\text{TE}} \frac{\dot{\mathcal{H}}_m^{(2)}(kr)}{\mathcal{H}_m^{(2)}(kr)} = 0 \text{ pour les modes TE} \quad (2.50)$$

Ainsi, pour obtenir les fréquences de résonance $\tilde{\omega}$ de la cavité, il suffit de résoudre numériquement ces équations pour k . La fréquence de résonance $\tilde{\omega}$ est complexe, et ce, même dans le cas où n_ξ est réel. Ceci est dû au fait que les flancs de cavité sont courbes. Dans cette géométrie, tous les modes de résonance subissent des pertes radiatives.

Cette méthode est valable pour $p = 1$, où p est le nombre de *maxima* du champ selon la direction radiale. Pour d'autres valeurs de p , il suffit d'introduire un niveau de quantification supplémentaire selon cette direction.

La condition sur la phase pour des modes de galerie avec $p = 1$ s'écrit :

$$2\pi r = m \frac{\tilde{\lambda}}{n} = \frac{2\pi c}{n\tilde{\omega}} \quad (2.51)$$

Une fois les fréquences de résonance connues, on peut utiliser les équations 2.47 et 2.48 afin de trouver les fonctions radiales $\Phi(\rho)$ pour les modes TE et TM. Les fonctions $\Theta(\theta)$ et $G(z)$ étant connues, on peut écrire la composante E_z ou H_z des champs. Une fois que l'une de ces deux composantes est connue, l'autre peut être calculée à partir des équations de Maxwell.

2.2.2 Facteur de qualité

Dans la section précédente, il est démontré qu'une cavité résonante peut supporter des fréquences discrètes d'oscillation, chacune présentant une configuration particulière des champs \vec{E} et \vec{H} (cf. Eq.2.39 et 2.40). Cela implique que si l'on tente d'exciter un mode particulier d'oscillation dans la cavité, par quelque moyen que ce

soit, rien ne se passera à moins que la fréquence choisie soit exactement égale à la fréquence de résonance du mode considéré.

En réalité, on observe la résonance pour une fine gamme de fréquences autour de la fréquence nominale de résonance à la place de la fonction *delta* attendue. Dans le cas idéal, les pertes dans les matériaux sont supposées connues et les pertes radiatives peuvent être estimées. Dans l'hypothèse où les pertes radiatives sont très faibles par rapport aux autres pertes, la principale cause de cet écart avec le cas idéal peut provenir d'une dissipation de l'énergie dans les parois de la cavité, ainsi que parfois dans les matériaux diélectriques qui la composent. Une façon de quantifier la qualité de la réponse d'une cavité à une excitation externe est le facteur Q de la cavité, défini comme 2π fois le rapport de la moyenne temporelle de l'énergie stockée dans la cavité avec celle perdue par cycle :

$$Q = \omega_0 \frac{\text{Energie stockée}}{\text{Puissance dissipée}} \quad (2.52)$$

où ω_0 est la fréquence de résonance dans le cas idéal sans pertes. On peut montrer que la forme de la résonance est de la forme :

$$|E(\omega)|^2 \propto \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + (\omega_0/2Q)^2} \quad (2.53)$$

où l'on tient compte de l'amortissement en fréquence [69]. Une oscillation amortie de la sorte n'est plus définie par une fréquence pure, mais par une superposition de fréquences autour de ω_0 . La largeur à mi-hauteur de cette distribution de fréquences, notée $\delta\omega$, est égale à ω_0/Q .

On peut aussi déterminer le facteur de qualité Q d'une cavité à partir de la connaissance de la valeur complexe de la fréquence de la résonance $\tilde{\omega}$:

$$Q \approx \frac{\text{Re}(\tilde{\omega})}{2|\text{Im}(\tilde{\omega})|} \quad (2.54)$$

La présence de pertes ohmiques diminue toujours la fréquence de résonance. Ceci n'est valable que dans l'approximation que les conditions aux bords correspondent au cas de bons conducteurs.

2.2.3 Excitation des modes de cavité par un faisceau incident

Ces modes de résonances peuvent être excités soit par une source de rayonnement externe, soit par une source de photons intra-cavité. Dans ce chapitre, on se limitera à l'étude de l'excitation des modes de résonance par une source externe provenant du rayonnement d'un corps noir. En pratique, il s'agit de la source interne du FTIR, focalisée sur l'échantillon *via* un système de miroirs (cf. Schéma 2.9 page 52). Le cas d'une source interne sera abordé dans la section 3.3.1 page 71 du chapitre 3.

Dans un spectre de réflectivité, l'intensité du faisceau réfléchi chute pour des fréquences proche de la fréquence propre de chacun des modes. La distribution spatiale des amplitudes des champs \vec{E} et \vec{B} sous le métal conditionne le couplage entre chacun des modes propres de la cavité et l'onde incidente, selon trois critères principaux : sa polarisation, l'angle d'incidence ϕ , et l'orientation de la cavité dans le plan (xy) . Notons que dans le cas des micro-disques, la symétrie infinie de la géométrie de la cavité dans le plan (xy) rend équivalentes toutes les rotations de la cavité dans le plan (xy) . Pour une onde se propageant dans la direction $x > 0$, peut se coupler avec le mode TM_{10} ou le mode TM_{01} selon sa polarisation (cf. figure 2.6) si son angle d'incidence est strictement positif. Le couplage se fait *via* le champ \vec{E} , et dépend de l'amplitude de la composante E_z du rayon incident. D'un point de vue qualitatif, pour une intensité incidente donnée, la projection de \vec{E} sur l'axe z augmente avec l'angle ϕ , donc le couplage augmente. Le même raisonnement qualitatif peut être appliqué à tous les modes de résonance de la cavité.

Le logiciel commercial COMSOL Multiphysics a été choisi pour la modélisation de cette cavité ainsi que des cavités hybrides qui feront l'objet du chapitre 3.

1. Pour trouver les modes propres d'une cavité isolée, un micro-disque métal-métal composé d'un cylindre semiconducteur de diamètre d , d'épaisseur L_z et de permittivité $\epsilon_r = \epsilon_{GaAs}$, surmonté d'un disque métallique de même diamètre, de 200 nm d'épaisseur, et de permittivité $\epsilon_r = \epsilon_{Au}$ est préparé. Le plan métallique inférieur peut être simulé en première approximation en imposant la condition au bord d'un conducteur électrique parfait ($E_{\parallel} = 0$ à l'interface). Les valeurs de ϵ_{GaAs} et ϵ_{Au} sont ajustées en fonction de la gamme de fréquences d'intérêt à partir de la relation 1.97 page 27 pour le GaAs non dopé, avec $\epsilon_{\infty} = 11.1$, $\omega_L = 291.5 \text{ cm}^{-1}$, $\omega_T = 268.2 \text{ cm}^{-1}$, $\gamma_{ph} = 2.3 \text{ cm}^{-1}$, et à partir de l'équation 1.90 page 25 (modèle de Drude) avec $\epsilon_{\infty} = 1$, $\omega_p = 7.25 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$ et $\gamma = 216 \text{ cm}^{-1}$ [106]. La cavité est incluse dans une boîte rectangulaire d'indice de réfraction $n = 1$. La condition imposée au bord des interfaces restantes est une condition de diffusion homogène. Pour vérifier l'effet de la présence des cavités voisines, il suffit de remplacer cette condition aux bords par une condition périodique pour les interfaces opposées deux à deux. Cette simulation est répétée pour différentes valeurs de paramètres d et L_z . Le mode fondamental TM_{10} (ou TM_{01} de façon équivalente pour des raisons de symétrie) existe à la fréquence $\nu_{TM_{01}} = 5.0 \text{ THz}$. La distribution spatiale de sa composante E_z est représentée en haut à droite de la figure 2.6. Le mode TM_{11} existe à la fréquence $\nu_{TM_{11}} = 7.2 \text{ THz}$ et la distribution spatiale de la composante E_z qui correspond à ce mode est reportée en bas à droite de la figure 2.6.
2. L'équivalent d'un spectre de réflectivité peut être obtenu en résolvant le problème en propagation harmonique. Pour cela, la face supérieure de la boîte rectangulaire est définie comme un port d'excitation duquel est lancée une

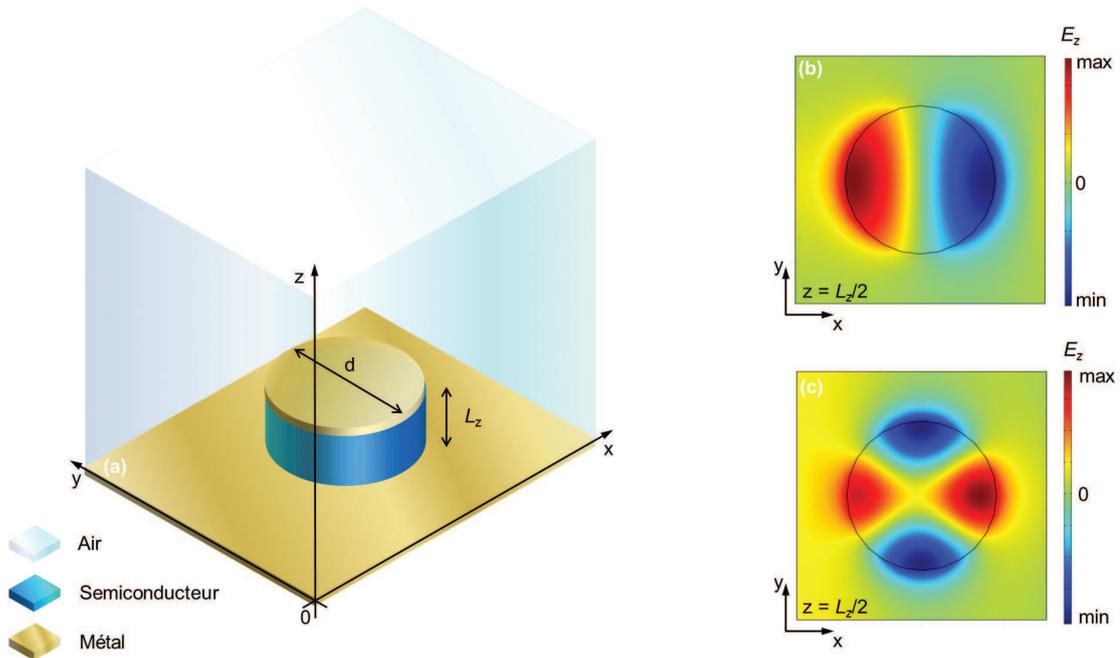


FIGURE 2.6 – Exemple de simulation d'un micro-disque métal-métal *purement photonique* de diamètre $d = 9 \mu\text{m}$ et d'épaisseur $L_z = 1 \mu\text{m}$. L'indice de réfraction utilisé pour le métal est celui de l'or [106] (cf. 1.10 page 29), tandis que pour le semiconducteur, on a fait l'approximation que $n = 3.6$ (approximation valable pour le GaAs tant que $\nu < 7 \text{ THz}$, cf. 1.9 page 28). A gauche : Schéma de la géométrie utilisée pour simuler les modes propres de la cavité *purement photonique*. A droite : La composante principale du champ électrique E_z à travers la section $z = L_z/2$ pour les deux premiers ordres des modes de cette cavité est tracée en échelle de couleurs ($E_z > 0$ en rouge, $E_z < 0$ en bleu).

onde plane définie par sa constante de propagation β et sa polarisation. Dans ce cas, les permittivités des matériaux peuvent être définies comme des fonctions dépendantes de la fréquence. Le spectre de réflectivité est alors obtenu en intégrant le flux du signal sortant par la face supérieure de la boîte normalisé par le flux entrant.

2.3 Fabrication et caractérisation

2.3.1 Fabrication

Ces micro-cavités *purement photoniques* sont fabriquées par les techniques usuelles de salle blanche. La figure 2.7 résume les principales étapes de fabrication qui m'ont

permis de réaliser plusieurs séries de micro-disques métal-métal de divers diamètres et épaisseurs :

- Étape 1 : Collage de l'échantillon (a) sur le substrat hôte (b) par thermo-compression.
- Étape 2 : Retrait du substrat côté échantillon puis de la couche d'arrêt par voie chimique.
- Étape 3 : Définition du motif métallique (carré ou disque).
- Étape 4 (facultative) : Retrait du diélectrique en dehors des motifs métalliques par gravure sèche.

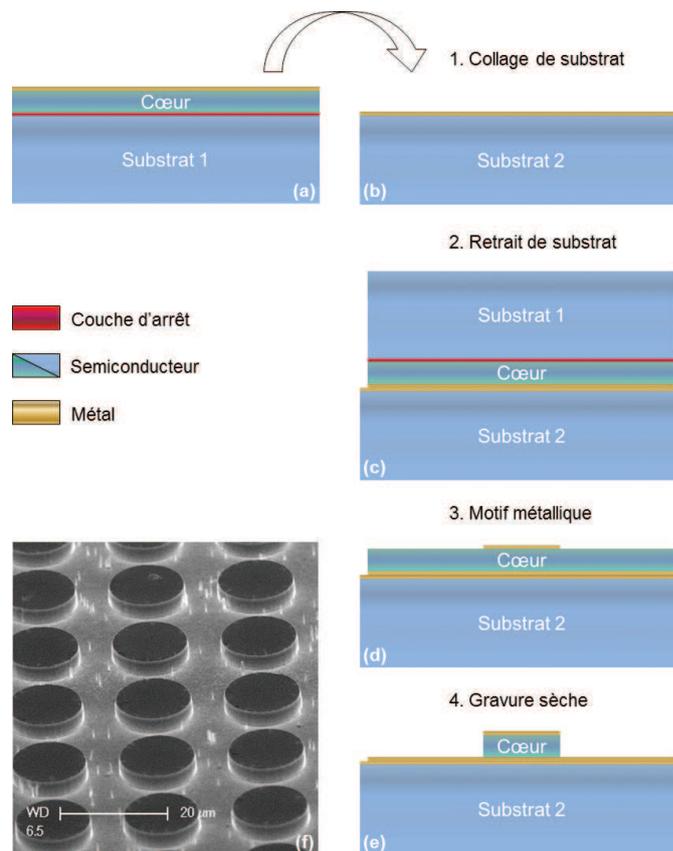


FIGURE 2.7 – En haut et à droite : Schémas des étapes de fabrication des micro-cavités photoniques. En bas à gauche : Micrographie obtenue par SEM d'un ensemble de micro-disques *purement photoniques* réalisé en procédant en suivant les étapes 1 à 4 incluse.

Le diélectrique de cœur choisi pour cette étude est le GaAs massif cristallin. Les raisons de ce choix sont pratiques : la fabrication et la caractérisation de ces micro-cavités largement exploitées dans la littérature ont ici pour unique objet de pouvoir

servir de référence lors de la comparaison avec les nouveaux résonateurs hybrides qui seront présentés dans le chapitre suivant. En effet, l'on s'attend à ce que le mode fondamental, c'est-à-dire le mode de plus grande longueur d'onde de résonance λ_0 , d'une micro-cavité *purement photonique* soit le mode dipolaire électrique représenté en haut à droite de la figure 2.6 page 48.

Préalablement aux étapes de salle blanche décrites ici, l'échantillon (a) a été obtenu par MBE dans l'équipe d'Isabelle Sagnes au Laboratoire de Photonique et de Nanostructures (LPN) : à partir d'un substrat de GaAs (100) non dopé, $L_z = 1 \mu\text{m}$ de GaAs non dopé a été épitaxié sur une couche d'arrêt d'épaisseur 600 nm de $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$. L'échantillon (a) ainsi obtenu est ensuite préparé en même temps que son substrat hôte (b) pour collage par thermo-compression. Pour cela, un film d'Or de 500 nm d'épaisseur est déposé par évaporation sur la face supérieure des deux échantillons. Le collage de substrats, ainsi que les étapes suivantes, sont effectués dans la salle blanche de l'IEF (CTU Minerve). Une fois le retrait du substrat 1 et de la couche d'arrêt effectués, les motifs métalliques sont obtenus par une étape de lithographie optique suivie d'une évaporation d'une couche mince métallique d'approximativement 200 nm d'or et d'un *lift off*. L'échantillon (d) est alors constitué d'un ensemble de micro-cavités définies uniquement par la réflectivité induite par les bords des motifs métalliques. L'échantillon (e) diffère seulement de (d) par un plus important contraste d'indice de réfraction (cf. équation 2.20 page 37), ce qui fait tendre encore un peu plus la valeur du coefficient de réflectivité ρ vers 1.

2.3.2 Banc de caractérisation optique

Toutes les mesures de réflectivité présentées ici ont été obtenues dans un spectromètre à transformée de Fourier infra-rouge (figure 2.8). Le faisceau émis par la source interne (à droite) est divisé en deux au niveau de la séparatrice qui renvoie une partie sur un miroir fixe et l'autre sur un miroir oscillant. Le faisceau recombinaison est ensuite focalisé au point S situé dans la chambre interne puis renvoyé vers le détecteur interne (à gauche). Une transformée de Fourier de l'interférogramme permet d'obtenir le spectre de la source à travers le FTIR. On peut ainsi obtenir un spectre de transmission à travers un échantillon placé en S.

Les cavités métal-métal ne peuvent pas être caractérisés en transmission à cause du plan métallique quasi-infini sous les micro-disques. Nous avons donc opté pour un système de caractérisation par mesure de réflectivité. Pour obtenir un spectre de réflectivité, on peut insérer un système de mesure de réflectivité dans la chambre interne du FTIR comme celui décrit dans la figure 2.9. Le système est composé d'un porte échantillon et d'une série de miroirs. Les miroirs M et M' sont paraboliques, et mobiles par rotation dans le plan $(yS'z)$ par rapport à l'axe (Sx) . L'onde incidente entre dans la chambre du côté $x < 0$ et se propage dans la direction $x > 0$. Dans le demi-espace $x < 0$, un jeu de trois miroirs plans ($m_{i=1,2,3}$) conduit le faisceau incident

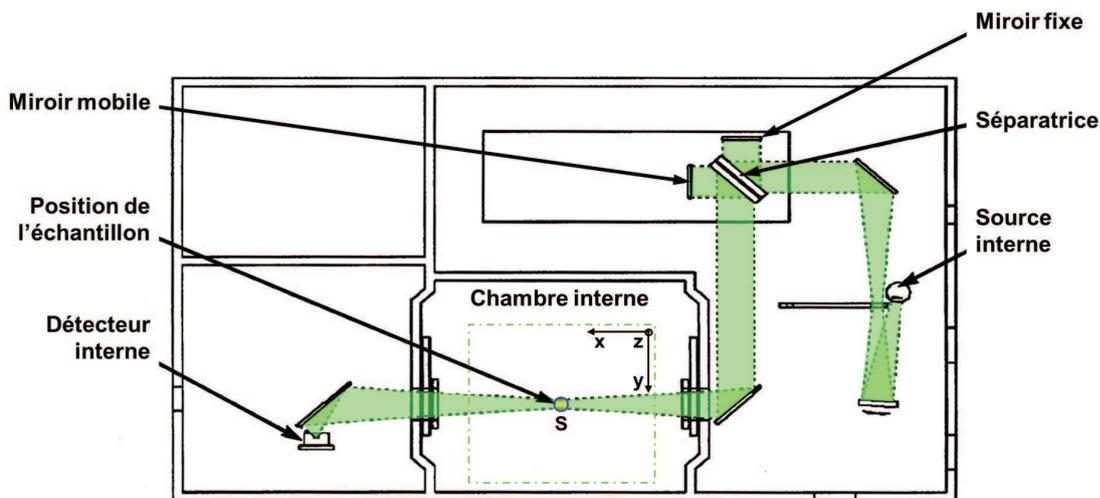


FIGURE 2.8 – Schéma en coupe dans le plan (x, y) du spectromètre IR à transformée de Fourier (FTIR).

sur le premier miroir parabolique mobile M . L'échantillon est positionné en S' situé en $(x = 0, y = 0)$, foyer optique de M et M' . Le faisceau réfléchi par l'échantillon est collecté par le miroir M' , puis le faisceau parallèle est reconduit dans le demi-espace $x > 0$ depuis le miroir mobile M' vers la sortie de la chambre par un nouveau système de trois miroirs identiques aux premiers ($m'_{i=1,2,3}$). La valeur de l'angle ϕ entre les bras des miroirs M et M' et la normale au plan $(xS'y)$ peut être contrôlée à distance ($13^\circ \leq \phi \leq 83^\circ$). Cela permet de contrôler l'atmosphère de la chambre interne au cours des mesures, et de s'affranchir des lignes d'absorption de l'eau en pompant la chambre interne du FTIR. L'échantillon est placé en S' sur un porte-échantillon, lui-même monté sur un ensemble de micro-contrôleurs qui permettent d'ajuster la position de l'échantillon dans les trois directions x , y et z , ainsi que son orientation par rapport au plan d'incidence par rotation autour des axes x et y , de façon à pouvoir maximiser la partie du signal réfléchi par l'échantillon collectée en M' . Afin de limiter les éventuelles réflexions parasites, la surface du plateau est choisie de telle façon à ce que la taille des grains qui la composent soit de l'ordre de la gamme de longueurs d'onde d'intérêt pour favoriser la diffusion. Dans le cas d'une étude en fonction de la polarisation, un polariseur est inséré en P sur le bras mobile qui contrôle la position du miroir M , de façon à ce que la polarisation soit indépendante de l'angle d'incidence choisi (ϕ).

2.3.3 Résultats expérimentaux

Je présente ici les résultats expérimentaux correspondant à cinq échantillons. Chaque échantillon est un panneau de 9 mm^2 contenant environ 200 micro-disques

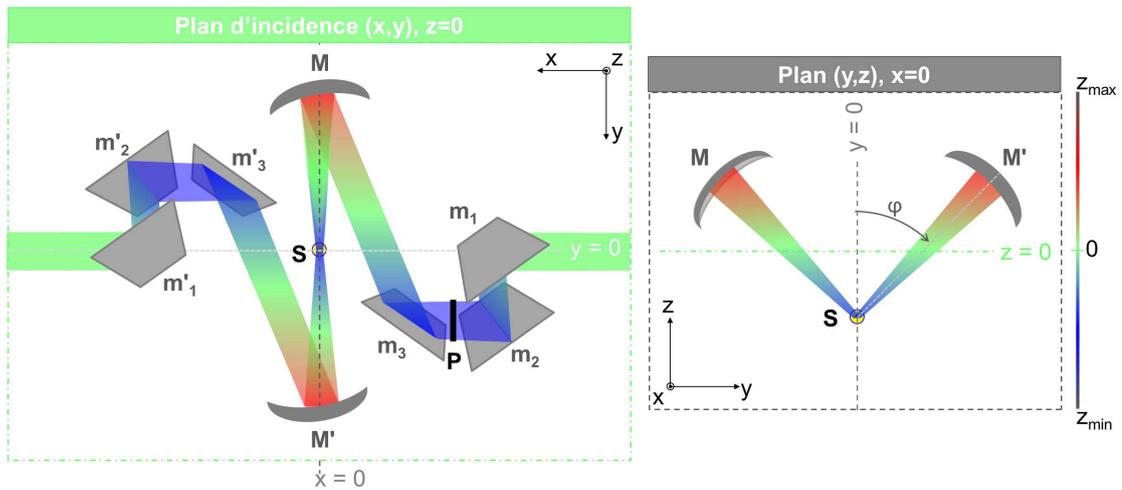


FIGURE 2.9 – Vues en coupe de la chambre interne du FTIR contenant le système de mesure de réflectivité. A gauche : Schéma du système mobile dans le plan (x, y) de la chambre interne du FTIR (les miroirs $m_{i=1,2}$ et $m'_{i=1,2}$ sont hors du plan (x, y)). A droite : Schéma du système de miroirs mobiles dans le plan (y, z) de la chambre interne du FTIR. Un polariseur peut être inséré en P . Le chemin optique du faisceau est symbolisé par une échelle de couleurs (bleu : $z < 0$, vert : $z = 0$, rouge : $z > 0$).

métal-métal identiques. Le semiconducteur utilisé est du GaAs épitaxié (100), non dopé, d'épaisseur $L_z = 1 \mu\text{m}$. Les cinq échantillons fabriqués suivant la technique décrite précédemment (cf. figure 2.7), diffèrent uniquement par le diamètre des microcavités : $d = 5, 7, 9, 11, 13 \mu\text{m}$. La distance inter-cavités est choisie très petite devant la longueur d'onde effective des modes de résonance d'ordre bas, mais suffisamment grande pour que chaque cavité se comporte comme une cavité isolée, c'est-à-dire que ses modes propres ne sont pas perturbés par la présence des cavités premières voisines.

Les cinq échantillons ont été caractérisés en réflectivité sur le banc optique décrit par les schémas 2.8 et 2.9. Les spectres du signal réfléchi par chaque échantillon, normalisé par le signal réfléchi par une référence (miroir d'or sur substrat de GaAs de même surface), sont reportés dans la figure 2.11.

L'identification des modes de résonance est facilitée par les simulations. Considérons par exemple le cas d'un ensemble de micro-disques de diamètre $d = 5 \mu\text{m}$ et d'épaisseur $L_z = 1 \mu\text{m}$. Dans le graphe de gauche de la figure 2.10, le spectre de réflectivité obtenu expérimentalement pour une onde incidente polarisée p arrivant avec l'angle $\phi = 45^\circ$ est reporté en rouge, tandis que le spectre obtenu par simulation en reproduisant les mêmes conditions incidentes est reporté en bleu. On peut noter que pour les modes dont la fréquence de résonance est située sous la bande *Reststrahlen*

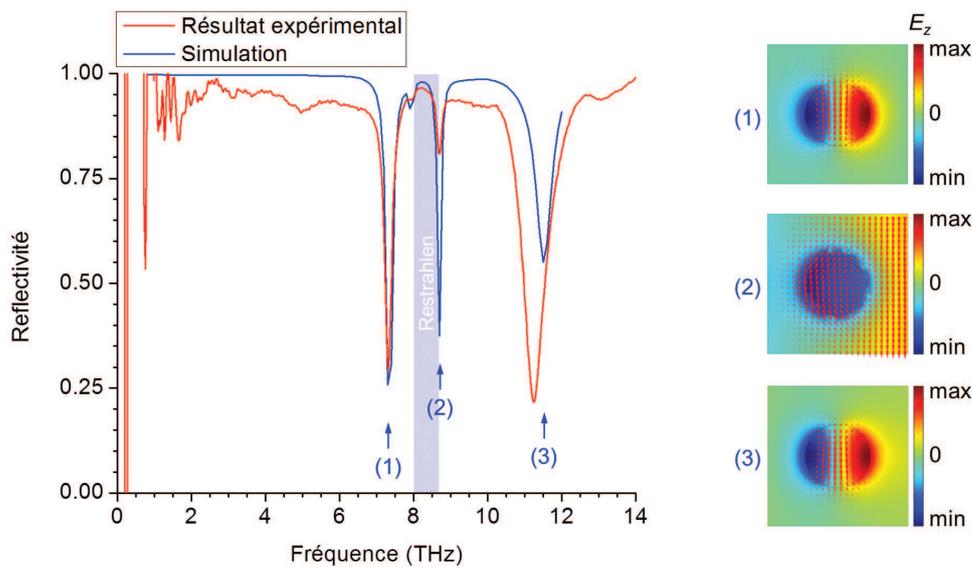


FIGURE 2.10 – A gauche : Comparaison entre le spectre obtenu expérimentalement (courbe rouge) et par simulation (courbe bleue), pour une onde incidente polarisée p avec $\phi = 45^\circ$, sur un ensemble de micro-disques métal-métal avec $d = 5 \mu\text{m}$ et $L_z = 1 \mu\text{m}$. A droite : Identification des modes de résonance de la cavité grâce aux simulations (E_z : échelle de couleurs, \vec{H} : flèches rouges).

(cf. cas 2 page 27), les simulations se superposent remarquablement bien avec les données expérimentales. Le mode annoté (1) correspond au mode fondamental de la cavité, c'est-à-dire au mode dipolaire électrique TM_{01} . Le mode annoté (2) correspond quant à lui à un mode de résonance collectif auquel participent deux cavités à la fois. Le mode annoté (3) est l'analogue du mode (1), mais qui existe de l'autre côté de la bande *Reststrahlen*. Les spectres des cinq échantillons sont reportés dans le graphe 2.11. On vérifie que le mode fondamental de la cavité observé expérimentalement correspond effectivement au mode TM_{01} . La fréquence de résonance de ce mode diminue lorsque le diamètre augmente, comme prévu par les simulations : $\nu_{\text{TM}_{01}} = 7.5 \text{ THz}$ pour $d = 5 \mu\text{m}$ et $\nu_{\text{TM}_{01}} = 3.5 \text{ THz}$ pour $d = 13 \mu\text{m}$. Les absorptions à plus haute fréquence correspondent à des modes d'ordre supérieur.

2.4 Limite fondamentale pour le confinement : La limite de diffraction

Quelques dispositifs lasers parmi les plus intéressants en terme de confinement sont reportés dans la figure 5.19. Tout résonateur est soumis à la limite de diffraction,

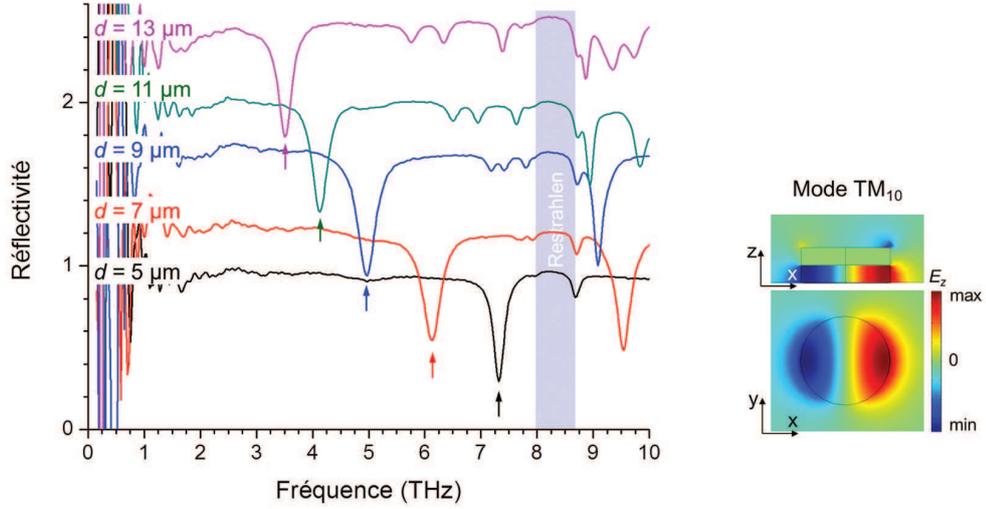


FIGURE 2.11 – A gauche : Spectres expérimentaux des micro-disques *purement photoniques* pour différents diamètres, obtenus sur le banc optique dans la configuration décrite par le schéma 2.9 avec une onde incidente polarisée p avec $\phi = 45^\circ$ (offset : 0.25). Les flèches indiquent la position du mode fondamental de la cavité : le mode TM_{10} . A droite : Distribution spatiale de la composante principale du champ électrique dans le plan $z = L_z/2$ et $y = 0$ pour le mode TM_{10} .

qui impose qu'au moins une de ses trois dimensions soit supérieur ou égal à la demi-longueur d'onde effective. Soit Λ_{eff} la limite de diffraction :

$$\Lambda_{\text{eff}} = \frac{\lambda_0}{2n_{\text{eff}}} = \frac{\lambda_{\text{eff}}}{2} \quad (2.55)$$

Les microcavités décrites dans ce chapitre, dont le mode fondamental est le mode *dipolaire électrique* symbolisé dans le graphe 5.19 par des triangles pleins bleus, appartiennent comme l'on pouvait s'y attendre à la classe des dispositifs *purement photoniques*. Leur volume modal est très faible, grâce au fait qu'ils opèrent très près de la limite de diffraction dans le plan (xy) et sous la limite de diffraction dans la troisième direction. Ce type de microcavité est conceptuellement très similaire à celui utilisé pour une application laser dans l'article par *Wather et al.*[153].

Une nouvelle classe de résonateurs *hybrides photoniques-électroniques* est décrite dans le chapitre suivant. Ces cavités présentent une résonance supplémentaire, d'ordre inférieur : le mode *dipolaire magnétique*.

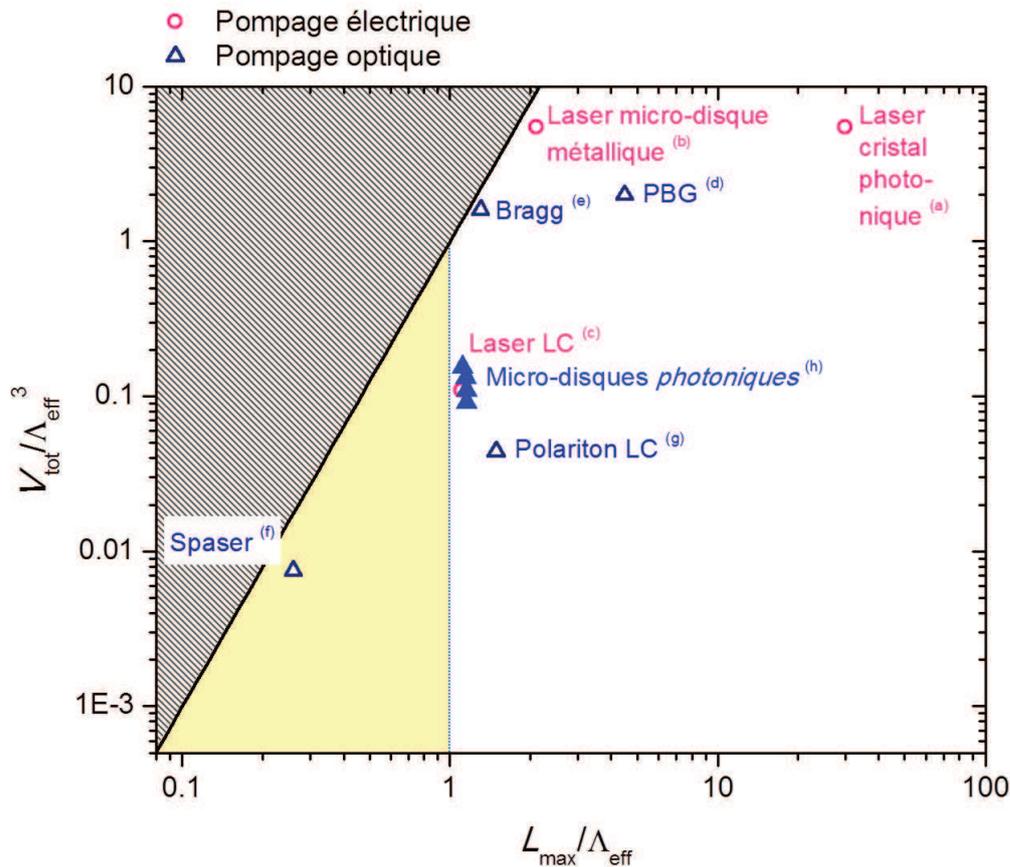


FIGURE 2.12 – Classement des dispositifs lasers qui présentent de très faibles volumes effectifs, en comparant leur volume total V_{tot} ainsi que la plus grande dimension L_{max} à la limite de diffraction Λ_{eff} (légende (a-g) : cf. Fig. 1.2 page 6). Les triangles pleins bleus (h) correspondent à la résonance d'ordre fondamental des micro-cavités métal-métal étudiées dans ce chapitre, démontrant qu'elles appartiennent à la classe des résonateurs purement photoniques (zone blanche).

Résonateur hybride électronique-photonique sub-longueur d'onde

Dans ce chapitre, je décris une nouvelle classe de résonateurs *hybrides photoniques-électroniques*, qui permet de bénéficier des caractéristiques habituellement réservées aux résonateurs *purement électroniques*, tout en maintenant celles utiles aux applications *photoniques*. En s'inspirant des SRRs utilisés dans le domaine des métamatériaux comme cellule élémentaire, je vais montrer comment il est possible de s'affranchir de la limite de diffraction dans une cavité métallique tout en confinant le champ dans le volume du semiconducteur. Puis je montrerai dans le chapitre suivant comment exploiter les fonctionnalités électroniques de cette nouvelle cavité. Ces deux résultats ouvrent la voie vers un dispositif actif, c'est-à-dire que l'on peut imaginer insérer du gain dans le semiconducteur.

3.1 Résonateurs THz à faible volume effectif

3.1.1 Origine de l'oscillation électromagnétique dans une cavité sub-longueur d'onde

Une résonance électromagnétique peut toujours être décrite comme un système dont l'énergie est alternativement capacitive et inductive.

$$U_{\text{totale}} = U_C + U_L \quad (3.1)$$

A la résonance, le terme capacitif U_C est exactement égal au terme inductif U_L , c'est-à-dire $L_R \langle I^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle / C_R$ où L_R et C_R représentent respectivement l'inductance et la

capacitance équivalentes du système résonnant, et $\langle I^2 \rangle$ et $\langle Q \rangle$ les moyennes de la densité de courant au carré et de la densité de charge. La fréquence de résonance naturelle de ce résonateur est proportionnelle à $1/\sqrt{L_R C_R}$. Il est donc en principe possible de repousser sa valeur sous la limite de diffraction, en augmentant soit son inductance L_R soit sa capacitance C_R ¹.

Uzhumov et al. [148] ont montré que l'on peut écrire la densité totale d'énergie U_{totale} répartie dans le volume du diélectrique et du métal en utilisant le modèle de Drude pour la permittivité diélectrique $\epsilon(\omega)$, dans l'approximation des électrons sans collision (cf. Eq. 1.90 page 25 avec $\gamma = 0$) comme :

$$U_{\text{totale}} = \int_{V_{\text{total}}} d^2x \left(\frac{H_z^2}{8\pi} + \frac{\vec{E}^2}{8\pi} \frac{\partial(\omega\epsilon)}{\partial\omega} \right) \quad (3.2)$$

D'un point de vue qualitatif, lorsque la cavité résonne, son énergie est répartie sous trois formes : électrique, magnétique, et cinétique.

$$U_{\text{totale}} = U_{\text{magnétique}} + U_{\text{électrique}} + U_{\text{cinétique}} \quad (3.3)$$

On peut lier ces termes à la distribution spatiale des champs pour une résonance donnée [148] :

$$U_{\text{magnétique}} \equiv \int_{V_{\text{total}}} \frac{d^2x}{8\pi} H_z^2, \quad (3.4)$$

$$U_{\text{électrique}} \equiv \int_{V_{\text{diélectrique}}} \frac{d^2x}{8\pi} \vec{E}^2 + \epsilon_{\infty} \int_{V_{\text{métal}}} \frac{d^2x}{8\pi} \vec{E}^2, \quad (3.5)$$

$$U_{\text{cinétique}} \equiv \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \int_{V_{\text{métal}}} \frac{d^2x}{8\pi} \vec{E}^2 \quad (3.6)$$

où $V_{\text{diélectrique}}$ et $V_{\text{métal}}$ sont les éléments de volume occupés respectivement par le diélectrique (air ou semiconducteur) et par le métal, et V_{total} et tel que $V_{\text{total}} = V_{\text{diélectrique}} + V_{\text{métal}}$.

Les termes 3.4 et 3.6 trouvent leur origine physique dans le mouvement des électrons et varient tous les deux selon ω^{-2} . On peut donc associer ces deux énergies à l'énergie inductive U_L dans l'équation 3.1. Puis de façon plus intuitive, on associe le terme 3.5 à l'énergie capacitive U_C . L'énergie oscille alors essentiellement entre l'énergie moyenne électrique $U_{\text{électrique}}$ et l'énergie moyenne magnétique $U_{\text{magnétique}}$ et on retrouve bien la propriété d'un résonateur : $U_{\text{électrique}} = U_{\text{magnétique}} + U_{\text{cinétique}} \approx 1/2 U_{\text{totale}}$. Dans la gamme des basses fréquences, le métal est un conducteur électrique parfait, et la plupart de l'énergie capacitive U_C réside dans la région du diélectrique,

1. Ceci est valable dans l'approximation quasi-statique des champs, qui est une hypothèse raisonnable dans le cas d'une cavité sub-longueur d'onde.

soit en dehors du métal ($L_{\text{métal}} \ll \lambda$, cf table 2.1 page 36). Autrement dit, les électrons n'ont quasiment pas d'énergie cinétique et $U_{\text{cinétique}} \ll U_{\text{électrique}}$. Cependant, plus la fréquence augmente, plus la longueur de pénétration de la lumière dans le matériau plasmonique augmente (lorsque $\omega \rightarrow \omega_p$). Autrement dit le terme $U_{\text{cinétique}}$ est de moins en moins négligeable. Une partie de l'énergie magnétique moyenne est transformée en énergie cinétique pour les électrons de Drude du métal, aux dépends du terme $U_{\text{magnétique}}$. Ceci est particulièrement vrai dans la gamme des fréquences optiques, où une partie de l'énergie est alors dissipée dans le métal sous forme de chaleur par le terme $U_{\text{cinétique}}$ aux dépends du terme $U_{\text{magnétique}}$. Dans ce cas limite, la réponse du guide est dite *plasmonique*. Ceci peut donc être vrai pour des longueurs d'onde relativement éloignées de la résonance plasmonique du matériau. Pour quantifier la contribution plasmonique d'une résonance magnétique, les auteurs de l'article [148] introduisent le paramètre $T_p = U_{\text{cinétique}}/U_{\text{magnétique}}$, considérant ainsi que la structure opère en régime plasmonique fort dès que $T_p > 1$.

C'est tout simplement à cause de ce phénomène que les résonateurs sub-longueur-d'onde tels que les SRRs, dont le domaine de prédilection est la gamme des très basses fréquences, ne peuvent pas être re-dimensionnés pour opérer dans le visible, comme le voudrait pourtant la loi d'échelle de Maxwell. En effet, lorsque l'on diminue les dimensions d'un SRR, on peut certes le rendre encore plus sub-longueur-d'onde, mais cela se produit aux dépends de l'énergie magnétique. La réponse magnétique peut alors être significativement diminuée si le matériau plasmonique introduit des pertes dans le bilan énergétique. Toutefois, la région des fréquences térahertz est suffisamment éloignée de la fréquence plasmonique des métaux pour que toute cavité métallique qui opère dans cette gamme fonctionne hors du *régime plasmonique* proprement dit. Des SRRs re-dimensionnés pour le térahertz ont d'ailleurs déjà été utilisés avec succès pour plusieurs applications planaires [121].

3.1.2 Le résonateur LC THz dans la littérature

Dans le chapitre 2, le concept de la microcavité "patch" est décrit, et j'ai justifié le fait que l'on appelle la résonance fondamentale de cette cavité une résonance *purement photonique* en utilisant l'argument qu'il existe au moins une dimension qui respecte la limite de diffraction. La cavité proposée dans l'article [153] puis dans les articles [52, 50] opère sur une résonance appelée *résonance LC* par les auteurs. L'intention première de cet article est de proposer un QCL THz qui possède les fonctionnalités d'un résonateur LC, c'est-à-dire donc l'oscillation du mode électromagnétique puisse être complètement décrite par analogie avec un circuit électronique composé d'inductances et de capacités. Néanmoins, tout guide d'onde planaire peut être décrit par cette approche [107], sans pour autant présenter les caractéristiques les plus intéressantes qui sont propres aux antennes, à savoir le contrôle de la fréquence par simple "déformation" de la géométrie de l'antenne, comme par exemple l'on

pouvait changer la station d'écoute sur un poste de radio en tournant un bouton réglant la distance entre les deux plaques d'un condensateur.

La nouveauté attribuée par les auteurs au résonateur proposé dans ces deux articles tiendrait au découplage entre \vec{E} et \vec{H} grâce à la séparation spatiale des parties inductive et capacitive, comme suggéré par le schéma de principe de la figure 1(A) de la référence [153]. Ce résultat est très intéressant car permet en principe de déplacer la fréquence de résonance en modifiant les valeurs de L ou C uniquement *via* la géométrie de la cavité, et ceci de façon indépendante. Dans cette section, je vais rapidement justifier pourquoi, s'il est vrai que son volume effectif est remarquablement faible, il n'y a pas de différence conceptuelle entre cette cavité et une microcavité "patch", et que donc cette caractéristique est en fait absente dans le travail de *Wather et al.* et *Geiser et al.*

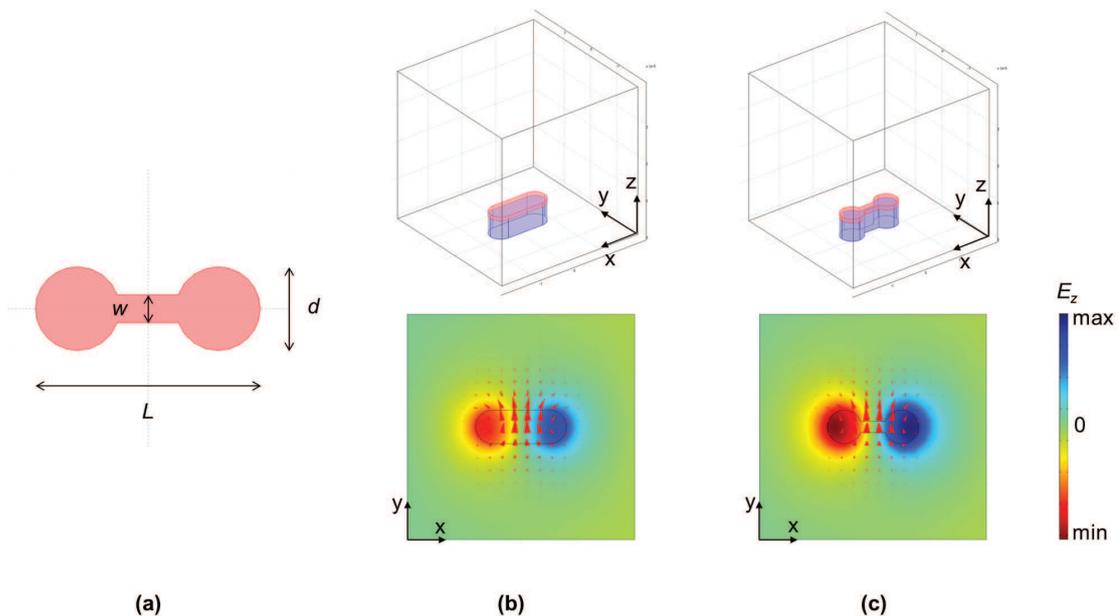


FIGURE 3.1 – Étude du mode fondamental de la cavité dite *LC* proposée par *Wather et al.* [153] et *Geiser et al.* [52]. (a) Schéma dans le plan (x, y) de la cavité *LC* (b,c) Distribution spatiale de la composante E_z (échelle de couleurs à droite) à travers la section en $z = t_{SC}/2$, ainsi que du champ magnétique (flèches rouges). (b) Mode fondamental du résonateur pour $w = d$ (cas "standard") : $\nu = 3.8$ THz, $Q = 28$. (c) Mode fondamental du résonateur pour $w = d/3$ (cas "optimisé") : $\nu = 3.6$ THz, $Q = 35$.

La figure 3.1 (a) est une vue en coupe dans le plan (x, y) du résonateur utilisé dans l'article [52], où L est la longueur totale, d est le diamètre des disques et w la largeur du lien entre les disques. Cette géométrie est très similaire à celui utilisé dans l'article [153]. Le résultat de la simulation du mode fondamental de cette cavité pour une

épaisseur du semiconducteur $t_{SC} = 5 \mu\text{m}$ et une épaisseur de métal de $1 \mu\text{m}$ est reporté dans la figure 3.1 (c). Les indices de réfraction utilisés sont issus des sections 1.5.1 pour le semiconducteur et 1.5.2 pour l'or. La distribution spatiale de la composante E_z à travers la section en $z = t_{SC}/2$ est représentée en échelle de couleurs, tandis que les flèches rouges représentent la direction et l'intensité du champ magnétique. Ce résultat est en excellent accord avec celui représenté par la figure 1 (D,E) de la référence [153], ainsi que par la figure 1 (d) de la référence [52]. Pour comparaison avec une cavité "patch", je présente la simulation du mode fondamental pour une cavité où $w = d$ dans la figure 3.1 (b). La représentation en coupe de la distribution spatiale des champs permet de se rendre compte que la résonance fondamentale correspond bien à la définition du mode *dipolaire électrique*, à l'instar du mode fondamental de la cavité "patch".

Or d'après le schéma de principe proposé dans la figure 1 (A) de la référence [153] (également repris dans la Fig.1(c) de la réf. [52]), on s'attendrait à ce que la valeur de fréquence de résonance soit inversement proportionnelle à la racine carrée de la valeur de la capacité C_R , qui est elle-même liée à l'épaisseur du semiconducteur. En d'autres termes, deux cavités (i) et (j) de géométrie identique qui diffèrent seulement par leur épaisseur $t_{i,j}$ d'un facteur $r = t_j / t_i$ devraient, en première approximation, présenter des fréquences de résonance telles que $t_j = \sqrt{r} t_i$. Je propose ici de vérifier si c'est le cas par des simulations. Pour cela, j'ai préparé trois cavités d'épaisseurs différentes de même géométrie dans le plan (x, y) (cf. Fig.3.1 (c)). Les résultats sont reportés dans la table 3.1.

Épaisseur (μm)	Fréquence (THz)
10	3.84
5	3.55
1	2.78

TABLE 3.1 – Etude de la fréquence du mode fondamental de la cavité dite *LC* proposée par *Wather et al.* [153] et *Geiser et al.* [52, 50] en fonction de l'épaisseur du semiconducteur.

Ces résultats de simulation sont en très bon accord avec les valeurs expérimentales publiées dans les articles de référence. L'élévation d'un facteur 1.4 de la fréquence entre les cavités $t = 1 \mu\text{m}$ et $t = 10 \mu\text{m}$ est très loin du rapport $\sqrt{t_{10 \mu\text{m}} / t_{1 \mu\text{m}}} \approx 3.2$. Ceci indique que, pour ces résonateurs, il existe encore une relation fondamentale qui lie la partie *inductive* à la partie *capacitive*, comme prévu par la théorie des lignes de transmission [107] dans le cas des résonateurs planaires. En d'autres termes, ceci est la signature d'une résonance essentiellement *photonique*. Cette analyse est confirmée par la position des deux résonances dans la zone blanche du graphe 1.2 page 6 : $V_{\text{tot}} / \Lambda_{\text{eff}}^3 = 0.11$ et $L_{\text{max}} / \Lambda_{\text{eff}} = 1.1$ pour le *LC laser* [153] (annoté (c) dans la figure 1.2),

tandis que la résonance de la cavité exploitée dans l'article [52] est caractérisée par $V_{\text{tot}}/\Lambda_{\text{eff}}^3 = 0.044$ et $L_{\text{max}}/\Lambda_{\text{eff}} = 1.5$ (cf. 1.2).

Selon ce point de vue, la principale différence entre la géométrie présentée dans le chapitre précédent et celle proposée dans les articles [153, 52, 50] est l'attention accordée au volume effectif du mode. Il est en effet bien connu que, par rapport à un micro-disque complet, une légère modification de la forme de la cavité permet l'amélioration du facteur de confinement, qui est d'ailleurs un paramètre critique pour atteindre le régime laser. Dans ces deux cas, elle est obtenue en adaptant la forme du métal puis gravant le semiconducteur pour ne conserver que le volume situé sous le métal, qui correspond à la distribution spatiale de la composante principale du champ électrique E_z : le facteur de qualité est de 28 dans le cas "standard", contre 35 dans le cas "optimisé" (cf. Fig.3.1(b) et (c) respectivement). Un autre avantage de cette gravure concerne le fait qu'il s'agit d'un QCL pompé électriquement : elle permet d'uniformiser le champ électrique appliqué entre les deux films métalliques afin d'atteindre l'alignement radiatif de l'hétérostructure. D'une part, le recouvrement entre le volume modal et la région active s'en trouve maximisé, et d'autre part, les lignes de courant de fuite en dehors de cette zone sont supprimées, ce qui permet de limiter l'échauffement local et donc d'améliorer l'efficacité du QCL ².

En conclusion, ce mode restant essentiellement photonique, l'équation de Maxwell pour le champ magnétique 1.3 page 9 est dominée par le terme $\frac{\partial}{\partial t} \vec{D}(\vec{r}, t)$ qui représente le courant de déplacement, et non par le terme \vec{j} , qui représente la densité de courant. Par conséquent, il est impossible de moduler la fréquence de cette cavité en modifiant uniquement C ou L . Ceci prévaudra tant que le lien métallique, qui correspond à la partie de la cavité située entre les deux maxima du champ \vec{E} reste dans le plan des disques [107]. Malgré ce point de désaccord quant à l'interprétation proposée par les auteurs de ces deux articles, elle a le mérite d'avoir renouvelé l'intérêt de la communauté pour l'intégration des fonctionnalités d'une antenne à une cavité photonique, que l'on pourrait alors appeler *une cavité hybride photonique-électronique*.

3.1.3 Vers un véritable résonateur LC fonctionnel pour le THz

En s'inspirant des métamatériaux, il est possible d'imaginer cette *cavité hybride*. La cellule élémentaire de ces matériaux artificiels est tellement sub-longueur d'onde ($\lambda/10$) qu'elle peut très bien être décrite par analogie avec ses capacités et bobines en série et en parallèle dans l'approximation quasi-statique des champs. Elle se comporte comme un véritable circuit LC, qui peut être plus ou moins simple en fonction de la géométrie choisie. Le plus simple exemple de cellule élémentaire est un SRR planaire, illustré par la figure 3.2 (a). Il s'agit d'une inclusion métallique qui a la forme d'une boucle (en jaune) ouverte en un endroit, d'où son nom de *split ring resonator* (SRR)

2. Pour comprendre cette partie de la discussion, on pourra se référer à la partie II de ce manuscrit.

en anglais. Traditionnellement, ce motif métallique repose sur un diélectrique (en bleu), et peut être opéré en transmission comme en réflexion [134, 28]. Dans cette

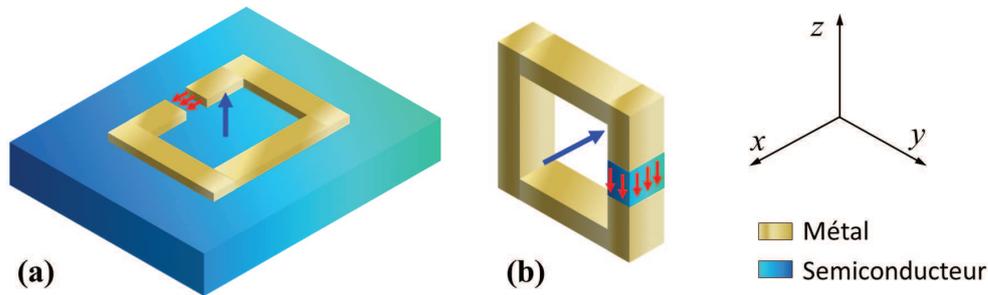


FIGURE 3.2 – Schémas d’un SRR planaire (a) et 3D (b). Les flèches représentent la direction des champs \vec{E} (rouge) et \vec{H} (bleu).

configuration, un champ électrique presque uniforme est concentré dans l’ouverture de la boucle, et dirigé selon l’axe x (flèches rouges). Ce champ est dû à une accumulation de charges qui apparaissent de chaque côté de l’ouverture aux deux extrémités métalliques qui se font face. L’oscillation de charges est permise le long de l’anneau métallique, induisant un champ magnétique dont les lignes de champs sont concentrées au centre de la boucle et dirigées selon l’axe z (flèche bleue). A la résonance, l’amplitude du champ électrique devient extrêmement forte à l’intérieur de l’ouverture, rendant la structure extrêmement sensible au matériau placé dans cette zone. Cette propriété est souvent mise à profit dans le contexte des métamatériaux actifs. En général, un semiconducteur ou une substance aux propriétés non-linéaires est insérée dans l’ouverture de l’anneau pour accorder la fréquence de la réponse collective d’une assemblée de ces dispositifs sub-longueur d’onde.

Nous avons vu dans la section 3.1.1 qu’il est possible d’utiliser un tel résonateur planaire en le re-dimensionnant pour qu’il opère dans le domaine fréquentiel térahertz, ce qui a fait l’objet de plusieurs publications récentes [121, 89, 142]. Toutefois, il est intéressant de remarquer que la radiation térahertz générée par les matériaux actifs qui nous intéressent est polarisée TM, tandis que suivant la même convention le mode du SRR planaire est orienté TE. En effet, la radiation THz générée au sein de ce type d’hétérostructure semiconductrice suit une règle de sélection quantique qui fixe la polarisation du photon émis lors d’une transition électronique entre deux niveaux d’énergie en bande de conduction. Par convention, la bande de conduction est structurée selon l’axe z , qui correspond à la direction de croissance des couches minces lors de l’épitaxie de l’hétérostructure, ce qui conduit à une polarisation TM par rapport à l’interface métal/semiconducteur.

Pour répondre à cette problématique, il suffit d’opérer à une rotation de 90° de la géométrie du SRR par rapport à l’un des axes du plan (x, y) (cf. Fig.3.2(b)). Les

avantages principaux de cette situation sont que le semiconducteur est inséré dans l'ouverture de l'anneau métallique dans la région où le champ électrique est concentré, et que le mode est orienté TM. L'inconvénient est que cette première ébauche ne permettra pas d'y insérer un laser à cascade quantique. Néanmoins, tout autre région active ne nécessitant pas de polarisation électrique peut très bien être utilisée et est démontrée dans la suite de ce chapitre.

Une telle structure 3D n'est cependant pas réalisable avec les techniques de fabrication actuelles en salle blanche. Pour contourner cette difficulté, il suffit d'exploiter la symétrie du problème. Ainsi, on peut se contenter de construire la moitié supérieure du dispositif schématisé par la figure 3.2 (b) (demi-espace $z > 0$) en introduisant un plan métallique infini en $z = 0$ (cf. schéma Fig.3.3(a)). La charge réelle située dans le demi-espace ($z < 0$) est remplacée dans ce cas par l'image de la charge située dans le demi-espace ($z > 0$). Ce "demi-dispositif", en tout point analogue au dispositif 3D, est alors réalisable en salle blanche (cf. micrographe Fig.3.3(b)).

3.2 Nouveau résonateur hybride THz

Dans cette section, je présente une étude systématique de ce résonateur, qui est l'équivalent topologique d'un SRR, et qui peut accueillir un cœur actif. Afin de prouver l'apparition d'un nouveau mode fondamental qui bat la limite de diffraction dans les trois dimensions spatiales, je compare les modes d'oscillation d'un résonateur hybride avec ceux d'une cavité "patch" *photonique* de dimensions équivalentes.

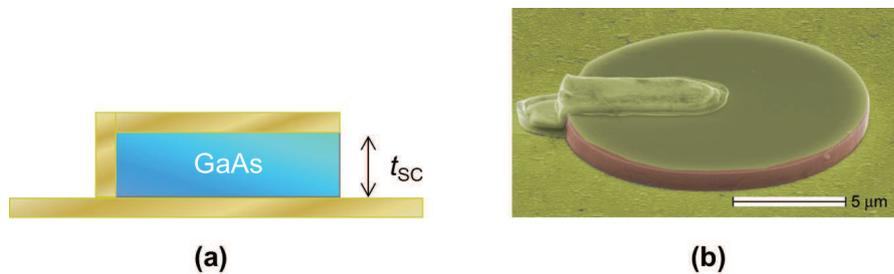


FIGURE 3.3 – Schéma (a) et image SEM (b) d'un résonateur hybride fabriqué à partir d'un micro-disque "patch".

3.2.1 Nouveau mode fondamental

Les modes de résonance de ce dispositif peuvent être calculés avec les mêmes outils que ceux décrits dans le chapitre précédent. Le semiconducteur est le GaAs et le métal est l'or, tous deux d'épaisseur $t_i = 1 \mu\text{m}$. Le diamètre du disque est $d = 7 \mu\text{m}$ et la largeur de la connection latérale est $l = 2 \mu\text{m}$. Les paramètres de simulations sont

identiques à ceux décrits dans le chapitre précédent, l'unique différence étant qu'il faut prendre en compte l'orientation de la cavité par rapport au plan d'incidence, à cause de la perte de symétrie due à la présence de la connection latérale. On note cet angle θ dans le plan (x, y) , et on définit $\theta = 0$ dans le cas où l'axe passant par le centre du disque et le centre de la connection latérale est aligné avec la direction incidente (cf. Fig.3.4).

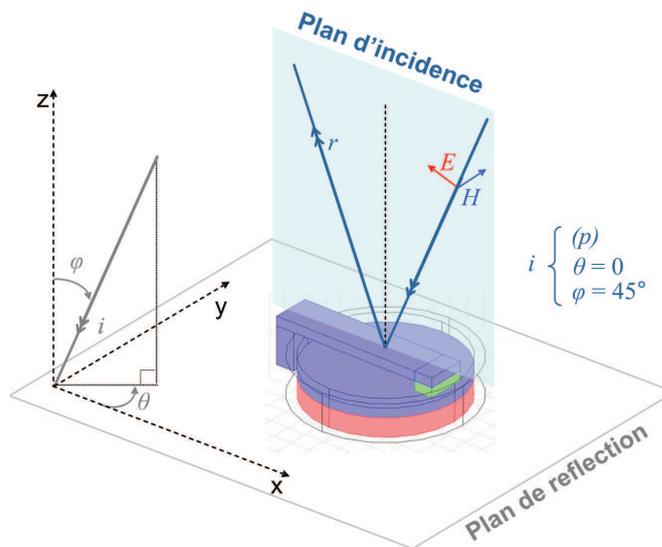


FIGURE 3.4 – Schéma récapitulatif des conventions utilisées pour les angles ϕ et θ : Exemple pour un faisceau incident i polarisé (p) tel que $\phi = 45^\circ$, $\theta = 0$.

Les résultats obtenus avec le logiciel COMSOL sont reportés dans la figure 3.5. Les spectres de réflectivité pour chaque polarisation sont reportés dans le graphe de gauche. La distribution spatiale des champs est représentée dans la partie de droite pour les trois premiers mode de résonance (classés de haut en bas). Il est aisé d'identifier les modes TM_{10} à $\nu = 6.3$ THz et TM_{01} à $\nu = 7.1$ THz avec le mode fondamental de la cavité "patch" de même diamètre à $\nu = 6.2$ THz (cf. Fig. 2.11 page 54, tracé rouge). Ce mode est infiniment dégénéré dans la cavité "patch" à cause de la symétrie infinie du disque, ce qui se traduit dans le spectre par un seul pic d'absorption. La levée de dégénérescence observée ici est simplement due à la présence de la connection métallique latérale, qui brise la symétrie infinie du disque en imposant localement une condition de bord métallique, forçant les composantes tangentielles de champ \vec{E} à s'annuler dans cette zone. Pour cette raison, le mode TM_{01} est perturbé et "spatialement repoussé" vers le centre de la cavité, et oscille à une fréquence plus élevée que le mode TM_{10} . Ces deux modes sont représentés à droite de la figure 3.5, au milieu et en bas.

Le résultat le plus important de ces simulations est qu'elles prouvent l'apparition

d'un nouveau mode fondamental dans la cavité hybride. Ce mode est représenté par la figure 3.5, en haut à droite. Il apparaît sans ambiguïté lorsque la polarisation et la direction du faisceau incident sont telles que le champ magnétique est parallèle aux surfaces métalliques et que le couplage avec la partie inductive du résonateur est maximal, c'est-à-dire pour la polarisation (p) avec $\theta = 0$. Il correspond au pic d'absorption qui apparaît vers $\nu = 2.8$ THz dans la courbe rouge (polarisation p). Pour l'autre polarisation, ce couplage est minimisé et le mode de résonance ne peut être observé dans le spectre de réflectivité (courbe bleue). Ce nouveau mode est très bien séparé en fréquence des modes d'ordres supérieurs ($\nu = 6.3$ et 7.1 THz).

En conclusion, ce mode présente toutes les caractéristiques du mode fondamental d'un SRR. En effet, le champ électrique ne présente aucun nœud dans le plan (x, y) et est très fortement confiné dans le semiconducteur. De plus, la longueur d'onde d'opération est très grande devant chacune des trois dimensions du résonateur (cf. Fig.3.2). Ce nouveau mode ne peut exister dans la cavité "patch" car il violerait le principe de conservation des charges. Par la suite, j'appellerai cette nouvelle résonance d'ordre fondamental *mode dipolaire magnétique*, et le mode d'ordre supérieur *mode dipolaire électrique*.

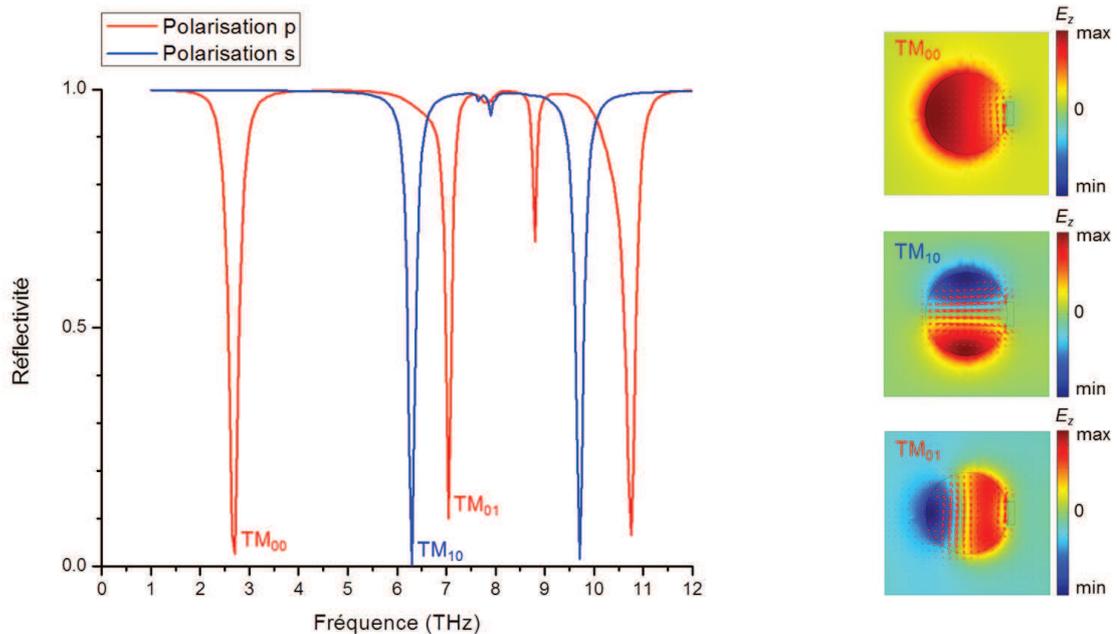


FIGURE 3.5 – A gauche : Simulation du micro-disque "hybride" pour $d = 7 \mu\text{m}$ et $L_z = 1 \mu\text{m}$ pour chaque polarisation ($\phi = 45^\circ$, $\theta = 0$). A droite : Distribution spatiale des champs correspondant aux trois premiers ordres de résonance : la composante principale E_z est représentée en échelle de couleurs et \vec{B} par des flèches rouges.

3.2.2 Fabrication et caractérisation

Afin d'observer expérimentalement l'existence de ce nouveau mode, j'ai réalisé une étude systématique des propriétés de cette cavité pour six valeurs de diamètre : 5, 7, 9, 10, 11 et 13 μm .

Pour obtenir ce résonateur hybride, il suffit de suivre la technique en quatre étapes décrite dans la section 2.3.1 de façon à obtenir un micro-disque *photonique*, puis d'ajouter une cinquième étape de lithographie optique pour définir la connection métallique latérale entre le plan métallique quasi-infini inférieur et le disque métallique supérieur du micro-disque. C'est cette connection latérale qui permettra l'échange de charges entre les surfaces métalliques supérieure et inférieure. La figure 3.3 (b) est une image SEM du dispositif réel. De la même manière que dans le cas des cavités "patch" du chapitre précédent, j'ai fabriqué six panneaux de 9 mm² contenant chacun environ 200 résonateurs identiques entre eux, de façon à pouvoir collecter suffisamment de signal. Enfin, j'ai fabriqué sur même échantillon des panneaux "non connectés", autrement dit de simples cavités "patch", qui servent de référence. Les échantillons sont ensuite caractérisés selon la procédure décrite dans la section 2.3.2 page 50.

3.2.3 Résultats expérimentaux

Un exemple de spectre de réflectivité d'une cavité hybride est représenté dans la figure 3.6 (a) par la courbe rouge. Il correspond à la caractérisation de la cavité hybride de diamètre $d = 7 \mu\text{m}$, dont l'image SEM est représentée par la figure 3.6 (c). Cette mesure a été obtenue avec l'angle d'incidence $\phi = 45^\circ$ et l'orientation $\theta = 0$. Le faisceau incident est non polarisé, ce qui permet d'observer les trois premiers ordres de résonance dans un même spectre. Les pics d'absorption observés expérimentalement pour les fréquences inférieures à la bande *Reststrahlen* sont en excellent accord avec les résultats obtenus par simulation (cf. Fig.3.5), ce qui permet d'identifier parfaitement les trois premiers modes de résonance de la cavité hybride.

Pour comparaison, le spectre de réflectivité d'une cavité *photonique* (ou micro-disque "patch") est également reporté dans la figure 3.6 (a), où il est représenté par la courbe noire. Il correspond à la caractérisation de la cavité "patch" de diamètre $d = 7 \mu\text{m}$, dont l'image SEM est représentée par la figure 3.6 (b). La seule différence avec le résonateur hybride est l'absence de connection métallique latérale. Ce spectre a été obtenu dans les mêmes conditions que celui de la cavité hybride, et est en parfait accord avec les résultats présentés dans le chapitre précédent.

Les caractérisations effectuées en fonction de la polarisation et de l'orientation θ de l'échantillon confirment également que le mode fondamental est excité par couplage avec le champ magnétique de l'onde incidente. Les spectres obtenus pour chaque polarisation sont reportés dans la figure 3.7, en bleu (*s*) et en rouge (*p*). Ils correspondent à la caractérisation de la cavité hybride de diamètre $d = 9 \mu\text{m}$. Afin

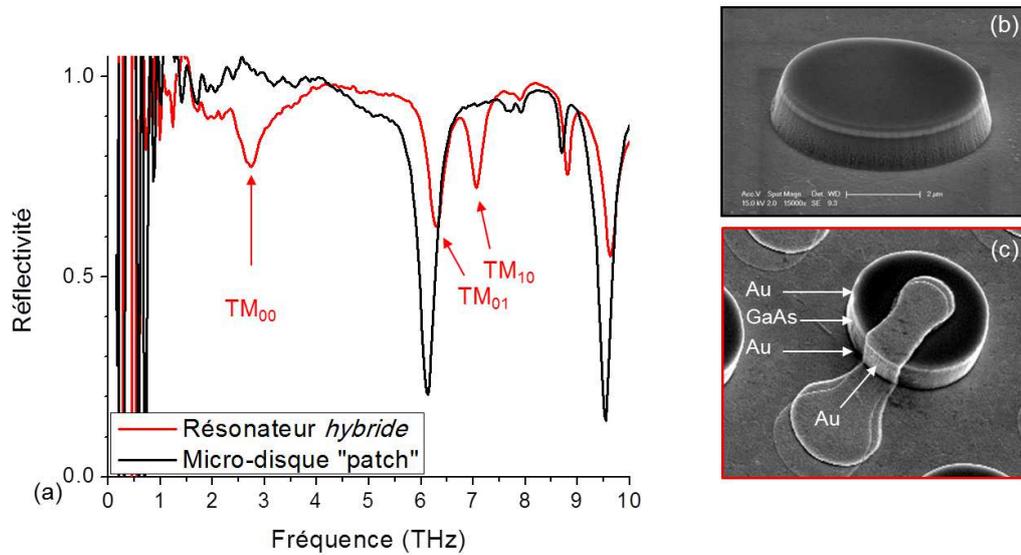


FIGURE 3.6 – (a) Comparaison entre le spectre expérimental du micro-disque "standard" (courbe noire) et celui du micro-disque "hybride" (courbe rouge) pour $d = 7 \mu\text{m}$ et $L_z = 1 \mu\text{m}$. A droite : Images SEM d'un micro-disque "standard" (b) et d'un micro-disque "hybride" (c). Dans le micrographe (c), les annotations indiquent la nature des matériaux qui composent la résonateur.

d'observer la résonance fondamentale ($\nu_{TM_{00}} \approx 2.0 \text{ THz}$), le détecteur utilisé ici est un bolomètre qui couvre les gammes de fréquence $0.8 - 4.1 \text{ THz}$ d'une part, et $4.3 - 7.9 \text{ THz}$ d'autre part. Ces deux zones de bruit sont représentées en gris foncé dans le graphe, et la bande du *Restrahlen* est représentée en gris clair. Ces mesures permettent d'identifier le mode TM_{00} et TM_{10} dans le spectre en polarisation p aux fréquences respectives $\nu = 2.0$ et 6.3 THz , tandis que la polarisation s permet d'observer uniquement le mode TM_{01} à la fréquence $\nu = 5.1 \text{ THz}$. Ces résultats sont en très bon accord avec les fréquences de résonance prévues par les simulations pour ces trois modes. En revanche, le facteur de qualité Q du mode fondamental est moins bon que celui prévu par les simulations. Cette différence expérimentale sera discutée dans la section 3.6 page 90 (cf. Table 3.3).

3.2.4 Conclusions et perspectives

Les longueurs d'onde des modes de résonance correspondant aux deux premiers ordres sont reportées dans la figure 3.8 pour les cavités hybrides de diamètre $d = 5, 7, 9, 11, 13 \mu\text{m}$. L'épaisseur des cavités étant de $1 \mu\text{m}$, le diamètre représente la dimension spatiale la plus grande. La limite de diffraction est ainsi représentée par la ligne bleue. Elle est définie par $\lambda = 2nd$ où n est l'indice de réfraction du GaAs estimé

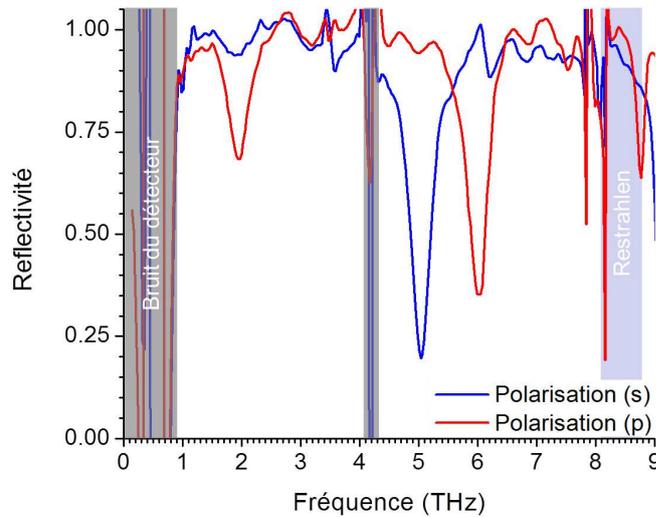


FIGURE 3.7 – Comparaison entre les spectres expérimentaux du résonateur hybride pour les polarisations s (courbe bleue) et p (courbe rouge) pour $d = 9 \mu\text{m}$ et $L_z = 1 \mu\text{m}$, avec le faisceau incident $\phi = 45^\circ$ et $\theta = 0$.

à $n \approx 3.6$ par interpolation des données expérimentales (lignes hachurées bleue et rouge). La zone hachurée sous la ligne bleue correspond à la région du graphe accessible aux cavités *purement photoniques*. On observe immédiatement que le mode *dipolaire électrique* est situé autour de la ligne bleue pour tous les échantillons. Le mode *dipolaire magnétique* est, quant à lui, situé bien au-dessus de cette limite. Il franchit clairement la limite de diffraction, et se situe dans la région du graphe comprise entre $\lambda/4n$ et $\lambda/6n$ (lignes verte et violette). C'est la cavité de diamètre $d = 13 \mu\text{m}$, le plus large diamètre testé, qui présente le plus fort confinement ($\lambda/6n$), avec une longueur d'onde de résonance $\lambda_0 = 273 \mu\text{m}$. Cela correspond à un volume effectif record $V_{\text{eff}} \approx 5 \times 10^{-6}$. Ce résultat est remarquable, et il est à comparer à celui d'une cavité "patch" de même diamètre dont le mode fondamental est observé pour $\lambda_0 = 86 \mu\text{m}$.

On peut toutefois s'interroger sur la perte de confinement pour le mode fondamental dans les cavités de faible diamètre. Cette tendance peut peut-être être expliquée en partie par les limitations du procédé de fabrication. En effet, ces dispositifs étant fabriqués par lithographie optique, la largeur de la connection latérale métallique est $l \approx 1.5 \mu\text{m}$, et ce, pour tous les diamètres fabriqués. Lorsque le diamètre est suffisamment grand devant cette valeur, la connection latérale agit comme un fil métallique 1D. Lorsque le diamètre de la cavité est du même ordre de grandeur, ce ruban latéral peut être approximé à une condition de bord métallique, et le système tend alors vers la valeur théorique $\lambda/4n$. Cette valeur peut être retrouvée en appliquant la méthode des charges images une seconde fois, cette fois dans le plan (y, z) . Une autre raison pour

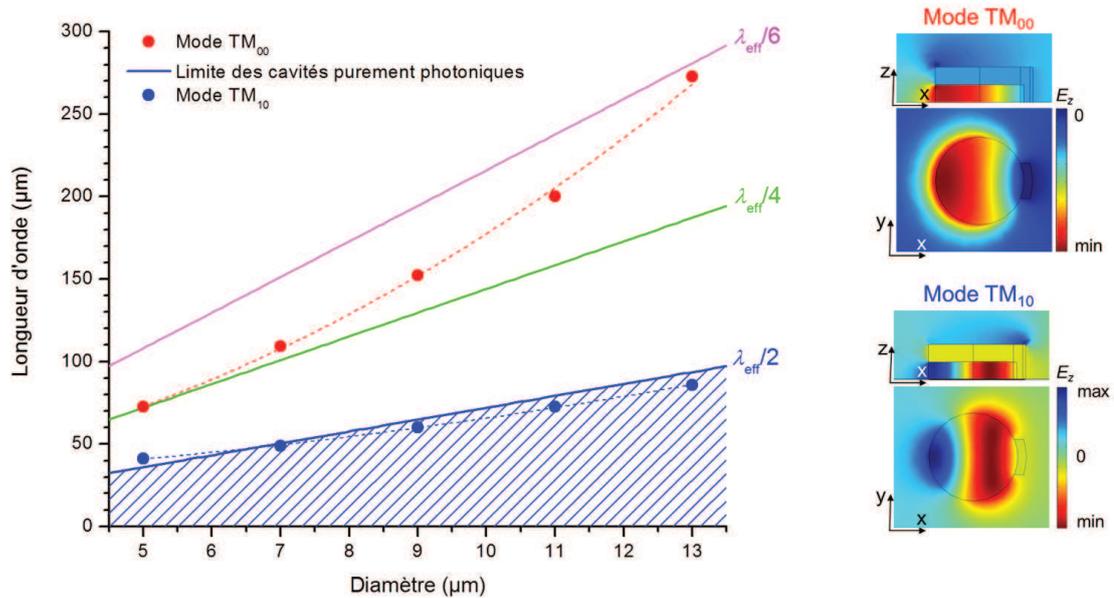


FIGURE 3.8 – A gauche : Longueurs d'onde des deux premiers ordres de résonance de la cavité hybride avec $L_z = 1 \mu\text{m}$. A droite : Distribution spatiale de la composante principale du champ électrique dans le plan $z = L_z/2$ et $y = 0$ pour chaque mode.

cette perte de confinement apparente tient probablement au fait que l'on compare des cavités en variant uniquement le diamètre. En particulier, l'épaisseur du cœur de la cavité reste fixée à $1 \mu\text{m}$. Autrement dit, dans cette étude les cavités fabriquées ne suivent pas la loi d'échelle.

En conclusion, cette étude permet de prouver expérimentalement l'apparition du mode *dipolaire magnétique* à une fréquence plus basse que celle des modes *dipolaires électriques*, que ce mode existe uniquement dans la cavité "patch", *modifiée* et enfin, qu'il a un caractère magnétique. Elle permet également de vérifier que pour des fréquences supérieures, cette cavité hybride retrouve les caractéristiques propres aux cavités *purement photoniques*. Enfin, et c'est le plus important, elle apporte la preuve conceptuelle que cette cavité échappe à la définition des cavités *purement photoniques* pour entrer dans la famille des résonateurs *électroniques*. Cela explique et justifie l'emploi de l'expression *cavité hybride photonique-électronique* pour qualifier cette nouvelle famille de résonateurs THz. Ces résultats sont reportés dans le graphe 3.13 (triangles vert clair).

3.3 Application à l'électrodynamique quantique

Afin de prouver que les résonateurs hybrides sont d'excellents candidats pour les applications en électrodynamique quantique, j'ai préparé une autre série d'échantillons dans laquelle le GaAs massif est remplacé par une hétérostructure quantique III-V. Cette structure quantique consiste en une superposition de couches de AlGaAs et de GaAs qui permet de préparer des états quantiques pour les électrons en bande de conduction, de façon à favoriser l'observation de polaritons ISB.

3.3.1 Polaritons inter-sous-bande THz

Dans cette section, je décris le phénomène de couplage fort entre deux oscillateurs couplés par une énergie de couplage $\hbar\Omega$ de façon très générale et volontairement simple. Le lecteur pourra se référer par exemple à la référence [32] pour une description rigoureuse.

L'un de ces deux oscillateurs correspond au champ électromagnétique d'un photon confiné dans une micro-cavité, et l'autre à une transition ISB pour un électron confiné dans un puits quantique. Le premier oscillateur a été décrit en détails dans les chapitres précédents, et le second sera détaillé dans la seconde partie de ce manuscrit. Pour simplifier on se limitera à des systèmes à un seul état d'excitation. Notons E_{cav} l'énergie du premier oscillateur dans son premier état d'excitation et E_{ISB} l'énergie correspondante du second oscillateur. Partons de la condition initiale pour le système le cas où l'électron est dans son état fondamental, c'est-à-dire qu'il occupe la sous-bande de plus basse énergie, tandis que le champ du photon est dans son état excité. Cet état initial est noté $|0, p\rangle$. La situation complémentaire, correspondant au cas où l'oscillateur dans son état excité est la transition ISB, est noté $|e, 0\rangle$. L'Hamiltonien de ce système peut alors être écrit sous la forme d'une matrice dont les éléments non diagonaux représentent l'énergie de couplage :

$$\begin{pmatrix} E_{\text{cav}} & \hbar\Omega \\ \hbar\Omega^* & E_{\text{ISB}} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Dans ce cas, le couplage entre la transition ISB et le champ électromagnétique du vide \vec{E} est décrit par la quantité :

$$\hbar\Omega = \vec{d} \cdot \vec{E} \quad (3.8)$$

où \vec{d} est l'élément de matrice dipolaire associé à la transition électronique ISB entre deux sous-bandes. Comme on le verra dans la partie II, ce dipôle est orienté dans la direction de croissance du puits quantique, résultant en une règle de sélection pour la polarisation. Les états propres de ce système sont désormais les combinaisons

linéaires des états non couplés $|0, p\rangle$ et $|e, 0\rangle$. Ces états sont appelés *polaritons*, et dans ce cas particulier, *polaritons inter-sous-bande* :

$$|\psi_+\rangle = \cos \alpha |0, p\rangle + j \sin \alpha |e, 0\rangle \quad (3.9)$$

$$|\psi_-\rangle = j \sin \alpha |0, p\rangle + \cos \alpha |e, 0\rangle \quad (3.10)$$

avec

$$\alpha = \frac{1}{2} \arctan \frac{\hbar \Omega}{E_{\text{ISB}} - E_{\text{cav}}} = \frac{1}{2} \arctan \frac{\Omega}{2\pi\delta} \quad (3.11)$$

où $2\pi\delta = \omega_{\text{ISB}} - \omega_{\text{cav}}$ est aussi appelé *detuning*. Ainsi, en diagonalisant la matrice 3.7 on trouve les fréquences propres du système :

$$\omega_{\pm} = \frac{1}{2} \left(\omega_{\text{ISB}} + \omega_{\text{cav}} \pm \sqrt{(\omega_{\text{ISB}} - \omega_{\text{cav}})^2 + 4\Omega^2} \right) \quad (3.12)$$

A la résonance ($\omega_{\text{ISB}} = \omega_{\text{cav}}$), les valeurs propres deviennent :

$$\omega_+^{\text{res}} = \frac{1}{2} (\omega_{\text{ISB}} + \omega_{\text{cav}} + 2|\Omega|) \quad (3.13)$$

$$\omega_-^{\text{res}} = \frac{1}{2} (\omega_{\text{ISB}} + \omega_{\text{cav}} - 2|\Omega|) \quad (3.14)$$

Les états non couplés ne sont plus dégénérés, et l'on peut alors mesurer la constante de couplage à partir de la différence d'énergie entre les deux états propres du système couplé (cf. Fig.3.9 à $\delta = 0$) :

$$2|\Omega| = h(\omega_+^{\text{res}} - \omega_-^{\text{res}}) \quad (3.15)$$

On appelle cette quantité la *fréquence de Rabi* (ou *Rabi splitting*).

La figure 3.9 résume les fréquences caractéristiques du système non couplé (en noir et rouge), et du système couplé par le terme Ω (en bleu et vert), en fonction du *detuning* δ . Pour $\delta = 0$, l'état dégénéré $\nu_{\text{cav}} = \nu_{\text{ISB}}$ est remplacé par un couple d'états non dégénérés dès qu'un couplage non nul Ω est introduit. On appelle ces deux états *polaritons inter-sous-bande*. Ils sont séparés en énergie par l'énergie d'anticroisement $\Delta E_0 = 2\hbar|\Omega|$. Ainsi, l'observation expérimentale de l'apparition de cette énergie d'anticroisement est la manifestation de l'existence des polaritons, et la mesure de sa valeur informe sur la force du couplage effectivement introduit entre les deux oscillateurs.

Pour quantifier la force de couplage, on introduit le rapport $2|\Omega|/\omega_{\text{ISB,cav}}$. On considère que le régime de couplage fort est atteint lorsque la fréquence de Rabi Ω du système couplé est plus grande que l'élargissement $\delta\omega_{\text{ISB,cav}}$ des niveaux du système découplé. Le régime de couplage ultra-fort est atteint lorsque Ω représente une fraction conséquente de $\omega_{\text{ISB,cav}}$. Dans ces conditions, des phénomènes physiques

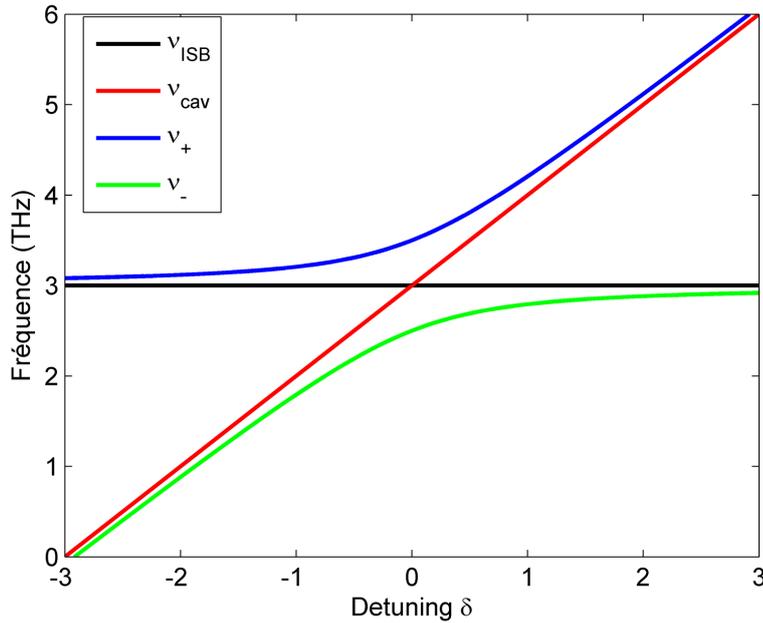


FIGURE 3.9 – Fréquences caractéristiques du système non couplé (en noir et rouge), et du système couplé par le terme $|\Omega|$ (en bleu et vert), en fonction du *detuning* δ . Les fréquences du système couplé ν_+ et ν_- sont calculées à partir de l'équation 3.12 avec $\nu_{\text{ISB}} = 3$ THz, $\nu_{\text{cav}} = \nu_{\text{ISB}} - \delta$ et $|\Omega|/2\pi = 0.5$ THz.

d'ordre fondamental peuvent se produire comme, par exemple, l'observation de l'effet Casimir dynamique [161], ou encore l'émission de photons jumeaux [92].

Dans l'étude expérimentale qui suit, nous avons utilisé la région active qui présentait la plus grande valeur rapportée sans champ magnétique externe à cette époque, soit $2|\Omega|/\omega_{\text{ISB,cav}} = 48\%$, par *Todorov et al.* [144]. Il s'agit d'un puits quantique fortement dopé, inséré dans un micro-disque métal-métal.

3.3.2 Résultats expérimentaux

La région active utilisée pour cette étude est celle décrite dans l'article [144] par *Todorov et al.*. Elle est conçue de telle sorte qu'une transition ISB d'énergie $\hbar\omega_{\text{ISB}} \approx 12.4$ meV ($\nu_{\text{ISB}} \approx 3$ THz) puisse être activée à basse température. A haute température, cette transition n'est pas active car la population électronique est distribuée entre plusieurs états du puits quantique. Les densités électroniques des deux sous-bandes d'intérêt sont alors très proches. Lorsque la température est très basse, les électrons peuplent majoritairement la sous-bande de plus basse énergie, et peuvent être vus comme un gaz d'électrons à deux dimensions (gaz 2D). Dans ce cas, l'oscillation collective des électrons qui composent ce gaz 2D vers les sous-bandes d'énergies

supérieures est permise.

A l'intérieur d'une micro-cavité, cette hétérostructure se comporte en première approximation comme du GaAs massif légèrement dopé de type n (cf. section 1.5.1 page 26). Ainsi, les mesures de réflectivité à haute température d'une telle micro-cavité permet d'observer les modes de résonance de la cavité hors couplage. La micro-cavité utilisée dans l'article original est une micro-cavité "patch" de section carrée. La géométrie utilisée pour cette étude est le résonateur hybride décrit dans la section précédente (cf. schéma 3.12 page 78). Les étapes de fabrication suivies sont identiques à celles décrites dans la section précédente. Cette fois, l'épaisseur de la région active (l'hétérostructure) est $t_{AR} 1.3 \mu\text{m}$, tandis que dans le cas précédent, $t_{GaAs} = 1.0 \mu\text{m}$. Huit panneaux de 9 mm^2 ont ainsi été fabriqués avec les diamètres compris entre $4 \mu\text{m}$ et $12 \mu\text{m}$.

Une première série de caractérisations en réflectivité a été réalisée à température ambiante pour les huit échantillons sur le banc de mesure décrit dans la section 2.3.1 page 48. Les spectres obtenus par la méthode décrite dans la section 3.2.3 ont permis d'extraire les fréquences de résonance reportées dans la figure 3.10. Cette mesure a été obtenue avec l'angle d'incidence de $\phi = 45^\circ$ et l'orientation $\theta = 0$. Dans ces conditions, la polarisation du faisceau incident permet d'identifier sans ambiguïté le mode *dipolaire magnétique* pour la polarisation (p). On observe également la levée de dégénérescence entre les modes *dipolaires électriques*. Ces résultats sont en très bon accord avec les simulations (non montrées ici) et les résultats présentés dans la section précédente. La zone bleue représente la fréquence de la transition ISB du gaz 2D à basse température.

La fréquence du mode fondamental de la cavité hybride de diamètre $d = 6 \mu\text{m}$ coïncide avec la fréquence de la transition ISB ($\nu_{cav} \approx \nu_{ISB} \approx 3 \text{ THz}$). Cet échantillon est le meilleur candidat de la série pour l'observation des polaritons THz.

Cet échantillon a donc été caractérisé à basse température afin d'activer la transition ISB, et ainsi d'observer la *fréquence de Rabi* Ω résultant du couplage fort entre la cavité hybride et la transition ISB. Notre banc de mesure ne permettant pas de contrôler la température de l'échantillon, ces mesures ont été effectuées à l'Université Paris 7 Diderot dans l'équipe "Matériaux et Phénomènes Quantiques", avec l'aide de Yuk-Nga Chen et Yanko Todorov sous la direction de Carlo Sirtori. La configuration utilisée est essentiellement la même, hormis le fait que l'angle d'incidence est fixe à $\phi = 45^\circ$. La source utilisée est la source interne d'un FTIR identique à celui utilisé précédemment. Une fois l'échantillon monté dans un cryostat, il peut être inséré dans le plan d'incidence du FTIR. Le signal réfléchi par l'échantillon est ensuite collecté par un détecteur externe (bolomètre). L'orientation de l'échantillon par rapport au faisceau incident est $\theta = 0$, et le faisceau est polarisé (p).

Les spectres collectés pour différentes températures comprises entre $T = 150 \text{ K}$ et $T = 5 \text{ K}$ sont reportés dans le graphe 3.11. A $T = 150 \text{ K}$, la transition n'est pas activée

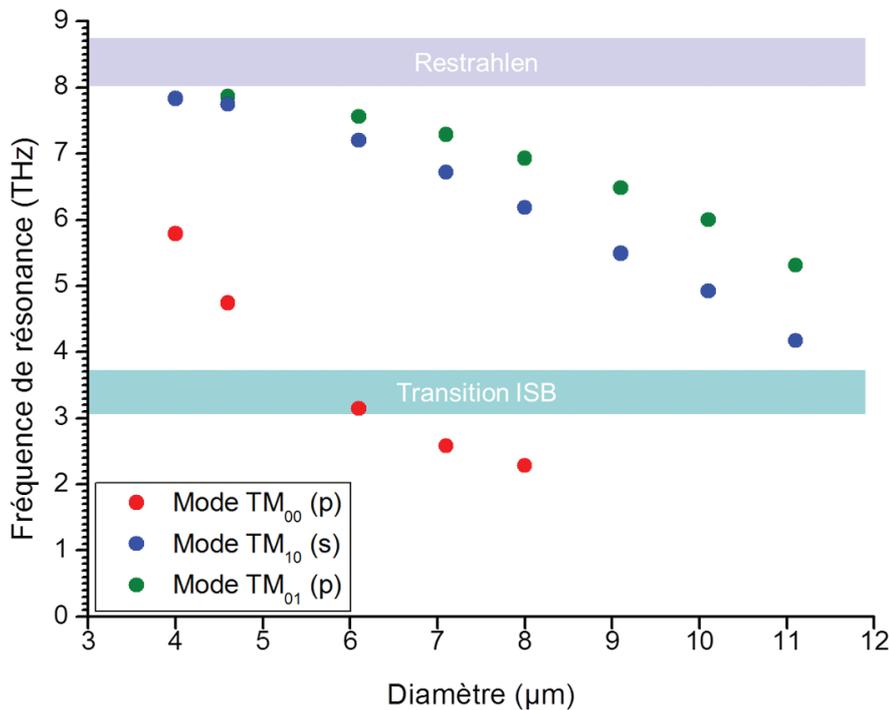


FIGURE 3.10 – Fréquence des trois premiers ordres de résonance de la cavité hybride hors couplage, dont le coeur contient l'hétérostructure décrite dans l'article [144] par *Todorov et al.*. Ces résonances sont extraites de mesures de réflectivité réalisées à température ambiante. La zone bleue représente la fréquence de la transition ISB du gaz 2D à basse température.

et on observe les résonances des deux premiers ordres $\nu_{\text{TM}_{00}} = 3.3$ THz et $\nu_{\text{TM}_{01}} = 7.8$ THz de la cavité hybride ($d = 6$ μm). Lorsque la température du gaz 2D diminue, la densité électronique de population dans l'état fondamental de la transition ISB est maximisée, et se rapproche du cas idéal de l'oscillateur décrit dans la section 3.3.1. Au cours de la descente en température, on observe effectivement un couplage de la résonance fondamentale de la cavité avec la transition ISB, tandis que la résonance d'ordre supérieur reste inchangée. La température minimale accessible au cours de cette expérience est $T = 5$ K (Hélium liquide). A cette température, la fréquence de Rabi mesurée est $2|\Omega| = 1.51$ THz, soit un rapport $2|\Omega|/\omega_{\text{ISB}} = 0.50$. Ce résultat est en parfait accord avec la valeur reportée dans l'article [144]. L'amélioration de 7% du couplage par rapport au résultat de la publication originale peut être expliquée par l'augmentation du facteur de confinement électromagnétique à la résonance fondamentale. Néanmoins, elle pourrait aussi trouver sa cause dans l'augmentation du contraste d'indice due à la gravure du semiconducteur, tandis que dans la publication

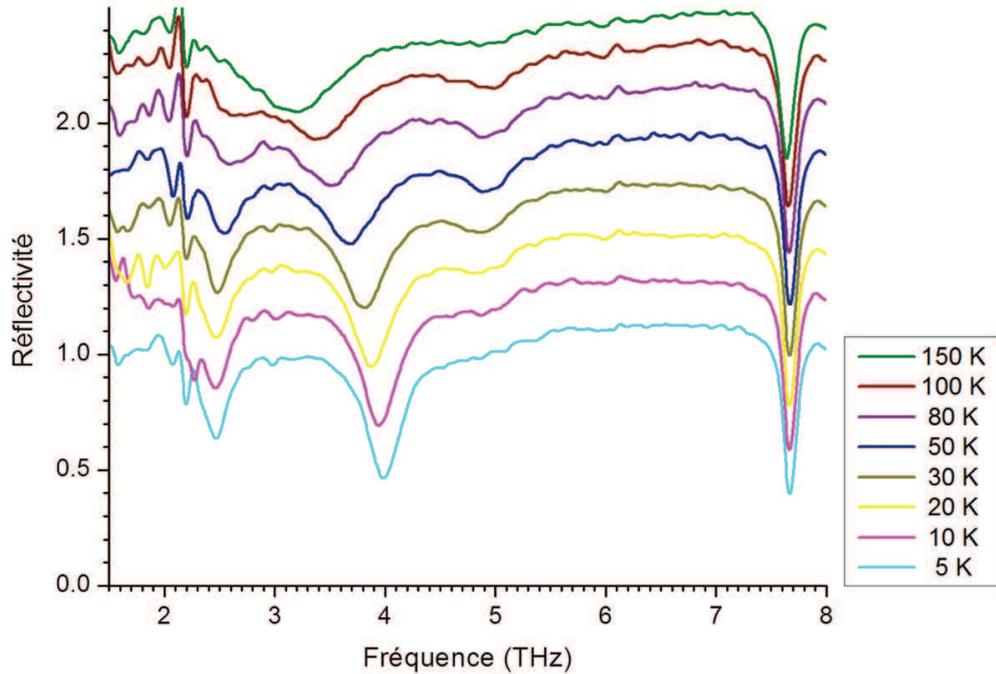


FIGURE 3.11 – Spectres de réflectivité de la cavité hybride de diamètre $d = 6 \mu\text{m}$ contenant le gaz 2D d'électrons pour différentes températures. Les polaritons THz sont effectivement activés à basse température, indiquant que la transition ISB est en couplage fort avec celle de la cavité. A $T = 5 \text{ K}$, on mesure la fréquence de Rabi $|\Omega|/2\pi = 1.51 \text{ THz}$ $T = 5 \text{ K}$.

originale, seul le motif métallique est gravé.

La plus grande valeur sans champ magnétique externe rapportée à ce jour est $2|\Omega|/\omega_{\text{ISB,cav}} = 54\%$, par *Geiser et al.* [51]. Ce travail a été réalisé en parallèle de celui-ci et présente d'autres intérêts. Dans le travail par *Geiser et al.*, la région active utilisée est un puits quantique parabolique couplé avec la cavité LC issue des références [153, 52]. Le potentiel parabolique effectif est obtenu en introduisant des barrières de $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ d'épaisseurs variables à l'intérieur d'un large puits de GaAs, de façon à ce que les énergies des états propres de l'hétérostructure soient toutes équidistantes entre elles. L'un des avantages de cette approche est qu'elle permet d'obtenir un couplage fort quelle que soit la distribution électronique, tandis que la région active utilisée dans la présente étude nécessite de travailler à température cryogénique afin de maintenir une population électronique suffisante dans l'état bas de la transition ISB.

En conclusion, cette étude démontre que ces résonateurs hybrides, opérés sur le

mode fondamental *magnétique*, peuvent être utilisés pour observer le couplage fort lumière-matière en micro-cavité. Cette démonstration est très encourageante pour la communauté des lasers à cascade quantiques, car elle ouvre la possibilité d'insérer un matériau qui fournit du gain dans la région où le champ électrique est confiné et, à long terme, de développer pour la première fois un laser THz dont les trois dimensions spatiales se situent sous la limite de diffraction.

3.4 Résonateur hybride : exploitation des fonctionnalités LC

Très récemment, beaucoup d'efforts ont été déployés pour tenter de convertir les micro-cavité "patch" utilisées pour les dispositifs actifs THz, en résonateurs hybrides LC. Dans les références [153, 52, 50], la configuration planaire a été privilégiée. Bien qu'elle présente un certain avantage en terme de fabrication, au moins une des trois dimensions spatiale de ces résonateurs ne peut être réduite au-dessous de la limite de diffraction pour une raison purement conceptuelle. Dans le domaine des fréquences térahertz ($\lambda \approx 100 \mu\text{m}$), cette dimension est de l'ordre de $15 \mu\text{m}$ pour des dispositifs semiconducteurs à base de GaAs, ce qui est notamment prohibitif pour les applications sur circuit intégré. De plus, comme je l'ai montré dans la section 3.1.2 page 59, aucun de ces travaux ne démontre que l'inductance L et la capacité C peuvent être contrôlées séparément comme dans un circuit électrique. L'importance de ces deux points va bien au-delà d'une simple preuve de principe, car cette fonctionnalité supplémentaire permettrait d'intégrer les caractéristiques des métamatériaux à une cavité photonique active, comme l'adaptation d'impédance dans le cas d'un détecteur ou le contrôle de la direction du faisceau de sortie dans le cas d'un laser.

3.4.1 Principe

Les géométries des cavités dites LC des références [153, 52, 50] sont composées de deux surfaces métalliques coplanaires. Elles sont donc équivalentes à une ligne de transmission de longueur finie. En négligeant les effets de bord sur les champs, la résonance d'ordre fondamental peut s'écrire :

$$f \approx \frac{1}{2\sqrt{LC}} \quad (3.16)$$

Or, d'après le théorème fondamental des lignes de transmission [136, 69], l'inductance et la capacitance par unité de longueur $L' = L/l$ et $C' = C/l$, où l est la longueur de l'élément, sont liées à la célérité de la lumière c par la relation fondamentale :

$$L'C' = \frac{1}{c^2} \quad (3.17)$$

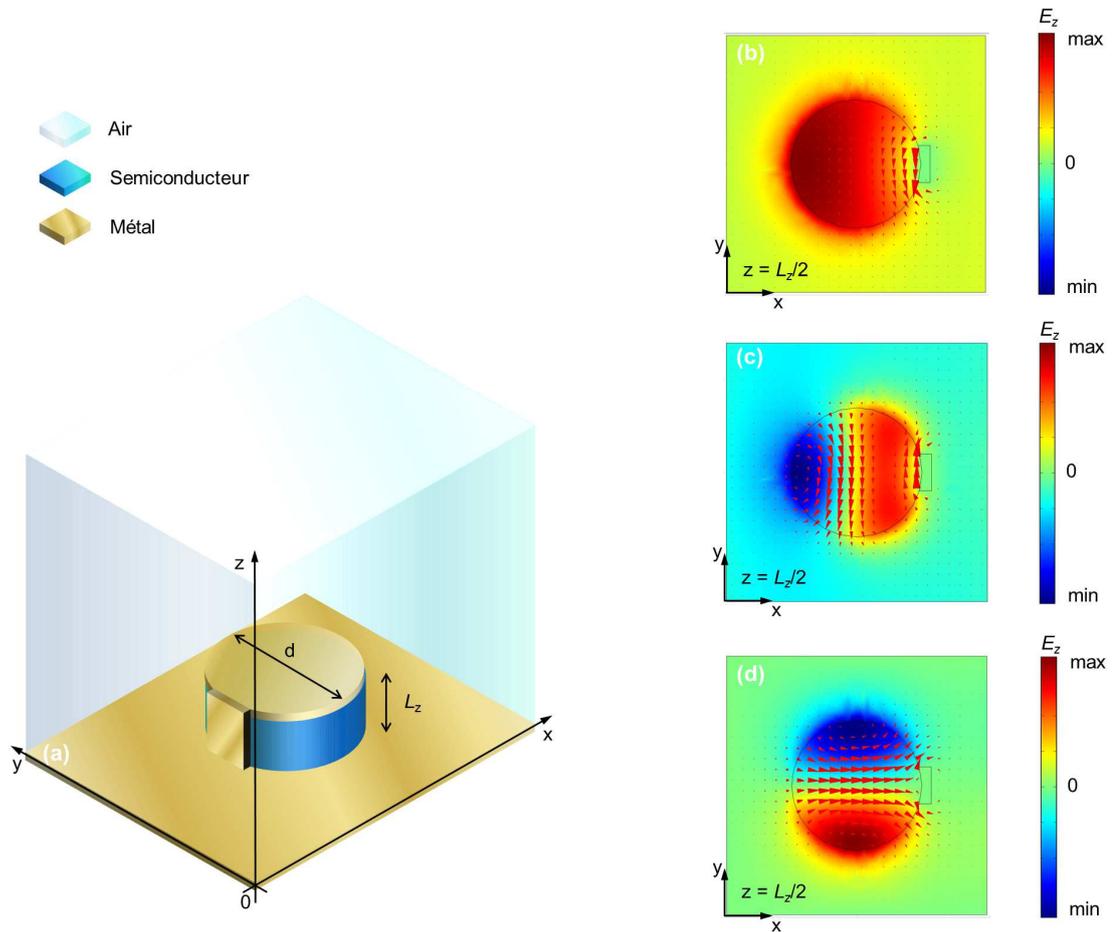


FIGURE 3.12 – Exemple de simulation d'un micro-disque métal-métal hybride de diamètre $d = 7 \mu\text{m}$ et d'épaisseur $L_z = t_{\text{GaAs}} = 1 \mu\text{m}$. A gauche : Schéma de la géométrie utilisée pour simuler les modes propres de la cavité hybride. A droite : Composante principale du champ électrique E_z à travers la section $z = L_z/2$ pour les trois premiers ordres des modes de cette cavité en échelle de couleurs ($E_z > 0$ en rouge, $E_z < 0$ en bleu). Les flèches rouges représentent le champ magnétique.

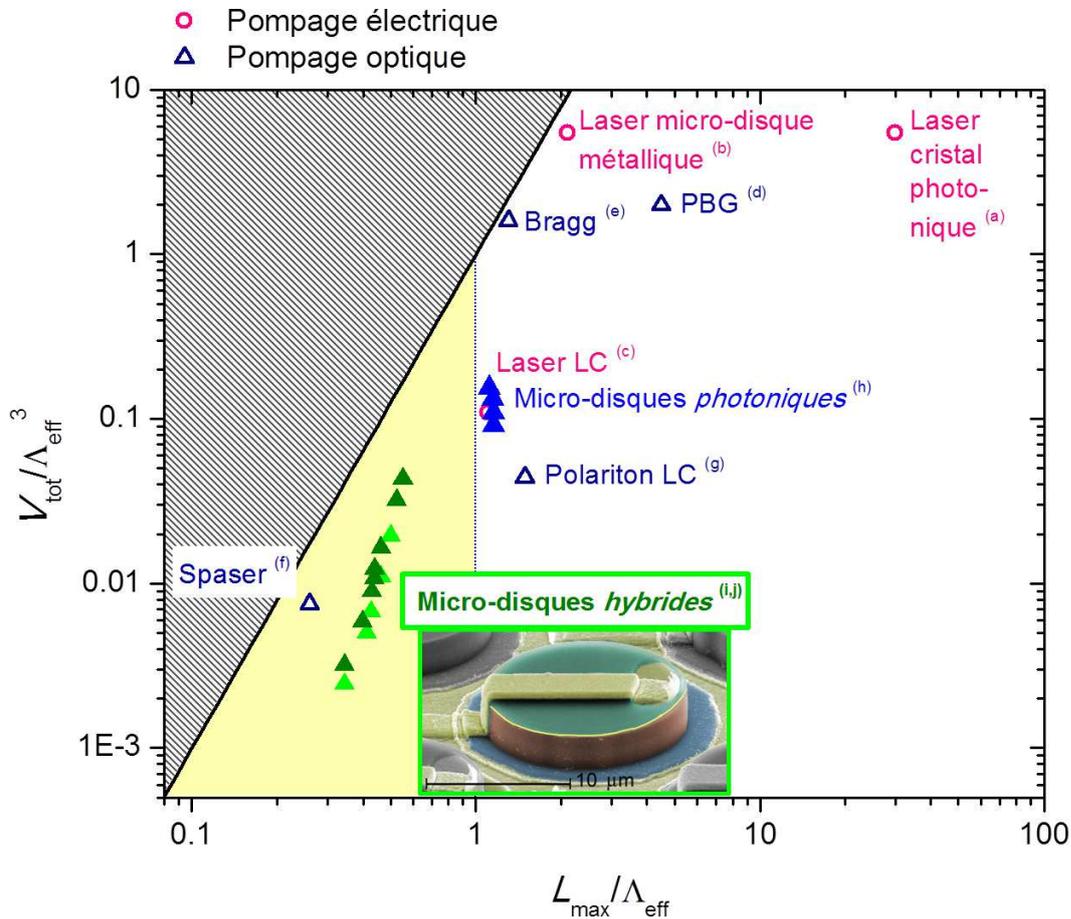


FIGURE 3.13 – Classement des dispositifs lasers qui présentent de très faibles volumes effectifs, en comparant leur volume total V_{tot} ainsi que la plus grande dimension L_{max} à la limite de diffraction Λ_{eff} (légende (a-h) : cf. Fig. 1.2 page 6 et 5.19 page 178). Les dispositifs fonctionnant sur un régime purement photonique apparaissent dans la zone blanche. Les triangles pleins vert (i,j) correspondent à la résonance d'ordre fondamental des micro-cavités hybrides étudiées dans ce chapitre, démontrant qu'ils appartiennent à la classe des résonateurs électroniques : (i, vert clair) le semiconducteur de cœur est du GaAs massif (cf. section 3.2), (j, vert foncé) le GaAs massif est remplacé par une hétérostructure III-V (cf. section 3.3).

Autrement dit, elles ne peuvent pas être ajustées indépendamment l'une de l'autre, et on retrouve facilement à partir des équations 3.16 et 3.17 que cela contraint le dispositif à la limite de diffraction. Les résonateurs hybrides décrits dans le chapitre

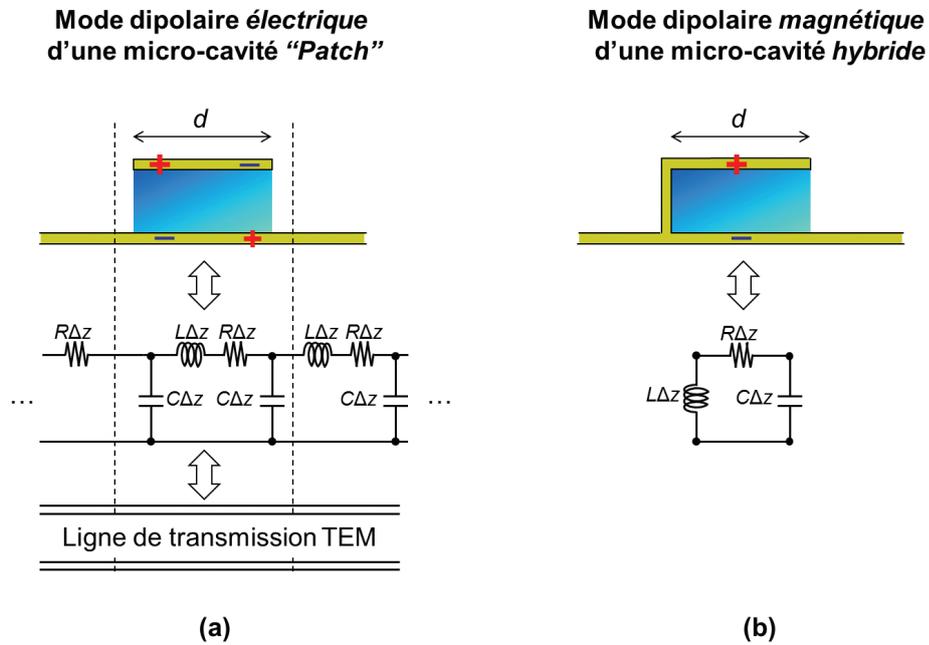


FIGURE 3.14 – TEMvsOneLoop

précédent échappent à cette condition grâce à leur géométrie 3D. Leurs capacitance et inductance effectives sont alors décorréliées. Ils peuvent ainsi être vus comme une antenne boucle [162, 58, 76], dont le comportement est décrit par la théorie des antennes [6] :

$$Z_{\text{antenne}} = Z_{\text{charge}}^* \quad (3.18)$$

où Z_{antenne} est l'impédance complexe de l'antenne et Z_{charge}^* est le complexe conjugué de l'impédance de charge. De ce point de vue, le problème peut alors être résolu par analogie avec un circuit LC . La fréquence de résonance de ce système est alors donnée par la partie imaginaire de l'équation 3.18 :

$$\frac{1}{j\omega C_{\text{charge}}} = -j\omega L_{\text{antenne}} \quad (3.19)$$

et la fréquence f du système s'écrit :

$$f = \frac{1}{2\pi \sqrt{L_{\text{antenne}} C_{\text{charge}}}}. \quad (3.20)$$

Dans ce chapitre, je présente une étude qui démontre la possibilité de contrôler la fréquence de résonance en modifiant la charge capacitive *ou* inductive du résonateur hybride. Bien que ce soit au-delà de l'objectif de ce travail, je propose également un modèle analytique très simple, développé par analogie avec un circuit *LC*, qui permet d'expliquer qualitativement le comportement de ces dispositifs hybrides. Les hypothèses ainsi que les approximations qui m'ont permis de développer ce modèle analytique seront justifiées par des simulations numériques de calcul de la résonance fondamentale par éléments finis.

3.4.2 Résultats expérimentaux

Le principe du contrôle de la fréquence de la résonance *LC* est résumé par la figure 3.16. A partir de la situation représenté dans cette figure par le schéma (a), on aboutit au schéma (c) par l'ajout d'une boucle au circuit. Cette modification a pour effet d'augmenter l'inductance effective totale de l'antenne tout en laissant inchangé la valeur de la *capacitance* *C*, élevant ainsi la fréquence de résonance. Puis à partir de la situation représentée en (c), on aboutit au schéma (e) en augmentant l'épaisseur du micro-disque. L'augmentation de la distance séparant les plaques du condensateur diminue la capacitance effective totale de l'antenne, abaissant la fréquence de résonance, tout en modifiant de façon marginale la valeur de *L*.

Dans la présente étude, je décris cette nouvelle famille de résonateurs hybrides, et je compare ses caractéristiques expérimentales à celles de la famille de résonateurs hybrides décrite dans le chapitre précédant. Afin de distinguer trois situations décrites par les schémas (a,c,e) de la figure 3.16, j'utiliserai les notations suivantes :

- "One loop" pour la première famille de résonateurs hybrides (cf. Fig.3.15(a)), car les électrons parcourent une seule boucle de courant,
- "Two loops" pour la nouvelle famille de résonateurs hybrides (cf. Fig.3.15(b)), car les électrons parcourent alors deux boucles de courant.

3.4.3 Fabrication des résonateurs "Two loops"

D'un point de vue technologique, cette nouvelle famille de résonateurs diffère de la première essentiellement par l'ajout d'une couche de SiO_2 sous la connection latérale. Une étude de la famille de résonateurs hybrides "Two loops" en fonction du diamètre et de l'épaisseur du semiconducteur de cœur a été réalisée. Comme dans le chapitre précédent, l'étude d'un type de résonateur en fonction du diamètre du disque facilite d'une part l'identification des modes de résonances supportés par la cavité, et d'autre part permet de dégager le comportement fréquentiel caractéristique de ce type de résonateur. Les premières étapes de fabrication suivies sont identiques à celles décrites dans le chapitre précédent jusqu'à l'étape 4 (cf. Fig. 2.7 (a-e)). Puis on

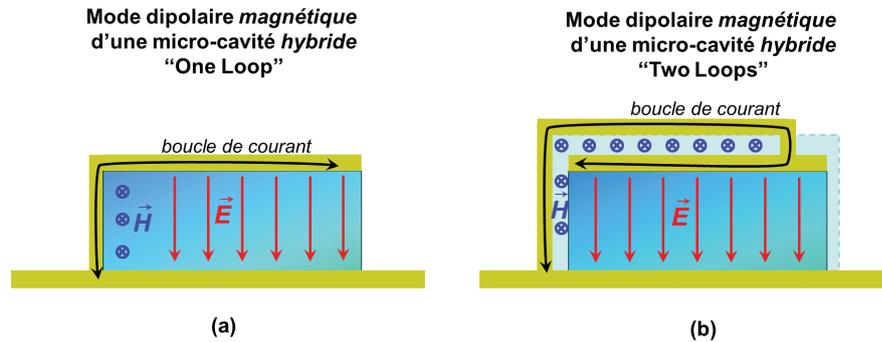


FIGURE 3.15 – Schémas de principe pour le mode fondamental des résonateurs "One loop" et "Two loops". (a) Schéma équivalent du résonateur "One loop". (b) Schéma équivalent du résonateur "Two loops".

procède à un dépôt conforme de SiO_2 (isolant électrique) par dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (*plasma enhanced chemical vapor deposition*) (PECVD) suivi d'une lithographie et d'une gravure ionique réactive (*reactive ion etching*) (RIE) (sélective pour le SiO_2) de façon à définir les *vias* à travers le SiO_2 qui permettront de connecter le disque métallique supérieur au plan métallique situé au pied du micro-disque (cf. Fig.3.17(b)). Pour terminer, une connection latérale métallique est définie par lithographie optique, suivie d'un dépôt de film mince métallique et d'un lift-off (cf. Fig. 3.17 (b,c)), qui permettra l'oscillation des charges entre le disque et le plan métalliques. Pour étudier les situations schématisées par les figures 3.16 (c) et (e), j'ai utilisé deux épaisseurs de GaAs massif (respectivement $t_{\text{GaAs}} = 1.0 \mu\text{m}$ et $t_{\text{GaAs}} = 3.0 \mu\text{m}$), préparées par MBE au LPN par Isabelle Sagnes et al. Deux séries de six panneaux de 9 mm^2 de surface portant un ensemble d'environ 200 résonateurs "Two loops" chacun ont ainsi été fabriqués, avec les diamètres compris entre $7 \mu\text{m}$ et $14 \mu\text{m}$, pour chacune des deux épaisseurs t_{GaAs} . Pour référence, deux séries de panneaux de 9 mm^2 composés de résonateurs de type "patch" encapsulés dans de la silice ont également été fabriqués à partir des deux épaisseurs de cœur avec des diamètres compris entre $5 \mu\text{m}$ et $14 \mu\text{m}$ (cf. Fig.3.16(b)).

3.4.4 Caractérisation du résonateur "Two loops" d'épaisseur $3 \mu\text{m}$

La figure 3.18 rassemble les spectres expérimentaux obtenus pour cinq diamètres de cavité hybride avec $t_{\text{GaAs}} = 3.0 \mu\text{m}$: $d = 5, 7, 9, 11, 13 \mu\text{m}$. Les spectres de la figure de gauche ont été effectués sur le banc de mesure décrit dans la section 2.3.2 page 50 avec un faisceau incident non polarisé tel que $\theta = 0$ et $\phi = 45^\circ$. Ces résultats permettent de vérifier le décalage en fréquence des modes *dipolaires électriques* ($\text{TM}_{01,10}$) pour les cinq échantillons, qui se produit comme prévu vers les basses fréquences lorsque le diamètre augmente. On peut également observer le mode *dipolaire magnétique*

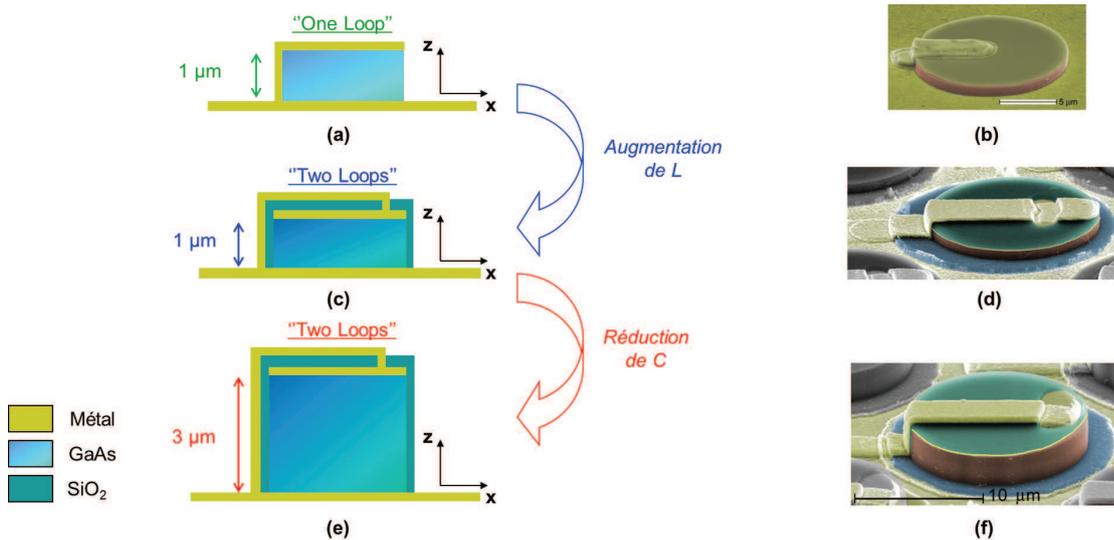


FIGURE 3.16 – A gauche (a,c,e) : Schémas des résonateurs hybrides "One loop" (a) et "Two loops" (c,e). A droite (b,d,f) : Images SEM des dispositifs réels "One loop" (b) et "Two loops" (d,f).

dans les spectres des deux plus diamètres de cavité (cf. courbes noire et rouge dans le graphe de gauche de la Fig.3.18).

Les mesures à basse fréquence reportées dans le graphe de droite de la figure 3.18 ont été effectuées sur le banc de mesure de TDS du groupe THz au Laboratoire Pierre Aigrain, situé à l'École Nationale de Paris. Elles ont été effectuées par Pierrick Cavalié, sous la direction de Sukhdeep Dhillon et Jérôme Tignon. La gamme de fréquence couverte par ce banc de mesure s'étend de 0.3 THz à 4 THz environ, ce qui est idéal pour l'observation de la résonance fondamentale de ces cavités. On peut ainsi observer le mode *dipolaire magnétique* dans les spectres des cavités de plus grand diamètre dans le graphe de droite de la figure 3.18. Dans le spectre en violet ($d = 13 \mu\text{m}$), on observe deux pics d'absorption : l'un vers 1 THz, l'autre vers 3.5 THz. Le premier correspond au mode fondamental, c'est-à-dire au mode *dipolaire magnétique*, et le second correspond au mode *dipolaire électrique* TM_{10} . Ce résultat est en parfait accord avec celui obtenu pour le même échantillon dans notre banc de mesure (cf. spectre violet dans le graphe de gauche de la Fig.3.18). Dans le spectre en rouge ($d = 10 \mu\text{m}$), l'élargissement de la résonance est dû au fait que la séparatrice utilisée introduit des pertes par absorption. Il s'agit d'une caractéristique bien identifiée, propre au banc de mesure. Elle n'est donc pas à attribuer à l'échantillon. La résonance fondamentale est donc également décalée vers les basses fréquences lorsque le diamètre augmente.

Le mode *dipolaire magnétique* peut être identifié sans ambiguïté, soit en comparant les spectres en polarisation p et s pour des angles $\theta = 0$ et $\phi = 45^\circ$ par exemple

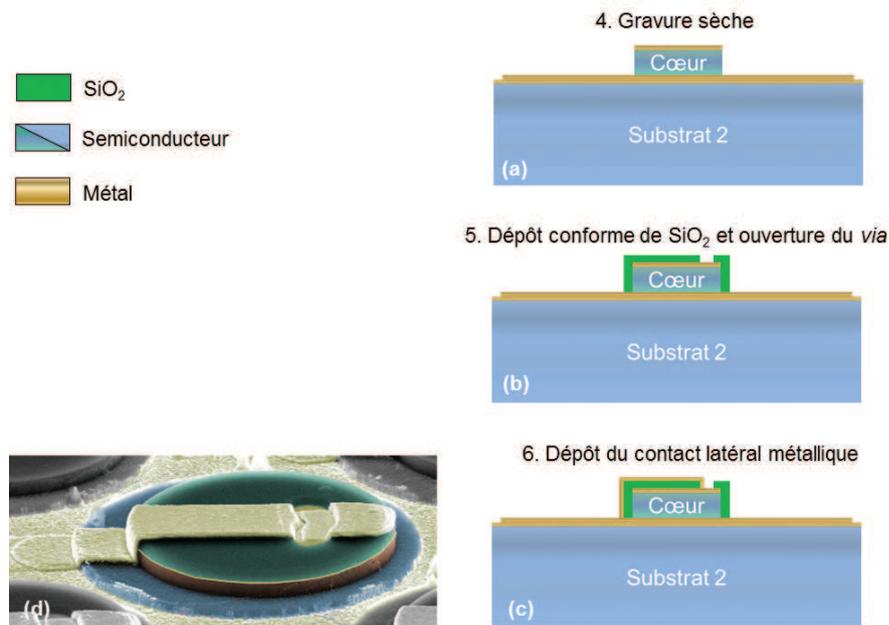


FIGURE 3.17 – En haut et à droite : Schémas des étapes de fabrication des micro-cavités hybrides de la famille "Two loops". En bas à gauche : Micrographie obtenue par SEM d'un résonateur hybride "Two loops" réalisé en procédant en suivant les étapes 1 à 4 décrites dans la figure 2.7 page 49 suivies des étapes 5 et 6.

(cf. 3.5 page 66), soit en comparant les spectres pour les orientations $\theta = 0$ et $\theta = 90^\circ$ (cf.3.19) par exemple en polarisation p .

3.4.5 Conclusion

La longueur d'onde des modes TM_{00} et TM_{10} pour chaque échantillon ("One loop" $t_{GaAs} = 1 \mu m$, "Two loops" $t_{GaAs} = 1 \mu m$, "Two loops" $t_{GaAs} = 3 \mu m$, "Patch" $t_{GaAs} = 1 \mu m$ et "Patch" $t_{GaAs} = 3 \mu m$) en fonction du diamètre d du résonateur est reportée dans la figure 3.20. Pour chaque résonateur, le mode fondamental *dipolaire magnétique* (TM_{00}) est représenté par les symboles pleins et le mode *dipolaire électrique* (TM_{10}) par les symboles vides. Ainsi, les étoiles vertes représentent les deux premiers ordres de résonance des résonateurs hybrides "One loop" d'épaisseur $t_{GaAs} = 1 \mu m$ (déjà présentés dans le chapitre précédents), les sphères rouges représentent les deux premiers ordres de résonance des résonateurs "Two loops" d'épaisseur $t_{GaAs} = 1 \mu m$, et les sphères bleues représentent les deux premiers ordres de résonance des résonateurs "Two loops" d'épaisseur $t_{GaAs} = 3 \mu m$. Le mode fondamental des cavités "patch" (*dipolaire électrique*, TM_{01}) est également reporté (triangles gris vides) pour les épaisseurs $t_{GaAs} = 1 \mu m$ (triangles pointe en vers le haut) et $t_{GaAs} = 3 \mu m$ (triangles

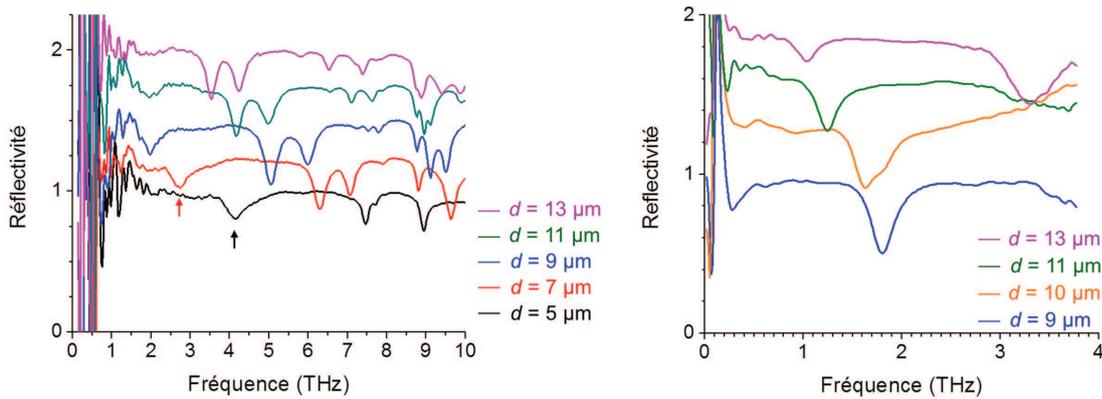


FIGURE 3.18 – A gauche : Spectres des cavités hybrides "Two loops" avec $t_{\text{GaAs}} = 3.0 \mu\text{m}$, collectés sur le banc optique FTIR avec le détecteur interne (DTGS) avec un faisceau incident non polarisé, tel que $\theta = 0$ et $\phi = 45^\circ$. Les flèches indiquent la position du mode fondamental *dipolaire magnétique* observé pour les diamètres $d = 5, 7 \mu\text{m}$. A droite : Spectres des cavités hybrides "Two loops" avec $t_{\text{GaAs}} = 3.0 \mu\text{m}$, collectés sur le banc optique TDS pour les diamètres $d = 9, 10, 11, 13 \mu\text{m}$, avec un faisceau incident polarisé p , tel que $\theta = 0$ et $\phi = 45^\circ$.

pointe vers le bas).

On observe que, pour un diamètre donné, les résonateurs hybrides "Two loops" opèrent à une fréquence plus basse que les résonateurs hybrides "One loop", ce qui est en bon accord avec l'augmentation de la valeur de l'inductance introduite par l'ajout d'une boucle de courant. Les résonateurs hybrides "Two loops" avec $t = 3 \mu\text{m}$ opèrent à une fréquence plus élevée que ceux avec $t = 1 \mu\text{m}$ d'un facteur $\sqrt{3}$, ce qui est en très bon accord avec la réduction de la valeur de la capacitance d'un facteur 3. Ceci démontre que le mode fondamental de ces cavités est effectivement contrôlé par un circuit LC externe. Un confinement maximal de $\lambda_{\text{eff}}/9$ dans les deux plus grandes dimensions est atteint pour le résonateur "One loop" de diamètre $d = 14 \mu\text{m}$ et d'épaisseur $1 \mu\text{m}$. Ce résonateur opère à la longueur d'onde $\lambda \approx 450 \mu\text{m}$, ce qui établit le nouveau record du plus faible volume effectif publié à ce jour : $\frac{V_{\text{tot}}}{\lambda_{\text{eff}}^3} \approx 8 \times 10^{-5}$ ($\frac{V_{\text{tot}}}{\Lambda_{\text{eff}}^3} \approx 1 \times 10^{-5}$). Quant aux modes dipolaires électriques, ils reposent tous sur la ligne $\lambda_{\text{eff}}/2$, quelle que soit leur famille ("patch", "One loop" et "Two loops"), ce qui indique que ces résonances sont des modes purement photoniques.

En conclusion, cette étude démontre que ces familles de résonateurs hybrides possèdent effectivement les deux fonctionnalités essentielles d'un oscillateur électronique : des dimensions très petites devant la limite de diffraction, et une fréquence de résonance contrôlable par un circuit où L et C sont indépendantes. De plus, la géométrie 3D assure un excellent confinement au sein de la région active, ce qui

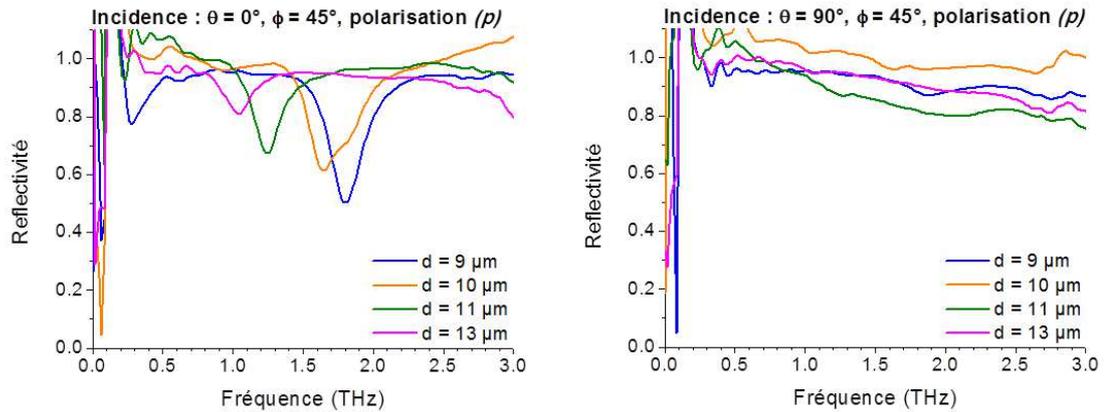


FIGURE 3.19 – Comparaison entre les spectres obtenus pour $\theta = 0$ (à gauche) et $\theta = 90^\circ$ (à droite) pour les résonateurs "Two loops" de diamètre $d = 9, 10, 11, 13 \mu\text{m}$, avec un faisceau incident polarisé p tel que $\phi = 45^\circ$

est un avantage certain par rapport aux géométries planaires pour la plupart des applications.

3.5 Modèle analytique simple LC

J'ai développé un modèle analytique très simple qui vise à démontrer que la fréquence de résonance du mode fondamental est directement liée à la géométrie de ces dispositifs *via* l'inductance et la capacitance effectives [6]. Pour ce faire, considérons les deux familles de résonateurs "One loop" et "Two loop". Pour simplifier les calculs, je considère les géométries représentées par les schémas des figures 3.21 3.22. Le plan métallique situé sous le semiconducteur agissant comme un plan de masse quasi-infini avec des conditions de bord électriques, le principe des charges images peut être appliqué. Ainsi, la structure schématisée par la figure 3.21 (a) est équivalente aux dispositifs "One loop" fabriqués (cf. Fig.3.16 (a,b)). De la même façon, la structure schématisée par la figure 3.21 (b) est équivalente aux dispositifs "Two loops" fabriqués (cf. Fig.3.16 (c,d) et (e,f)).

La principale contribution à la capacitance C provient des deux disques (en rouge dans la figure 3.21), séparés par le matériau semiconducteur. L'inductance L peut être vue quant à elle comme la somme des auto-inductances L_i de chacun des éléments métalliques qui supportent un courant de surface (tous les éléments colorés dans la figure 3.21, disques inclus) [69]. En première approximation, on peut négliger la contribution des inductances et de capacitances mutuelles entre les différents éléments [14].

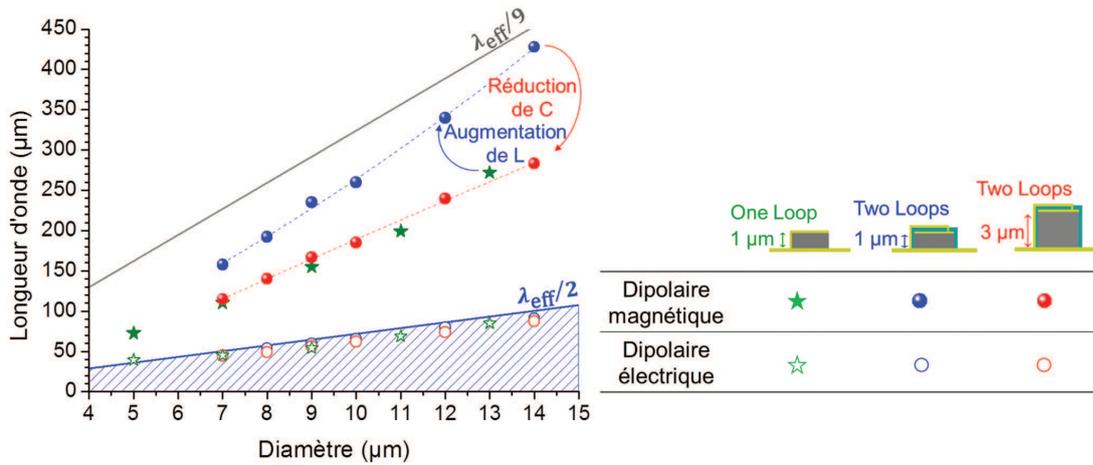


FIGURE 3.20 – Longueur d'onde effective en fonction du diamètre d pour les résonateurs hybrides "One loop" d'épaisseur $1\ \mu\text{m}$ (étoiles vertes), les "Two loops" d'épaisseur $1\ \mu\text{m}$ (sphères rouges) et $3\ \mu\text{m}$ (sphères bleues). Les symboles pleins correspondent au mode fondamental *dipolaire magnétique* et les symboles vides correspondent au mode *dipolaire électrique*. Les courbes pointillées sont les interpolations des points expérimentaux. Les lignes continues bleue et grise servent de guide pour l'oeil et indiquent les équivalences $d = \lambda_{eff}/2$ et $d = \lambda_{eff}/9$ respectivement. La zone hachurée représente la région du graphe réservée aux résonateurs *photoniques*.

La capacité peut être estimée par la formule :

$$C = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r S}{g} \quad (3.21)$$

où S est l'aire du disque, g la distance séparant les deux disques et $\epsilon_{SC} = \epsilon_0 \epsilon_r$ est la constante diélectrique du matériau situé entre les disques. L'inductance totale est donnée par $L = \sum_i L_i$ où l'inductance élémentaire L_i s'écrit d'après la formule standard [6, 14] pour un fil de section rectangulaire :

$$L_i \approx \frac{\mu_0 h}{4\pi} \left[2 \ln(2h) - \frac{\omega_1^2}{3\omega_2^2} \ln \omega_1 - \frac{\omega_2^2}{3\omega_1^2} \ln \omega_2 - \left(1 - \frac{\omega_2^2}{6\omega_1^2} - \frac{\omega_1^2}{6\omega_2^2} \right) \ln(\omega_1^2 + \omega_2^2) - \frac{4}{3} \frac{\omega_1}{\omega_2} \tan^{-1} \frac{\omega_2}{\omega_1} - \frac{4}{3} \frac{\omega_2}{\omega_1} \tan^{-1} \frac{\omega_1}{\omega_2} + \frac{7}{6} + 1 \right] \quad (3.22)$$

où h est la longueur du fil, et ω_1, ω_2 sont les cotés de la section rectangulaire du fil (cf. Fig.3.22). Les résultats numériques des formules L et C 3.22 et 3.21 en fonction du diamètre pour chaque type de résonateur hybride sont reportés dans la figure 3.23.

La courbe verte décrit l'évolution de L et C pour le résonateur de type "One loop" pour une épaisseur de GaAs massif $g/2 = 1\ \mu\text{m}$, et avec $\omega_1 = 2.0\ \mu\text{m}$ et $\omega_2 = 400\ \text{nm}$

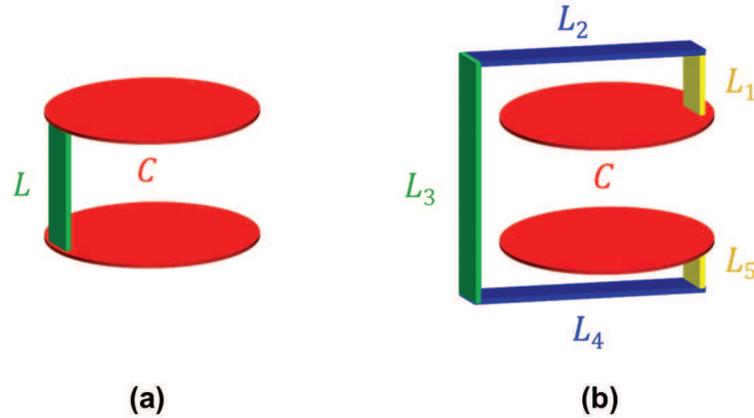


FIGURE 3.21 – Schémas des géométries utilisées pour l'estimation des fréquences de résonance par un modèle analytique LC . (a) Schéma équivalent du résonateur "One loop" après application du principe de charge image, de capacité C et d'inductance effective totale $L = \sum_{i=1}^3 L_i$. (b) Schéma équivalent du résonateur "Two loops" après application du principe de charge image, de capacité C et d'inductance effective totale $L = \sum_{i=1}^7 L_i$.

pour L_2 . La courbe bleue décrit l'évolution de L et C pour le résonateur de type "Two loops" pour une épaisseur de GaAs massif $g/2 = 1 \mu\text{m}$, et avec $\omega_1 = 3.5 \mu\text{m}$, $\omega_2 = 450 \text{ nm}$ pour L_2 et $\omega_2 = 700 \text{ nm}$ pour L_2, L_4 et L_6 . La courbe rouge décrit l'évolution de L et C pour le résonateur de type "Two loops" pour une épaisseur de GaAs massif $g/2 = 3 \mu\text{m}$, et avec comme dans le cas précédent $\omega_1 = 3.5 \mu\text{m}$, $\omega_2 = 450 \text{ nm}$ pour L_2 et $\omega_2 = 700 \text{ nm}$ pour L_2, L_4 et L_6 . Les valeurs de ω_2 correspondent aux épaisseurs réelles des différents éléments métalliques des dispositifs fabriqués, après évaporation d'un micromètre d'or avec un angle de $\phi = 45^\circ$ par rapport au plan de l'échantillon pour deux orientations de l'échantillon $\theta = 0$ et 180° . La valeur de h des éléments $L_{i=2,3,\dots,7}$ du dispositif schématisé par la figure 3.21 (b) dépendent de l'épaisseur du film de SiO_2 . Le film de SiO_2 déposé de façon conforme par PECVD mesure 500 nm d'épaisseur (cf. images SEM Fig.3.16(b,d,f)). L'épaisseur des disques d'or est de 200 nm .

La longueur d'onde de résonance peut alors être calculée en fonction du diamètre des disques à partir des équations 3.21 et 3.22 par la formule :

$$\lambda = c 2\pi \sqrt{LC} \quad (3.23)$$

Les résultats numériques pour les trois types de résonateurs sont reportés dans la figure 3.24 (courbes continues verte, bleue et rouge). Les valeurs numériques de l'inductance et de la capacité effectives calculées sont de l'ordre de la dizaine de pH et de quelques fF respectivement. Pour comparaison, les valeurs expérimentales sont représentées par des points de couleurs correspondantes.

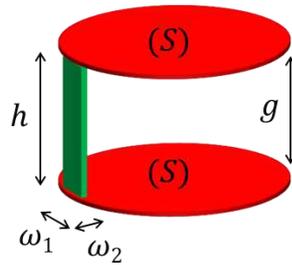


FIGURE 3.22 – Schéma équivalent du résonateur "One loop" annoté avec les dimensions géométriques utilisées dans les formules 3.21 et 3.22.

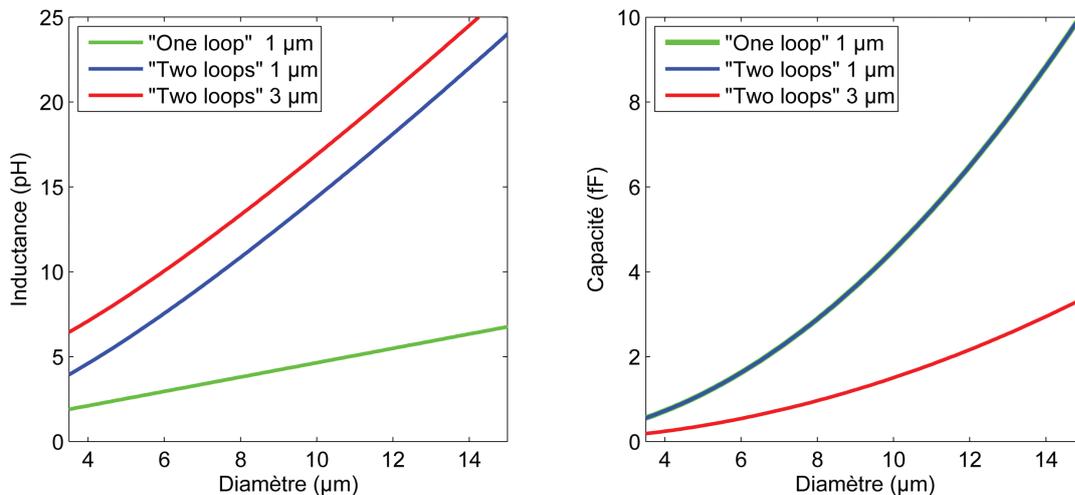


FIGURE 3.23 – Estimation de L et C pour chaque type de résonateur hybride dans l'approximation quasi-statique des champs. A gauche : Inductance effective totale (cf. Eq.3.22). A droite : Capacité effective totale (cf. Eq.3.21).

En conclusion, ce modèle analytique délibérément simple explique la tendance générale des points expérimentaux de façon très satisfaisante. La dépendance de la longueur d'onde de résonance avec la variation du diamètre, de l'inductance ou de la capacité est correctement reproduite. Ceci prouve que la fréquence du mode fondamentale des résonateurs hybrides est effectivement déterminée par L et C . Cependant, ce modèle très simple surestime les longueurs d'onde de résonance observées expérimentalement. Ce résultat peut être en partie expliqué par les fortes approximations réalisées dans le cas idéal décrit par les schémas 3.21 (b,c,d) par rapport aux géométries réelles (cf. images SEM Fig.3.16(b,d,f)). Ces approximations sont raisonnables et chaque élément inductif ou capacitif décrit par ce modèle correspond à une réalité physique au sein du résonateur.

Pour étayer la validité de cette affirmation ainsi que du modèle en général, je

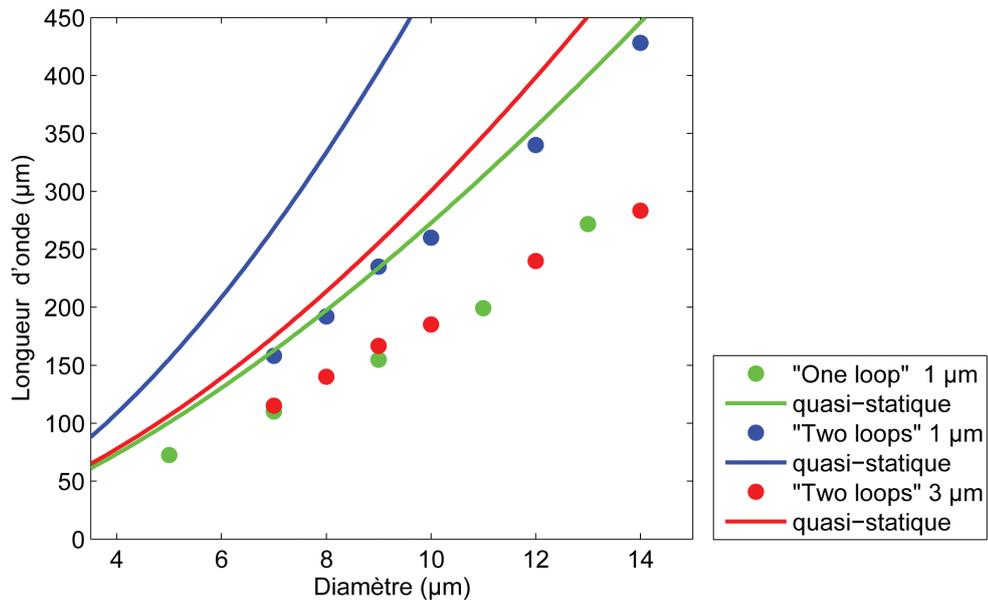


FIGURE 3.24 – Calcul de la longueur d'onde (courbes continues) pour les trois résonateurs ("One loop" 1 μm en vert, "Two loops" 1 μm en bleu, "Two loops" 3 μm en rouge) en fonction du diamètre des disques. Pour comparaison, les valeurs expérimentales sont représentées par des points de couleurs correspondantes.

présente dans la section suivante les résultats de simulation par éléments finis des ondes électromagnétiques "full wave" (COMSOL) dans les résonateurs hybrides et les compare à ceux obtenus par cette approche quasi-statique.

3.6 Simulations "full wave" avec COMSOL

Les résonances de ces résonateurs ont également été simulées avec le logiciel COMSOL dans le mode de calcul des valeurs propres dans les trois dimensions de l'espace. Toutes les dimensions sont identiques à celles utilisées dans le modèle analytique LC présenté ci-dessus. Les indices de réfraction du métal, du SiO_2 et du GaAs sont issues des références [106, 110] et de la section 1.5 page 26 respectivement.

Pour comparer les résultats obtenus par simulation "full wave" aux résonances observées expérimentalement, j'ai préparé neuf géométries 3D qui correspondent aux trois types de résonateurs pour trois valeurs de diamètre chacun. Les résultats de ces simulations sont résumés dans la table 3.2. La figure 3.25 représente la distribution spatiale du champ électromagnétique dans le résonateur hybride "Two loops" d'épaisseur 1 μm et de diamètre $d = 7 \mu\text{m}$ (cf. Fig.3.16(c)) à la résonance fondamentale (*dipolaire magnétique*). Le métal est symbolisé par la couleur jaune, et la silice est délimitée

d (μm)	"One loop" $1\mu\text{m}$		"Two loops" $1\mu\text{m}$		"Two loops" $3\mu\text{m}$	
	λ (μm)	Γ	λ (μm)	Γ	λ (μm)	Γ
6	119.5	0.60	119.5	0.60	95.1	0.41
10	151.2	0.66	251.7	0.67	186.6	0.49
14	244.5	0.72	420.6	0.72	296.7	0.54

TABLE 3.2 – Résonance fondamentale de chacun des trois types de résonateurs hybrides obtenues par simulation par éléments finis (COMSOL) pour trois valeurs de diamètre.

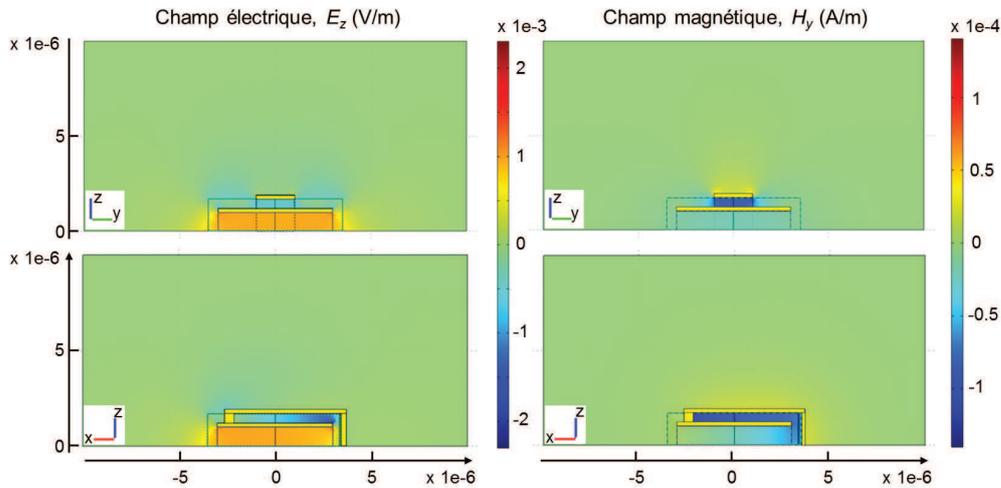


FIGURE 3.25 – Distribution spatiale des champs pour la résonance fondamentale *dipolaire magnétique* du résonateur "Two loops" d'épaisseur $1\mu\text{m}$. A gauche : Composante principale du champ électrique (E_z). A droite : Composante principale du champ magnétique (H_y).

par une ligne pointillée grise. La composante principale du champ électrique E_z à travers les coupes situées en $(y0z)$ et $x0z$ est représentée dans la partie de gauche de la figure, et la composante principale du champ magnétique H_y , dans la partie de droite. D'après ces simulations, on peut conclure le champ électrique est localisé principalement dans le cœur semiconducteur du résonateur, à l'exception d'une petite portion localisée dans la région de faible volume située entre le disque et l'une des branches inductives. Quant au champ magnétique, on peut conclure qu'il est très bien localisé dans la région des branches inductives, et très peu dans le cœur semiconducteur. En première approximation, ces résultats suggèrent d'une part que la partie capacitive correspond à la région située entre les disques, et d'autre part que la partie inductive correspond aux connexions métalliques. Ils corroborent les hypothèses qui m'ont

permis de construire le modèle analytique LC présenté dans la section précédente (cf. Fig. 3.15 page 82). Toutefois, le fait qu'une petite portion du champ électrique soit située hors du cœur semiconducteur indique que ce modèle pourrait être amélioré en prenant en compte l'effet de la capacité supplémentaire située dans le petit élément de volume entre le disque et la branche inductive supérieure. Les longueurs d'onde

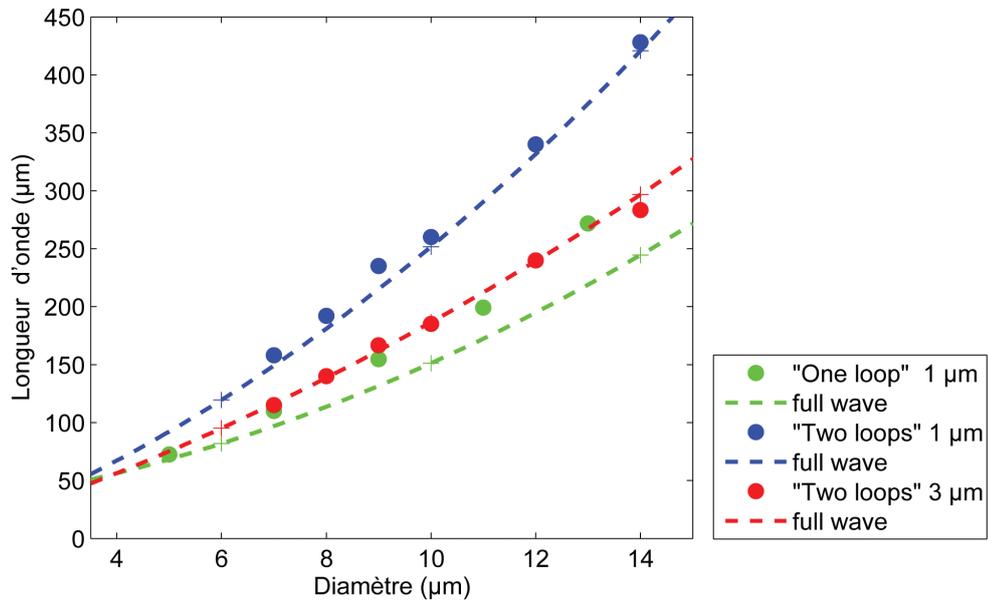


FIGURE 3.26 – Longueur d'onde obtenue par simulation "full wave" (COMSOL) pour les trois résonateurs ("One loop" 1 µm en vert, "Two loops" 1 µm en bleu, "Two loops" 3 µm en rouge) en fonction du diamètre des disques. Les marqueurs + correspondent aux résultats des simulations pour $d = 6, 10, 14$ µm. Les courbes pointillées correspondent à l'interpolation des résultats des simulations. Pour comparaison, les valeurs expérimentales sont représentés par des points de couleurs correspondantes.

de résonance sont reportées dans la figure 3.26 (marqueurs +, interpolation courbes pointillées).

Ces simulations sont en excellent accord avec les résultats expérimentaux pour les résonateurs du type "Two loops". Cependant, les résultats des simulations de la cavité "One loop" divergent légèrement par rapport aux valeurs expérimentales. Par exemple pour le diamètre $d = 13$ µm, la longueur d'onde théorique est sous-estimée par un facteur de 19% par cette méthode. Cet écart entre les valeurs théoriques et expérimentales dans le cas des résonateurs de type "One loop" est probablement lié au fait que la résonance fondamentale est très sensible aux dimensions de la connection métallique latérale, en particulier au paramètre ω_1 (cf. schéma 3.22). En effet, dans la géométrie "One loop", cet élément du dispositif influence directement la distribution spatiale du champ électrique : la condition aux bords électrique annule la compo-

sante E_z à l'interface entre le semiconducteur et le métal. Autrement dit, le mode est "spatialement repoussé" vers le centre du micro-disque (cf. Fig.3.12(b)). Ainsi, plus la valeur de ω_1 est importante, plus le volume modal est faible, et la fréquence de résonance augmente. En revanche, ce phénomène est plus marginal dans le cas des résonateurs de type "Two loops" car la position de cet élément est plus éloignée du cœur semiconducteur. De plus, étant donnée la géométrie du résonateur, il est difficile de connaître précisément l'épaisseur réelle ω_2 de la connection latérale. Lors de la fabrication des dispositifs, cette connection est obtenue par évaporation avec un angle d'incidence variant autour de $\phi = 30 \pm 15^\circ$ en fonction du temps. Cette méthode dépôt permet de limiter les effets d'ombre portée, qui induiraient une discontinuité du film métallique (par exemple au pied du micro-disque), interdisant alors l'oscillation de charges. La forme de la connection latérale est définie par un masque de résine de plus de $1 \mu\text{m}$ d'épaisseur. Lors du dépôt de cette couche mince métallique, l'orientation de l'échantillon par rapport au creuset est également déterminante. Or, il est facile d'introduire une erreur de plusieurs degrés entre l'échantillon et l'axe du plateau pivotant lorsqu'il est monté dans l'évaporateur, car la surface de l'échantillon est d'environ 1 cm^2 . Tout désalignement introduit des effets d'ombre dus à l'épaisseur de la résine qui sert à définir le motif et à favoriser le lift-off, autrement dit des variations d'épaisseur de la connection latérale.

Afin de tenter de quantifier ces effets, j'ai préparé trois géométries de type "One loop" $1 \mu\text{m}$ de diamètre $d = 14 \mu\text{m}$ avec différentes valeurs de ω_1 et ω_2 . La gamme de variation choisie pour ω_1 correspond à l'incertitude typique liée au procédé de microfabrication par lithographie optique : $\omega_1 = 2.5 \mu\text{m} \pm 0.5 \mu\text{m}$ (cf. micrographe SEM Fig.3.3(b)). Il est difficile d'évaluer la largeur réelle de cette connexion latérale à partir des images SEM car les bords apparents peuvent être en réalité très fins voire discontinus, augmentant localement la résistance ohmique dans cet élément de volume du film métallique. Autrement dit, la largeur efficace du ruban métallique est probablement différente de celle mesurée par SEM. Comme il est encore plus difficile d'évaluer l'incertitude sur la valeur expérimentale de ω_2 , je propose également d'étudier l'effet d'une variation homogène entre le cas idéal ($\omega_2 = 400 \text{ nm}$) et le cas limite ($\omega_2 = 50 \text{ nm}$). Les résultats de ces simulations sont reportés dans la table 3.3 pour $\omega_1 = 3.0, 2.5, 2.0 \mu\text{m}$ et $\omega_2 = 200 \text{ nm}$ d'une part, et pour $\omega_1 = 2.0 \mu\text{m}$ et $\omega_2 = 50, 400 \text{ nm}$ d'autre part. Ils indiquent que l'incertitude expérimentale sur ω_1 induit une variation de $\pm 6\%$ autour de la longueur d'onde de résonance, tandis que celle sur ω_2 induit une variation de $\pm 2.5\%$.

Cette analyse démontre que la fréquence de la résonance fondamentale des résonateurs hybrides est très sensible aux imperfections de la connection latérale métallique. Les dimensions des dispositifs fabriqués étant à la limite de résolution de la lithographie optique utilisée, ces défauts sont inévitables. Ainsi, dans un panneau de 9 mm^2 contenant environ 200 cavités en principe identiques, il existe en pratique une

"One loop" 1 μm		
ω_1 (μm)	ω_2 (nm)	λ (μm)
3.0	200	226.5
2.5	200	233.4
2.0	200	240.6
2.0	400	238.8
2.0	50	244.5

TABLE 3.3 – Influence des dimensions de la connection métallique latérale sur la résonance fondamentale dans le cas du résonateur "One loop" 1 μm de diamètre $d = 14 \mu\text{m}$ (simulations).

distribution de cavités qui diffèrent par les dimensions effectives $\omega_{1,2}$. Cette désuniformité affecte spécifiquement la résonance d'ordre fondamental, et est probablement responsable de l'élargissement du pic d'absorption observé expérimentalement (cf. par exemple Fig. 3.6 page 68(a), tracé rouge) qui n'est pas visible dans le spectre obtenu par simulation avec COMSOL (cf. Fig. 3.5 page 66). Cela suggère que le facteur de qualité Q de ces résonateurs peut être grandement amélioré, soit en développant une meilleure technique de fabrication, par exemple en remplaçant la cinquième étape de lithographie optique qui sert à définir la connection métallique latérale par une étape de lithographie électronique, soit en modifiant légèrement la géométrie du résonateur en éloignant spatialement la connection latérale par rapport au cœur du micro-disque. Ce raisonnement est bien sûr valable pour les trois types de résonateurs hybrides étudiés.

3.7 Perspectives

Les résonateurs hybrides conçus dans le cadre de cette thèse peuvent donner lieu à de nouvelles applications technologiques pour les lasers et les détecteurs grâce au fait que leur géométrie détermine la partie qui agit comme une antenne, offrant un éventail infini de possibilités. Cette fonctionnalité supplémentaire rend ainsi possible le développement de résonateurs véritablement *hybrides électroniques-photoniques* qui permettrait la réalisation pratique de dispositifs tels que des lasers à émission dirigée contrôlée électriquement, des détecteurs THz à courant d'obscurité très réduit, mais aussi des lasers dont la fréquence peut être modulée *via* un circuit électronique.

3.7.1 Amélioration du couplage entre l'onde incidente et le résonateur hybride

La difficulté de coupler un faisceau incident avec une structure dont les dimensions sont très petites devant la longueur d'onde de résonance est bien connue. Ce phénomène explique probablement en partie la différence entre le facteur de qualité du mode fondamental prévu par les simulations et celui observé expérimentalement, tandis que l'accord est meilleur pour les modes d'ordres supérieurs. Afin d'améliorer ce résultat, plusieurs astuces peuvent être envisagées pour focaliser la lumière THz (lentilles [91], antenne "bow-tie" [167] ou spirale logarithmique [56]...). .

3.7.2 Généralisation du principe du résonateur hybride

Les résonateurs "One loop" et "Two loops" utilisent une configuration d'antenne *boucle*. Ils résultent du couplage entre une micro-cavité "Patch", dont le mode fondamental est contraint par la limite de diffraction ($d \geq \lambda/2$) et une antenne *boucle* [162, 58, 76], qui opère dans un régime très sub-longueur d'onde ($l \ll \lambda$). La figure 3.27 représente le schéma de principe de ce concept. Il s'agit d'un cas particulier, qui

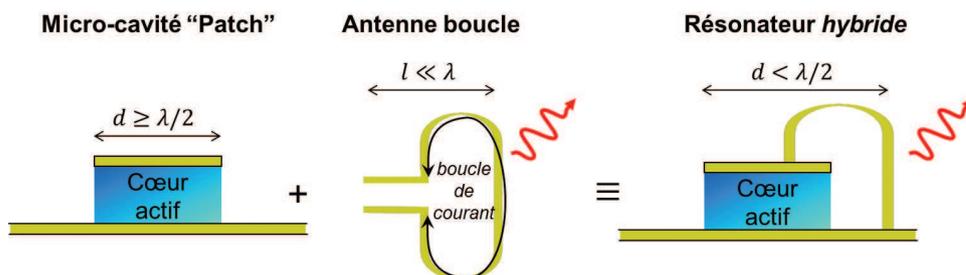


FIGURE 3.27 – Schéma de principe du couplage entre une micro-cavité "Patch" et une antenne *boucle*, résultant en une cavité hybride.

peut être généralisé à un couplage avec tout type d'antenne.

3.7.3 Vers le nanolaser THz

On peut également envisager d'insérer un cœur actif à l'intérieur de la cavité. Par exemple, la figure 3.18 page 85 permet d'extraire les facteurs de qualité Q pour les résonateurs "Two loops" avec $t = 3 \mu\text{m}$. Pour la résonance fondamentale *magnétique*, le facteur Q mesuré expérimentalement est d'environ $Q_{00} \approx 7$, tandis que pour la résonance *dipolaire électrique* on mesure $Q_{10} \approx 10$. Ces valeurs sont en très bon accord avec celles que l'on peut trouver dans la littérature concernant les cavités métalliques "patch" opérant dans la gamme des fréquences térahertz dont le cœur

semiconducteur est très fin [144, 50, 52, 153]. En effet, bien que les métaux soient de bons conducteurs aux fréquences térahertz, lorsque l'épaisseur du semiconducteur est très faible ($t = 1 - 3 \mu\text{m}$) par rapport à la longueur d'onde ($\lambda = 100 - 400 \mu\text{m}$), la pénétration du champ électrique dans le métal devient une portion non négligeable par rapport aux matériaux diélectriques (cf. Eq. 3.6 page 58). Dans ce cas le facteur de qualité de la résonance est dominé par les pertes ohmiques. Nous verrons dans la partie II que ce niveau de pertes n'est pas incompatible avec les critères de fonctionnement en régime laser [138].

Deuxième partie

Vers la miniaturisation des Lasers à Cascade Quantique TéraHertz

Notions de base pour les lasers à cascade quantique THz

L'objectif de ce chapitre est de rassembler les notions de base nécessaires à la compréhension du principe de fonctionnement des lasers à cascade quantique THz à travers l'étude d'une région active de type "phonon-résonant" dans un guide d'onde Fabry-Pérot.

Les lasers à cascade quantique, ou encore lasers unipolaires inter-sous-bande, diffèrent des diodes lasers sur plusieurs aspects fondamentaux. Le principe de fonctionnement des diodes lasers repose sur des transitions entre niveaux d'énergie sur lesquels des électrons sont injectés en bande de conduction tandis que des trous sont injectés en bande de valence à travers une jonction $p - n$, et qui se recombinent à travers la bande d'énergie interdite du matériau [163]. Celle-ci détermine la longueur d'onde d'émission. Les QCLs sont quant à eux des dispositifs unipolaires, c'est-à-dire que seuls les électrons en bande de conduction sont impliqués dans le processus radiatif. L'autre spécificité des QCLs est l'effet de cascade électronique, qui permet de recycler l'électron afin qu'il émette plusieurs photons. Ces deux spécificités sont indépendantes, et peuvent être exploitées séparément. Par exemple, la référence [49] rapporte la démonstration expérimentale d'un laser à cascade inter-bande, tandis que la référence [55] rapporte la démonstration expérimentale d'un laser inter-sous-bande qui fonctionne sans effet de cascade.

Le caractère unipolaire des QCLs est une conséquence du fait que la transition radiative a lieu dans un puits quantique entre deux états quantiques confinés en bande de conduction (sous-bandes). La transition ISB a ainsi lieu entre un état initial et un état final qui appartiennent tous deux à la bande de conduction, et dont on peut considérer, en négligeant la non-parabolicité, qu'ils possèdent la même courbure de bande dans l'espace réciproque (cf.Fig.4.1).

En négligeant la non-parabolicité de ces états, on aboutit à une densité d'états

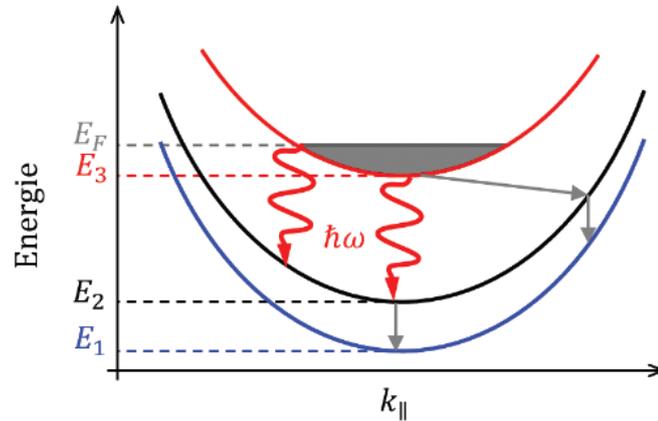


FIGURE 4.1 – Relations de dispersion des niveaux $|1\rangle$, $|2\rangle$ et $|3\rangle$ dans la région active d'un QCL en fonction du vecteur d'onde planaire $k_{||}$

jointe étroite, ce qui rend la transition radiative ISB très similaire à une transition atomique. Contrairement aux transitions inter-bande, où la distribution des électrons et des trous dans la bande de conduction et de valence suit la statistique de Fermi, l'élargissement du gain est dans ce cas seulement lié de façon indirecte à la température à travers les mécanismes de collision et les effets à N-corps. De plus, la longueur d'onde d'émission des QCLs ne dépend pas de la bande interdite des matériaux constitutifs de la région active. En revanche, elle peut être adaptée en ajustant simplement l'épaisseur des puits quantiques. La plus haute énergie accessible au photon est limitée par la discontinuité de bande de conduction (DBC) entre le matériau qui constitue le puits (par exemple GaAs) et celui qui constitue la barrière (par exemple $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$). Théoriquement, la largeur de raie de la transition inter-sous-bande, qui dépend, entre autres, des rugosités aux interfaces [16, 147], est la limite fondamentale pour la conception de QCLs émettant dans l'infra-rouge lointain.

La seconde caractéristique des QCLs, à savoir le mécanisme de cascade qui recycle les électrons d'une période à l'autre, permet à chaque électron de contribuer à l'émission d'un photon par période et donc de contribuer d'autant au gain laser. Ainsi, chaque électron injecté après que le seuil du laser ait été atteint peut en principe générer N_p photons laser, où N_p est le nombre de répétitions de la période. Cela conduit à une efficacité quantique sur-unitaire ($\eta_q \gg 1$) et à une forte puissance optique de sortie, ces deux quantités étant proportionnelles à N_p .

Après une brève description des guides d'onde THz utilisés au cours de cette thèse, je présenterai les éléments théoriques nécessaires à la conception de la région active des QCLs, tout en dégageant les paramètres pertinents au point de vue de la performance des lasers.

4.1 Guides d'onde Fabry-Pérot pour les QCLs THz

Un laser fonctionnel est composé d'un résonateur électromagnétique qui fournit une contre-réaction optique d'une part, et d'un matériau qui fournit du gain d'autre part.

Un tel résonateur permet de remplir le critère nécessaire à l'obtention du régime d'émission laser lorsque :

- la phase de l'onde est telle que :

$$(k + \phi(\nu)) L_x = p\pi, p = 1, 2, \dots \quad (4.1)$$

où $k = 2\pi/\lambda$, L_x est la longueur de la cavité dans la direction de propagation, et $\phi(\nu)$ est le déphasage induit par le matériau qui fournit le gain,

- le gain modal dans la région active, qui doit compenser exactement les pertes optiques du résonateur, est tel que :

$$G_{\text{modal}} = \Gamma_{\text{RA}} g_{th} = \alpha_{\text{total}} \quad (4.2)$$

où g_{th} est le gain au seuil laser, Γ_{RA} le facteur de recouvrement du mode guidé avec la région active, et α_{total} représente les pertes optiques totales.

Dans cette section, les principales caractéristiques des deux types de guide d'onde les plus couramment utilisés pour les lasers à cascade quantique THz, à savoir le guide simple plasmon (SP) et le guide métal-métal (MM), sont présentées afin d'apprécier leurs avantages et leurs inconvénients.

4.1.1 Facteur de confinement et pertes optiques

Le guide SP et le guide MM, schématisés par la figure 4.2, sont des résonateurs Fabry-Pérot. Le résonateur Fabry-Pérot est le guide d'onde le plus simple permettant d'étudier les caractéristiques optique et électronique d'un QCL. Les modes supportés par ces guides d'onde exploitent les propriétés des plasmons de surface. Ces modes sont localisés à l'interface entre deux matériaux dont les parties réelles de la constante diélectrique sont de signes opposés (cf. section 2.1.2). Les matériaux plasmoniques utilisés dans ces guides sont soit des métaux, soit des semiconducteurs fortement dopés (cf. section 1.5). La région active du QCL THz est placée au cœur du guide. C'est une hétérostructure quantique qui, d'après la règle de sélection de la polarisation qui sera décrite dans la section 4.4.1, agit comme une source interne de rayonnement électromagnétique polarisé TM. C'est pour cette raison que nous nous traiterons dans cette partie seulement les modes du guide en polarisation TM.

Les premières démonstrations de l'électroluminescence [146] puis du régime laser [80] dans une structure à cascade quantique THz ont été réalisées en utilisant un guide

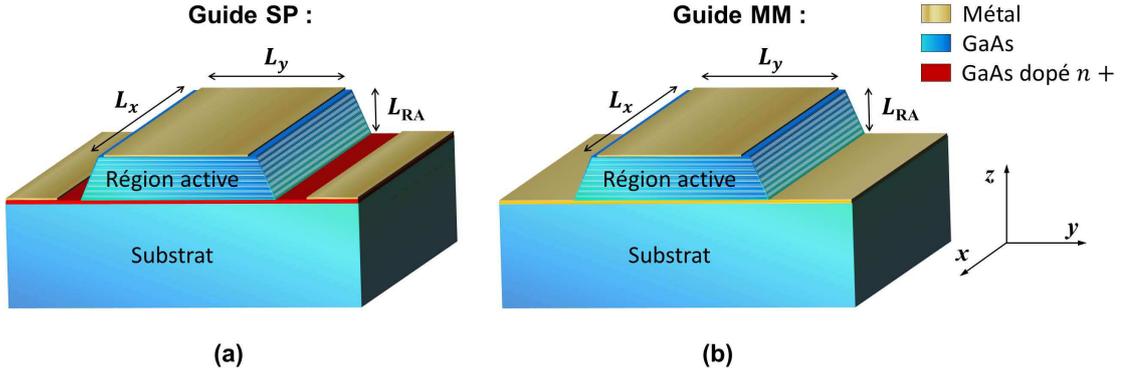


FIGURE 4.2 – Géométrie du guide simple plasmon (SP) (a) et du guide métal-métal (MM) (b), de longueur L_x , de largeur w et d'épaisseur L_{RA} . La région active (RA) du guide est composée d'une hétérostructure épitaxiée d'épaisseur L_{RA} qui fournit du gain dans la gamme [1 – 5] THz.

en configuration SP. Dans ce guide, la région active est située entre une couche mince métallique déposée par évaporation et une fine couche de GaAs fortement dopée ($n+$) obtenue par MBE sur un substrat semi-isolant (SI) de GaAs (cf. Fig.4.2(a)).

Le guide MM est une configuration alternative dans lequel la couche de GaAs dopé ($n+$) est remplacée par une seconde couche mince métallique (cf. Fig.4.2(b)). Bien que la première démonstration de cette configuration ait été réalisée dans le moyen infra-rouge [159], son utilisation est beaucoup plus avantageuse dans la gamme THz, où les pertes dans le métal sont beaucoup plus faibles que dans le moyen infra-rouge.

Dans un QCL, seul le volume correspondant à la région active contribue à l'amplification laser. Le facteur de confinement Γ_{RA} représente la fraction du mode guidé recouvrant la région active. En faisant l'approximation que la valeur de l'indice effectif du mode est proche de l'indice de réfraction de la région active, le facteur de confinement peut s'écrire [20] :

$$\Gamma_{RA} \approx \frac{\int_{L_{RA}} |E_z|^2 dz}{\int |E_{total}|^2 dz} \quad (4.3)$$

où L_{RA} est l'épaisseur de la région active.

Quel que soit le guide considéré, le régime laser est atteint lorsque le gain du matériau compense exactement les pertes du mode guidé (cf. Eq.4.2). Les pertes optiques α_{total} peuvent être décomposées en la somme de deux termes, les pertes de propagation du mode dans le guide α_g d'une part, et les pertes radiatives à travers les facettes miroirs α_m d'autre part :

$$\alpha_{total} = \alpha_g + \alpha_m. \quad (4.4)$$

Pour un mode résonant à la longueur d'onde λ_0 , les pertes de propagation du mode dans le guide s'écrivent :

$$\alpha_g = \frac{4\pi \operatorname{Im}(n_{\text{eff}})}{\lambda_0} \quad (4.5)$$

où n_{eff} est l'indice effectif complexe du mode.

Afin de calculer l'indice effectif n_{eff} , le problème peut être simplifié à une dimension. Les dimensions caractéristiques d'un ridge Fabry-Pérot THz SP ou MM sont $L_x = 1 - 3 \text{ mm}$ dans la direction de propagation x , $L_y = 50 - 200 \text{ }\mu\text{m}$ dans la direction y et $L_{\text{RA}} = 10 - 12 \text{ }\mu\text{m}$ dans la direction de croissance de l'hétérostructure quantique z . Elles sont à comparer avec la longueur d'onde d'opération $\lambda_0 \sim 100 \text{ }\mu\text{m}$ dans l'espace libre ($\lambda_{\text{eff}} \sim 30 \text{ }\mu\text{m}$ dans le GaAs).

La valeur de l'indice effectif n_{eff} résulte du recouvrement du mode avec les différentes régions du guide d'indices n_i . Une méthode de calcul analytique de n_{eff} est présentée dans la section 1.3.1. Les résultats présentés dans ce chapitre sont obtenus par une méthode de calcul numérique par éléments finis (FEM). Pour cette méthode, l'indice effectif d'un mode résonant à la longueur d'onde λ_0 est défini par :

$$n_{\text{eff}}(\lambda_0) = \sum_i \Gamma_i n_i(\lambda_0) \quad (4.6)$$

où Γ_i est le facteur de confinement dans chaque région. La constante de propagation du mode β permet de retrouver la valeur de n_{eff} :

$$n_{\text{eff}}(\lambda_0) = \frac{\beta}{2\pi} \lambda_0 \quad (4.7)$$

Cette approche permet d'obtenir une bonne estimation de la constante de propagation β , des pertes du guide α_g , et du facteur de confinement dans la région active Γ_{RA} associés à chaque mode de résonance λ_0 à partir des valeurs des indices de réfraction $n_i(\lambda_0)$, ainsi que des épaisseurs des différentes couches de matériaux qui composent le guide.

Les pertes miroir d'un guide Fabry-Pérot par les facettes avant et arrière sont déterminées par leurs coefficients de réflectivité respectifs R_1 et R_2 , ainsi que par la distance L_x entre les deux facettes :

$$\alpha_m = -\frac{1}{2L_x} \ln(R_1 R_2) \quad (4.8)$$

Afin d'illustrer les principales différences entre un guide SP et un guide MM, il est utile d'estimer les valeurs numériques que peuvent prendre les paramètres Γ_{RA} , α_g et α_m dans chacune des deux configurations.

4.1.2 Comparaison entre le guide SP et le guide MM

La figure 4.3 illustre la configuration utilisée pour la simulation FEM unidimensionnelle à travers une section d'un guide SP (a) et MM (b). La table 4.1 résume les indices de réfraction utilisés pour le calcul par FEM 1D des modes dans les guides SP et MM.

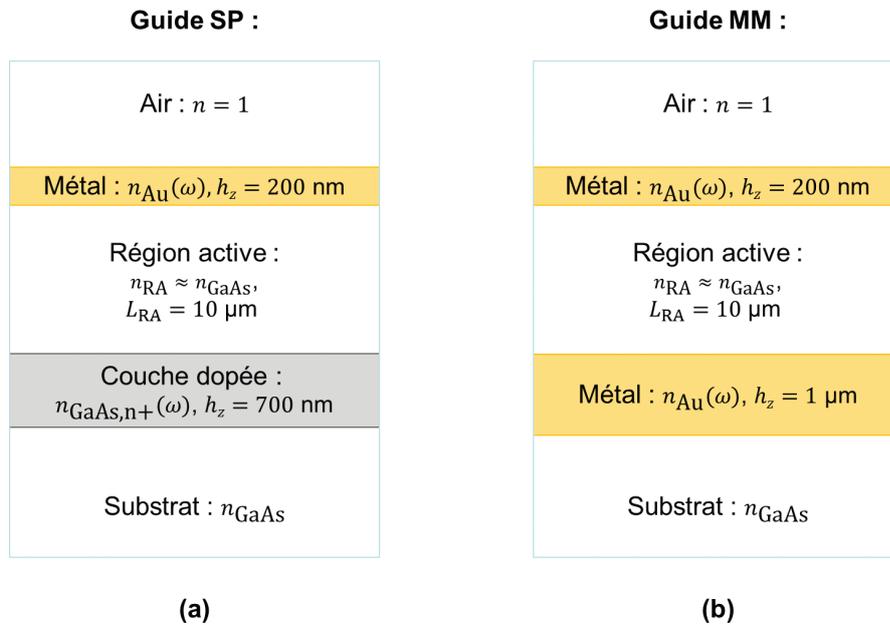


FIGURE 4.3 – Configuration des différentes couches de matériaux qui composent le guide simple-plasmon (SP) (a) et métal-métal (MM) (b). Vue en coupe dans le plan (y, z).

L'indice de réfraction du métal est issu de la référence [106], celui de la couche de GaAs dopé à $n = 2 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$ est calculé en utilisant le modèle de Drude (cf. Eq. 1.95 page 26), celui du substrat est approximé à l'indice de réfraction du GaAs non dopé ($n_{GaAs} \approx 3.6$ à $\lambda_0 = 100$ μ m), et celui de la région active correspond à l'indice de réfraction du GaAs massif dopé à $n = 5 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$.

Le profil caractéristique du mode TM_0 à $\lambda_0 = 100$ μ m dans chacune des deux configurations du guide est reporté dans la figure 4.4.

Dans le guide SP, le mode est confiné dans la région active à l'interface avec la couche métallique supérieure d'une part et la couche dopée inférieure d'autre part (cf. Fig.4.4(a)). Dans cette configuration, le profil du mode s'étend à l'extérieur de la région active sur une distance d'environ 80 μ m à l'intérieur du substrat :

- le confinement selon la direction z n'est pas sub-longueur d'onde et le facteur de confinement dans la région active vaut $\Gamma_{RA} \approx 0.3$,

Simulation FEM 1D		
	SP	MM
Matériau (<i>i</i>)	Indice de réfraction (n_i)	
Air	1	
Couche supérieure	$239 - j 404$	
Région active	$3.6 - j 3 \cdot 10^{-3}$	
Couche inférieure	$3.82 - j 14.5$	$239 - j 404$
Substrat	3.6	

TABLE 4.1 – Indices de réfraction utilisés pour la simulation FEM 1D des guides SP et MM.

- le coefficient de réflectivité est proche de la valeur habituelle à l'interface semi-conducteur/air, c'est-à-dire $R_{SP} \approx 0.3$ ($L_z \geq \lambda_{\text{eff}}$, cf. section 2.1.4).

Le mode du guide MM est quant à lui très bien confiné dans la région active par les couches métalliques supérieure et inférieure (cf. Fig.4.4(b)) :

- le confinement selon la direction z est sub-longueur d'onde et le facteur de confinement dans la région active vaut $\Gamma_{RA} \approx 1$,
- cela induit un fort désaccord entre le profil du mode se propageant dans le guide et celui d'un mode pouvant se propager dans l'espace libre, ce qui se traduit par un plus grand coefficient de réflectivité de la facette à l'interface semiconducteur/air, c'est-à-dire $R_{MM} \approx 0.7$ ($L_z \ll \lambda_{\text{eff}}$, cf. section 2.1.4) et Fig. 2.3 page 40).

Les valeurs des pertes dans le guide α_g correspondant au mode TM_0 , ainsi que le facteur de confinement Γ_{RA} sont reportés dans la table 4.2.

Pertes du guide		
	SP	MM
α_g (cm^{-1})	3.9	12.3
Γ_{RA}	0.31	0.98

TABLE 4.2 – Résultats du calcul par FEM 1D du mode TM_0 pour $\lambda_0 = 100 \mu\text{m}$ ($\nu_0 = 3$ THz) dans les guides SP et MM.

On pourra remarquer que, malgré la différence de nature entre le GaAs massif et l'hétérostructure constituant la région active, ces simulations ont été réalisées dans l'approximation $n_{RA} \approx n_{\text{GaAs}}$. En réalité, la région active est un système de puits quantiques présentant des absorptions ISB dont il est possible de tenir compte (cf.

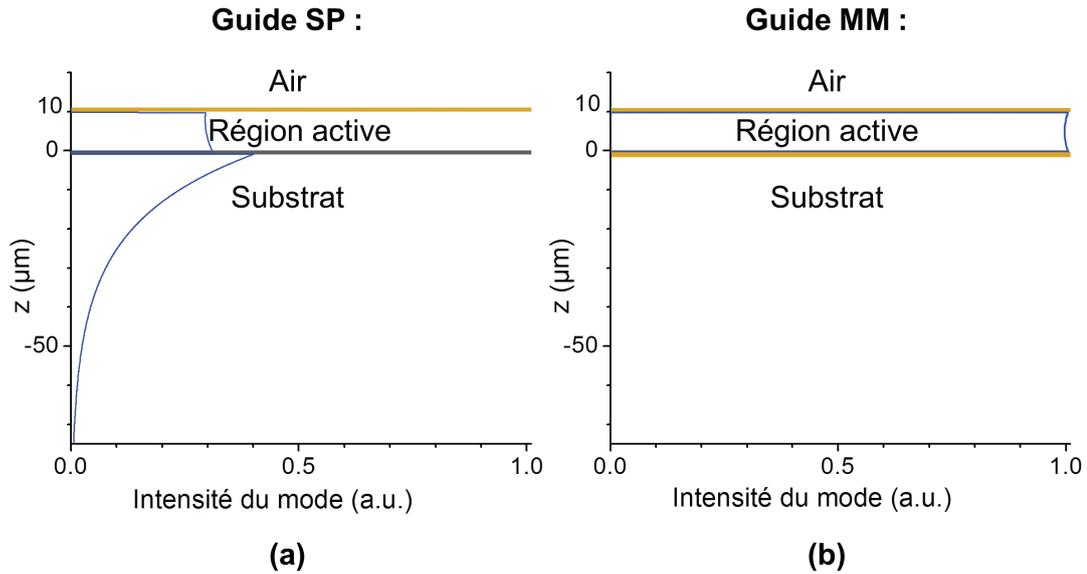


FIGURE 4.4 – Amplitude de la composante principale du champ électrique (E_z) pour le mode TM_0 selon la direction de confinement (z) : comparaison entre un guide SP (a) et un guide MM (b) d'épaisseur $L_{\text{RA}} = 10 \mu\text{m}$, pour $\lambda = 100 \mu\text{m}$. En jaune : couche mince métallique. En gris : couche mince de GaAs dopé n+.

Eq.1.102 et 1.103). Ceci est nécessaire en particulier dans le cas où le mécanisme d'injection implique une mini-bande. Les régions actives étudiées au cours de cette thèse ne font pas appel à ce type de mécanisme d'injection (voir section 5.1), c'est pourquoi ces phénomènes d'absorption peuvent être négligés dans le calcul de la fonction diélectrique de la région active, et dans ce cas l'approximation $n_{\text{RA}} \approx n_{\text{GaAs}}$ est une bonne approximation.

Les pertes par les facettes du guide, α_m , sont calculées pour différentes longueurs $L_x = 1.0, 1.5$ et 2.0 mm dans chacune des deux configurations. Les valeurs de α_m reportées dans la table 4.3 sont obtenues à partir de l'équation 4.8, en utilisant les coefficients de réflectivité $R_{\text{SP}} \approx 0.3$ ou $R_{\text{MM}} \approx 0.7$ selon le type de configuration.

Nous retiendrons de cette étude comparative que, pour des ridges Fabry-Pérot de longueur $L_x = 1 - 2$ mm et d'épaisseur $L_{\text{RA}} = 10 \mu\text{m}$:

- le guide MM présente des pertes optiques α_{total} plus élevées que le guide SP,
- le facteur de confinement Γ_{RA} est proche de l'unité dans la configuration MM,
- dans la configuration SP, les pertes optiques sont dominées par les pertes par les facettes α_m , et sont donc très sensibles à la longueur L_x ,
- dans la configuration MM, les pertes optiques sont dominées par les pertes de propagation du mode dans le guide α_g , et sont en principe sensibles à l'épaisseur L_{RA} .

Pertes miroir						
	SP			MM		
L_x (mm)	2.0	1.5	1.0	2.0	1.5	1.0
α_m (cm ⁻¹)	5.7	7.6	11.4	1.8	2.3	3.3
α_{total} (cm ⁻¹)	9.6	11.5	15.3	14.1	14.6	15.6

TABLE 4.3 – Comparaison entre plusieurs guides SP et MM pour différentes longueurs L_x pour le mode TM_0 à $\lambda_0 = 100 \mu\text{m}$ ($\nu_0 = 3 \text{ THz}$).

Ce dernier point est très important, et sera approfondi dans le prochain chapitre.

4.1.3 Conclusion

La table 4.4 résume les caractéristiques d'un ridge Fabry-Pérot de longueur $L_x = 1 \text{ mm}$ et d'épaisseur $L_{\text{RA}} = 10 \mu\text{m}$, pour le mode TM_0 à $\lambda_0 = 100 \mu\text{m}$ ($\nu_0 = 3 \text{ THz}$).

Comparaison		
	SP	MM
α_{total} (cm ⁻¹)	15.3	15.6
$\alpha_g/\Gamma_{\text{RA}}$ (cm ⁻¹)	12.6	12.6
$\alpha_m/\Gamma_{\text{RA}}$ (cm ⁻¹)	36.8	3.4
C_α	0.37	0.11

TABLE 4.4 – Comparaison entre un guide SP et un guide MM avec $L_x = 1 \text{ mm}$, pour le mode TM_0 à $\lambda = 100 \mu\text{m}$ ($\nu = 3 \text{ THz}$). Le coefficient C_α est défini par la relation 4.10.

Les rapports $\alpha_g/\Gamma_{\text{RA}}$ et $\alpha_m/\Gamma_{\text{RA}}$ permettent de comparer les pertes de propagation et les pertes miroir entre les deux types de guide. Ainsi on peut se rendre compte que, bien que la valeur de α_g soit environ trois fois plus importante que celle du guide SP, la configuration MM permet d'obtenir la même valeur pour le rapport $\alpha_g/\Gamma_{\text{RA}}$ et de réduire d'un facteur 10 le rapport $\alpha_m/\Gamma_{\text{RA}}$. De ce fait, cette configuration est plus intéressante pour étudier les propriétés de la région active des QCLs.

La puissance de sortie collectée lors de la caractérisation expérimentale d'un ridge Fabry-Pérot correspond à l'émission par une seule facette. Le coefficient C_α reflète cette caractéristique des guides SP et MM. Pour un courant I qui traverse la région active du QCL, le rendement différentiel s'écrit :

$$dP_s/dI \propto N_p \hbar \omega \frac{\alpha_m}{\alpha_g + \alpha_m} \quad (4.9)$$

où P_s est la puissance émise hors de la cavité laser, et N_p le nombre de périodes de la région active. Pour un ridge laser qui possède deux facettes miroir identiques et non traitées, la puissance collectée correspond à celle émise par une seule facette :

$$\frac{dP_{s,m_1}}{dI} \propto N_p \hbar \omega \frac{\alpha_{m_1}}{\alpha_g + \alpha_{m_1} + \alpha_{m_2}} = N_p \hbar \omega C_\alpha, \quad (4.10)$$

avec dans notre cas $\alpha_{m_1} = \alpha_{m_2} = \alpha_m/2$. Dans le cas du guide SP, le facteur C_α est plus de 3 fois plus important que dans le guide MM, rendant cette configuration plus intéressante que la configuration MM pour des applications nécessitant une large puissance de sortie.

Il faut toutefois rappeler que cette étude compare des guides d'onde idéaux, et que ces résultats sont donc à modérer par l'existence sources de pertes supplémentaires dans les guides réels.

En réalité, bien que dans un guide SP, les pertes par absorption par les porteurs libres liées à l'extension spatiale du mode dans le substrat soient minimisées par le faible recouvrement avec la fine couche dopée, ce phénomène est la principale source de pertes dans le guide et est inhérent à la configuration SP. En effet, la profondeur de pénétration dans la couche dopée est du même ordre de grandeur que l'épaisseur de la couche dopée ($0.5 - 1 \mu\text{m}$ pour un dopage à $5 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$) [118]. De plus, dans un guide SP, la pénétration du mode dans le substrat (considéré sans perte dans ce calcul) peut engendrer des pertes supplémentaires dues à l'absorption par les impuretés dans le substrat (atomes donneurs ou accepteurs) et ce, même pour un substrat nominalemeent non dopé.

Dans un guide MM réel, il faut également tenir compte des couches de contact fines dopées $n+$ supplémentaires de chaque côté de la région active à l'interface avec le métal. Ces couches servent à améliorer l'injection du courant dans la région active. Au point de vue des pertes optiques, leur présence augmente légèrement la valeur de α_g à cause du recouvrement non nul du mode avec ces couches dopées. Un calcul par FEM 1D en incluant ces couches dopées à $N = 2 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$ d'épaisseur $h_z = 200 \text{nm}$ donne des résultats quasiment identiques à ceux présentés ci-dessus.

Il reste désormais à calculer le gain dans la région active du QCL THz. Les sections suivantes fournissent les éléments de théorie nécessaires à l'établissement :

- de l'expression de la densité de courant de seuil J_{th} (Eq.4.94),
- de la formule du gain fourni par une période de la région active g_p (Eq.4.109),
- et finalement du gain modal $G_{\text{modal}} = \Gamma g_{\text{th}} = \Gamma g_p J_{\text{th}}$ (cf. Eq.4.2 et 4.111)

en fonction des paramètres quantiques d'un QCL THz.

4.2 Propriétés électroniques et optiques des semiconducteurs III-V

Cette section a pour objectif de fournir une base théorique simple qui permet de décrire la structure électronique d'un cristal massif et d'une hétérostructure, et finalement le gain optique ainsi que le transport électronique à travers la région active d'un QCL THz phonon-résonant.

4.2.1 Structure cristalline

L'arrangement périodique des atomes dans un réseau cristallin est le siège de nombreux phénomènes quantiques intéressants. Les propriétés de la structure électronique des cristaux sont mises à profit dans les dispositifs à base de semiconducteurs. L'essor des dispositifs électroniques et optoélectroniques a été rendu possible par la maîtrise de la conception d'hétérostructures semiconductrices.

Les atomes d'un cristal semiconducteur du groupe IV sont liés entre eux par des liaisons covalentes, issues de l'hybridation sp^3 des orbitales s et p des électrons de valence. Les orbitales électroniques hybrides forment des liaisons covalentes tétraédriques, qui sont responsables de la symétrie de type diamant ou zinc blende du réseau cristallin (cf. schéma 4.5). Cet arrangement est préféré par les atomes car il correspond au cas le plus favorable du point de vue énergétique. Dans un cristal parfait de type diamant, chaque atome possède ainsi quatre liaisons équivalentes avec ses premiers voisins dans les directions tétraédriques.

Dans le cas des semiconducteurs III-V, l'espèce du groupe III ne met pas en jeu le même nombre d'électrons de valence que l'espèce du groupe V, et les liaisons covalentes formées ont une nature ionique. Autrement dit, les liaisons covalentes qui lient deux atomes voisins n'ont pas toutes la même énergie, ce qui explique notamment l'existence de plans de moindre contrainte. Cette charge ionique z est caractérisée par le coefficient Z tel que $z = Ze$, où e est la charge élémentaire de l'électron. Dans les semiconducteurs binaires GaAs, InAs et GaSb, ce facteur vaut environ $Z \approx 1/3$.

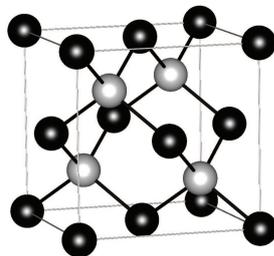


FIGURE 4.5 – Cellule élémentaire de la structure cristalline zinc blende.

Les structures cristallines peuvent être décrites mathématiquement comme un ensemble de points qui suivent une règle de translation vectorielle de vecteur \vec{T} tel que :

$$\vec{T} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3 \quad (4.11)$$

où $n_{i=1,2,3}$ sont des nombres entiers et $\vec{a}_{i=1,2,3}$ sont les vecteurs primitifs de ce réseau, appelé réseau de Bravais. La structure zinc blende peut être construite à partir de deux mailles élémentaires de type cubique face centrée (cfc) de paramètre de maille a_0 (longueur d'un côté de la maille cfc), l'une composée d'atomes du type III et l'autre d'atomes du type V, décalées l'une par rapport à l'autre d'un quart de la longueur de la grande diagonale du cube. Dans ce cas, le motif élémentaire est composé de deux atomes qui définissent deux bases, en $\vec{b}_1 = (000)$ et $\vec{b}_2 = \frac{a_0}{4}(111)$. Dans chacune de ces bases, le réseau de Bravais est décrit par les vecteurs primitifs [54] :

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 &= \frac{a_0}{2}(011) \\ \vec{a}_2 &= \frac{a_0}{2}(101) \\ \vec{a}_3 &= \frac{a_0}{2}(110) \end{aligned}$$

Une telle structure périodique peut également être décrite par son réseau réciproque [3, 77]. Cette représentation simplifie souvent l'écriture des relations $E(\vec{k})$ de dispersion ou de diffraction des ondes électromagnétiques à travers le cristal. Le réseau réciproque est formé de tous les vecteurs propres de l'équation :

$$e^{j\vec{k} \cdot (\vec{r} + \vec{T})} = e^{j\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (4.12)$$

Ainsi, toutes les ondes planes de vecteur d'onde $e^{j\vec{k} \cdot \vec{r}}$ partagent la même périodicité que les vecteurs de translation du réseau dans l'espace réel. Le réseau réciproque correspond à la transformée de Fourier du réseau représenté dans l'espace réel, et l'on peut donc construire les vecteurs du réseau réciproque $\vec{v}_{i=1,2,3}$ à partir des vecteurs primitifs du réseau de Bravais $\vec{a}_{j=1,2,3}$:

$$\vec{v}_i = 2\pi \frac{\vec{a}_j \times \vec{a}_k}{(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2) \cdot \vec{a}_3} \quad (4.13)$$

L'analogie du vecteur \vec{T} du réseau de Bravais est le vecteur \vec{G} , qui est une combinaison linéaire des vecteurs du réseaux réciproque :

$$\vec{G} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \quad (4.14)$$

où h, k, l sont des nombres entiers, liés aux vecteurs primitifs du réseau de Bravais par des coefficients de proportionnalité $x_{1,2,3}$ tels que $(hkl) = \left(\frac{a_1}{x_1} \frac{a_2}{x_2} \frac{a_3}{x_3} \right)$. Les indices h, k, l et a_1, a_2, a_3 ainsi définis représentent les longueurs des vecteurs réduits du réseau réciproque et du réseau de Bravais respectivement. Ils sont mathématiquement identiques dans les deux réseaux et sont appelés indices de Miller.

4.2.2 Structure de bande électronique

Le réseau atomique du cristal forme un système quantique caractérisé par une structure de bande électronique. Les états électroniques sont gouvernés par l'équation de Schrödinger :

$$\mathcal{H}(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t) = j\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r}, t) \quad (4.15)$$

où $\Psi(\vec{r}, t)$ est la fonction d'onde de l'électron. L'opérateur Hamiltonien de ce système s'écrit sous sa forme générale :

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \sum_j \frac{\vec{p}_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq j'} \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_j - \vec{r}_{j'}|} - \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\vec{r}_i - \vec{r}_{i'}|} \quad (4.16)$$

Les deux premiers termes de la somme représentent l'énergie cinétique des électrons et des ions, dont le moment cinétique est $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Les trois termes restants représentent la contribution de l'interaction électrostatique ion-ion, ion-électron et électron-électron (e-e) respectivement.

Dans l'approximation de Born-Oppenheimer, les ions sont considérés statiques. Cette hypothèse est raisonnable car leur masse est de trois ordres de grandeur supérieure à celle des électrons. Ainsi, le temps de relaxation des électrons étant très grand devant celui des ions, le système peut être considéré comme étant dans son état fondamental à tout instant. Ces approximations permettent d'écrire l'opérateur Hamiltonien d'un système à un seul électron sous l'influence du potentiel effectif $V(\vec{r})$ et d'écrire l'équation de Schrödinger correspondante :

$$\mathcal{H}_{1e}\Psi_n(\vec{r}) = \left[\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) \right] \Psi_n(\vec{r}) = E_n \Psi_n(\vec{r}) \quad (4.17)$$

Le potentiel $V(\vec{r})$ a la même périodicité a_0 que le réseau cristallin.

Les propriétés des dispositifs électroniques qui nous intéressent reposent sur les électrons des couches externes du cortège atomique. Les électrons de cœur produisant un écrantage de la charge du noyau, ces électrons externes ont la particularité d'être faiblement liés aux atomes du cristal. Ainsi, par la suite on fera l'hypothèse d'électrons quasi-libres sous l'influence d'un potentiel périodique faible. D'après le théorème de Bloch, les solutions de l'équation de Schrödinger peuvent être écrites sous la forme [27] :

$$\begin{cases} \Psi(\vec{r}) & = u(\vec{r}) e^{j\vec{k}\cdot\vec{r}} \\ \Psi(\vec{r} + \vec{R}) & = e^{j\vec{k}\cdot\vec{R}} \Psi(\vec{r}) \end{cases} \quad (4.18)$$

où $u(\vec{r})$ est une fonction périodique de même périodicité que le potentiel $V(\vec{r})$. Il suffit de ne retenir que les solutions qui appartiennent à la première zone de Brillouin ($|k| < \pi/a$) pour décrire complètement le système. Dans l'espace réciproque, cette zone est centrée en $\Gamma \equiv (000)$, et est limitée par les points $X \equiv 2\pi/a(100)$ et $L \equiv \pi/a(111)$.

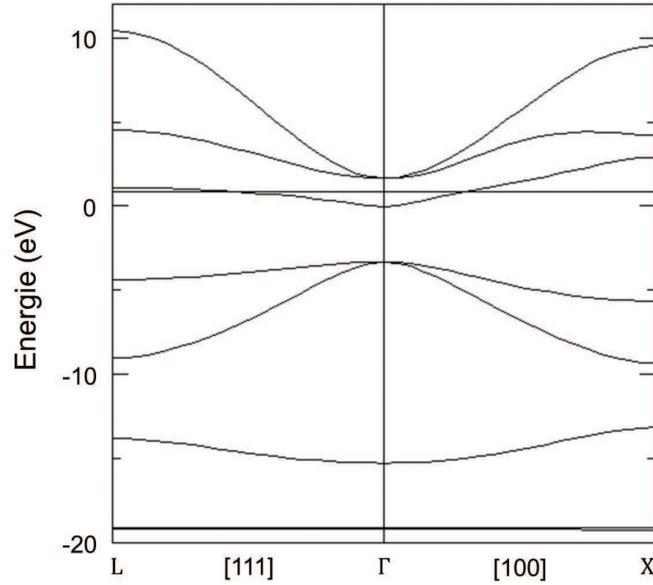


FIGURE 4.6 – Structure de bande du GaAs massif dans la première zone de Brillouin. [29]

Un électron libre est décrit par une onde plane avec une relation de dispersion parabolique :

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_0} \quad (4.19)$$

La relation de dispersion d'un électron sous l'influence du potentiel $V(\vec{r})$ de périodicité a_0 doit satisfaire aux conditions de continuité en bord de zone de Brillouin ($E(\vec{k} + \vec{G}) = E(\vec{k})$). Ainsi, au point Γ en bande de conduction, la relation $E(\vec{k})$ peut être écrite sous une forme quadratique de \vec{k} :

$$E(\vec{k}) = E(0) + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m^*} \quad (4.20)$$

Le coefficient m^* , appelé *coefficient de masse effective* de l'électron, est tel que [27] :

$$\frac{1}{m^*} \equiv \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\hbar^2 \partial \vec{k}^2} \quad (4.21)$$

On peut décrire le mouvement de cet électron dans le réseau cristallin par analogie avec celui d'un électron libre qui posséderait une masse effective $m_0 \cdot m^*$ par rapport

à la masse de l'électron libre m_0 . De la même façon, on peut déduire la vitesse de l'électron à partir de la relation de dispersion $E(\vec{k})$:

$$\vec{v}_k = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \quad (4.22)$$

Ces deux dernières relations sont très importantes car elles permettent de déterminer les propriétés de transport des porteurs de charge dans les solides par une approche semi-classique.

4.2.3 Densité d'états à l'équilibre et porteurs de charge extrinsèques

Dans un cristal massif de dimension L dans les trois directions de l'espace réel, les états propres de l'électron en bande de conduction en Γ sont des points séparés par $2\pi/L^3$ dans l'espace réciproque. La densité d'états d'énergie E proche du niveau de Fermi E_F est définie par la relation [77, 23] :

$$\rho_{3D}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_C)^{1/2} \quad (4.23)$$

où E_C est l'énergie du bas de la bande de conduction. Dans le cas d'un puits quantique 2D, la dépendance en $E^{1/2}$ est remplacée par une fonction porte. La distribution des porteurs intrinsèques dans les bandes de valence et de conduction d'un semiconducteur suit la loi de distribution de Fermi-Dirac en fonction de leur énergie E et de la température du cristal T :

$$f_{FD}(E, T) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_F}{k_B T}}} \quad (4.24)$$

où k_B est le facteur de Boltzmann. Ainsi, à la température absolue $T = 0$ K, la fonction de Dirac se réduit à une fonction porte abrupte, et la totalité des porteurs se trouve en bande de valence. A une température non nulle, le profil abrupt s'arrondit et une portion évanescence de la distribution de Fermi-Dirac pénètre dans la bande de conduction, générant un nombre égal d'électrons en bande de conduction et de trous en bande de valence. On appelle densité d'états joints $n(E, T)$ la densité effective de porteurs excités à une énergie donnée dans la bande de valence ou de conduction. Cette densité d'états est définie par la relation :

$$n(E, T) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{FD}(E, T) \rho(E) dE \quad (4.25)$$

Dans le cas d'un cristal parfait de type diamant (groupe IV de la classification périodique des éléments), les quatre électrons de valence des atomes sont engagés

dans les liaisons covalentes. Ainsi, à la température absolue $T = 0$ K, il n'y a aucun électron libre dans le réseau. C'est également le cas dans les cristaux composés semiconducteurs III-V (ou II-VI) car ils disposent en moyenne de quatre électrons de valence par atome [77]. Il est possible d'introduire une quantité finie de porteurs extrinsèques en remplaçant certains atomes du réseau par des atomes d'impureté. En fonction du groupe d'appartenance de ces impuretés, chaque atome est soit donneur, soit accepteur d'électron, introduisant une charge nette négative ou positive dans le cristal.

Dans les semiconducteurs III-V, on utilise souvent des atomes du groupe IV. Dans ce cas, le signe du dopage (n ou p) dépend du type de site qu'ils occupent (dopage n s'ils remplacent les éléments de type III, et p sinon). Notons que par exemple, dans un cristal de GaAs, les atomes de Si (groupe IV) occupent préférentiellement les sites du Ga de la surface (100), induisant un dopage n , mais il est possible de modifier cette tendance en contrôlant les paramètres de croissance du cristal par MBE, comme la température du substrat ou le rapport des flux As : Ga [112, 101, 145].

Ces porteurs de charge supplémentaires peuvent être traités comme des charges libres dans la structure de bande du cristal. S'ils sont spatialement séparés de leurs atomes dopants, par exemple sous l'effet d'un champ électrique ou par relaxation vers des états de plus faible énergie, les dopants sont ionisés et deviennent des charges fixes dans le cristal qui reste globalement neutre. Ces charges induisent une courbure du profil des bandes de valence et de conduction qui peut être prise en compte en introduisant l'équation de Poisson lors de la résolution de l'équation de Schrödinger (cf. section 4.3.2 page 116).

4.3 Structure électronique des hétérostructures

Dans cette section, la structure électronique des cristaux semiconducteurs est décrite dans une dimension (1D) en présence d'une ou plusieurs hétérojonctions. Dans ce cas, le moment cinétique d'un électron peut être décomposé sous la forme :

$$k = k_{\parallel} + k_{\perp} \quad (4.26)$$

où k_{\parallel} est la projection du vecteur \vec{k} sur le plan parallèle à l'interface de l'hétérojonction, et k_{\perp} est sa composante normale au plan de l'interface. Pour la suite des calculs de ce problème à une dimension, on fera l'hypothèse que la contribution planaire suit une relation de dispersion parabolique (approximation de l'électron libre) :

$$E = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \quad (4.27)$$

et l'on considèrera seulement la contribution de la composante normale du moment cinétique et de la masse effective de l'électron.

4.3.1 Approximation de la fonction enveloppe

Pour faciliter l'analyse des hétérostructures, il est préférable de considérer la fonction d'onde de l'électron comme le produit de la fonction de Bloch $u(r)$ avec la fonction $\Phi(r)$ (cf. Eq.4.18) :

$$\Psi(r) = u(r) \Phi(r) \quad (4.28)$$

En effet, l'épaisseur caractéristique des couches qui composent une hétérostructure est comprise entre 1 et 20 nm, ce qui est bien supérieur à la largeur des puits de potentiel atomiques (cf. Fig.4.7). La fonction de Bloch $u(r)$ oscille avec la périodicité du réseau cristallin, tandis que la fonction enveloppe $\Phi(r)$ décrit la contribution des différents matériaux qui composent l'hétérostructure [7, 27]. La fonction enveloppe,

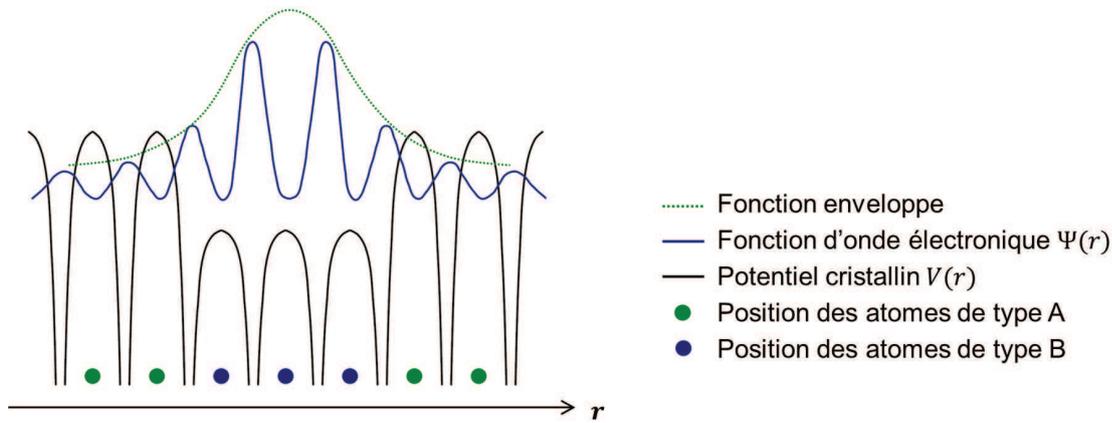


FIGURE 4.7 – Approximation de la fonction d'onde de l'électron dans un puits quantique par sa fonction enveloppe.

ainsi que sa première dérivée pondérée par la masse effective de l'électron, doivent être continues à toute interface entre deux matériaux A et B :

$$\begin{cases} \Phi_A(r_-) &= \Phi_B(r_+) \\ \frac{1}{m_A^*} \frac{\partial \Phi(r_-)}{\partial r} &= \frac{1}{m_B^*} \frac{\partial \Phi(r_+)}{\partial r} \end{cases} \quad (4.29)$$

L'approximation par la fonction enveloppe permet de modéliser les états électroniques à l'intérieur de structures à plusieurs puits quantiques de façon très satisfaisante. Une précision au niveau atomique serait superflue puisque les électrons ne sont que faiblement liés, et par conséquent, ne sont pas localisés près d'un atome cristallin particulier. Au contraire, ils sont délocalisés à travers les puits quantiques définis par les couches des différents matériaux. Dans le cas d'une hétérostructure unidimensionnelle dans la direction z , l'opérateur Hamiltonien devient :

$$\mathcal{H}_{\text{env}}(z) = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right] + V(z) \quad (4.30)$$

où $V(z)$ est le potentiel cristallin au point z de l'hétérostructure. L'équation de Schrödinger à résoudre pour la fonction enveloppe s'écrit :

$$\mathcal{H}_{\text{env}}(z) \Phi(z) = E \Phi(z) \quad (4.31)$$

4.3.2 Méthode numérique de résolution Schrödinger-Poisson

Les valeurs propres de l'équation de Schrödinger pour une hétérostructure à plusieurs puits quantiques ne peuvent être calculées analytiquement, en particulier sous l'action d'un champ électrique externe. La méthode d'analyse numérique utilisée au cours de cette thèse est la méthode des différences finies (FDM), par laquelle le potentiel et les fonctions d'onde électroniques sont discrétisées [71] dans un espace divisés en mailles. L'opérateur Hamiltonien ainsi discrétisé s'écrit :

$$\mathcal{H}_{\text{FDM}} = -\frac{\hbar^2}{r_i + r_{i-1}} \frac{1}{m_0} \left(\frac{\Phi_{i+1} - \Phi_i}{m_{i+1/2}^* r_i} - \frac{\Phi_i - \Phi_{i-1}}{m_{i-1/2}^* r_{i-1}} \right) \quad (4.32)$$

où r_{i-1} , r_i et r_{i+1} sont les coordonnées spatiales de trois mailles voisines, et m_i^* et Φ_i représentent respectivement le coefficient de masse effective et la fonction enveloppe en r_i . L'équation de Schrödinger devient alors, sous forme matricielle :

$$\sum_{j=1}^n \mathbf{A}_{ij} \Phi_j = E \Phi_i \quad (4.33)$$

En tenant compte du potentiel discrétisé V_i , les éléments de la matrice \mathbf{A} sont :

$$\mathbf{A}_{ij} = \begin{cases} -[\hbar^2/m_{i+1/2}^*] \cdot [1/r_{i+1}(r_i + r_{i-1})] & \text{si } j = i + 1, \\ -[\hbar^2/m_{i-1/2}^*] \cdot [1/r_{i+1}(r_i + r_{i-1})] & \text{si } j = i - 1, \\ -A_{ii+1} - A_{ii-1} + V_i & \text{si } j = i, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.34)$$

Pour le calcul des régions actives des QCLs présentées dans les chapitres suivants, cette méthode est utilisée dans une structure composée de deux à trois périodes entre deux barrières de potentiel très hautes, afin de reproduire les conditions de cascade au centre de la structure simulée .

Ces résultats peuvent être affinés en tenant compte de l'influence de la distribution de charges sur le profil du potentiel. Pour cela, l'équation de Poisson est d'abord résolue pour calculer la perturbation du potentiel $\phi(z)$ induite par la distribution de charges $\rho(z)$:

$$\nabla^2 \phi(z) = -\frac{\rho(z)}{\epsilon} = \frac{-e(N_D - n(z))}{\epsilon} \quad (4.35)$$

où la densité $\rho(z)$ provient de la densité électronique $n(z)$ et de la concentration d'atomes donneurs ionisés N_D . Les calculs peuvent être menés de façon auto-consistante [141]. Dans ce cas, la densité $n(z)$ dans l'équation 4.35 est remplacée par la densité totale $n_{\text{tot}}(z)$ qui tient compte de la contribution de chaque état propre d'indice k [141] :

$$n_{\text{tot}}(z) = \sum_{k=1}^m \Phi_k^*(z) \Phi_k(z) n_k \quad (4.36)$$

où n_k est le coefficient d'occupation de l'état propre d'indice k . L'équation de Schrödinger est ensuite résolue une seconde fois en remplaçant le potentiel $V(z)$ par sa nouvelle forme $V_{\text{corr}}(z)$ [141] :

$$V_{\text{corr}}(z) = V(z) - e\phi(z) \quad (4.37)$$

Les nouveaux états propres de ce système modifient à leur tour la distribution de charges à travers l'hétérostructure, et l'équation de Schrödinger est à nouveau résolue avec un nouveau potentiel. Cette opération est ainsi répétée jusqu'à ce que les solutions pour la distribution de charges et pour les états propres du système convergent.

4.4 Transitions inter-sous-bandes

Le principe de fonctionnement des composants optoélectroniques ISB repose sur des transitions électroniques entre les états propres de l'hétérostructure. Les mécanismes de transition impliqués dans le fonctionnement d'un QCL sont radiatifs, mais certains processus non-radiatifs sont également exploités pour assurer la déplétion de certains états de façon rapide et efficace. Pour connaître le gain dans la région active d'un QCL, il faut déterminer les probabilités d'une transition ISB induite par la présence d'une onde électromagnétique incidente [109].

4.4.1 Transitions radiatives

Considérons une onde plane électromagnétique polarisée linéairement. Le champ électrique peut s'écrire :

$$\vec{E} = E_0 \vec{\epsilon} \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (4.38)$$

avec la polarisation $\vec{\epsilon}$. Le potentiel vecteur \vec{A} associé à cette onde incidente est tel que $\vec{E} = -\partial \vec{A} / \partial t$, d'où :

$$\vec{A} = -\frac{E_0}{2\omega} \vec{\epsilon} \left(e^{j(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} - e^{-j(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \right) \quad (4.39)$$

L'action de cette onde incidente sur les états propres de l'électron dans l'hétérostructure peut être calculée grâce à l'Hamiltonien dépendant du temps, dans l'approximation dipolaire et le formalisme de la masse effective [7] :

$$\mathcal{H} = -\frac{e}{m^*} \vec{A} \cdot \vec{p} = V \left(e^{j(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} - e^{-j(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \right) \quad (4.40)$$

avec $V = \frac{eE_0}{2m^*\omega} \vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}$.

Sous l'action de cet Hamiltonien de perturbation, la probabilité par unité de temps pour un électron dans l'état initial $|i\rangle$ d'énergie E_i de subir une transition vers l'état final $|f\rangle$ d'énergie E_f est donnée par la règle d'or de Fermi :

$$W_{if}(\hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|V|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega) \quad (4.41)$$

ou encore :

$$W_{if}(\hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 E_0^2}{4m^{*2}\omega^2} |\langle f|\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}|i\rangle|^2 \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega) \quad (4.42)$$

Le terme $-\hbar\omega$ est associé au premier terme de l'équation 4.39 et correspond à l'absorption d'un photon incident : $E_f = E_i + \hbar\omega$, tandis que le terme $+\hbar\omega$ est associé au second terme de l'équation 4.39 et correspond à l'émission stimulée d'un photon : $E_f = E_i - \hbar\omega$. Dans l'approximation de masse effective, les fonctions d'onde des états de l'hétérostructure sont de la forme :

$$\Psi_i(\vec{r}) = u_i f_i(\vec{r}) \quad (4.43)$$

$$f_i(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{j\vec{k}_{\parallel i} \cdot \vec{r}_{\parallel}} \Phi_i(z) \quad (4.44)$$

où u_i est la partie périodique de la fonction de Bloch, $k_{\parallel i}$ et \vec{r}_{\parallel} sont respectivement le vecteur d'onde bidimensionnel et le vecteur position dans le plan des couches d'aire S , et $\Phi_i(z)$ est la fonction enveloppe qui décrit l'extension de l'état de l'électron dans la direction perpendiculaire au plan des couches. Pour les transitions ISB, l'état final et l'état initial appartiennent à la même bande, donc $u_i = u_f$. Dans ce cas, l'élément de matrice de l'équation 4.42 se réduit à l'élément de matrice dipolaire des fonctions enveloppe :

$$\begin{aligned} \langle f|\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}|i\rangle &= \langle f_f|\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}|f_i\rangle \\ &= \langle \Phi_f|\Phi_i\rangle \frac{1}{S} \int dx dy e^{-j\vec{k}_{\parallel f} \cdot \vec{r}_{\parallel}} (\varepsilon_x p_x + \varepsilon_y p_y) e^{j\vec{k}_{\parallel i} \cdot \vec{r}_{\parallel}} \\ &\quad + \delta(\vec{k}_{\parallel f} - \vec{k}_{\parallel i}) \langle \Phi_f|p_z|\Phi_i\rangle \end{aligned} \quad (4.45)$$

Les fonctions enveloppe étant orthogonales entre elles, le terme $\langle \Phi_f|\Phi_i\rangle$ est nul si les indices i, f désignent deux sous-bandes différentes. Le taux de transition de l'état $|i\rangle$ vers l'état $|f\rangle$ s'écrit :

$$W_{if}(\hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 E_0^2}{4m^{*2}\omega^2} |\langle \Phi_f|p_z|\Phi_i\rangle|^2 \delta(\vec{k}_{\parallel f} - \vec{k}_{\parallel i}) \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega) \quad (4.46)$$

ou encore, en notation spatiales :

$$W_{if}(\hbar\omega) = \frac{2\pi e^2 E_0^2}{\hbar} \frac{1}{4} |\langle \Phi_f | z_{if} | \Phi_i \rangle|^2 \delta(\vec{k}_{\parallel f} - \vec{k}_{\parallel i}) \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega) \quad (4.47)$$

où z_{if} est l'élément de matrice dipolaire entre les états $|i\rangle$ et $|f\rangle$.

Les équations 4.46 et 4.47 définissent plusieurs règles concernant les transitions ISB :

- **Règle de sélection de polarisation ISB** : Seules les transitions optiques dont le champ électrique est orienté selon la direction de croissance z sont permises (polarisation TM). En effet, il ne reste que la composante ϵ_z de la polarisation dans les expressions du taux de transition. En conséquence, aucune transition ne peut être observée si la lumière se propage perpendiculairement à la surface de l'échantillon.
- **Vecteur d'onde** : Les transitions optiques sont verticales dans l'espace réciproque : $\vec{k}_{\parallel f} = \vec{k}_{\parallel i}$. Ainsi, dans l'approximation d'une dispersion parabolique, l'énergie de la transition $E_{if} = E_i - E_f$ et le taux de transition W_{if} ne dépendent pas des composantes planaires du vecteur d'onde.
- **Élément de matrice dipolaire** : L'élément de matrice dipolaire dépend seulement des fonctions enveloppes et peut être adapté en modélant la forme des fonctions d'onde dans les puits de l'hétérostructure.

En conclusion, W_{if} est l'expression générale du taux de transition d'un électron de la sous-bande i à la sous-bande f indépendamment de sa nature bidimensionnelle. En réalité, les sous-bandes ont une largeur finie dont on peut tenir compte en remplaçant la fonction delta qui garantit la conservation de l'énergie par une lorentzienne de largeur à mi-hauteur $\delta\nu$:

$$W_{if}(\hbar\omega) = \frac{e^2 E_0^2 z_{if}^2}{2\hbar} \frac{\delta\nu/2}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + (\delta\nu/2)^2} \quad (4.48)$$

Dans les QCLs, la quantité pertinente est le taux maximal d'émission stimulée à la résonance ($\hbar\omega = E_f - E_i$) :

$$W_{if}^{\max} = \frac{e^2 E_0^2 z_{if}^2}{\delta\nu\hbar} \quad (4.49)$$

L'équation 4.49 est la probabilité d'absorption ou d'émission stimulée d'un photon par unité de temps et par électron présent dans la sous-bande initiale, en présence

d'un champ électromagnétique de pulsation $\omega = (E_f - E_i)/\hbar$ et d'amplitude E_0 dans la direction perpendiculaire aux couches de l'hétérostructure.

$$\alpha_{\text{ISB}}(\omega) = \frac{e^2 z_{if}^2 \omega (n_i - n_f)}{\epsilon_0 n_{\text{eff}} L} \frac{(\delta\nu/2)}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + (\delta\nu/2)^2} \quad (4.50)$$

Le gain est défini par une absorption négative :

$$g_{\text{ISB}}(\omega) = -\alpha_{\text{ISB}}(\omega) = \frac{e^2 z_{if}^2 \omega (n_f - n_i)}{\epsilon_0 n_{\text{eff}} L} \frac{(\delta\nu/2)}{(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + (\delta\nu/2)^2} \quad (4.51)$$

où $(n_f - n_i)$ est la différence des densités électroniques surfaciques entre les états f et i , et L la longueur de la région active. Une quantité importante est le gain maximal à la résonance par unité de porteurs en inversion :

$$g_c = \frac{g_{\text{ISB}}^{\text{max}}}{(n_f - n_i)} = \frac{2e^2 z_{if}^2 \omega}{\epsilon_0 c n_{\text{eff}} \delta\nu L} = \frac{4\pi e^2 z_{if}^2 \nu}{\epsilon_0 c n_{\text{eff}} L \delta\nu} \quad (4.52)$$

4.4.2 Transitions non radiatives

Interaction électron-phonon

Parmi les mécanismes de diffusion non-radiatifs qui peuvent se produire entre deux états, la relaxation des électrons par émission de phonons est le plus important pour les QCLs. Les phonons sont des pseudo-particules qui quantifient les vibration du réseau cristallin. La cellule élémentaire des cristaux de type zinc blende étant composée de deux atomes (cf. section 4.2.1 page 109), le modèle le plus simple pour décrire la relation de dispersion des phonons dans ces cristaux est le modèle de la chaîne diatomique [77, 35]. Dans ce modèle, la relation de dispersion des phonons est déduite de la loi de Newton pour une chaîne composée d'une série de deux oscillateurs séparés par la distance a :

$$\begin{cases} m_1 \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} = C(v_n + v_{n-1} - 2u_n) \\ m_2 \frac{\partial^2 v_n}{\partial t^2} = C(u_n + u_{n-1} - 2v_n) \end{cases} \quad (4.53)$$

où u_n et v_n représentent les déplacements de chacun des deux atomes élémentaires de masses respectives m_1 et m_2 , et C représente le coefficient de la force de rappel ressentie par les atomes. Les solutions de ce système de deux équations linéaires à deux inconnues sont données par :

$$\omega_{\pm}^2 = C \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^2 - \frac{2}{m_1 m_2} (1 - \cos(qa))} \right) \quad (4.54)$$

Cette relation est paire et $2\pi/a$ périodique. Elle présente deux branches distinctes avec une bande interdite en fréquence. Dans la première branche (ω_-), les atomes vibrent en phase. Dans la seconde branche (ω_+), les atomes vibrent en opposition de phase. Ces vibrations peuvent être engendrées par le champ électrique d'une onde lumineuse incidente, en particulier dans le cas des semiconducteurs III-V, les liaisons covalentes formées ont une nature légèrement ionique (cf. section 4.2.1).

Pour l'étude des transitions ISB d'une hétérostructure III-V, on peut faire l'hypothèse que la branche des phonons optiques est non dispersive, et que la branche des phonons acoustiques est isotrope. Dans l'approximation de l'oscillateur harmonique, près de l'origine ($qa \approx 0$), les solutions générales sont :

$$\begin{cases} \omega_A^2 \approx \frac{Ca^2q^2}{2(m_1+m_2)} \\ \omega_O^2 \approx 2C\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) \end{cases} \quad (4.55)$$

La solution ω_A décrit la branche des phonons acoustiques, dont l'énergie $E_A = \hbar\omega_A$ varie linéairement avec le vecteur d'onde q et s'annule pour $q = 0$. La solution ω_O décrit la branche des phonons optiques, dont l'énergie est indépendante de q et prend une valeur finie pour $q = 0$, permettant de ce fait une interaction directe avec les photons. Chacune de ces deux branches est dégénérée en modes transverses et longitudinaux.

En utilisant le formalisme des références [132] et [165], l'Hamiltonien d'interaction électron-phonon (Hamiltonien de Fröhlich) s'écrit :

$$\mathcal{H}_{e-ph} = \sum_{\vec{q}} \left(\alpha(\vec{q}) \left(e^{j\vec{q}\vec{r}} b_{\vec{q}} + e^{-j\vec{q}\vec{r}} b_{\vec{q}}^\dagger \right) \right) \quad (4.56)$$

où $b_{\vec{q}}$ et $b_{\vec{q}}^\dagger$ représentent les opérateurs création et annihilation du phonon de mode \vec{q} , et $\alpha(\vec{q})$ quantifie l'interaction électron-phonon.

Il a été démontré théoriquement et expérimentalement [13, 47] que, pour deux sous-bandes séparées par une énergie E_{if} supérieure à celle du phonon longitudinal optique (LO), le mécanisme de diffusion dominant est la diffusion par phonon LO.

La force d'oscillateur de l'interaction de Fröhlich pour la diffusion par phonon LO s'écrit :

$$|\alpha(\vec{q})|^2 = 2\pi \hbar\omega_{LO} \frac{e^2q^2}{(q^2 + q_s^2)^2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \quad (4.57)$$

où q_s est l'inverse de la longueur d'écrantage 3D, ϵ_0 et ϵ_∞ sont les constantes diélectriques statique et à haute fréquence respectivement, et $\hbar\omega_{LO} = E_{LO}$ est l'énergie du phonon LO. En négligeant les effets d'écrantage par le gaz d'électrons, l'équation 4.57 devient :

$$|\alpha(\vec{q})|^2 \approx C_{LO}/q^2 \quad (q \neq 0) \quad (4.58)$$

en posant $C_{\text{LO}} = 2\pi \hbar \omega_{\text{LO}} e^2 \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right)$.

D'après la règle d'or de Fermi, le taux de diffusion d'un électron de l'état initial $|i, \vec{k}_i\rangle$ vers l'état final $|f, \vec{k}_f\rangle$ par émission ou absorption d'un phonon LO s'écrit :

$$W_{if}(\vec{k}_i, \vec{k}_f) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f, \vec{k}_f | \mathcal{H}_{e\text{-ph}} | i, \vec{k}_i \rangle|^2 \delta(E_f(\vec{k}_f) - E_i(\vec{k}_i) \pm \hbar\omega(\vec{q})) \quad (4.59)$$

Le temps de diffusion $\tau(\vec{k}_i)$ peut alors être calculé par intégration numérique de l'équation 4.59 sur tous les états finaux possibles :

$$\frac{1}{\tau(\vec{k}_i)} = \int \frac{d^2 \vec{k}_f}{(2\pi/L)^2} W_{if}(\vec{k}_i, \vec{k}_f) \quad (4.60)$$

où L est une longueur de normalisation de l'intégrale. En faisant l'approximation que les sous-bandes présentent une dispersion parabolique, et en appliquant la règle de conservation de l'énergie, on trouve que les états finaux appartiennent au cercle de rayon k_f :

$$k_f^2 = k_i^2 + \frac{2m^*(E_f(0) - E_i(0) \mp E_{\text{LO}})}{\hbar^2} \quad (4.61)$$

Le taux total de diffusion par émission ou absorption d'un phonon LO est donné par [132] :

$$W_{if}^{\text{abs. LO-ph}} = \frac{m^* e^2 \omega_{\text{LO}}}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) n_{\omega_{\text{LO}}} \int_0^{2\pi} d\theta B_{if}(q_{\text{abs},\parallel}) \quad (4.62)$$

$$W_{if}^{\text{em. LO-ph}} = \frac{m^* e^2 \omega_{\text{LO}}}{2\hbar^2} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) (n_{\omega_{\text{LO}}} + 1) \int_0^{2\pi} d\theta B_{if}(q_{\text{em},\parallel}) \quad (4.63)$$

où $n_{\omega_{\text{LO}}}$ est la distribution de Bose-Einstein pour les phonons LO :

$$n_{\omega_{\text{LO}}} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{\text{LO}}}{k_B T}} - 1} \quad (4.64)$$

et

$$B_{if} = \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' \phi_f^*(z) \phi_i(z) \phi_i^*(z') \phi_j(z') I(z, z', q_{\parallel}), \quad (4.65)$$

en négligeant les effets d'écrantage, $I(z, z', q_{\parallel}) \approx \frac{1}{q_{\parallel}} e^{-q_{\parallel}|z-z'|}$. L'expression exacte de $I(z, z', q_{\parallel})$ en tenant compte des effets d'écrantage est donnée dans l'article [132]. Les lois de conservation de l'énergie et du vecteur d'onde dans le plan des couches imposent :

$$q_{\parallel}^2 = |\vec{k}_i - \vec{k}_f|^2 = k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos\theta \quad (4.66)$$

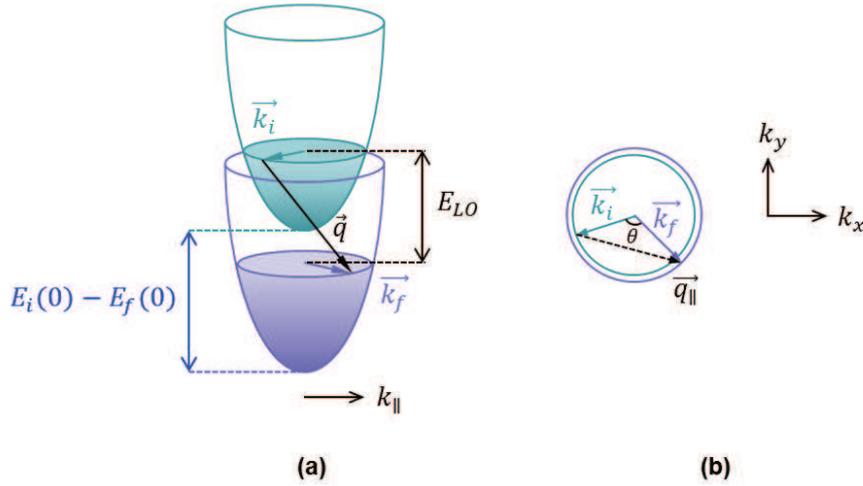


FIGURE 4.8 – (a) Vue schématique du mécanisme de diffusion par un phonon LO. (b) Diagramme dans le plan (k_x, k_y) de l'espace réciproque.

où θ représente l'angle entre les vecteurs d'onde \vec{k}_i et \vec{k}_f dans le plan des couches (cf. Fig.4.8).

Le taux d'émission de phonons LO par les électrons chauds en fonction de leur température T_e peut être calculé en utilisant la fonction de Fermi-Dirac pour décrire les distributions électroniques hors équilibre dans les deux sous-bandes, en leur attribuant différents quasi-niveaux de Fermi et différentes températures électroniques. Cependant, pour simplifier les calculs, je supposerai par la suite que les états finaux sont toujours vides. Le taux d'émission total en fonction de la température électronique des électrons de l'état initial s'écrit :

$$W_{if}^{\text{em. LO-ph}}(T_e) = \frac{\int dE_k W_{if}^{\text{em. LO-ph}}(E_k) f_{\text{FD},i}(E_k, T_e)}{\int dE_k f_{\text{FD},i}(E_k, T_e)} \quad (4.67)$$

avec $E_k = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*}$ représente l'énergie cinétique de l'électron dans la sous-bande initiale, et $f_{\text{FD},i}(E_k)$ la fonction de Fermi-Dirac correspondante.

Lorsque la différence d'énergie E_{if} est inférieure à E_{LO} ($E_{if} < E_{\text{LO}}$), l'émission de phonons LO est interdite à basse température. Dans ce cas, les mécanismes de relaxation sont dominés par une combinaison des autres mécanismes non-radiatifs, tels que les interactions électron-électron, la diffusion par les impuretés, ainsi que par l'émission de phonons LO par les électrons chauds. A haute température, la fonction de Fermi-Dirac peut être remplacée par la fonction de Boltzmann, et l'intégrale sur tous les états initiaux peut être réduite à l'expression :

$$W_{if}^{\text{em. LO-ph}}(T_e) \approx W_{if}^{\text{e-chaud}} e^{\frac{E_{fi} - E_{\text{LO}}}{k_B T_e}} \quad (4.68)$$

où $W_{if}^{e^- \text{chaud}}$ représente le taux de diffusion d'un électron thermiquement activé depuis le niveau de plus basse énergie qui remplit la condition $E_{if} = E_{LO}$. Le temps de vie caractéristique d'un électron dans un état excité tel que la diffusion par un phonon LO est permise varie entre 500 fs et quelques ps [41]. Ce phénomène est déterminant pour la compréhension de comportement en température des QCLs.

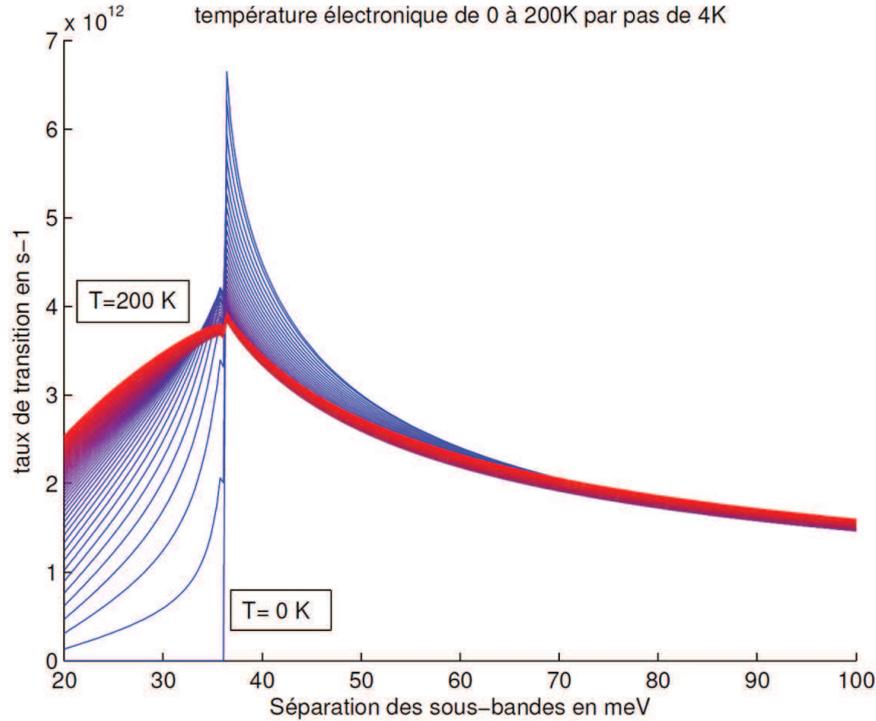


FIGURE 4.9 – Taux d'émission de phonon entre le deuxième et le premier niveau d'un puits quantique en GaAs avec des barrières infinies, en utilisant l'équation 4.67 (tiré de la thèse de Yannick Chassagneux [20]).

Autres mécanismes non-radiatifs inter- et intra-sous-bande

- **Interaction électron-phonon acoustique** : La force de couplage pour la diffusion de l'électron par un phonon acoustique s'écrit [132] :

$$|\alpha(\vec{q})|^2 = \frac{C_0}{V} \hbar\omega(\vec{q}) \quad (4.69)$$

avec $C_0 = D^2/2\rho c_s^2$, où D représente le potentiel de déformation pour les électrons, ρ la densité de population des phonons acoustiques et c_s la vitesse de propagation du son dans la direction longitudinale. Dans un QCL, les taux caractéristiques de diffusion sont de l'ordre de 100 ps. De plus, la densité de

population des phonons acoustiques est très faible à basse température. Les transitions inter-sous-bande *via* un phonon acoustique peuvent donc être négligées.

- **Collisions électron-électron :** L'importance de ce mécanisme d'interaction dans les sous-bandes des puits quantiques a été reconnu dès 1989 par Borenstain et Katz [12]. Lors d'une collision e-e, l'énergie d'un électron peut être modifiée, permettant une thermalisation de la distribution électronique du système. On s'attend à ce que ce mécanisme de relaxation devienne prépondérant lorsque l'énergie de séparation entre les deux niveaux E_{if} est inférieure à l'énergie du phonon LO, ainsi qu'à basse température lorsque l'émission d'un phonon par les électrons chauds est inhibée, car les collisions e-e peuvent fournir un excès d'énergie suffisant pour permettre la diffusion par un phonon LO [79]. Toutefois, ce mécanisme reste très problématique à sonder expérimentalement car il est difficile à discerner sans ambiguïté parmi les autres mécanismes de relaxation. Les taux de relaxation e-e inter-sous-bande mesurés expérimentalement varient entre 15 ps et 1 ns en fonction de l'intensité du laser de pompe [65, 66, 94, 62, 61]. Du point de vue théorique, il est tout aussi difficile d'estimer les taux de transitions e-e car il faut procéder à un calcul à N corps. On peut cependant fournir une interprétation semi-quantitative : ces transitions sont liées à l'interaction entre électrons créée par le potentiel de Coulomb, lui-même modifié par la présence des électrons [132, 133]. Les collisions e-e intra-sous-bandes représentent quant à elles la principale source de déphasage entre l'état initial et l'état final.
- **Autres mécanismes de diffusion :** D'autres mécanismes de diffusion sont possibles dans les structures à cascade, tels que la diffusion par les impuretés ionisées ou par les défauts d'interface. Les taux de transitions caractéristiques associés à ce type de transitions sont d'environ un ordre de grandeur plus faibles que dans le cas des collisions e-e et de l'émission de phonons LO [147]. Néanmoins, ces mécanismes de diffusion participent à l'élargissement de la transition optique $\delta\nu$ et limitent ainsi le gain maximal (cf. Eq.4.49). Afin de limiter l'effet des impuretés ionisées sur le gain laser, le dopage est généralement introduit loin de la région spatiale où la transition radiative a lieu.

En résumé, j'ai présenté dans cette section les principaux phénomènes quantiques concernant les électrons dans une hétérostructure semiconductrice. Dans un QCL, le transport électronique est assuré *via* certains de ces mécanismes non-radiatifs. Il faut donc en tenir compte lors de la conception de la région active. Les mécanismes de transport non-radiatifs efficaces tels que l'interaction électron-électron et l'interaction électron-phonon sont souvent mises à profit pour assurer l'inversion de population

électronique entre l'état haut et l'état bas de la transition radiative, respectivement dans les QCLs de type "bound-to-continuum" et "phonon-résonant"..

4.5 Transport électronique et gain optique dans la région active

Le principe de fonctionnement des lasers à cascade quantique repose sur le transport d'électrons à travers une hétérostructure dans la direction de croissance (z). La figure 4.10 illustre l'effet de cascade électronique à travers une hétérostructure composée de N_p répétitions du module élémentaire de longueur L_p . Les niveaux sont correctement alignés pour permettre la transition radiative lorsque le champ électrique externe $E_{rad.}$ est appliqué aux bornes de la structure, avec $E_{rad.}$ est tel que :

$$E_{rad.} [\text{kV/cm}] = |U_p [\text{eV}]| / L_p [\text{cm}] \quad (4.70)$$

où U_p est la différence d'énergie entre le niveau injecteur et le niveau extracteur d'un module à l'alignement radiatif :

$$U_p = -(E_{inj,u} + E_{ul} + E_{l,extr.} + E_{inj.,extr.}) \quad (4.71)$$

L'énergie $E_{inj,u}$ correspond à l'énergie d'anticroisement entre le niveau injecteur et le niveau haut de la transition radiative $|u\rangle$. De la même façon, l'énergie $E_{l,extr.}$ correspond à l'énergie d'anticroisement entre le niveau extracteur et le niveau bas de la transition radiative $|l\rangle$. L'énergie $E_{inj.,extr.}$ correspond à la différence d'énergie entre le niveau extracteur et le niveau injecteur du module suivant. Dans un QCL de type *bound-to-continuum* (BTC), cette énergie correspond à la largeur de la mini-bande. Dans un QCL de type phonon-résonant (PR), elle correspond à l'énergie d'un phonon LO.

Après émission d'un photon d'énergie E_{ul} , l'électron est extrait du niveau bas de la transition radiative $|u\rangle$ et injecté dans le module suivant. C'est le mécanisme de cascade quantique.

En pratique, la région active est insérée à l'intérieur d'un résonateur, par exemple un guide d'onde Fabry-Pérot en configuration MM, et une différence de potentiel est appliquée entre les deux couches métalliques, comme schématisé par la figure 4.11.

La conception de la région active d'un QCL doit permettre de remplir simultanément plusieurs conditions :

- une structure électriquement stable,
- l'inversion de population entre les niveaux supérieur $|u\rangle$ et inférieur $|l\rangle$ de la transition radiative,
- une grande valeur de gain inter-sous-bande.

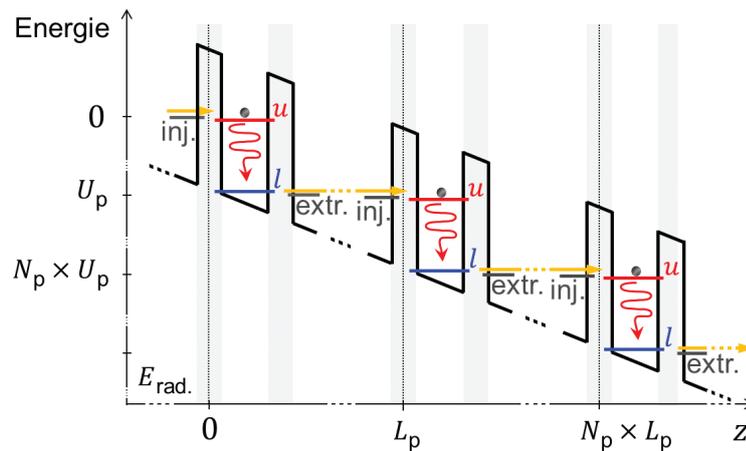


FIGURE 4.10 – Illustration du transport électronique radiatif à travers la région active d'un laser à cascade quantique.

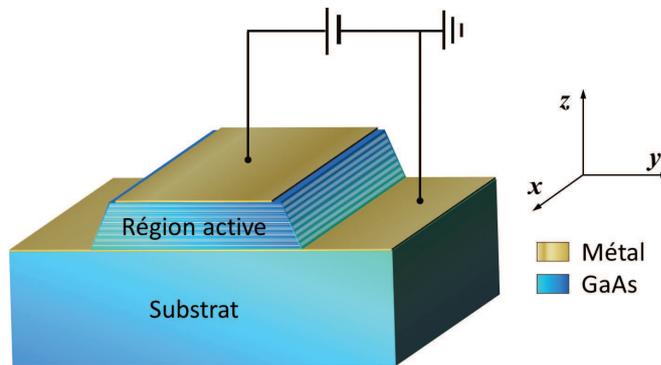


FIGURE 4.11 – Illustration du principe d'opération d'un laser à cascade quantique métal-métal.

Bien que les mécanismes réels de transport impliqués dans les QCLs soient complexes et difficiles à simuler, leurs effets peuvent nuire au gain ou détruire l'inversion de population. Il est donc très important de soigneusement les identifier et de tenter de les quantifier lors de la conception de la région active d'un QCL.

Une analyse complète du transport électronique dépasse le cadre de cette thèse. Je présente dans cette section une méthode simple basée sur le formalisme des matrices densités dans l'approximation des liaisons fortes. Le choix de cette approche se justifie a posteriori par des résultats expérimentaux qui tendent à confirmer que le transport vertical est contrôlé par l'effet tunnel résonant entre deux sous-bandes bidimensionnelles [131]. Cette méthode permet d'établir une expression de la densité de courant électrique au seuil laser qui traverse la structure ainsi que celle du gain dans le cas d'une structure simplifiée à un seul puits quantique par période. Les expressions

obtenues par ce modèle simple permettent de dégager les paramètres quantiques déterminants au point de vue des performances des QCLs THz qui devront être considérés lors de la conception de la région active.

4.5.1 Transport électronique tunnel résonant

Le modèle présenté dans cette section permet de décrire de manière très simple le phénomène de transport électronique tunnel résonant dans une structure à deux niveaux. Il n'est cependant pas suffisant pour décrire complètement le transport à travers la région active d'un laser à cascade quantique, en particulier car il ne tient pas compte de tous les processus non radiatifs qui peuvent contribuer ou nuire à l'inversion de population dans une structure réelle. Différentes approches basées sur l'approximation des équations de population ont montré un très bon accord avec les caractéristiques expérimentales [34, 127] en incluant une description des différents mécanismes de diffusion entre tous les niveaux quantiques de la zone active. Cependant, certains mécanismes, comme les interactions électron-électron ou la diffusion par les rugosités de surface, restent très difficiles à implémenter correctement dans ces calculs [36, 124]. Il existe d'autres approches semi-classiques, comme par exemple les simulations de type Monte-Carlo [100, 70]. La théorie des fonctions de Green hors équilibre [86, 126] permet quant à elle de tenir compte de tous les principaux mécanismes de diffusion et d'accéder aux caractéristiques courant-tension et au gain spectral des QCLs. Son avantage par rapport aux approches semi-classiques devient évident aux grandes longueurs d'onde (fréquences térahertz), où l'extension spatiale des fonctions d'onde (ou longueur de localisation) devient supérieure à la longueur de cohérence de phase d'un état quantique (ou libre parcours moyen) dans un semiconducteur.

Considérons un système composé de deux puits quantiques de profondeur finie, identiques, séparés par une barrière de potentiel (cf. Fig.4.12). L'interaction entre les deux niveaux énergétiques de ce système peut être décrite en utilisant l'approche des liaisons fortes. Les états propres de l'Hamiltonien non-perturbé \mathcal{H}_0 sont les fonctions d'onde $|G\rangle$ et $|D\rangle$ d'énergies E_G et E_D des puits quantiques de gauche et de droite respectivement (cf. Fig.4.12(a)). Lorsque l'épaisseur de la barrière est réduite, un couplage entre les états $|G\rangle$ et $|D\rangle$ apparaît, qui se traduit par l'apparition de termes non-diagonaux dans l'Hamiltonien. Les états propres de l'Hamiltonien perturbé forment un nouvel ensemble de fonctions d'ondes délocalisées $|S\rangle$ et $|A\rangle$, combinaisons linéaires respectivement symétrique et antisymétrique de $|G\rangle$ et $|D\rangle$ (cf. Fig.4.12(b)). L'énergie minimale de séparation entre les états symétrique et antisymétrique est appelé énergie d'anti-croisement : $\Delta_0 = |E_A - E_S|$. Sa valeur dépend de l'épaisseur de la barrière de séparation entre les deux puits quantiques et de la différence d'énergie $|E_G - E_D|$. La probabilité de trouver le système dans l'un de ses deux états propres oscille dans le temps avec la période de Rabi $T_{\text{Rabi}} = h/\Delta_0$.

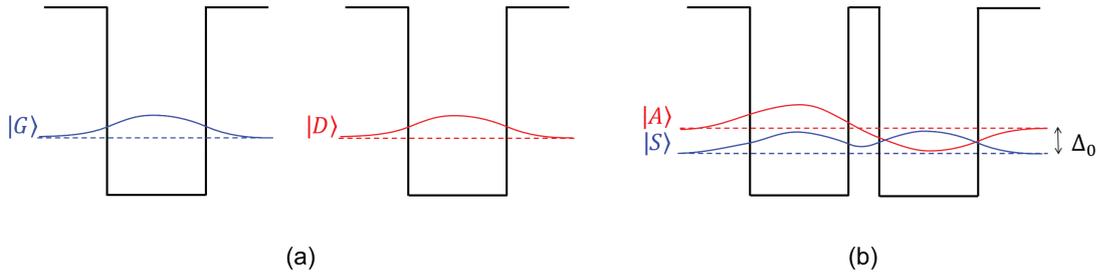


FIGURE 4.12 – Illustration de l'anti-croisement entre les états fondamentaux de deux puits quantiques identiques en fonction de l'épaisseur de la barrière de séparation [157].

La figure 4.13 illustre le cas d'une structure QCL simplifiée à deux puits quantiques séparés par une fine barrière de potentiel, sous un champ électrique qui permet l'alignement entre les états $|1\rangle$ et $|2\rangle$. Dans ce cas, la valeur de Δ_0 dépend également du champ électrique externe. Le transport par effet tunnel à travers la barrière peut être traité comme un mécanisme de diffusion entre les niveaux $|S\rangle$ et $|A\rangle$. La densité de courant s'écrit :

$$J = \frac{en_A}{\tau_A} + \frac{en_S}{\tau_S} \quad (4.72)$$

où n_A (resp. n_S) est la densité surfacique d'électrons sur le niveau $|A\rangle$ (resp. $|S\rangle$) et τ_A (resp. τ_S) est le temps de vie associé.

Soit P_ψ est la probabilité pour un électron d'être dans l'état $|\psi\rangle$. L'opérateur densité ρ s'écrit [22, 23] :

$$\rho = \sum P_\psi |\psi\rangle\langle\psi| \quad (4.73)$$

Dans un système simple composé de deux états de même énergie $|1\rangle$ et $|2\rangle$, entre lesquels on a induit une cohérence, on peut écrire :

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle + |2\rangle) \quad (4.74)$$

Dans ce cas, l'état $|\psi\rangle$ est pur ($P_\psi = 1$), et l'opérateur densité correspondant à ce mélange cohérent s'écrit :

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (4.75)$$

L'opérateur densité ρ est hermitien et satisfait la condition de conservation de probabilité $Tr(\rho) = 1$. De plus pour un état pur, $\rho^2 = \rho$, et $Tr(\rho^2) = 1$. Dans le cas d'un mélange statistique d'états tel que $|\psi_1\rangle = |1\rangle$ et $|\psi_2\rangle = |2\rangle$:

$$P_{\psi_1} = P_{\psi_2} = \frac{1}{2} \quad (4.76)$$

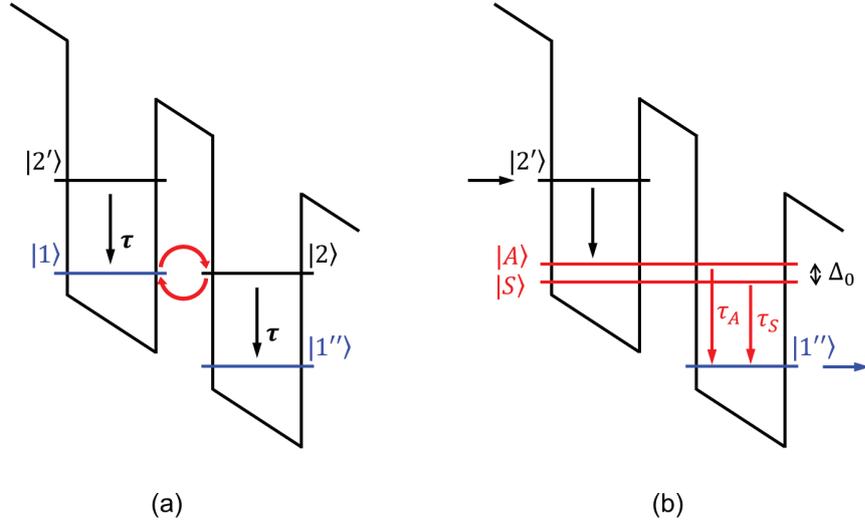


FIGURE 4.13 – Schéma d'un système à un seul puits quantique par période supportant deux états quantiques [157]. En régime statique, les niveaux $|2'\rangle$ et $|2\rangle$, ainsi que $|1\rangle$ et $|1''\rangle$, sont équivalents.

l'opérateur densité correspondant s'écrit :

$$\rho = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 \end{pmatrix} \quad (4.77)$$

avec $Tr(\rho^2) < 1$. On associe ensuite une matrice densité à chaque opérateur densité, que l'on peut écrire dans la base des états propres qui convient le mieux au problème que l'on souhaite traiter. Quelle que soit la base choisie,

- les éléments diagonaux représentent les probabilités de présence,
- les éléments non-diagonaux représentent le degré de cohérence entre les états de la base.

Si le système est dans un état pur, son degré de cohérence est maximal, et la matrice densité correspondante possède des éléments non-diagonaux, à moins que les états de la base choisie coïncident avec les fonctions propres de l'Hamiltonien. Ainsi, il est nécessaire de travailler dans une base différente de celle des états $|S\rangle$ et $|A\rangle$ afin de pouvoir dériver les termes de déphasage. Pour calculer la relation de phase entre $|1\rangle$ et $|2\rangle$, on peut préparer le système dans l'un de ces deux états. L'opérateur densité s'écrit alors :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{j}{\hbar} [\mathcal{H}, \rho] \quad (4.78)$$

Dans la base des états $|1\rangle$ et $|2\rangle$, l'Hamiltonien s'écrit :

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_1 & -\Delta_0/2 \\ -\Delta_0/2 & E_2 \end{pmatrix} \quad (4.79)$$

En ajoutant les termes d'amortissement de manière phénoménologique, l'évolution temporelle des éléments de la matrice densité $\rho_{i,j}$ suit les équations :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho_{11}}{\partial t} &= j \frac{\Delta_0(\rho_{21} - \rho_{21}^*)}{2\hbar} + \frac{\rho_{2'2'}}{\tau} \\ \frac{\partial \rho_{22}}{\partial t} &= -j \frac{\Delta_0(\rho_{21} - \rho_{21}^*)}{2\hbar} + \frac{\rho_{22}}{\tau} \\ \frac{\partial \rho_{21}}{\partial t} &= j \frac{\Delta_0(\rho_{11} - \rho_{22})}{2\hbar} - j \frac{E_{21}\rho_{21}}{\hbar} + \frac{\rho_{21}}{\tau_{\parallel}}\end{aligned}\quad (4.80)$$

où $E_{21} = E_2 - E_1$, τ est le temps de diffusion du niveau $|2\rangle$ vers le niveau $|1\rangle$, et τ_{\parallel} le temps de perte de cohérence, défini de façon à inclure les effets de relaxation des populations ainsi que les effets de déphasage pur [20] :

$$\frac{1}{\tau_{\parallel}} = \frac{1}{\tau} + \frac{1}{T_2^*} \quad (4.81)$$

où T_2^* est le temps de déphasage pur, et résulte des divers mécanismes de diffusions possibles tels que les rugosités d'interface, la diffusion par les impuretés ou encore les interaction e-e. Sa valeur dépend essentiellement de la qualité de la croissance de l'hétérostructure par MBE et peut être estimée à partir de la mesure de la largeur de raie en régime d'émission spontanée (dans le cas d'une transition verticale). Le système évolue donc vers un mélange d'états avec le temps.

4.5.2 Densité de courant à travers une structure à deux niveaux

En régime stationnaire, la densité de courant s'écrit :

$$J = \frac{en\rho_{22}}{\tau} \quad (4.82)$$

où n est la densité surfacique d'électrons par période. En utilisant le système d'équation 4.80 en régime stationnaire dans une structure périodique, c'est-à-dire dans un système tel que $\rho_{2'2'} = \rho_{22}$, l'équation 4.82 devient :

$$J = \frac{en}{2} \frac{(\Delta_0/\hbar)^2 \tau_{\parallel}}{1 + (E_{21}/\hbar)^2 \tau^2 + (\Delta_0/\hbar)^2 \tau_{\parallel} \tau} \quad (4.83)$$

et l'on retrouve l'expression du courant par effet tunnel résonant en fonction du désalignement E_{21} rapportée par Kazarinov et Suris [74] et par Sirtori *et al.* [131], décrite par une Lorentzienne de largeur à mi-hauteur (FWHM) :

$$\Delta E_{21,FWHM} = \frac{2\hbar}{\tau_{\parallel}} \left[1 + \left(\frac{\Delta_0}{\hbar} \right)^2 \tau_{\parallel} \tau \right]^{1/2} \quad (4.84)$$

La densité de courant maximale est obtenue à la résonance $E_{21} = 0$:

$$J_{\max} = \frac{en}{2} \frac{(\Delta_0/\hbar)^2 \tau_{\parallel}}{1 + (\Delta_0/\hbar)^2 \tau_{\parallel} \tau} \quad (4.85)$$

D'après l'équation 4.85, il existe deux régimes de fonctionnement :

- Le régime de couplage fort : $(\Delta_0/\hbar)^2 \tau_{\parallel} \tau \gg 1$.
Le transport est alors dominé par l'effet tunnel résonant. la probabilité d'occupation de l'état $|S\rangle$ est approximativement égale à celle de l'état $|A\rangle$, c'est-à-dire que $n_A \approx n_S$ et l'équation 4.72 devient $J \approx \frac{en}{2\tau}$, où $\tau^{-1} = \tau_A^{-1} + \tau_S^{-1}$.
- Le régime de couplage faible : $(\Delta_0/\hbar)^2 \tau_{\parallel} \tau \ll 1$.
Le paquet d'onde subit des pertes qui amortissent rapidement l'oscillation entre les états $|G\rangle$ et $|D\rangle$. Dans ce cas le transport est limité par les phénomènes de transport incohérents, comme le montre l'équation 4.72, qui devient dans cette approximation $J \approx \frac{en}{2} \left(\frac{\Delta_0}{\hbar}\right)^2 \tau_{\parallel}$.

Le régime de couplage fort est la situation désirée pour atteindre le régime laser. Dans ce cas le mécanisme d'injection des électrons dans le niveau haut de la transition laser est rapide [131]. L'équation 4.85 permet d'estimer la valeur de J_{\max} lors de la conception de la région active du QCL, pour des valeurs de n et τ données, ou bien d'extraire la valeur expérimentale de τ connaissant n à partir de la mesure de J_{\max} au point d'inflexion de la courbe $J - V$ obtenue expérimentalement. Les données expérimentales issues de la thèse par Williams [157] montrent que les densités de courant calculées par cette méthode sont légèrement surestimées par rapport aux valeurs mesurées.

Lorsque $J > J_{\max}$, la densité de charge n n'est plus suffisante pour maintenir la valeur de courant souhaitée. Les états $|1\rangle$ et $|2\rangle$ portent une charge négative en excès, générant un champ électrique local qui rétablit la neutralité des charges. Ce champ local peut induire une modification importante de l'alignement des niveaux et détériorer le mécanisme d'injection.

4.5.3 Équations de population pour les lasers à cascade quantique

La figure 4.14 schématise de façon très simplifiée le mécanisme de transport d'un électron à travers la région active d'un QCL. L'électron est injecté sur le niveau $|3\rangle$ du puits actif, d'où il peut relaxer vers le niveau $|2\rangle$ de plus basse énergie en émettant un photon. Enfin, l'électron est extrait du niveau $|2\rangle$ vers le niveau $|1\rangle$ du puits actif et de là, vers l'extracteur. En répétant cet enchaînement injecteur \rightarrow puits actif \rightarrow extracteur de façon périodique, l'électron peut être recyclé et produire autant de photons que de périodes de répétition. C'est ce que l'on appelle l'effet de cascade électronique.

Dans un laser à cascade quantique, la région active peut être simplifiée à un système à trois niveaux d'énergie. Le rôle de l'extracteur est de transporter les électrons depuis le niveau $|1\rangle$ vers le niveau $|3\rangle$ de la période suivante. La cascade quantique est assurée par le fait que l'injecteur représenté dans le schéma 4.14 ($|4\rangle$) est également l'extracteur de la période précédente.

Le gain ISB naît d'une inversion de population entre les niveaux $|3\rangle$ et $|2\rangle$. L'un des paramètres les plus importants pour quantifier l'effet laser généré par un QCL

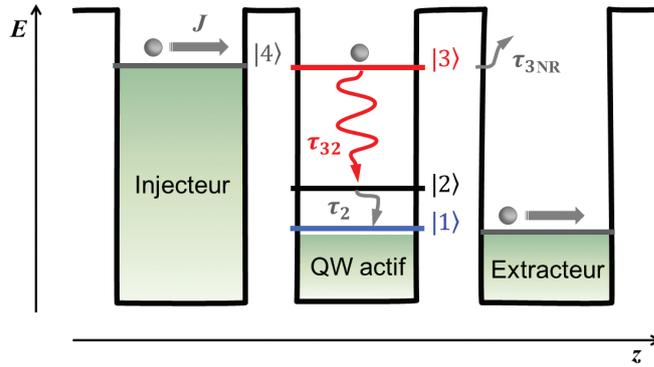


FIGURE 4.14 – Schéma simplifié de la région active d'un QCL.

est l'efficacité d'injection η_3 , définie comme le rapport entre le courant effectivement injecté sur le niveau $|3\rangle$ et le courant total :

$$\eta_3 = \frac{J_3}{J} \quad (4.86)$$

Les divergences du cas idéal $\eta_3 = 1$ sont dues à l'activation thermique des électrons de l'injecteur vers le continuum ou vers des états excités de plus hautes énergies, ou bien à une injection indirecte depuis l'injecteur vers les états $|2\rangle$ et $|1\rangle$. Le premier mécanisme peut être évité en éloignant la position en énergie de l'injecteur par rapport au continuum et aux états excités indésirables au moment de la conception de la région active, ainsi que par le choix d'un système de matériaux qui offre des barrières hautes en énergie. Le second mécanisme peut être limité par exemple par l'ajout d'un puits quantique étroit après la barrière d'injection de façon à augmenter la sélectivité à l'injection, en améliorant le couplage entre l'injecteur et le niveau $|3\rangle$ aux dépens de son couplage avec les niveaux $|2\rangle$ et $|1\rangle$.

Une fois injectés sur le niveau $|3\rangle$, les électrons peuvent transiter de façon radiative vers l'état $|2\rangle$ avec le temps τ_{32} , ainsi que de façon non radiative *via* un mécanisme quelconque avec le temps τ_{3NR} . Le temps de vie total sur le niveau $|3\rangle$ s'écrit :

$$\frac{1}{\tau_3} = \frac{1}{\tau_{32}} + \frac{1}{\tau_{3NR}} \quad (4.87)$$

Le niveau $|2\rangle$ est peuplé par transition directe (radiative) depuis le niveau $|3\rangle$, par injection non désirée depuis l'injecteur, ainsi que par rétro-diffusion depuis le niveau extracteur. L'efficacité d'injection indirecte (et indésirable) sur le niveau $|2\rangle$ est définie par :

$$\eta_2 = \frac{J_2}{J} \quad (4.88)$$

et la population thermique du niveau $|2\rangle$ s'écrit :

$$n_{2,\text{therm}} = n_{\text{extr}} e^{-\frac{\Delta}{k_B T}} \quad (4.89)$$

où Δ représente la différence d'énergie entre les quasi-niveaux de Fermi de l'état extracteur et de l'état $|2\rangle$, et n_{extr} la densité surfacique d'électrons dans l'extracteur.

Dans cette structure simplifiée, l'état $|3\rangle$ est le niveau haut de la transition laser, et l'état $|2\rangle$, le niveau bas. Pour un système composé par une seule période active, les équations de population s'écrivent [68] :

$$\begin{cases} \frac{dn_3}{dt} = \eta_3 \frac{J}{e} - \frac{n_3}{\tau_3} - \Gamma_p g_c \frac{c}{n_{\text{eff}}} \Phi_p \Delta n \\ \frac{dn_2}{dt} = \eta_2 \frac{J}{e} + \frac{n_3}{\tau_{32}} - \frac{n_2 - n_{2,\text{therm}}}{\tau_2} + \Gamma_p g_c \frac{c}{n_{\text{eff}}} \Phi_p \Delta n \end{cases} \quad (4.90)$$

où J est le courant qui traverse la structure à une période, n_2 et n_3 sont les densités surfaciques par période, $\Delta n = n_3 - n_2$ est la différence de population entre le niveau haut et le niveau bas de la transition laser, Γ_p est le recouvrement du mode avec la structure, g_c est la section efficace du gain dans la structure, n_{eff} est l'indice effectif (réel) du mode dans le milieu de la région active, Φ_p est le flux de photons par période et par unité de largeur de la structure. La section efficace du gain dans la structure g_c est définie par l'équation 4.52. Le gain modal est défini comme $G_{\text{modal}} = \Gamma g_c \Delta n$, où $\Gamma = N_p \Gamma_p$ est le recouvrement de mode optique sur toute la région active.

L'évolution de la densité photonique totale Φ à travers la totalité de la région active composée de N_p périodes s'écrit :

$$\frac{d\Phi}{dt} = (\Gamma g_c \Delta n - \alpha_{\text{tot}}) \frac{c}{n_{\text{eff}}} \Phi + \beta_{\text{sp}} \frac{n_3}{\tau_{\text{sp}}} \quad (4.91)$$

où α_{tot} représente les pertes optiques totales, β_{sp} est la fraction des photons émis spontanément dans le mode du laser avec le temps τ_{sp} , et dans l'hypothèse où chaque période contribue de la façon équivalente à l'émission de photons ($\Phi = N_p \Phi_p$).

Sous le seuil laser, la densité de photons est très faible ($\Phi \approx 0$). En régime stationnaire, les dérivées temporelles s'annulent, et la différence de population $\Delta n = n_3 - n_2$ s'écrit, d'après les équations 4.90 et 4.91 :

$$\Delta n = \frac{J}{e} \left(\eta_3 \tau_3 - \eta_2 \tau_2 - \frac{\tau_2 \tau_3}{\tau_{32}} \right) - n_{2,\text{therm}} \quad (4.92)$$

Le seuil laser est atteint lorsque le gain compense exactement les pertes totales du guide :

$$\Gamma g_c \Delta n = \alpha_{\text{tot}} \quad (4.93)$$

Les équations 4.90, 4.91 et 4.92 permettent d'écrire l'expression de la densité de courant de seuil du laser :

$$J_{\text{th}} = \frac{e}{\eta_3 \tau_3 - \eta_2 \tau_2 - \frac{\tau_2 \tau_3}{\tau_{32}}} \left(\frac{\alpha_{\text{tot}}}{g_c} + n_{2,\text{therm}} \right) \quad (4.94)$$

Au-dessus du seuil laser, la densité photonique dans la cavité laser augmente, et l'on peut supposer que le temps de vie lié à l'émission stimulée est beaucoup plus court que le temps de vie lié à l'émission spontanée :

$$\frac{1}{\tau_{\text{sp}}} \ll \frac{1}{\tau_{\text{stim}}} \propto g_c \Phi \quad (4.95)$$

Le dernier terme de l'équation 4.91 peut être négligé, et l'expression du gain au-dessus du seuil s'écrit :

$$\Gamma g_c \Delta n = \alpha_{\text{tot}} \quad (4.96)$$

Cela signifie qu'une fois le seuil laser atteint, le gain du matériau est clampé à sa valeur de seuil.

En supposant à présent que le niveau $|2\rangle$ est peuplé uniquement par diffusion directe des électrons depuis le niveau $|3\rangle$ (cas idéal tel que $\eta_2 \rightarrow 0$ et $n_{2,\text{therm}} \approx 0$), la densité électronique du niveau $|2\rangle$ s'écrit simplement :

$$n_2 \simeq \frac{\tau_2}{\tau_{32}} n_3 \quad (4.97)$$

où τ_{32} représente le temps de diffusion moyen de $|3\rangle$ vers $|2\rangle$, et τ_2 le temps de vie total des électrons sur le niveau $|2\rangle$. Dans ce cas, la différence de population $\Delta n = n_3 - n_2$ s'écrit :

$$\Delta n \simeq \frac{J}{e} \eta_3 \tau_3 \left(1 - \frac{\tau_2}{\tau_{32}} \right) \quad (4.98)$$

et la densité de seuil s'écrit :

$$J_{\text{th}} \simeq \frac{e}{\eta_3} \left(\frac{\alpha_{\text{tot}}}{g_c} + n_{2,\text{therm}} \right) \frac{1}{\tau_3 \left(1 - \frac{\tau_2}{\tau_{32}} \right)} = \frac{e}{\eta_3} \left(\frac{\alpha_{\text{tot}}}{g_c} + n_{2,\text{therm}} \right) \frac{1}{\tau_{\text{eff}}} \quad (4.99)$$

où τ_{eff} est le temps de vie effectif des électrons sur le niveau haut de la transition laser :

$$\tau_{\text{eff}} = \tau_3 \left(1 - \frac{\tau_2}{\tau_{32}} \right) \quad (4.100)$$

En utilisant les équations 4.90, 4.91, 4.92 et 4.99, on peut écrire la densité photonique par période, Φ_p , comme une fonction linéaire de la densité de courant J :

$$\Phi_p \simeq \frac{n_s}{\frac{c}{n_{\text{eff}}} \alpha_{\text{tot}}} \left[1 - \frac{\tau_2 \tau_{32}}{\tau_3 (\tau_{32} - \tau_2)} \right]^{-1} \frac{\eta_3}{e} (J - J_{\text{th}}) \quad (4.101)$$

où n_s est la densité surfacique totale d'électrons par période.

La situation la plus favorable correspond au cas où tous les électrons passent de manière séquentielle du niveau $|3\rangle$ au niveau $|2\rangle$, c'est-à-dire lorsque $\tau_3 = \tau_{32}$. Dans ce cas, n_2 atteint sa valeur maximale :

$$n_2 \simeq \eta_3 \frac{J}{e} \tau_2 \quad (4.102)$$

et l'inversion de population est réalisée si la condition $\tau_{32} > \tau_2$ est satisfaite :

$$\Delta n \simeq \eta_3 \frac{J}{e} (\tau_{32} - \tau_2). \quad (4.103)$$

L'inversion de population ainsi que le gain optique sont atteints quelle que soit la densité de courant J .

4.5.4 Gain dans la région active

Considérons une onde plane électromagnétique se propageant dans la direction x , recouvrant la largeur L_y d'une hétérostructure d'épaisseur L_p contenant une seule période active d'un QCL à trois niveaux (cf. Fig.4.14). La géométrie d'un tel dispositif est représentée par le schéma de la figure 4.15.

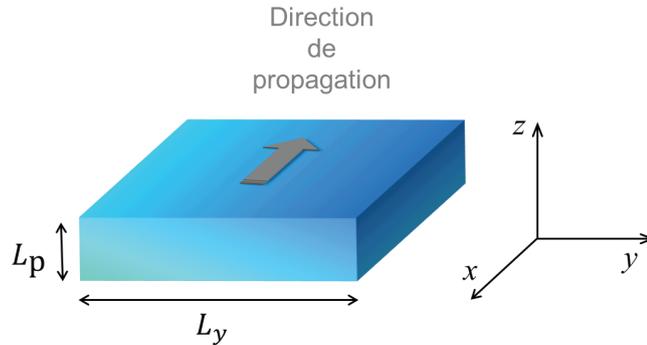


FIGURE 4.15 – Schéma de la géométrie utilisée pour le calcul du gain dans le matériau. La direction de croissance est z , et la direction de propagation de la lumière est x .

La densité de puissance surfacique transportée par cette onde plane d'amplitude E_0 s'écrit :

$$P = \frac{1}{2} \epsilon_0 n_{\text{eff}} c E_0^2 \quad (4.104)$$

où n_{eff} est l'indice effectif du mode guidé. Le nombre de photons d'énergie $\hbar\omega$ traversant la structure par unité de temps et par période s'écrit :

$$\Phi_p = \frac{1}{2} \frac{\epsilon_0 n_{\text{eff}} c E_0^2}{\hbar\omega} L_y L_p \quad (4.105)$$

En utilisant l'expression du taux maximal d'émission stimulée à la résonance pour $\hbar\omega = E_{32}$ (Eq.4.49), la variation du flux de photons sur un élément de distance dx s'écrit :

$$d\Phi_p = W_{32}^{\text{max}} dN_3 - W_{23}^{\text{max}} dN_2 \quad (4.106)$$

où $dN_3 = n_3 L_y dx$ et $dN_2 = n_2 L_y dx$ représentent le nombre total d'électrons par période sur les niveaux $|3\rangle$ et $|2\rangle$ respectivement, à travers la tranche de largeur w et de longueur dx . Le premier terme correspond à l'émission stimulée de photons due à la présence d'électrons en $|3\rangle$, tandis que le second terme correspond à l'absorption de photons due à la présence d'électrons en $|2\rangle$.

Le gain par unité de longueur dans la structure est défini comme la variation du flux de photons par unité de longueur divisée par le nombre de photons :

$$G = \frac{d\Phi/dx}{\Phi} \quad (4.107)$$

En utilisant les équations 4.52, 4.105 et 4.106, on obtient l'expression du gain fourni par la structure en fonction des paramètres quantiques :

$$G = \Gamma_p g_c \Delta n = \Gamma_p \frac{e^2 \omega}{\epsilon_0 c n_{\text{eff}}} \frac{z_{32}^2}{\delta v_{32} L_p} (n_3 - n_2) \quad (4.108)$$

L'expression usuelle du gain d'un QCL proportionnelle à la densité de courant injecté s'obtient immédiatement en utilisant l'expression de Δn donné par l'équation 4.92 dans l'équation 4.108 :

$$G = g_p J_{\text{th}}, \quad (4.109)$$

où g_p est le coefficient de gain fourni par une période de longueur L_p , défini tel que :

$$g_p \simeq \Gamma_p \frac{e \omega}{\epsilon_0 c n_{\text{eff}}} \frac{z_{32}^2}{\delta v_{32} L_p} \left(\eta_3 \tau_3 - \eta_2 \tau_2 - \frac{\tau_2 \tau_3}{\tau_{32}} \right), \quad (4.110)$$

en supposant $n_{2,\text{therm}} \approx 0$.

Dans bien des cas, le mode guidé d'un QCL s'étend hors de la région active dans la direction z . Le gain du matériau est alors en réalité réduit à la proportion du recouvrement spatial entre le mode guidé et la région active Γ . Jusqu'à présent on n'a

considéré qu'une seule période, or la région active d'un QCL est composée de N_p périodes. En supposant que chacune des N_p périodes possède le même recouvrement Γ_p avec le mode guidé, le recouvrement du mode avec toute la région active s'écrit $\Gamma = N_p \Gamma_p$. Ainsi, pour un QCL, le gain modal est donc aussi proportionnel au nombre de périodes :

$$G_{\text{modal}} = \Gamma g_c \Delta n = N_p G = N_p g_p J_{\text{th}} \quad (4.111)$$

tandis que le coefficient de gain g_c est indépendant du nombre de périodes de la région active, mais est inversement proportionnel à la longueur d'une période.

Une autre conséquence remarquable et propre aux QCLs, de l'équation 4.103 est que, dans le cas idéal d'un système à trois niveaux ISB, *il n'y a pas de seuil pour atteindre l'inversion de population*. Autrement dit, le premier électron injecté dans la région active engendre en principe du gain. Cela signifie qu'il n'y a pas de condition de transparence, contrairement aux diodes laser [25], c'est-à-dire que dans le cas idéal, la densité de courant de seuil est *directement proportionnelle* aux pertes optiques de la cavité.

Ce résultat est très important et sera discuté dans l'étude expérimentale en fonction de l'épaisseur de la région active présentée dans le chapitre suivant.

QCLs THz avec une région active extrêmement sub-longueur d'onde

La région active des QCLs est constituée de $N_p = 100 - 200$ répétitions du module élémentaire de longueur L_p . Son épaisseur totale, $L_{RA} = N_p L_p$, peut atteindre 10 à 12 microns. L'utilisation d'une région active épaisse permet de minimiser les pertes optiques dans le guide d'onde (cf. section 4.1), ainsi que d'augmenter le nombre de photons laser émis par électron injecté dans le dispositif (cf. section 4.5.4).

Bien qu'à ce jour les technologies de croissance de ce type d'hétérostructures permettent d'obtenir des QCLs d'excellente qualité, le temps de croissance reste prohibitivement long (10 – 20 h). La réduction de l'épaisseur de la région active est donc intéressante au point de vue de la fabrication. De plus, la tension appliquée V , et donc la puissance électrique injectée $P = VI$, varient linéairement avec L_{RA} . Donc en réduisant L_{RA} , la dissipation thermique, qui est l'un des verrous pour les performances en régime continu, pourrait être facilitée. Enfin, la réduction de l'épaisseur de la région active ouvrirait la perspective d'obtenir des "nanolasers" THz.

Cependant, la réduction de L_{RA} s'accompagne d'une augmentation des pertes optiques du guide d'onde, d'une diminution de la puissance optique, et d'une augmentation du seuil laser. La valeur de L_{RA} est donc le résultat d'un compromis entre différents facteurs dont dépendent les performances des dispositifs.

Les guides MM ont permis de faire un grand pas vers la miniaturisation des QCLs THz dans une dimension. Dans le cœur d'un guide MM, le facteur de confinement Γ_{RA} approche 100%, et ce, tant que $L_{RA} < \lambda_{eff}$ ($\lambda_{eff} = \lambda_0 / n_{eff}$). J'ai montré dans le chapitre précédent que ce guide d'onde présente des pertes optiques faibles dans la gamme THz. Par exemple, dans les QCLs THz en configuration MM, pour $\lambda_0 = 100 \mu\text{m}$ ($\nu_0 = 3$ THz) et $n_{eff} = 3.6$, $L_{RA} = \lambda_{eff} / 2.8$ ($L_{RA} \approx \lambda_0 / 10$), les pertes optiques totales dans un guide Fabry-Pérot (FP) d'épaisseur $L_{RA} = 10 \mu\text{m}$ sont d'environ 15 cm^{-1} (cf. table 4.3 page 107).

Dans la partie I, j'ai présenté la démonstration expérimentale de résonateurs THz passifs hybrides sub-longueur d'onde dans les trois dimensions de l'espace. L'épaisseur optimale de ces résonateurs hybrides est $L_z \sim 1 - 3 \mu\text{m}$. Avant de pouvoir y insérer la région active d'un QCL THz, il faut étudier la possibilité de maintenir l'effet laser dans un si faible volume effectif, et en particulier, il faut étudier l'effet de la réduction de L_{RA} de $10 \mu\text{m}$ à $1 \mu\text{m}$ sur les performances du laser. Ainsi, en plus de la question des performances des QCLs THz en fonction de la valeur de L_{RA} , la connaissance de la valeur limite de l'épaisseur d'une région active donnée permettra de sonder la faisabilité d'un laser THz hybride, opérant sous la limite de diffraction dans les trois dimensions de l'espace.

Les résultats expérimentaux rapportés ici démontrent la faisabilité de lasers à cascade quantique THz dont l'épaisseur est telle que $L_{\text{RA}} \approx \lambda_{\text{eff}}/15$ ($L_{\text{RA}} \approx \lambda_0/50$). D'un point de vue plus fondamental, cette étude apporte également la confirmation expérimentale qu'un large courant de fuite persiste à travers la structure après qu'elle ait atteint l'alignement radiatif.

5.1 Conception de la région active

L'une des difficultés rencontrées au cours du développement des QCLs couvrant la gamme $\nu = 1.8 - 5 \text{ THz}$ est de confiner une si grande longueur d'onde ($\lambda = 60 - 150 \mu\text{m}$) en minimisant les pertes du guide. Ce point a été traité dans la section 4.1.

L'autre principale difficulté est d'obtenir une inversion de population entre deux états séparés par une si petite différence d'énergie ($E_{32} = 7.5 - 21 \text{ meV}$). L'objectif de cette section est d'introduire les caractéristiques électriques et thermiques des QCLs THz en dégagant les paramètres que l'on pourra contrôler lors de la conception de la région active.

5.1.1 Modèle phonon-résonant

Parmi les nombreux schémas de régions actives qui ont été proposés depuis le modèle original *chirped superlattice* (CSL), deux classes de régions actives ont émergé : le modèle BTC et le modèle PR. Les différents modèles de région active pour les QCLs THz sont présentés dans les articles de revue par Williams *et al.* [158] et par Scaliari *et al.* [122]. Le travail expérimental rapporté dans les chapitres suivants concerne la modélisation de la région active de QCLs THz de type phonon-résonant.

La section précédente a permis de mettre en évidence les points les plus importants qui permettront d'améliorer les performances des QCLs en maximisant le gain dans la structure. Pour cela, il faut :

- maximiser l'élément de matrice dipolaire z_{32} ,

- maximiser la différence $\eta_3\tau_3 - \eta_2\tau_2$ en améliorant la sélectivité à l'injection sur le niveau haut ($\eta_3 \rightarrow 1$ et $\eta_2 \rightarrow 0$), tout en garantissant $\tau_3 > \tau_2$,
- minimiser le rapport τ_2/τ_{32} en limitant les canaux de fuite ($\tau_{3NR} \rightarrow \infty$) et en minimisant le temps de vie sur le niveau bas τ_2 ,
- limiter le *backfilling* du niveau bas ($n_{2,\text{therm}} \rightarrow 0$),
- maximiser le facteur de recouvrement Γ_p grâce à un guide d'onde optimisé,
- utiliser un grand nombre de périodes N_p dans la région active,
- réduire la longueur de la période L_p .

Certains de ces critères entrent cependant en compétition entre eux et il faut souvent faire des compromis. Par exemple, l'intérêt d'utiliser un grand nombre de périodes actives provient de l'augmentation du facteur de recouvrement total Γ entre la région active et le mode guidé, tandis que l'intérêt d'utiliser une courte périodicité augmente la densité de gain par période. L'épaisseur de la région active est limitée par la vitesse de croissance par MBE, qui est de l'ordre de $0.5 - 1 \mu\text{m}$ par heure ([8]). Pour cette raison, l'épaisseur typique de la région active des QCLs THz est de l'ordre de $10 - 12 \mu\text{m}$. On comprend dès lors l'intérêt de réduire la longueur L_p de la période. Or, plus la période L_p est courte, plus il est difficile de maintenir un temps de vie long sur le niveau haut. En effet, lorsqu'un champ électrique est appliqué à la structure de cascade quantique, l'électron possède une probabilité finie de transiter par effet tunnel vers le continuum. Ce phénomène affecte en particulier l'état haut de la transition radiative, réduisant le temps de vie τ_{32} en faveur de τ_{3NR} (cf. Eq. 4.87), et peut mener au cas limite $\tau_{32} < \tau_2$ où l'inversion de population devient impossible (cf. Eq. 4.103). Le mécanisme de fuite vers le continuum peut se produire soit directement depuis le niveau haut, soit indirectement par couplage avec des états intermédiaires plus loin dans la structure.

Une solution efficace à ce problème consiste à placer une mini-bande interdite en regard du niveau haut [40, 123]. Cette astuce nécessite d'ajouter quelques puits supplémentaires après la région active, et donc d'augmenter la longueur de la période L_p . Elle est efficace à faible température. En revanche, si la température augmente, l'énergie des électrons peut être activée au-dessus de la mini-bande et τ_{3NR} augmente de nouveau aux dépens de τ_{32} . Si, au contraire, on souhaite maintenir la valeur de L_p à sa valeur minimale, on peut choisir d'augmenter la discontinuité de bande de conduction ou la largeur de la barrière d'extraction. La première solution peut être mise en œuvre en choisissant un système de matériaux adéquat, et implique également certains compromis (voir section 5.4.1). La seconde solution permet de limiter l'extension de la fonction d'onde de l'état haut à l'intérieur du puits actif. Cependant dans ce cas, le niveau bas en est aussi affecté, et en particulier τ_2 augmente.

Une manière de réduire le temps de vie τ_2 est d'utiliser le système à trois niveaux décrit ci-dessus en positionnant les énergies des états $|2\rangle$ et $|1\rangle$ de façon à ce que cette transition soit résonnante avec l'énergie du phonon LO, comme dans le modèle PR.

Le choix du modèle PR pour cette étude a été motivé par le fait qu'il offre les meilleures performances en température [44, 84], ainsi que pour la facilité avec laquelle la fréquence d'opération peut être ajustée indépendamment des autres paramètres, étant fixée par l'épaisseur d'une seule barrière, celle qui se situe dans le double puits de la transition radiative [93] (cf. Fig. 5.1). Bien que ces structures présentent une valeur plus faible de l'élément de matrice dipolaire z_{if} que dans les structures BTC, l'absence de mini-bande à l'injection et à l'extraction résulte en une longueur de période L_p en moyenne deux fois plus courte que dans les structures BTC.

5.1.2 Alignement radiatif

Le motif élémentaire de la structure de bande de conduction d'un QCL THz PR est représenté par la figure 5.1. Le système de semiconducteurs utilisé dans cet exemple est le GaAs pour les puits et le $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$ pour les barrières de potentiel. Dans cette configuration, l'état collecteur est l'état $|4'\rangle$, et est identique à l'état injecteur $|4\rangle$. Il est situé sous l'état bas de la transition laser $|2\rangle$ de façon à ce que la différence d'énergie entre ces deux états corresponde à l'énergie du phonon LO dans ce système de matériaux ($E_{\text{LO}} \sim 36 \text{ meV}$, cf. Table 5.4).

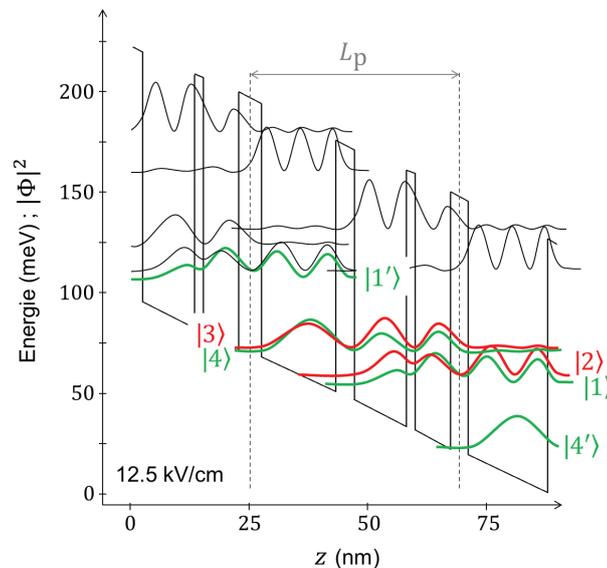


FIGURE 5.1 – Diagramme de bande de la période élémentaire d'une région active à trois puits quantiques de type phonon-résonant au champ d'alignement (12.5 kV/cm). La séquence est issue de la référence [93].

La transition radiative a lieu entre les états $|3\rangle$ et $|2\rangle$. Au champ d'alignement, le couplage entre les niveaux $|4\rangle$ et $|3\rangle$, ainsi qu'entre les niveaux $|2\rangle$ et $|1\rangle$ est ajusté de

telle façon que l'approximation du régime de couplage fort soit valide ($\Delta_0 \approx 4$ meV suffisamment grand, cf. Eq. 4.85). L'injection sur le niveau haut de la transition laser $|3\rangle$ se produit par transport tunnel cohérent depuis le niveau $|4\rangle$. De la même manière, l'extraction depuis le niveau bas $|2\rangle$ se produit par transport tunnel cohérent vers le niveau $|1\rangle$. Ainsi, l'état bas du laser est très rapidement dépeuplé par émission d'un phonon LO. Le phénomène de cascade est assuré par une répétition périodique du motif à trois puits quantiques (3QW). En pratique, lors de la croissance par MBE, la séquence de longueur L_p est répétée $N_p \approx 200$ fois, de sorte à ce que l'épaisseur totale de la région active atteigne $L_{RA} \approx 10 \mu\text{m}$ ($L_{RA} = N_p L_p$). Sur la figure 5.2, les états $|1'\rangle$ et $|4'\rangle$ sont analogues aux états $|1\rangle$ $|4'\rangle$ de la période suivante.

En négligeant tous les processus non-radiatifs indésirables ($n_2 \approx \tau_2/\tau_{32}$ n_3 et $\tau_3 \approx \tau_{32}$), la différence de population entre l'état haut $|3\rangle$ et l'état bas $|2\rangle$ est donnée par l'équation 4.103 :

$$\Delta n = n_3 - n_2 \approx \eta_3 \frac{J}{e} (\tau_{32} - \tau_2)$$

où la condition $\tau_{32} \gg \tau_2$ doit être satisfaite pour atteindre l'inversion de population.

La difficulté inhérente au modèle PR est de dépeupler le niveau bas $|2\rangle$ de façon sélective. Autrement dit, il faut limiter le recouvrement entre la fonction d'onde du niveau haut $|3\rangle$ et celle de l'état collecteur $|4'\rangle$. Une solution consiste à introduire un couplage fort entre les états $|2\rangle$ et $|1\rangle$ afin de délocaliser l'état $|2\rangle$ dans le puits large de la transition du phonon, tout en maintenant un bon confinement de l'état $|3\rangle$ dans le double-puits de la transition radiative. De cette façon, l'élément de matrice dipolaire $z_{24'}$ est maximisé, assurant une transition sub-picoseconde par diffusion d'un phonon LO, tandis que le temps de vie sur le niveau $|3\rangle$ est préservé grâce aux très faibles valeurs de z_{31} et $z_{34'}$, et son ordre de grandeur est de quelques picosecondes à basse température. Ainsi, la condition $\tau_{32} \gg \tau_2$ est satisfaite, l'inversion de population Δn est possible et le régime laser pourra être obtenu.

Tous les paramètres quantiques de la structure sont contrôlés lors de la conception de la région active par les épaisseurs des barrières et des puits qui composent le motif élémentaire, ainsi que le dopage.

Le puits le plus large est conçu de façon à ce que la séparation entre les deux premiers niveaux confinés corresponde à l'énergie d'émission du phonon optique dans le GaAs ($E_{14'} = 36$ meV). Dans cet exemple, la largeur de ce puits est 16.1 nm.

Les deux autres puits, plus petits, sont conçus de façon à permettre la transition radiative à $\nu = 3.1$ THz. Lorsque ces deux puits sont isolés, ils possèdent chacun un état fondamental à deux énergies distinctes. Dans cette structure, la barrière de séparation entre les deux puits est très fine (20 Å). Sous l'effet du champ électrique, les fonctions d'onde sont portées à la même énergie, et sont couplées par effet tunnel résonant à travers la fine barrière de séparation. Cela induit une levée de dégénérescence en un état symétrique $|2\rangle$ et un état antisymétrique $|3\rangle$ délocalisés dans les deux puits

(cf. Fig.4.12). L'écart énergétique $E_{32} = 12.9$ meV, et donc la fréquence du laser ν , sont fixés par l'épaisseur de cette barrière.

La valeur de la constante de couplage entre les niveaux $|4\rangle$ et $|3\rangle$ ($\Delta_{0,\text{inj.}}$) est fixée par l'épaisseur de la barrière d'injection (48 \AA), et la valeur de la constante de couplage entre les niveaux $|2\rangle$ et $|1\rangle$ ($\Delta_{0,\text{extr.}} \approx 2$ meV) est fixée par l'épaisseur de la barrière d'extraction (42 \AA).

5.1.3 Alignement parasite

Le principal désavantage de la structure PR est la valeur élevée de la densité de courant de seuil J_{th} . Encore mal expliquée par les modèles analytiques, la valeur de la densité de courant seuil semble être liée à l'existence d'un canal de courant qui persisterait au-delà du champ d'alignement de la structure et ce, même à basse température. La figure 5.2 reprend de façon simplifiée le diagramme de bande de la référence [93] au champs d'alignement parasite $E = E_{\text{para.}}$ (a), et au champ d'alignement radiatif $E = E_{\text{rad.}}$ (b).

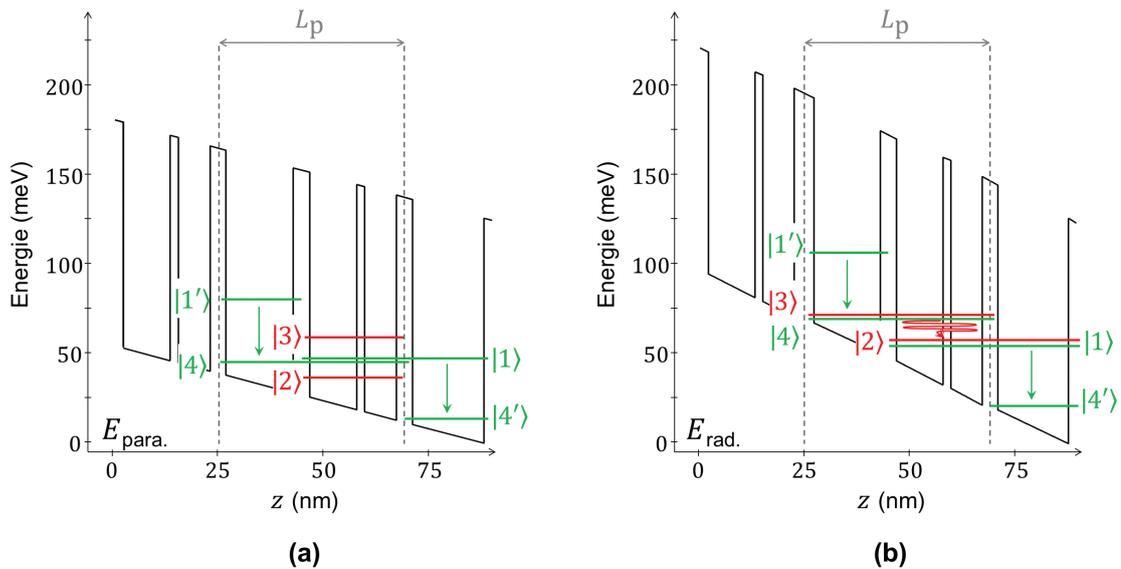


FIGURE 5.2 – Schéma d'une structure QCL de type phonon-résonant à trois puits quantiques : (a) au champ d'alignement parasite $E = E_{\text{para.}}$ (~ 9 kV/cm), (b) au champ d'alignement radiatif $E = E_{\text{rad.}}$ (~ 12.5 kV/cm).

Dans une structure PR à trois puits quantiques, il existe un champ plus faible $E_{\text{para.}} < E_{\text{rad.}}$ auquel les états $|4\rangle$ et $|1\rangle$ sont portés à la même énergie. A ce champ, les deux fonctions d'onde sont délocalisées à travers le double-puits et un couplage apparaît entre les deux états, permettant aux électrons de traverser la structure par

effet tunnel résonant en émettant un phonon par période. Ce mécanisme de transport électronique est non radiatif et supporte une densité de courant dite "parasite" (J_{para}). La densité de courant maximale que peut supporter cet alignement dépend de la densité surfacique de porteurs n et de la valeur de l'énergie d'anticroisement $\Delta_{0,\text{para}}$ qui définit le couplage entre les états $|4\rangle$ et $|1\rangle$. Sa valeur peut être estimée en utilisant l'équation 4.85 [74, 131] :

$$J_{\text{para}} = \frac{en}{2} \frac{(\Delta_{0,\text{para}}/\hbar)^2 \tau_{\parallel}}{1 + (\Delta_{0,\text{para}}/\hbar)^2 \tau_{\parallel} \tau_{41}} \quad (5.1)$$

où $\Delta_{0,\text{para}}$ est l'énergie d'anticroisement qui définit le couplage entre les états $|4\rangle$ et $|1\rangle$, τ_{41} est le temps de diffusion par effet tunnel du niveau $|4\rangle$ vers le niveau $|1\rangle$, et τ_{\parallel} est le temps de perte de cohérence.

Le champ $E_{\text{rad.}}$ correspond à l'alignement que l'on souhaite atteindre pour obtenir l'émission du photon THz décrit dans la section 5.1. A ce champ, les états $|4\rangle$ et $|3\rangle$, ainsi que les états $|2\rangle$ et $|1\rangle$, sont portés à la même énergie.

La densité de courant maximale que peut supporter cet alignement (J_{max}) dépend de la valeur des énergies d'anticroisement $\Delta_{0,\text{inj}}$ et $\Delta_{0,\text{extr}}$ qui définissent le couplage entre les états $|4\rangle$ et $|3\rangle$ d'une part, et $|2\rangle$ et $|1\rangle$ d'autre part, ainsi que de la densité surfacique de porteurs n . Le calcul de J_{max} nécessite un modèle à quatre niveaux au moins, comme celui proposé dans l'article [36]. Cependant, la valeur de J_{max} est proportionnelle à la densité surfacique de porteurs de charge n .

La figure 5.3 schématise la caractéristique densité J-E expérimentale typique d'un QCL PR à trois puits quantiques. Expérimentalement, l'existence d'un alignement parasite à un champ intermédiaire $E_{\text{para.}} < E_{\text{rad.}}$ se traduit par une première diminution de la résistance différentielle. La densité de courant atteint un maximum intermédiaire $J = J_{\text{para}}$ pour $E = E_{\text{para.}}$.

Si la valeur de $\Delta_{0,\text{para}}$ est suffisamment faible, et si la densité de dopage n le permet, la structure peut quitter l'alignement parasite représenté par la Fig.5.2(a) pour atteindre l'alignement radiatif représenté par la Fig.5.2(b). Expérimentalement, la transition entre ces deux situations stables ($E_{\text{para.}} < E < E_{\text{rad.}}$) se traduit par un point d'inflexion dans la courbe $J - E$. La densité de courant atteint sa valeur maximale $J_{\text{max}} > J_{\text{para}}$ pour $E = E_{\text{rad.}}$, qui se traduit par une résistance différentielle négative lorsque la densité de charges n n'est plus suffisante pour maintenir la valeur de courant souhaitée.

La plage dynamique du laser correspond à la gamme $J \in [J_{\text{th}}; J_{\text{max}}]$. Diminuer la valeur de J_{th} est un des obstacles les plus difficiles à franchir afin d'améliorer les performances de ces lasers. A ce jour, aucun modèle de calcul du transport électronique ne permet de relier quantitativement la valeur de la densité de courant totale au seuil du laser (J_{th}), avec chacun des paramètres de la structure PR. Notre hypothèse actuelle est qu'il existe un lien entre la valeur de la densité de courant qui peut traverser la

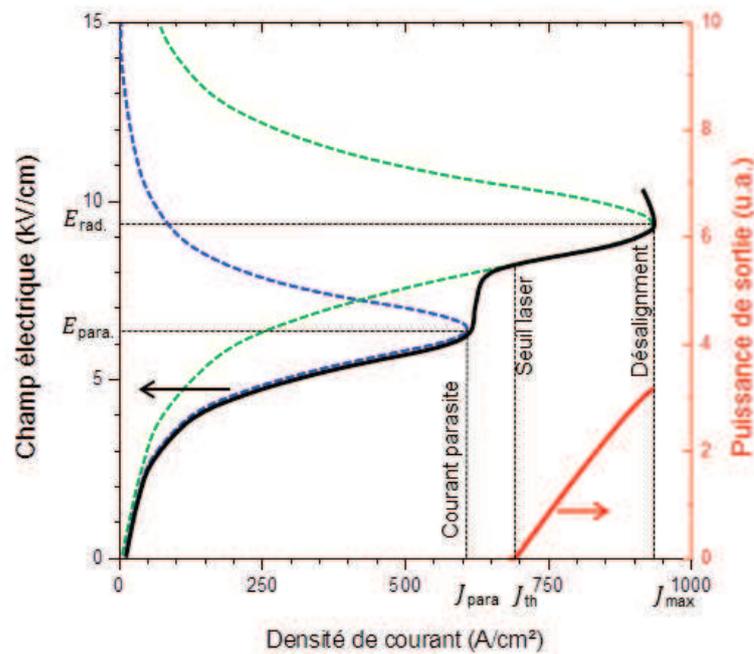


FIGURE 5.3 – Illustration du comportement d'un QCL phonon-résonant à trois puits quantiques. En noir : Courbe caractéristique densité de courant - champ électrique. En rouge : Courbe caractéristique densité de courant - puissance de sortie. En pointillés : Lorentzienne de la densité de courant qui traverse la structure au champ $E = E_{para}$. (bleu) et au champ $E = E_{rad}$. (vert) [74].

structure au champ d'alignement ($E_{\text{rad.}}$), et la valeur de la densité de courant qui la traverse lorsque la structure est soumise à un plus bas champ ($E < E_{\text{rad.}}$). Cette assumption est relativement bien acceptée par la communauté, mais il est très difficile de sonder expérimentalement les mécanismes de transport impliqués après le seuil laser de façon indépendante. Cependant, il est possible de quantifier la fraction du courant qui est effectivement impliquée dans le mécanisme de transport radiatif au seuil du laser [138]. Cette démonstration est présentée dans la suite de ce chapitre.

5.1.4 Effet du dopage

Le dopage de la région active est un compromis nécessaire entre pertes optiques et stabilité électrique dans un laser à cascade quantique. Afin d'assurer la neutralité électronique à travers toute la région active, il faut insérer des dopants à l'intérieur de chaque période. Or, les dopants sont des impuretés ionisées qui introduisent des porteurs libres absorbant le rayonnement THz. Dans le chapitre suivant, je montre que ce mécanisme d'absorption représente la source principale de pertes optiques dans un guide d'onde THz ($\alpha_{\text{total}} \approx \alpha_{\text{g}}, \alpha_{\text{g}} \propto \text{Im}(n_{\text{eff}})$). Ainsi, plus le niveau de dopage est élevé, plus les pertes à compenser augmentent ($g_{\text{th}} = \alpha_{\text{total}}/\Gamma$). De plus, le mécanisme d'absorption par les porteurs libres à l'énergie de la transition ISB a pour effet d'augmenter l'élargissement spectral de la raie $\delta\nu$, et donc de détériorer le gain maximal dans la région active ($g_{\text{c}} \propto 1/\delta\nu$ cf. Eq. 4.52).

Cependant, il est possible de limiter le mécanisme de diffusion par les porteurs libres en concentrant les impuretés le plus loin possible de la région spatiale où a lieu la transition radiative. En pratique, dans une structure QCL de type PR, on insère les dopants dans le tiers central du puits le plus large, où a lieu la diffusion par les phonons LO.

5.2 Étude théorique de l'effet de la réduction de l'épaisseur de la région active

J'ai étudié les caractéristiques d'une région active à trois puits quantiques de type PR, émettant à $\nu_0 = 3.1$ THz ($\lambda_0 = 96 \mu\text{m}$), en fonction de l'épaisseur de la région active L_{RA} dans un guide métal-métal. Les résultats de la simulation numérique des pertes optiques dans le guide ainsi que les résultats expérimentaux des caractéristiques optiques et électroniques du laser sont présentés dans cette section.

5.2.1 Choix de la région active

Dans l'article intitulé "*Limiting Factors to the Temperature Performance of THz Quantum Cascade Lasers Based on the Resonant-Phonon Depopulation Scheme*" par

Yannick Chassagneux *et al.* [19], nous avons étudié les performances en température des QCLs THz basés sur le modèle à trois puits quantiques de type PR décrit dans le chapitre précédent, en fonction de leur fréquence de fonctionnement. Le choix de ce type de structure est motivé par ses bonnes performances en température ainsi que par la possibilité d'ajuster la fréquence de fonctionnement indépendamment des autres paramètres lors de la conception de la période élémentaire. Cependant, ce type de laser présente une densité de courant de seuil élevée.

Pour l'étude rapportée dans la référence [19], nous avons conçu, fabriqué et caractérisé cinq dispositifs dans le système de matériaux GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As, dont les fréquences nominales se situent dans la gamme 2.3 – 3.8 THz. Tous les dispositifs ont présenté de très bonnes performances en température, comparables à l'état de l'art en date.

Cette étude a permis de démontrer expérimentalement que les QCLs PR THz à trois puits quantiques qui présentent les meilleures performances en température sont ceux dont la fréquence d'opération est proche de 3 THz. En effet, le dispositif laser à $\nu_0 = 3.1$ THz présente le meilleur compromis entre une bonne plage dynamique et une bonne valeur de température maximale de fonctionnement.

Ces résultats suggèrent que la performance des QCLs THz basés sur le modèle à trois puits quantiques de type PR est essentiellement limitée par deux facteurs :

- la diffusion des électrons chauds par couplage avec les phonons LO, qui domine pour les petites longueurs d'onde ;
- le courant parasite, qui domine pour les plus grandes longueurs d'onde.

L'étude rapportée dans l'article [19] a également permis de développer un modèle semi-empirique qui permet de décrire la dépendance de la densité de courant de seuil J_{th} avec la température qui, malgré sa simplicité, est en excellent accord avec les valeurs observées expérimentalement pour les cinq dispositifs. L'hypothèse de base de ce modèle est qu'il est possible, en première approximation, de décomposer la densité de courant qui traverse la région active d'un QCL à trois puits quantiques de type PR, notée $J_{th}^{3QW,PR}$, en la somme de deux termes :

$$J_{th}^{3QW,PR} \equiv J_{th}^{théor.} + J_{para} \quad (5.2)$$

où $J_{th}^{théor.}$ est la densité de courant de seuil définie par l'équation 4.94 et J_{para} est la densité de courant parasite qui persiste à travers la structure au seuil laser, dont l'expression est donnée par l'équation 5.1.

La séquence choisie pour l'étude des performances en fonction de l'épaisseur de la région active présentée dans les sections suivantes correspond à celle du dispositif opérant à $\nu_0 = 3.1$ THz utilisée dans les références [19, 93].

5.2.2 Pertes optiques dans un guide métal-métal Fabry-Pérot

Pour l'étude des performances en température des QCLs THz basés sur le modèle à trois puits quantiques de type PR présentée dans ce chapitre, j'ai fabriqué et caractérisé cinq dispositifs laser de séquence périodique identique, avec différentes épaisseurs de région active $L_{RA} = 10 \mu\text{m}$, $5 \mu\text{m}$, $2.5 \mu\text{m}$, $2 \mu\text{m}$ et $1.75 \mu\text{m}$.

Le diagramme de bande correspondant est reporté dans la figure 5.1. Les différentes valeurs de L_{RA} sont obtenues uniquement par variation du nombre de répétitions de la période à trois puits quantiques, N_p . L'étude théorique présentée ici a pour objectif d'explicitier le lien entre l'évolution des pertes optiques dans ces dispositifs et la valeur de la densité de courant de seuil $J_{th}^{3QW,PR}$, afin d'éprouver la validité de l'hypothèse exprimée par l'équation 5.2.

Les pertes optiques sont un facteur essentiel des performances du laser car elles déterminent son seuil de fonctionnement. En effet, la densité de courant de seuil $J_{th}^{théor.}$ est proportionnelle aux pertes optiques totales $\alpha_{tot.}$, suivant l'équation 4.94.

Les pertes optiques totales sont la somme des contributions des pertes par les facettes miroir α_m et des pertes du guide d'onde α_g : $\alpha_{tot.} = \alpha_m + \alpha_g$.

La figure 5.4 montre l'évolution du coefficient de réflectivité en fonction de l'épaisseur L_{RA} du guide MM calculée par la méthode présentée dans la section 2.1.4, ainsi que les valeurs de α_m pour $L_x = 1.0, 1.5, 2.0$ mm. Les pertes par les facettes dépendent de la longueur du résonateur L_x et du coefficient de réflectivité des facettes R_1 et R_2 : $\alpha_m = -1/2L_x \ln(R_1 R_2)$. Le mode optique est fortement confiné dans la direction z ($L_{RA} < \lambda_{eff}$) et subit ainsi une forte réflexion à la facette. Cette méthode de calcul est valable tant que $L_{AR} < \lambda_{eff}$ ($\lambda_{eff} \approx 27 \mu\text{m}$ pour un guide en GaAs à $\nu_0 = 3.1$ THz).

Ces résultats montrent que, pour des épaisseurs de guide petites devant la longueur d'onde effective, le confinement optique dans un guide MM FP augmente rapidement lorsque l'épaisseur diminue, et ainsi que les pertes par les facettes restent très faibles :

- $\alpha_m = 3.3 \text{ cm}^{-1}$ pour un guide d'épaisseur $L_{RA} = 10 \mu\text{m}$ et de longueur $L_x = 1.0$ mm,
- et $\alpha_m \leq 1 \text{ cm}^{-1}$ pour tous les guides fins tels que $L_{RA} \leq 3 \mu\text{m}$.

Les pertes dans le guide d'onde, α_g , peuvent être calculées à partir de l'équation 4.5 :

$$\alpha_g = \frac{4\pi \text{Im}(n_{eff})}{\lambda_0}$$

où λ_0 est la longueur d'onde de résonance et n_{eff} est l'indice effectif du mode. Pour une longueur d'onde fixée λ_0 (ici $\lambda_0 = 96 \mu\text{m}$), n_{eff} dépend du recouvrement du mode optique avec les différentes couches du guide, en particulier avec les couches de contact fortement dopées, ainsi qu'avec le métal, qui occasionnent des pertes optiques importantes par absorption par les porteurs libres.

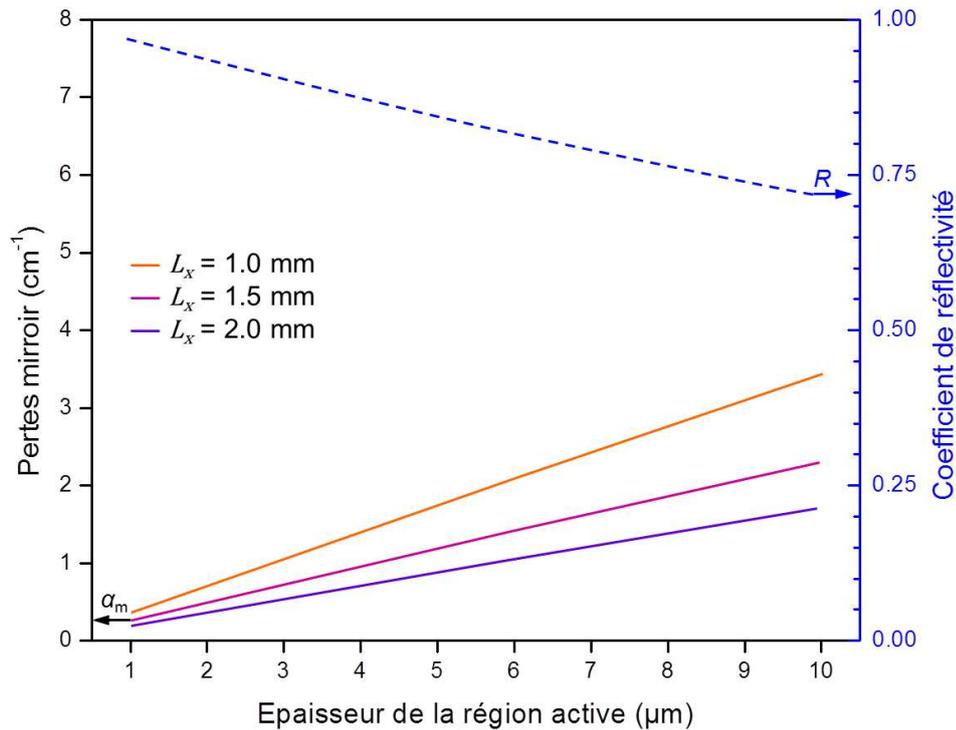


FIGURE 5.4 – Évolution des pertes par les miroirs en fonction de l'épaisseur de la région active (L_{RA}), calculées à partir des valeurs du coefficient de réflectivité R reportées dans la figure 2.3, pour les trois différentes longueur de cavité (L_x) utilisées dans cette étude.

Une estimation quantitative des pertes par le guide peut être obtenue par une simulation FEM unidimensionnelle, décrite dans le chapitre précédent (cf. 4.1.2). La figure 5.5(a) illustre la configuration utilisée pour la simulation FEM à travers la section du guide MM FP. Les indices de réfraction sont calculés à partir du modèle de Drude pour la longueur d'onde $\lambda_0 = 96 \mu\text{m}$ et un temps de diffusion dans la région active (resp. les couches de contact dopées $n+$) de $\tau = 1$ ps (resp. $\tau = 0.1$ ps). Dans cette étude, les variables sont l'épaisseur de la région active L_{RA} et de la couche de contact supérieure h_z .

Le profil du mode TM_0 est reporté dans la figure 5.5(b) pour les différentes épaisseurs de région active étudiées. On comprend déjà intuitivement grâce à cette figure que la réduction de la valeur de L_{RA} par la réduction du nombre de périodes N_p , implique que les pertes optiques dues au recouvrement du mode avec les couches dopées et le métal augmentent.

Les résultats du calcul de α_g en fonction de L_{RA} sont reportés dans la figure 5.6. Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs de l'épaisseur de la couche de contact dopée supérieure h_z . Contrairement aux pertes par les facettes α_m , les pertes

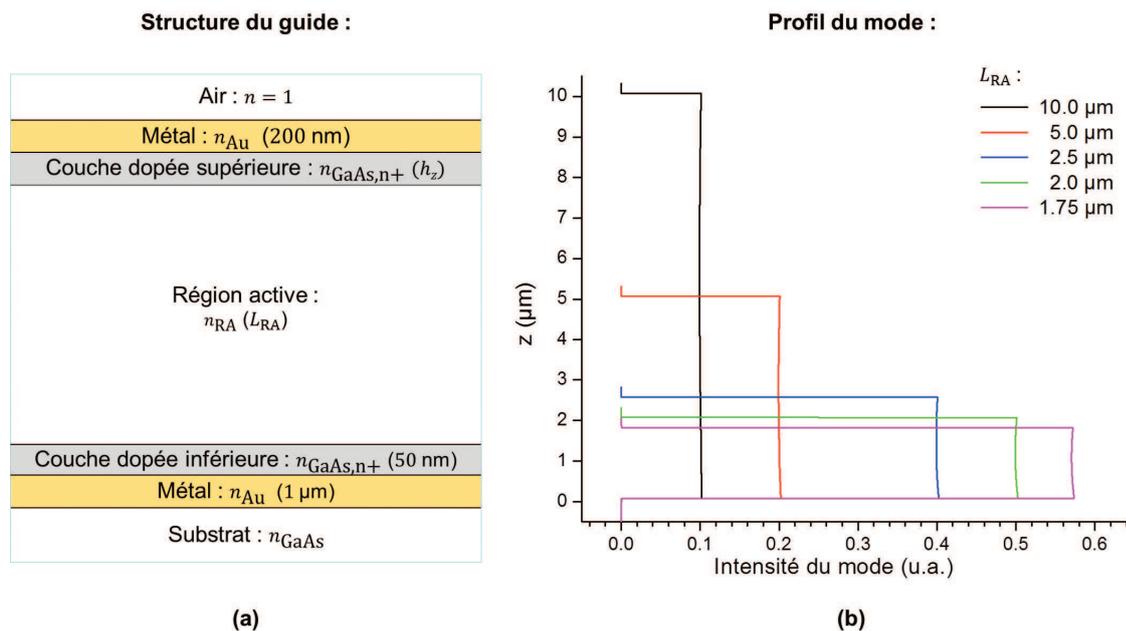


FIGURE 5.5 – (a) Configuration des différentes couches de matériaux composant le guide MM FP utilisée pour le calcul des pertes par le guide. Les indices de réfraction sont calculés à partir du modèle de Drude. (b) Profil du mode TM_0 confiné dans un guide MM FP pour différentes épaisseurs de région active.

par le guide augmentent exponentiellement lorsque L_{RA} diminue. Cela s'explique par le fait que la fraction du mode qui pénètre le métal et les couches dopées devient proportionnellement plus importante par rapport à la fraction qui recouvre la région active lorsque L_{RA} diminue.

De plus, comme l'on pouvait s'y attendre, elles dépendent fortement de l'épaisseur h_z des couches de contact dopées. Ces couches dopées sont utilisées pour faciliter l'injection électronique lors du fonctionnement du laser. Leur épaisseur doit donc être minimisée afin de réduire les pertes par le guide. En pratique, dans un guide MM THz, on utilise des couches de contact d'épaisseur comprise entre $h_z = 50$ et $h_z = 200$ nm. On peut remarquer dans la figure 5.6 que les courbes avec $h_z = 0$ nm et $h_z = 75$ nm sont quasiment confondues, et sont très proches de la courbe avec $h_z = 200$ nm. Ces résultats indiquent que lorsque les couches de contact sont suffisamment fines, les pertes dans le guide sont dominées par l'absorption dans le métal, bien que la profondeur de pénétration du champ d'une onde THz à l'intérieur de l'or ne soit que de 40 nm à $\nu_0 = 3$ THz (cf. Tables 2.1 et 2.2).

Il est important pour la suite de noter que la valeur des pertes par le guide d'épaisseur $L_{RA} = 10$ μm augmente d'environ un facteur 3 lorsque $L_{RA} = 1.75$ μm .

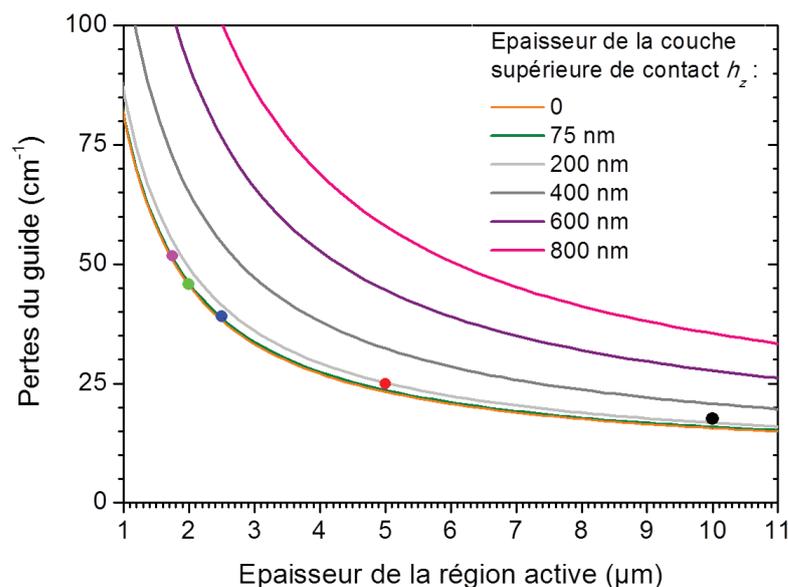


FIGURE 5.6 – Pertes de propagation par le guide calculées dans la configuration schématisée par la figure 5.5(a), en fonction de l'épaisseur de la région active L_{RA} et pour différentes valeurs d'épaisseur de la couche de contact supérieure dopée h_z . Les points correspondent aux pertes totales calculées comme la somme des pertes par les facettes et des pertes par le guide pour les dispositifs utilisés dans l'étude expérimentale.

5.2.3 Lien avec la densité de courant de seuil

En comparant les valeurs des pertes par les facettes avec les pertes par le guide obtenues, on peut se rendre compte que les pertes par les facettes représentent 11.5 % des pertes totales dans le guide lorsque $L_{RA} = 10 \mu\text{m}$, et sont réduites à seulement 0.75 % lorsque $L_{RA} = 2 \mu\text{m}$. On peut donc faire l'hypothèse que dans cette étude les pertes totales dans ces guides d'onde sont dominées par les pertes par le guide :

$$\alpha_{\text{tot.}} = \alpha_{\text{m}} + \alpha_{\text{g}} \approx \alpha_{\text{g}} \quad (5.3)$$

Les points reportés dans la figure 5.6 correspondent aux pertes totales calculées comme la somme des pertes par les facettes et des pertes par le guide pour les dispositifs utilisés dans l'étude expérimentale.

Pour atteindre le régime laser, le gain modal doit compenser les pertes optiques totales. D'après l'équation 4.111, le gain modal peut être exprimé en fonction de la densité de courant de seuil :

$$G_{\text{modal}} = |\alpha_{\text{tot.}}| = N_{\text{p}} g_{\text{p}} J_{\text{th}}^{\text{théor.}} \quad (5.4)$$

Le gain par période g_{p} est défini par l'équation 4.109, et la densité de courant de seuil peut être exprimée simplement :

$$J_{\text{th}}^{\text{théor.}} \approx \frac{|\alpha_{\text{tot.}}|}{C_{\text{RA}}} \quad (5.5)$$

en posant

$$C_{\text{RA}} = \Gamma_{\text{RA}} \frac{\tau_{\text{eff}} g_{\text{c}}}{e} \quad (5.6)$$

où g_{c} est le gain maximal à la résonance défini par l'équation 4.52, τ_{eff} est le temps de vie effectif des électrons sur le niveau haut de la transition laser défini par l'équation 4.100, et Γ_{RA} est le facteur de confinement du mode guidé dans la région active, tel que $\Gamma_{\text{RA}} = N_{\text{p}} \Gamma_{\text{p}}$.

Il est très important de noter que le facteur C_{RA} reste constant au cours cette étude, car il dépend uniquement des paramètres quantiques de la région active. D'après l'étude des guides MM présentée dans la section 4.1.2, on peut considérer que $\Gamma_{\text{RA}} \approx 100 \%$ pour toutes les valeurs de L_{RA} étudiées ici ($L_{\text{RA}} < \lambda_{\text{eff}}$) :

$$C_{\text{RA}} \approx \frac{\tau_{\text{eff}} g_{\text{c}}}{e} \quad (5.7)$$

Cette étude théorique démontre donc qu'il est possible d'étudier l'effet direct de l'augmentation des pertes optiques totales sur la valeur de la densité de seuil laser $J_{\text{th}}^{3\text{QW,PR}}$ en changeant uniquement la valeur de N_{p} , lorsque la région active est insérée

dans un guide d'onde MM FP garantissant un confinement constant $\Gamma_{RA} \approx 100\%$ quelle que soit la valeur de N_p .

La section suivante résume les résultats expérimentaux qui correspondent à cette étude théorique. Ces résultats permettent de comparer l'évolution de la valeur de $J_{th}^{3QW,PR}$ avec celle des pertes totales dominées par les pertes par le guide, en fonction de l'épaisseur de la région active :

$$\begin{aligned} J_{th}^{3QW,PR} &\equiv J_{th}^{théor.} + J_{para} \\ &\approx \frac{|\alpha_{tot.}|}{C_{RA}} + J_{para} \\ &\approx f(L_{RA}) + \text{constante} \end{aligned}$$

De cette façon, il est possible de tester la validité de l'hypothèse exprimée par l'équation 5.2 ainsi que d'évaluer la part du courant correspondant au transport non radiatif J_{para} .

5.3 Résultats expérimentaux

La croissance des structures a été réalisée dans l'équipe d'Edmund Linfield à l'Université de Leeds. Les plaques obtenues par MBE possèdent toutes la même période élémentaire et la comparaison entre elles est possible car elles ont été épitaxiées de façon successive dans le même bâti. Les numéros des plaques utilisées sont L420, L421 et L422. Elles partagent la même fréquence nominale d'émission $\nu_0 = 3.1$ THz ($\lambda_0 = 96 \mu\text{m}$).

Tous les dispositifs présentent un confinement sub-longueur d'onde, allant de $C \approx \lambda_0/10$ pour $L_{RA} = 10 \mu\text{m}$ à $C \approx \lambda_0/50$ pour $L_{RA} = 1.75 \mu\text{m}$.

Après une étude détaillée du dispositif le plus épais ($L_{RA} = 10 \mu\text{m}$), une étude comparative des cinq épaisseurs en fonction de L_{RA} sera présentée.

5.3.1 Caractéristiques de la région active de $10 \mu\text{m}$ d'épaisseur

Tous les lasers ont été fabriqués dans des guides rubans MM FP de quatre largeurs différentes L_y : $90 \mu\text{m}$, $150 \mu\text{m}$, $210 \mu\text{m}$ et $310 \mu\text{m}$. Ces rubans ont été obtenus par gravure humide selon les étapes décrites par les figures 5.7, 5.8 et 5.9 :

- (a) Métallisation de la plaque épitaxiée et d'un substrat hôte (Ti/Au, 8 nm/500 nm).
- (b) Collage de la plaque épitaxiée sur le substrat hôte par thermo-compression.
- (c) Polissage mécanique suivie d'une gravure sélective (acide citrique) du substrat côté région active. La couche d'arrêt est ensuite entièrement gravée de façon sélective (HF). (*n.b.*) Si besoin, amincissement de la région active par voie

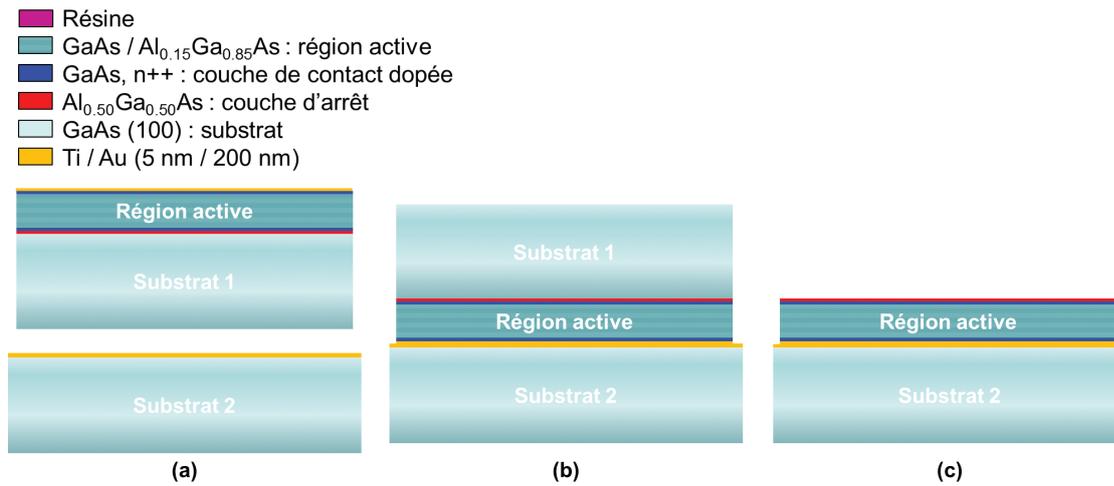


FIGURE 5.7 – Étapes du procédé de fabrication des rubans MM par gravure humide (début). (a-c) Report de substrat.

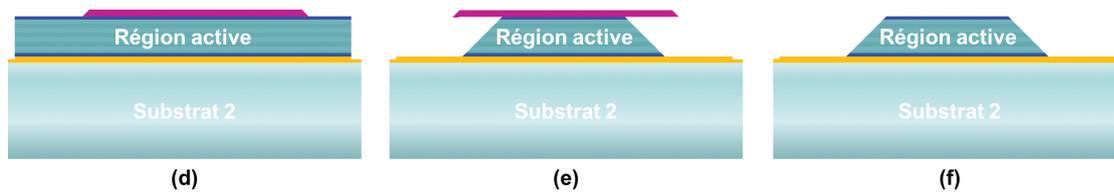


FIGURE 5.8 – Étapes du procédé de fabrication des rubans MM par gravure humide (suite). (d-f) Gravure des rubans dans la région active.

chimique, en sacrifiant la couche de contact supérieure (H_2SO_4 : H_2O_2 : H_2O , 1 : 8 : 120).

- (d) Définition du masque de résine positive (S1818) par photolithographie pour la gravure des rubans.
- (e) Gravure de la région active par voie humide (H_2SO_4 : H_2O_2 : H_2O , 1 : 8 : 10-40).
- (f) Retrait de la résine.
- (g) Définition du masque de résine inversible (Ti35ES) pour la métallisation du contact supérieur.
- (h) Métallisation du contact supérieur (Ti/Au, 5 nm/200 nm) et *lift-off* (Acétone/I-sopropanol).
- (i) Amincissement de la face arrière et métallisation (Ti/Au, 10 nm/150 nm).

Ce procédé de fabrication diffère de celui présenté dans la partie I uniquement par le type de gravure utilisé pour la région active. En effet, nous avons opté pour une

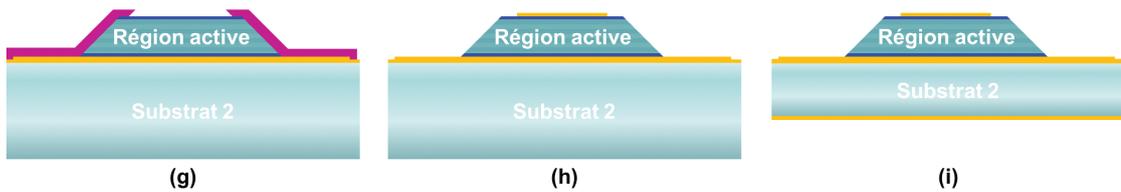


FIGURE 5.9 – Étapes du procédé de fabrication des rubans MM par gravure humide (fin). (g-i) Définition du contact métallique supérieur.

gravure par voie chimique. Les principaux désavantages de cette technique sont que dans ce cas :

- les flancs des rubans ne sont pas verticaux, ce qui induit une non-uniformité de champ à l'intérieur de la région active lors du fonctionnement du laser,
- il faut anticiper le phénomène de sous-gravure inhérent lors de la conception des masques pour la photolithographie des contacts supérieurs métalliques.

Une fois la fabrication des rubans terminée, l'échantillon est clivé à la longueur L_x souhaitée. Les facettes ainsi formées suivent les plans cristallins de la région active et forment des plans miroirs quasi-parfaits. Les résonateurs Fabry-Pérot obtenus sont montés sur une embase en Cuivre et soudés à l'Indium. Ces deux matériaux sont choisis pour les bonnes conductances thermiques. Le contact métallique supérieur des dispositifs que l'on souhaite caractériser est connecté à un plot latéral en Or et le plan d'Or au pied des résonateurs au plan de masse. L'échantillon est placé dans un cryostat, où il peut être refroidi à l'azote liquide (78 K) ou à l'hélium liquide (10 K). Un système composé d'une sonde et d'une résistance en rétro-action monté à proximité de l'échantillon permet de contrôler la température de la région active.

Les caractérisations électro-optiques des QCLs ont été obtenues grâce au banc de mesure décrit dans la figure 5.10. L'une des deux facettes de l'échantillon est placée dans le foyer d'un miroir parabolique. Les bornes du QCL sont reliées à un système composé d'un impulsateur, d'une sonde de courant et d'un oscilloscope et un système de détection synchrone permet de corrélérer le signal reçu par le détecteur avec l'alimentation pulsée du QCL. Grâce à un second miroir parabolique, le faisceau est ensuite focalisé en un point situé quelques centimètres en avant le spectromètre. Il est nécessaire que le faisceau entre de manière divergente dans le spectromètre à cause des spécificités de celui-ci (Bruker IFS66). Le spectromètre consiste en un interféromètre de Michelson, dont un des bras a une longueur variable (identique à celui utilisé dans la partie I). Le signal optique obtenu en fonction de la position du miroir mobile n'est autre que la transformée de Fourier du spectre d'émission. Afin de mesurer le signal optique, il est possible de choisir parmi deux détecteurs en fonction de l'intensité du signal émis par le QCL : le détecteur interne du spectromètre (DTGS FAR-IR), ou un bolomètre Si refroidi à $T = 4$ K.

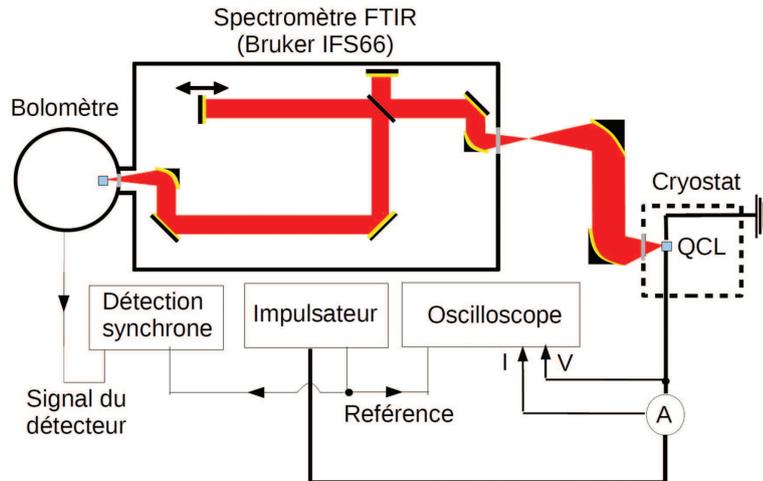


FIGURE 5.10 – Schéma du banc de mesure optique. La source interne du FTIR est remplacée par le QCL, placé dans un cryostat à l'extérieur du FTIR. Le signal divergeant émis par le QCL travers une fenêtre transparente au rayonnement THz et est collecté par un miroir parabolique qui redirige le faisceau dans le spectromètre. Le signal est mesuré grâce à la source interne du FTIR ou grâce à un bolomètre Si.

Les caractéristiques électriques des QCLs sont obtenues en mesurant la tension aux bornes du dispositif en fonction du courant injecté. Afin de pouvoir comparer les différentes géométries de résonateurs entre eux, il est souvent préférable de tracer ces courbes en fonction de la densité de courant (en A cm^{-2}).

Les caractéristiques courant-tension-signal optique d'un dispositif MM ruban d'épaisseur $L_{\text{RA}} = 10 \mu\text{m}$ (L421), de longueur $L_x = 2 \text{ mm}$ et de largeur $L_y = 310 \mu\text{m}$, sont reportées dans la figure 5.11 pour différentes valeurs de température. La caractéristique électrique mesurée à basse température fournit les informations sur les différents alignements quantiques possibles, car c'est à basse température que les alignements sont le plus marqués (cf. Fig.5.3). Pour cette structure particulière, en étudiant la structure de bande pour différents champs électriques appliqués, on observe deux alignements possibles : le premier à $E_{\text{para}} = 9 \text{ kV/cm}$ (cf. schéma 5.2(a)) et le second à $E_{\text{align}} = 12.5 \text{ kV/cm}$ (cf. schéma 5.2(b)). Sur la figure, on retrouve bien ces deux alignements. La limite inférieure de la valeur de la densité de courant de seuil J_{th} est limitée d'une part par J_{para} , qui correspond au champ d'alignement parasite E_{para} , et sa limite supérieure est fixée par J_{max} , qui correspond au désalignement de la situation radiative pour $E > E_{\text{align}}$.

La mesure du spectre d'émission du laser permet de comparer la fréquence émise par le dispositif à la fréquence nominale calculée lors de la conception de la région active. L'intensité des résonances Fabry-Pérot dépend de la largeur de la transition $\delta\nu$ et de la forme du gain laser. Les spectres collectés sur la source interne du FTIR à

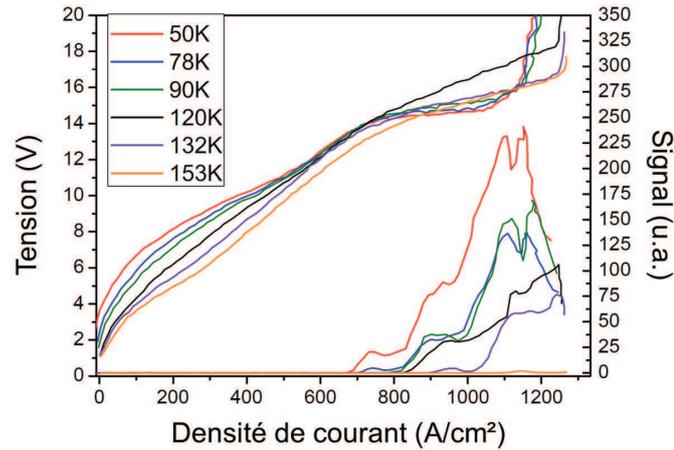


FIGURE 5.11 – Caractéristique courant-tension-signal d'un ruban avec $L_{RA} = 10 \mu\text{m}$ (L421) pour différentes températures.

$T = 78 \text{ K}$ pour plusieurs valeurs de courant $I_{th} \leq I \leq I_{max}$ sont reportés dans la figure 5.12. Ils ont été mesurés en régime pulsé à la fréquence de 85 kHz avec une durée de 300 ns . A partir de ces données, la fréquence d'émission laser ν est située dans la plage $3.05 - 3.30 \text{ THz}$ et la largeur de raie estimée $\delta\nu$ est d'environ 0.3 THz . Ce résultat est en très bon accord avec la fréquence nominale de 3.1 THz et un élargissement caractéristique de l'ordre de 10% . Le léger décalage vers les plus hautes fréquences est dû au fait que la transition radiative est légèrement diagonale, induisant un effet Stark entre deux points différents de la plage dynamique du laser [93].

Connaissant la longueur L_x du résonateur FP, on peut évaluer l'indice de réfraction effectif. La condition de résonance s'écrit :

$$n_{\text{eff}}(\nu_0) = \frac{p}{2L_x} \frac{c}{\nu_0}, \quad p \in \mathbb{N} \quad (5.8)$$

Dans le cas général, l'indice effectif est dépendant de la fréquence et il faut tenir compte de la dispersion. Soit $\Delta\nu$ la différence de fréquence entre deux pics Fabry-Pérot d'indices p consécutifs :

$$\Delta\nu = \frac{c}{2L \left(n_{\text{eff}} + \nu \frac{\partial n_{\text{eff}}}{\partial \nu_0} \right)} \quad (5.9)$$

Dans le cas d'un résonateur FP MM THz, l'indice effectif varie peu avec la fréquence, et on peut écrire :

$$\Delta\nu \approx \frac{c}{2Ln_{\text{eff}}} \quad (5.10)$$

En utilisant la position des pics Fabry-Pérot dans la figure 5.12, on mesure une distance spectrale $\Delta\nu \approx 0.02 \text{ THz}$, soit un indice effectif $n_{\text{eff}} \approx 3.75$ pour $L_x = 2 \text{ mm}$, ce qui est en bon accord avec la valeur théorique de 3.68 .

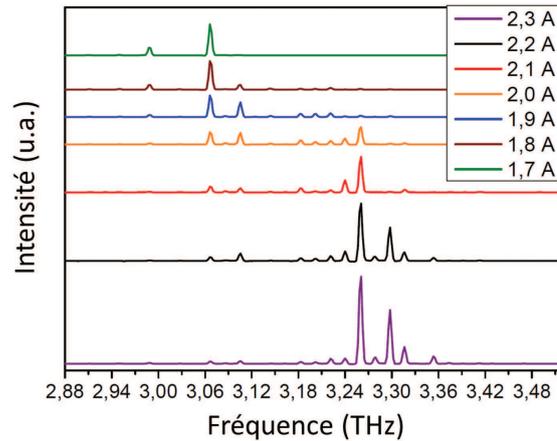


FIGURE 5.12 – Spectres d'émission pour différentes valeurs de courant $I_{th} < I < I_{max}$ à basse température ($T = 78$ K).

Il est important de noter que lors de ces mesures, le chemin optique n'est ni pompé, ni purgé. Cela se manifeste par des pics d'absorption dans le spectre THz qui correspondent aux raies d'absorption de la vapeur d'eau. Il est donc difficile dans ces conditions d'interpréter l'intensité du signal collecté sur le détecteur. De plus, au cours d'une mesure courant-signal, l'émission laser parcourt une plage de fréquences qui peut s'étendre jusqu'à 1 THz. Enfin, du fait de l'utilisation d'un guide FP MM, l'émission par la facette est divergente et seule une fraction de la puissance de sortie est collectée.

On peut remarquer sur la figure 5.11 que la valeur de J_{th} augmente avec la température, et lorsqu'elle atteint la valeur de J_{max} , le laser cesse d'émettre (température maximale de fonctionnement du laser). Les valeurs de J_{th} en fonction de la température sont reportées dans la figure 5.13. La densité de courant de seuil à $T = 10$ K est $J_{th} = 675 \text{ A.cm}^{-2}$, et la température maximale de fonctionnement de ce dispositif est $T_{max} = 153$ K.

Dans les QCLS THz PR, l'augmentation de $J_{th}^{théor.}$ avec la température est principalement due à deux facteurs pouvant dégrader l'inversion de population $\Delta n = n_3 - n_2$:

- l'augmentation de la population thermique du niveau bas de la transition laser $n_{2,therm}$, définie par l'équation 4.89,
- la réduction du temps de vie du niveau haut de la transition radiative, due à l'émission de phonons par les électrons chauds, qui suit la loi exprimée par l'équation 4.68.

On s'attend à ce que le premier facteur soit marginal pour les régions actives de type PR par rapport aux lasers de type BTC, car l'énergie de séparation entre le quasi-niveau de Fermi de l'injecteur et le niveau bas de la transition radiative est plus importante ($\gtrsim 36$ meV pour le type PR, $\gtrsim 15$ meV pour le type BTC)

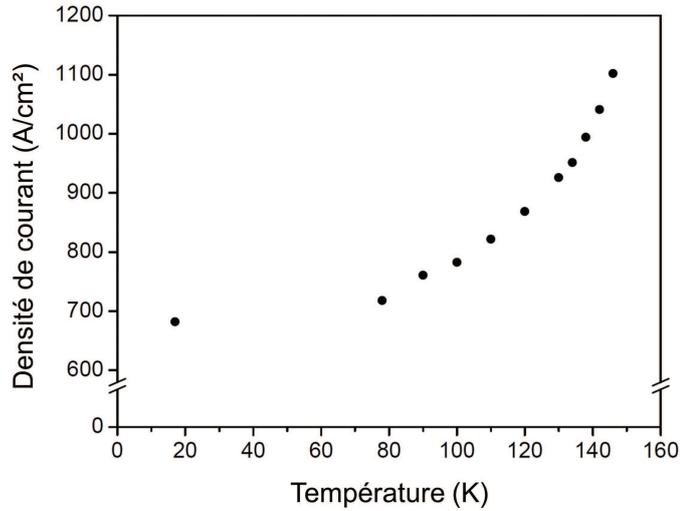


FIGURE 5.13 – Évolution de la densité de courant de seuil en fonction de la température.

En revanche, le second facteur pouvant dégrader l'inversion de population est non négligeable quel que soit le type de région active considéré. En effet, pour une densité de courant J donnée, la différence de population Δn est proportionnelle à $\tau_{\text{eff}} \approx \tau_{32} - \tau_2$ (cf. Eq. 4.98 et 4.103). Lorsque la température augmente, les électrons chauds du niveau haut $|3\rangle$ peuvent relaxer vers le niveau bas $|2\rangle$ en émettant un phonon LO au lieu d'émettre un photon, car ce mécanisme de relaxation est beaucoup plus efficace ($\tau_{\text{sp}} \gg \tau_{\text{LO}}$).

On peut inclure la dépendance en température de τ_{32} dans l'expression de $J_{\text{th}}^{\text{théor.}}$ en utilisant l'équation 4.68 :

$$\frac{1}{\tau_{32}} = \frac{1}{\tau_{32}^0} + \frac{1}{\tau_{32}^{\text{chaud}}} e^{\frac{h\nu - E_{\text{LO}}}{k_{\text{B}}T_e}} \quad (5.11)$$

où τ_{32}^0 est le temps de vie sur le niveau haut $|3\rangle$ à $T = 0$ K, principalement dominé par les collisions électron-électron, et $\tau_{32}^{\text{chaud}} = 1/W_{32}^{\text{chaud}}$ est le temps de vie des électrons chauds sur le niveau haut $|3\rangle$ pouvant relaxer vers le niveau bas $|2\rangle$ en émettant un phonon LO.

Si l'on néglige l'influence de la température sur les pertes optiques et sur la largeur de la transition $\delta\nu$, la densité de courant de seuil en fonction de la température peut s'écrire :

$$J_{\text{th}}^{\text{théor.}} = \frac{\alpha_{\text{tot}} e}{g_{\text{c}}} \frac{1}{\tau_2} \left[\frac{1}{1 - \tau_2/\tau_{32}^0 - \tau_2/\tau_{32}^{\text{chaud}} \cdot e^{(h\nu - E_{\text{LO}})/k_{\text{B}}T_e}} - 1 \right] \quad (5.12)$$

La température T_e est la température électronique, qui peut être supérieure à la température de la région active. En effet, des simulations théoriques [11, 15] ainsi

que des mesures expérimentales [150] suggèrent que, dans les QCLs PR THz, la température des électrons du niveau haut de la transition radiative est plus élevée de 50 – 100 K par rapport à la température du cristal.

On peut faire l'approximation que le taux de relaxation des électrons par émission d'un phonon LO est beaucoup plus élevé que le taux de relaxation par collision électron-électron ($\tau_{32}^0 \gg \tau_{32}^{\text{chaud}}$), ce qui conduit à :

$$J_{\text{th}}^{\text{théor.}} = J_{\text{th}}^{3\text{QW,PR}} - J_{\text{para}} \quad (5.13)$$

$$\approx \frac{\alpha_{\text{tot}} e}{g_c} \frac{1}{\tau_2} \left[\frac{1}{1 - \tau_2 / \tau_{32}^{\text{chaud}} \cdot e^{(h\nu - E_{\text{LO}}) / k_B T_e}} - 1 \right] \quad (5.14)$$

$$\propto \frac{\alpha_{\text{tot}}}{z_{32}^2} \frac{\delta\nu}{\nu} \frac{1}{\tau_2} \left[\frac{1}{1 - \tau_2 / \tau_{32}^{\text{chaud}} \cdot e^{(h\nu - E_{\text{LO}}) / k_B T_e}} - 1 \right] \quad (5.15)$$

De la même façon, le facteur C_{RA} défini par l'équation 5.6 peut s'écrire en fonction de la température :

$$C_{\text{RA}}(T_e) \approx \Gamma_{\text{RA}} \frac{g_c}{e} \frac{1}{\tau_2} \left[\frac{1}{1 - \tau_2 / \tau_{32}^{\text{chaud}} \cdot e^{(h\nu - E_{\text{LO}}) / k_B T_e}} - 1 \right] \quad (5.16)$$

L'équation 5.13 indique que la densité de courant de seuil très élevée dans les QCLs THz PR et ce, même à basse température, pourrait être réduite simplement en réduisant la valeur de J_{para} . Dans la référence [19], nous montrons expérimentalement que J_{para} augmente lorsque l'on diminue la fréquence d'opération en gardant comparables tous les autres paramètres quantiques, et nous proposons une interprétation de cette tendance.

Toutefois, l'équation 5.14 suggère que les QCLs conçus avec une valeur de fréquence nominale faible devraient en principe atteindre des températures maximales de fonctionnement plus élevées. Ceci peut se comprendre par le fait que l'émission de phonons LO par les électrons chauds permet de "refroidir" la température effective des électrons sur niveau |3>, car les électrons qui possèdent une forte composante planaire du vecteur d'onde peuvent diffuser rapidement vers le niveau |2> en émettant un phonon, tandis que le temps de vie des électrons avec une petite composante planaire sur le niveau |3> est plus long [11, 15]. Ainsi, les QCLs THz PR opérant à haute fréquence semblent désavantagés au point de vue des performances à haute température.

Enfin, l'équation 5.15 semble indiquer que, pour une fréquence donnée, les performances en température peuvent être améliorées de façon significative en utilisant une transition plus diagonale (z_{32} plus faible). Comme mentionné dans le chapitre précédent, une transition plus diagonale permet de réduire le recouvrement entre les fonctions électroniques, et de là, la force d'oscillateur des transitions indésirables,

et en particulier, le taux de relaxation des électrons du niveau $|3\rangle$ par émission d'un phonon LO est réduit. Ce faisant, la force d'oscillateur de la transition laser est également réduite, ce qui paraît être un désavantage au point de vue de l'inversion de population, mais il est possible que cet effet soit compensé par l'augmentation de la valeur du temps de vie total sur le niveau haut de la transition laser. Une étude récente des performances des QCLs THz à trois puits quantiques de type PR en fonction de la force d'oscillateur indique que l'effet de la force d'oscillateur sur la T_{\max} est en fait plus complexe que ne le suggère ce modèle simplifié [46].

Une étude plus approfondie de ces aspects est présentée dans l'article [19]. Dans l'étude qui suit, je présente dans un premier temps l'étude complète des caractéristiques des dispositifs en fonction de L_{RA} . Puis l'hypothèse de l'existence d'un large courant parasite qui subsiste au-delà de l'alignement radiatif lié à l'alignement intermédiaire au champ E_{para} , est discutée à partir des caractéristiques électroniques mesurées à basse température.

5.3.2 Réduction de l'épaisseur de la région active

Le procédé de fabrication de l'échantillon L421 avec $L_{\text{RA}} = 10 \mu\text{m}$ est détaillé dans la section 5.3.1. Les deux épaisseurs de régions active supplémentaires, $L_{\text{RA}} = 2.0 \mu\text{m}$ et $L_{\text{RA}} = 1.75 \mu\text{m}$, ont été obtenues à partir de la plaque L422 avec $L_{\text{RA}} = 2.5 \mu\text{m}$, en amincissant la région active par voie chimique à l'étape (c) ($\text{H}_2\text{SO}_4 : \text{H}_2\text{O}_2 : \text{H}_2\text{O}$, 1 : 8 : 120), sacrifiant la couche de contact supérieure ($h_z = 0$). Des rubans Fabry-Pérot de longueur $L_x = 2 \text{ mm}$ et de largeur $L_y = 90 - 220 \mu\text{m}$ ont été conçus à partir des cinq épaisseurs de région active. Les rubans laser ont été soudés avec de l'Indium sur des embases en Cuivre, puis placés dans un cryostat où ils ont été caractérisés électriquement et optiquement en fonction de la température.

Plaque	$L_{\text{RA}} (\mu\text{m})$	N_{p}	$h_z (\text{nm})$	$\alpha_{\text{total}} (\text{cm}^{-1})$
L421	10.0	227	75	17.6
L420	5.0	114	75	24.9
L422	2.5	58	75	39.1
L422	2.0	45	0	45.8
L422	1.75	40	0	51.7

TABLE 5.1 – Détails des plaques utilisées au cours de cette étude. L_{RA} est l'épaisseur de la région active, N_{p} est le nombre de répétitions de la période élémentaire, h_z est l'épaisseur de la couche de contact dopée supérieure, et α_{total} représente les pertes optiques totales dans les dispositifs réels.

La table 5.1 résume les principales informations concernant les épaisseurs de régions actives utilisées. Les pertes optiques totales sont calculées comme la somme

des pertes par les miroirs et des pertes de propagation dans un ruban Fabry-Pérot de dimensions L_{RA} et $L_y = 2$ mm, en tenant compte du dopage et de la présence de la couche de contact dopée supérieure le cas échéant.

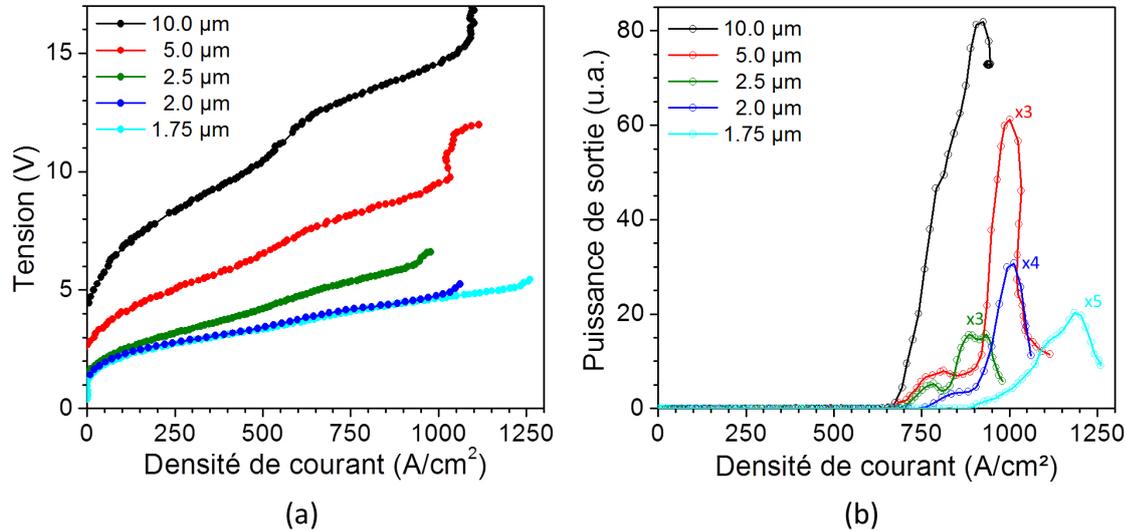


FIGURE 5.14 – Caractéristiques tension – densité de courant (a) et signal – densité de courant (b) pour les cinq valeurs de L_{RA} à $T = 10$ K, en émission pulsée avec un cycle de travail de 1 %.

La figure 5.14 (a) montre la caractéristique tension – densité de courant ($V - J$) à basse température ($T = 10$ K) pour chacune des cinq épaisseurs de région active L_{RA} . Sur cette figure, on peut constater une très nette diminution de la tension d’alignement avec la valeur de L_{RA} , comme l’on peut s’y attendre. En effet, puisque tous les dispositifs sont constitués à partir de la même structure quantique, le champ électrique à travers la région active détermine l’allure de la caractéristique $E - J$. Ce point sera vérifié dans la section suivante (cf. Fig.5.17).

La figure 5.14 (b) montre la caractéristique signal – densité de courant ($L - J$) à basse température ($T = 10$ K) pour chacune des cinq épaisseurs de région active L_{RA} . L’intensité du signal diminue nettement avec la valeur de N_p . Ce comportement est en accord avec le fait que, en principe, un laser émet un photon par période. À l’exception du dispositif le plus fin, les valeurs de la densité de courant maximale J_{max} , ainsi que celles de la densité de courant J_{para} à l’alignement parasite ($E_{\text{para}} \approx 9$ kV/cm, cf. Fig. 5.2 page 144), sont comparables entre elles. Ceci est dû au fait que la période élémentaire de la région active et le niveau de dopage sont nominalement identiques pour les cinq épaisseurs. De légères variations autour des épaisseurs nominales des puits et barrières, ainsi que du dopage nominal entre dispositifs issues de différentes croissances sont courantes. Bien que les dispositifs d’épaisseur $L_{RA} = 2.5, 2.0$ et 1.75 μm soient issus de la même plaque (L422), l’augmentation de la valeur de J_{max} peut

s'expliquer par l'existence de canaux de transport électroniques parasites supplémentaires qui proviendraient d'une dés-uniformité locale de l'épaisseur de la région active, résultant de leur amincissement par voie chimique.

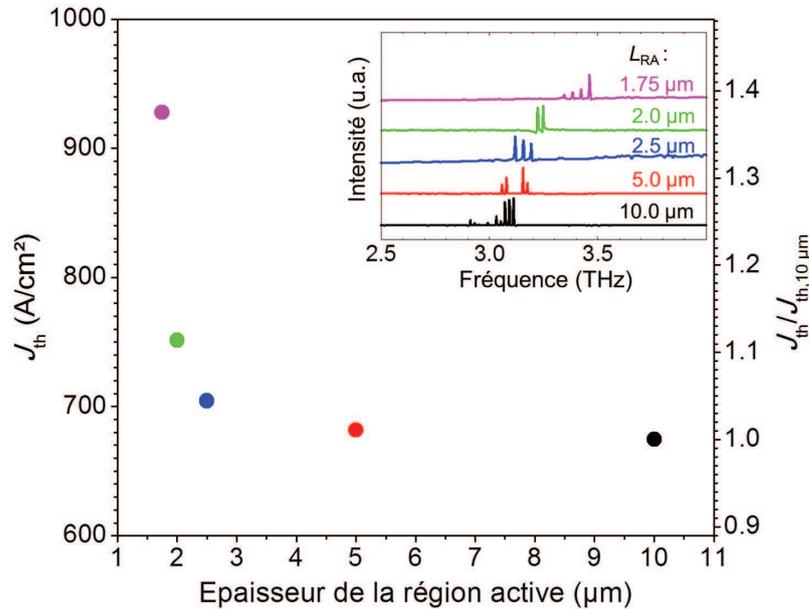


FIGURE 5.15 – Densité de courant de seuil (J_{th}) en fonction de l'épaisseur de la région active (L_{RA}) à basse température ($T = 10$ K). Encart : Spectres d'émission au seuil laser pour les cinq épaisseurs à $T = 10$ K.

La densité de courant de seuil, J_{th} , est relevée à basse température ($T = 10$ K) pour chacun des cinq épaisseurs. Les valeurs sont reportées dans la figure 5.15 en fonction de la valeur de L_{RA} . Lorsque l'épaisseur de la région active diminue, les pertes totales et donc la densité de courant de seuil augmentent. Cependant, il faut remarquer que les valeurs de J_{th} pour $L_{RA} = 10 \mu\text{m}$ et $L_{RA} = 5 \mu\text{m}$ sont très proches l'une de l'autre malgré une réduction d'un facteur deux de la valeur de L_{RA} : $J_{th,10\mu\text{m}} = 675 \text{ A}/\text{cm}^2$ et $J_{th,5\mu\text{m}} = 682 \text{ A}/\text{cm}^2$. Ce résultat est en parfait accord avec l'étude publiée précédemment par Y. Chassagneux dans l'article intitulé "*Low threshold THz QC lasers with thin core regions*" [117]. Puis, la valeur de J_{th} augmente de façon exponentielle pour les régions actives de plus en plus fines. Cette tendance rappelle celle suivie par les pertes totales calculées dans la section précédente (cf. Fig. 5.6 page 152) et reportées dans la table 5.1.

Les spectres d'émission au seuil laser de chaque dispositif, collectés en régime pulsé avec un cycle de travail de 1 %, sont reportés dans l'encart de la figure 5.15, pour $T = 10$ K. Le léger décalage vers les plus hautes fréquences lorsque L_{RA} diminue s'explique par l'augmentation de la valeur de J_{th} (effet Stark [93], cf. Fig. 5.12 page 159).

La figure 5.16 montre l'évolution de la densité de courant de seuil J_{th} en fonc-

tion de la température pour les cinq épaisseurs. A basse température, la valeur de J_{th} augmente rapidement lorsque L_{RA} diminue. Ce comportement est en bon accord avec le fait que les pertes optiques augmentent lorsque L_{RA} diminue. La température maximale d'opération diminue avec l'épaisseur de la région active car la plage dynamique du laser, définie comme $J_{max} - J_{th}$, diminue globalement. Il est important de remarquer que les cinq lasers opèrent au-dessus de la température de l'Azote liquide ($T = 77$ K).

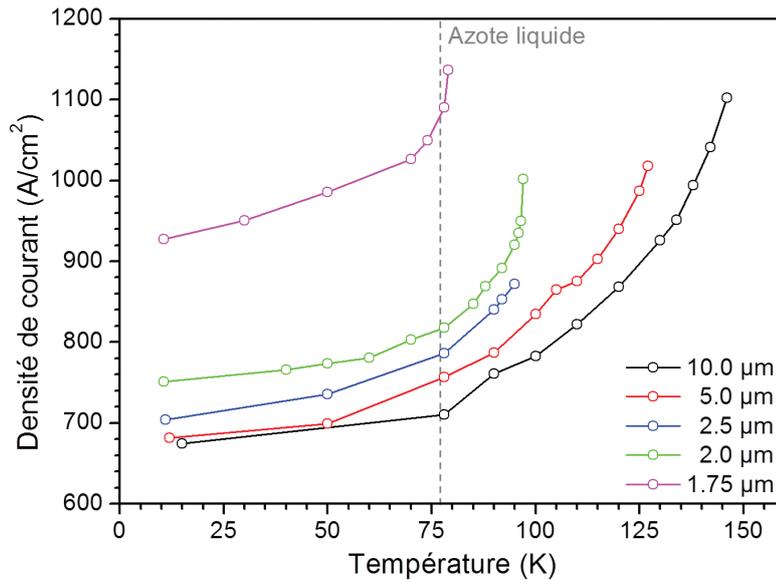


FIGURE 5.16 – Évolution de la densité de courant de seuil en fonction de la température pour les cinq épaisseurs.

5.3.3 Laser ultra-fin et validation du modèle

La table 5.2 résume les résultats de l'étude expérimentale de l'effet de la réduction de l'épaisseur de la région active sur les performances du QCL THz de type PR avec $\nu_0 = 3.1$ THz.

Le premier résultat important de cette étude est qu'il est possible de réduire la valeur de L_{RA} d'un facteur 7, tout en maintenant l'effet laser au-dessus de la température de l'Azote liquide. Le laser d'épaisseur $L_{RA} = 1.75$ µm offre un confinement extrêmement sub-longueur d'onde : $\lambda/L_{RA} \approx 50$, ou encore $\lambda_{eff}/L_{RA} \approx 13$, où λ_{eff} est la longueur d'onde effective dans le cœur du guide.

Le second résultat, tout aussi important, est que, comme le montre la table 5.3, tandis que les pertes totales augmentent d'un facteur 3, la densité de courant de seuil n'augmente que d'un facteur 1.4. Ce résultat est surprenant si l'on considère la

L_{RA} (μm)	J_{th} ($T = 10$ K)	ν (THz)	λ/L_{RA}	T_{max} (K)
10.0	674.8	3.10	9.7	153
5.0	682.0	3.12	19.2	127
2.5	704.0	3.15	38.1	97
2.0	751.3	3.28	45.7	95
1.75	927.6	3.45	49.7	79

TABLE 5.2 – Résultats de l'étude expérimentale de l'effet de la réduction de l'épaisseur de la région active sur les performances du QCL THz de type PR avec $\nu_0 = 3.1$ THz.

relation entre les pertes totales et la densité de courant de seuil usuelle, selon laquelle $J_{th}^{3QW,PR} \propto \alpha_{total}$.

L_{RA} (μm)	$S_\alpha = \alpha_{total}/\alpha_{total,10\mu\text{m}}$	$J_{th}/J_{th,10\mu\text{m}}$ ($T = 10$ K)
10.0	1.00	1.00
5.0	1.41	1.01
2.5	2.22	1.04
2.0	2.60	1.11
1.75	2.94	1.37

TABLE 5.3 – Comparaison entre l'évolution des pertes totales et celle de la densité de courant de seuil à $T = 10$ K en fonction de l'épaisseur de la région active L_{RA} .

Comme mentionné en préambule de ce chapitre, cette étude permet de tester la validité du modèle de transport à travers cette structure, exprimée par l'équation 5.2 :

$$J_{th}^{3QW,PR} \equiv J_{th}^{théor.} + J_{para}.$$

Selon cette hypothèse, seul le terme $J_{th}^{théor.}$ participe au transport radiatif. Afin de confronter ce modèle aux résultats expérimentaux, renommons ce terme J_{utile} . De la même façon, le terme $J_{th}^{3QW,PR}$ peut être renommé J_{th} . Il correspond à la densité de courant expérimentale qui traverse la structure au seuil laser. Enfin, renommons J_0 le terme J_{para} , qui correspond au courant de fuite à l'alignement radiatif. Avec ces nouvelles notations, l'équation 5.2 devient :

$$J_{utile} \equiv J_{th} - J_0. \quad (5.17)$$

La figure 5.17 montre les caractéristiques $E - J$ des cinq épaisseurs à basse température ($T = 10$ K). Les seuils laser correspondant à chaque dispositif sont rappelés par des flèches de couleur. Les courbes $E - J$ ont été obtenues à partir des caractéristiques $V - J$ de la figure 5.14 après avoir pris en compte l'épaisseur de la région active L_{RA} ,

la contribution du banc de mesure à la tension mesurée, ainsi que les différences physiques entre les échantillons :

- la résistance des câbles du cryostat, mesurée égale à 0.61Ω ,
- et la barrière de Schottky, pour les cas où la couche de contact supérieure est absente ($L_{RA} = 2.0$ et $1.75\ \mu\text{m}$), estimée à $0.15\ \text{V}$.

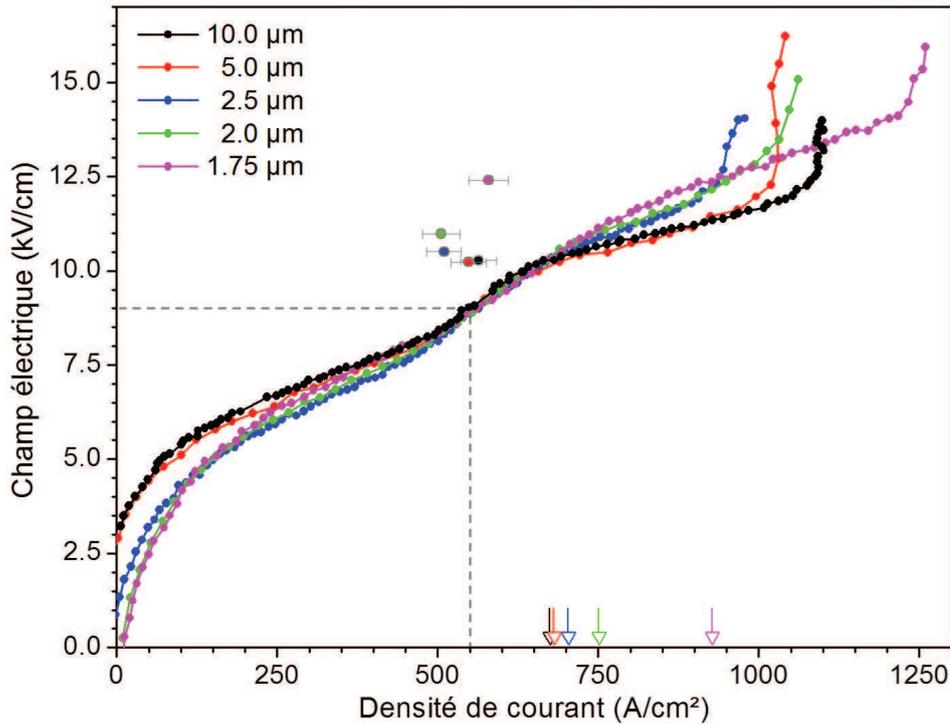


FIGURE 5.17 – Caractéristiques courant-champ électrique pour les cinq épaisseurs à $T = 10\ \text{K}$. Les flèches indiquent la valeur de J_{th} pour chaque dispositif. Les lignes en pointillé indiquent la position du point d'inflexion en (J_0, E_0) . Les symboles ronds cerclés de gris représentent la valeur de J_{para} estimée pour chaque dispositif.

Idéalement, après ces corrections, toutes les courbes de la figure 5.17 devraient se superposer, or ce n'est pas tout-à-fait le cas. Cependant, toutes les courbes se croisent en un point, qui se trouve être le point d'inflexion de chaque courbe. La position de ce point est indiquée par les lignes pointillées en $E_0 \approx 9\ \text{kV/cm}$ et $J_0 \approx 550\ \text{A/cm}^2$. Ce point est indiqué par les lignes en pointillé sur le graphe 5.17. Cette caractéristique commune démontre l'équivalence de la région active des cinq épaisseurs étudiées, et correspond en principe à la densité de courant maximale $J_0 \equiv J_{\text{para}}$ qui traverse la structure à l'alignement $E_0 \equiv E_{\text{para}} \approx 9\ \text{kV/cm}$. On peut toutefois remarquer qu'en amont et en aval du point d'inflexion, la résistance différentielle dépend de L_{RA} . Ce

comportement est très similaire à celui observé dans la caractéristique $V - J$ pour L_{RA} en fonction de la température de la figure 5.11.

Si l'on considère la valeur de J_0 indépendante de L_{RA} telle que $J_0 = 550 \text{ A/cm}^2$, alors on peut calculer $J_{\text{utile}} = J_{\text{th}} - J_0$ pour chaque valeur de J_{th} en fonction de la température. S'il est vrai que $J_{\text{utile}}(L_{RA}) \propto \alpha_{\text{total}}(L_{RA})$, ces deux paramètres doivent suivre la même tendance en fonction de (L_{RA}), au moins à basse température. Pour vérifier cette hypothèse, on définit le facteur de normalisation S tel que :

$$S(L_{RA}) = \frac{J_{\text{utile},10\text{K}}(L_{RA})}{J_{\text{utile},10\text{K}}(L_{RA} = 10\mu\text{m})}. \quad (5.18)$$

La figure 5.18 (a) permet de comparer le facteur de normalisation S au facteur S_α défini dans la table 5.3 tel que :

$$S_\alpha(L_{RA}) = \frac{\alpha_{\text{total}}(L_{RA})}{\alpha_{\text{total}}(L_{RA} = 10\mu\text{m})}. \quad (5.19)$$

Tandis que le résultat est excellent pour $L_{RA} = 10 \mu\text{m}$ et $L_{RA} = 1.75 \mu\text{m}$, la valeur de J_0 choisie ne permet pas d'obtenir de si bons résultats pour les valeurs intermédiaires. La figure 5.18 (b) montre l'évolution de la densité de courant de seuil "utile", $J_{\text{utile}} = J_{\text{th}} - J_0$, normalisée par le facteur S , en fonction de la température pour les cinq épaisseurs. Cette procédure permet cependant de superposer presque parfaitement toutes les courbes en température.

Si, au contraire, on considère que la valeur de J_0 peut varier en fonction de L_{RA} , on peut extraire la valeur expérimentale de α_{total} du graphe 5.18 (a) pour chaque dispositif pour estimer les valeurs de $J_0(L_{RA})$. Les valeurs de $J_0(L_{RA})$ obtenues par cette méthode sont représentées par les symboles ronds cerclés de gris dans le graphe 5.17. On observe dans ce cas que, lorsque L_{RA} diminue, la densité de courant de fuite passe par un minimum pour $L_{RA} = 2.0 \mu\text{m}$. Les valeurs obtenues sont comprises entre $J = 500 \text{ A/cm}^2$ et $J = 570 \text{ A/cm}^2$. L'hypothèse sur laquelle le modèle de transport est fondée, à savoir que $J_{\text{para}} \equiv J_0$ est constant, est correcte avec une marge d'erreur de $\pm 10\%$.

En conclusion, cette analyse suggère que, bien que la densité de courant de fuite $J_{\text{para}} \equiv J_0$ ne soit pas strictement constante sur toute la gamme dynamique du laser, l'erreur commise est marginale et est justifiée par la simplicité du modèle proposé.

5.4 Perspectives d'amélioration des performances des QCLs THz

Les résultats de l'étude expérimentale présentée dans ce chapitre mettent en évidence l'existence d'un ou plusieurs canaux de fuite pour les électrons qui traversent

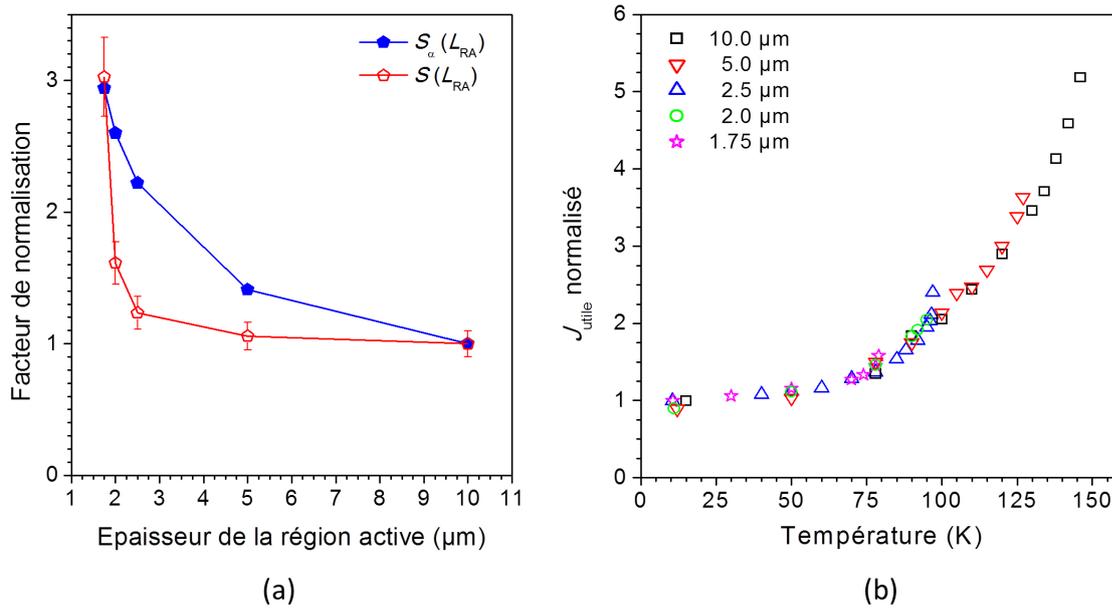


FIGURE 5.18 – (a) Comparaison entre les facteurs de normalisation S et S_α , défini par les équations 5.18 et 5.19 respectivement. (b) Évolution de la densité de courant de seuil "utile", $J_{\text{utile}} = J_{\text{th}} - J_0$, normalisée par rapport à la valeur de J_{utile} à basse température, $J_{\text{utile},10\text{K}} = J_{\text{th},10\text{K}} - J_0$, en fonction de la température pour les cinq épaisseurs.

la région active d'un QCL THz de type phonon-résonant. Bien qu'il soit très difficile d'identifier la nature des mécanismes de transport quantique impliqués dans ce processus indésirable, le succès des QCLs en tant que source de rayonnement laser dans le "gap THz" est encore à ce jour limité par ce verrou fondamental.

En effet, la suppression de ces canaux de transport non radiatifs entraînerait une valeur de la densité de courant de seuil beaucoup plus faible, la plage dynamique du laser augmenterait d'autant et donc la température maximale d'opération serait améliorée. De plus, le rendement quantique, la puissance de sortie et donc l'efficacité de conversion de la puissance électrique en puissance optique, qui sont les paramètres clés d'un système laser, seraient grandement améliorés.

5.4.1 Systèmes de matériaux et masse effective

Pour atteindre ces objectifs, les voies actuellement explorées sont la recherche de nouveaux types région active, et le développement de nouveaux systèmes de matériaux.

De nombreux types de région active ont déjà été proposées [158]. Cependant, aucune de ces tentatives n'a pour l'instant permis d'atteindre une amélioration par rapport à l'état de l'art des QCLs THz de type PR. Par exemple, la diagonalisation de

la transition radiative dans les QCLs PR a permis dans un premier temps de réduire la valeur de la densité de courant de seuil et d'obtenir une nette amélioration de la température maximale de fonctionnement [84]. Cependant, une étude a montré que pour une plus grande diagonalisation, les performances en température ainsi que la stabilité électronique du système sont dégradées [46]. Ces résultats démontrent qu'il est possible de diminuer légèrement la valeur de l'élément de matrice dipolaire z_{ul} . Des schémas à deux puits quantiques ont alors été proposés, où le niveau bas de la transition radiative est confondu avec le niveau haut du puits où le phonon LO est émis [83]. Ce schéma présente l'avantage de supprimer l'alignement parasite au champ E_{para} . La valeur de la densité de courant de seuil dans ces structures est effectivement très faible. Cependant, la plage dynamique est très faible et les performances en température sont décevantes, ce qui peut s'expliquer par le fait que la période élémentaire est très courte.

En parallèle de ces efforts, il y a un grand intérêt à développer de nouveaux systèmes de matériaux. En effet, le choix du système de matériaux est fondamental au point de vue des performances des QCLs car il détermine les bandes d'énergie interdites (E_G) ainsi que la discontinuité de bande de conduction (E_{DBC}). La valeur de l'énergie E_G influence directement la valeur de la masse effective de l'électron. La valeur de E_{DBC} influence quant à elle la probabilité pour l'électron de transiter *via* des canaux non radiatifs, et de ce fait, le temps de vie de l'électron sur le niveau haut de la transition laser.

Les trois principaux systèmes de matériaux utilisés pour les QCLs THz sont :

- GaAs/Al_xGa_{1-x}As [59, 60]
- In_{.53}Ga_{.47}As/In_{.52}Al_{.48}As [59, 60, 105]
- In_{.53}Ga_{.47}As/GaAs_{.51}Sb_{.49} [59, 30]

Ces couples de semiconducteurs sont accordés en maille, et à gap direct. L'importance de ce dernier point est discuté dans la référence [9]. Les paramètres électroniques de ces trois systèmes de matériaux sont reportés dans la table 5.4 : la bande interdite E_G , la masse effective m^* , ainsi que l'énergie de discontinuité de bande de conduction E_{DBC} .

En utilisant le fait que les états propres forment une base complète :

$$\sum_n |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n| = 1 \quad (5.20)$$

ainsi que la relation $[z, p_z] = j\hbar$, la règle suivie par la force d'oscillateur s'écrit :

$$\sum_n f_{nl} = 1 \quad (5.21)$$

où la force d'oscillateur entre deux états f et i est définie par l'équation :

$$f_{fi} = \frac{2m^*}{\hbar^2} z_{fi}^2 (E_f - E_i) \quad (5.22)$$

puits/barrière	$E_{G,p}/E_{G,b}$ (eV)	m_p^*/m_b^*	E_{DBC} (meV)
GaAs/Al _{0.15} Ga _{0.85} As	1.42/1.61	$0.067m_0/0.075m_0$	134
In _{0.53} Ga _{0.47} As/In _{0.52} Al _{0.48} As	0.74/1.47	$0.041m_0/0.075m_0$	520
In _{0.53} Ga _{0.47} As/GaAs _{0.51} Sb _{0.49}	0.74/0.81	$0.041m_0/0.045m_0$	360

TABLE 5.4 – Paramètres électroniques des principaux systèmes de matériaux III-V utilisés pour les QCLs THz. $E_{G,p}$ (resp. $E_{G,b}$) représente l'énergie de la bande interdite du matériau constituant les puits (resp. les barrières), m_p^* (resp. m_b^*) représente la masse effective de l'électron dans le matériau constituant les puits (resp. les barrières), et E_{DBC} est l'énergie de discontinuité de bande de conduction.

D'après la théorie $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ à deux bandes de Kane, l'inverse de la masse effective peut s'écrire comme la somme de la masse de l'électron libre et d'un terme qui dépend des éléments de matrices dipolaires et de la différence d'énergie entre la bande de valence et la bande de conduction E_G [72]. Ces deux critères, z_{fi} et E_G , sont très importants au point de vue des performances des QCLs, et peuvent être influencés par le choix du système de matériaux.

La valeur des éléments de matrice dipolaires z_{if} ne varie pas beaucoup d'un système de matériaux à un autre [116]. En revanche, l'énergie de bande interdite E_G peut prendre des valeurs très différentes d'un semiconducteur à l'autre [59].

Si l'on ne tient compte que de la bande de conduction et de la bande de valence, on peut considérer en bonne approximation que l'inverse de la masse effective est proportionnelle à l'inverse de l'énergie de gap du semiconducteur :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} \left(1 + \frac{E_P}{E_G} \right) \quad (5.23)$$

où E_P est l'énergie de Kane ($E_P \sim 20$ eV pour la plupart des semiconducteurs [165]).

Autrement dit, les semiconducteurs à petit gap fournissent des masses effectives plus faibles, et en conséquence, des forces d'oscillateur plus importantes que les semiconducteurs à grand gap. Cette règle est généralement vérifiée en pratique [10].

La relation entre la force d'oscillateur et la masse effective n'est pas explicite lorsque la force d'oscillateur normalisée est utilisée $f'_{\tilde{h}} = f_{\tilde{h}} m_0 / m^*$ à la place de la définition 5.22. Dans ce cas, la règle de somme pour la force d'oscillateur normalisée s'écrit : $\sum_n f'_{nl} = m_0 / m^*$. Tant que l'on reste dans un système de matériaux donné, on peut utiliser la force d'oscillateur normalisée $f'_{\tilde{h}}$. Cependant si l'on souhaite comparer différents systèmes de matériaux entre eux, il faut utiliser la définition 5.22.

Il est commode de récrire la force d'oscillateur dans un matériau donné sous la forme :

$$f_{fi} = C_{\text{mat.}} E_{fi} [\text{eV}] (z_{fi} [\text{\AA}])^2 \quad (5.24)$$

où $C_{\text{mat.}}$ est une constante qui dépend de la masse effective de l'électron dans le matériau qui compose les puits. Par exemple pour le GaAs, $C_{\text{mat.}} \approx 0.0176$, et pour l' $\text{In}_{.53}\text{Ga}_{.47}\text{As}$, $C_{\text{mat.}} \approx 0.0115$.

5.4.2 Performances en température

Lorsqu'un champ électrique \vec{E} est appliqué à la structure de cascade quantique, l'électron a une probabilité finie de transiter par effet tunnel par auto-ionisation vers le continuum. En conséquence, tous les états sont en résonance avec le continuum, et ces résonances sont caractérisées par un temps de vie fini $\tau_{\text{act.}}$.

Ce phénomène non radiatif agit comme un canal de fuite pour les électrons, et est d'autant plus efficace que l'énergie du niveau est proche de l'énergie de DBC. Dans un QCL, l'état haut de la transition radiative est en particulier affecté, et le temps de vie total sur ce niveau τ_3 est réduit (cf Eq.4.87). Si le canal de fuite est efficace, cela risque de réduire le temps de vie total sur le niveau haut au-dessous de la limite du temps de diffusion par phonon LO. Il est donc très important de pouvoir contrôler ce canal de fuite afin de garantir l'inversion de population.

Ce phénomène peut se produire soit directement depuis le niveau haut, soit indirectement par couplage avec des états intermédiaires plus loin dans la structure. Le couplage avec des états intermédiaires peut être évité pendant la modélisation de la structure en plaçant une bande d'énergie interdite centrée autour de l'énergie du niveau haut, créant un miroir de Bragg pour les électrons, limitant leur fuite vers le continuum [123, 1]. Cette astuce est très efficace. Cependant, si la température augmente, les électrons peuvent acquérir une énergie supérieure au haut de la bande d'énergie interdite ($E_{\text{act.}}$), résultant en une augmentation de $\tau_{\text{act.}}$.

En pratique, le miroir de Bragg est conçu en ajoutant quelques puits supplémentaires après la région active. Cette astuce ne convient pas à une structure de type PR à trois puits quantiques, dont l'un des intérêts principaux provient du fait que la longueur d'une période L_p est réduite à sa valeur minimale. Pour les QCLs PR, une solution consisterait à augmenter l'épaisseur de la barrière d'extraction, mais dans ce cas le temps de vie sur le niveau bas augmenterait également, annulant l'effet désiré sur l'inversion de population.

En revanche, il est possible de diminuer la fuite des électrons du niveau haut vers le continuum en augmentant la hauteur de la barrière de potentiel E_{DBC} . Ce phénomène augmente exponentiellement avec la température et peut être exprimé grossièrement sous cette forme :

$$[\tau_{\text{act.}}]^{-1} \approx [\tau_{\text{cont.}}]^{-1} e^{-\frac{E_{\text{act.}}}{k_B T}} \quad (5.25)$$

où $[\tau_{\text{cont.}}]^{-1}$ est le taux de fuite vers le continuum, et $E_{\text{act.}}$ est l'énergie d'activation..

L'énergie $E_{\text{act.}}$ représente la position relative du niveau haut de la transition laser par rapport au haut de la barrière de potentiel qui permettrait de garantir un temps de vie sur le niveau haut suffisamment long pour remplir la condition d'inversion de population à température ambiante.

Le système GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ est le plus utilisé pour les QCLs THz, principalement pour les raisons suivantes :

- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ possède un paramètre de maille très proche de celui du GaAs (5.65 Å), quelle que soit la valeur de x ,
- le pourcentage d'Aluminium dans la barrière, x , permet d'ajuster la hauteur de la barrière de potentiel E_{DBC} ainsi que la valeur de la masse effective de l'électron dans la barrière $m_{\text{barrière}}^*$.

La table 5.5 résume les valeurs de $m_{\text{barrière}}^*$ et E_{DBC} pour différentes valeurs de x .

x	$m_{\text{barrière}}^*$	E_{DBC} (meV)
0.10	0.073	89
0.15	0.075	134
0.20	0.078	179
0.25	0.082	224
0.30	0.084	268
0.33	0.086	295
0.36	0.088	322

TABLE 5.5 – Paramètres électroniques du système GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ en fonction du pourcentage d'Aluminium (x).

Une comparaison entre les systèmes de matériaux GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ avec $x = 0.33$ et $x = 0.45$, pour des QCLs de régions actives similaires, indique que la densité de courant de seuil augmente plus rapidement avec la température dans le cas où $x = 0.33$ [108]. Cette étude confirme expérimentalement la tendance exprimée par l'équation 5.25.

Selon le critère donné par l'équation 5.25, le système de matériaux GaAs/ $\text{Al}_{0.10}\text{Ga}_{0.90}\text{As}$ semble ne pas être un bon candidat pour une opération à haute température, car $E_{\text{DBC}} - E_u < E_{\text{act.}}$ (300K). En effet, pour garantir $\tau_3 > \tau_2$ à température ambiante dans un QCL PR, l'énergie d'activation vaut $E_{\text{act.}} = 83$ meV (calcul à partir de l'équation 5.25 avec $\tau_{\text{act.}} = 10\tau_2$ avec $\tau_2 = \tau_{\text{LO}} \approx 0.25$ ps à $T = 300$ K).

De ce point de vue, une plus grande valeur de x paraît souhaitable car elle implique une plus grande valeur de E_{DBC} , et donc en principe, de meilleures performances en température.

Cependant, elle implique également une plus grande valeur de $m_{\text{barrière}}^*$. Cela n'est pas souhaitable, car le temps de vie dans le niveau haut de la transition laser est

inversement proportionnel au carré de m^* [73].

De plus, la croissance par MBE de structures GaAs/Al_xGa_{1-x}As avec une grande valeur de x est difficile. En effet, la longueur de diffusion d'un atome d'Al sur une surface de GaAs est d'une ordre de grandeur plus faible par rapport à celle d'un atome de Ga, et est encore plus faible sur une surface contenant de l'Al. Cela a pour effet d'augmenter la rugosité de surface d'une part, et de créer des zones où la concentration d'atomes d'Al diminue d'autre part. Dans les régions où x est plus faible, la hauteur des barrières est plus faible, ouvrant des canaux de fuite pour les électrons et élargissant l'énergie moyenne des niveaux [67].

5.4.3 Conclusion

Bien que le système GaAs/Al_xGa_{1-x}As soit très pratique pour les degrés de liberté qu'il apporte lors de la conception de la régions active des QCLs, et bien que cette technologie soit désormais mature pour la fabrication des QCLs THz, les problèmes liés à la présence d'Aluminium dans la région active ne peuvent être évités, et il apparaît préférable à long terme d'abandonner ce système pour un système de matériaux sans Aluminium, tel que In_{0.53}Ga_{0.47}As/GaAs_{0.51}Sb_{0.49} [30]. La maîtrise de la croissance de structures dans ce système en est encore à ses débuts, cependant un tel système présente les avantages souhaités pour les hautes performances des QCLs THz : de faibles masses effectives à la fois dans les puits et dans les barrières, une grande valeur d'énergie de discontinuité de bande de conduction, ainsi qu'une valeur de l'énergie de diffusion par phonon LO (34 meV) comparable à celle du GaAs (36 meV). Les premiers résultats expérimentaux démontrés par Deutsch *et al.* dans l'article [31] sont très encourageants.

Conclusion générale et Perspectives

Conclusion générale et Perspectives

Dans la première partie de ce manuscrit, j'ai présenté des résonateurs THz hybrides extrêmement sub-longueur d'onde dans les trois dimensions de l'espace et démontré leurs fonctionnalités par analogie avec des résonateurs LC . Ces résonateurs présentent un facteur de qualité $Q \approx 7 - 10$ qui peut en principe être amélioré en adaptant l'impédance complexe de la partie inductive. Ce travail est actuellement poursuivi au sein du groupe. Ces dispositifs, dont l'épaisseur est comprise entre $L_z = 1$ et $3 \mu\text{m}$, ont permis d'atteindre un volume effectif record $V_{\text{eff}} = L_x L_y L_z / \lambda_{\text{eff}}^3 = 5 \cdot 10^{-6}$ [140]. Une application aux polaritons inter-sous-bandes térahertz a permis d'obtenir des résultats à l'état de l'art, démontrant d'une part que ces résonateurs hybrides conservent leurs "propriétés photoniques", et d'autre part qu'ils permettent un couplage fort lumière-matière [139].

Dans la seconde partie, j'ai montré qu'il est possible de concevoir un laser THz avec une région active extrêmement fine. La réduction des dimensions de la région active dans la direction de croissance est la modification la plus critique du processus de miniaturisation. En effet, l'épaisseur L_z est directement proportionnelle au nombre de répétitions de la période élémentaire N_p et donc en principe au nombre de photons émis par électron injecté. De plus, la réduction de L_z induit une forte augmentation des pertes optiques dans le guide et donc de la densité de courant de seuil du laser. Le résonateur utilisé est un guide d'onde Fabry-Pérot dans une configuration métal - région active - métal. La région active choisie est une période à trois puits quantiques de type phonon-résonant opérant à la longueur d'onde nominale $\nu_0 = 3.1 \text{ THz}$ [19]. Cette étude a permis d'observer le régime laser dans des dispositifs d'épaisseur $L_z = 1.75 \mu\text{m}$, ce qui correspond à un confinement record $\approx \lambda_{\text{eff}}/13$, jusqu'à la température maximale de fonctionnement $T = 79 \text{ K}$.

Le guide d'onde Fabry-Pérot d'épaisseur $L_z = 1.75 \mu\text{m}$ présente un facteur de qualité $Q \approx 45 - 50$. Il est donc permis d'espérer que la même région active permette d'observer le régime laser dans un résonateur hybride d'épaisseur $L_z = 1 - 3 \mu\text{m}$, au moins aux températures cryogéniques. Le principal obstacle à la réalisation d'un tel dispositif est que la région active d'un QCL THz doit être soumise à une différence de potentiel afin d'atteindre l'alignement radiatif. Or, dans toutes les classes de résonateurs hybrides présentées dans la partie I, l'oscillation d'énergie est assurée par un

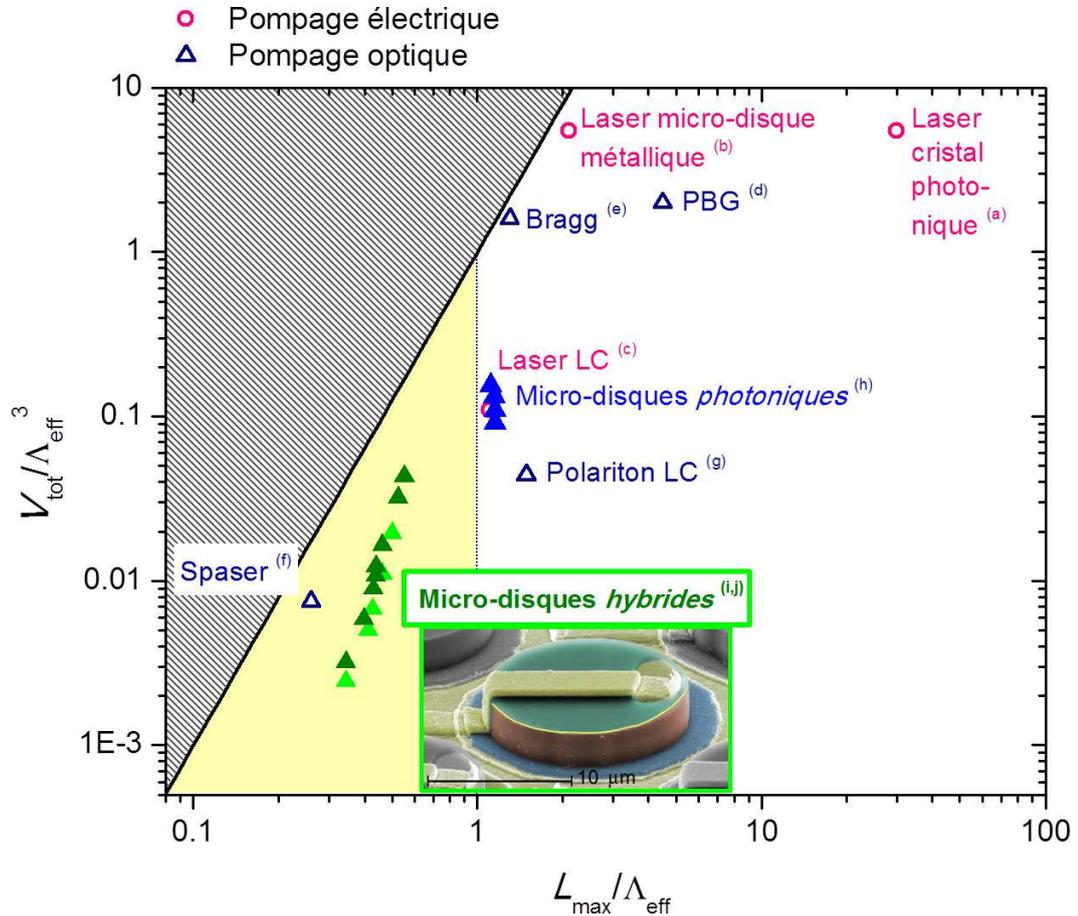


FIGURE 5.19 – Classement des dispositifs lasers qui présentent de très faibles volumes effectifs, en comparant leur volume total $V_{\text{tot}} = L_x L_y L_z$ ainsi que la plus grande dimension L_{max} à la limite de diffraction $\Lambda_{\text{eff}} = \lambda_0 / 2n_{\text{eff}}$ (légende (a-h) : résonateurs THz issus de la littérature cf. Fig. 1.2 page 6 et 5.19). Les dispositifs fonctionnant sur un régime purement photonique apparaissent dans la zone blanche. Les triangles pleins vert (i,j) correspondent à la résonance d'ordre fondamental des micro-cavités hybrides développée au cours de ma thèse, démontrant qu'ils appartiennent à la classe des résonateurs électroniques : (i, vert clair) le semiconducteur de cœur est du GaAs massif (cf. section 3.2), (j, vert foncé) le GaAs massif est remplacé par une hétérostructure III-V (cf. section 3.3).

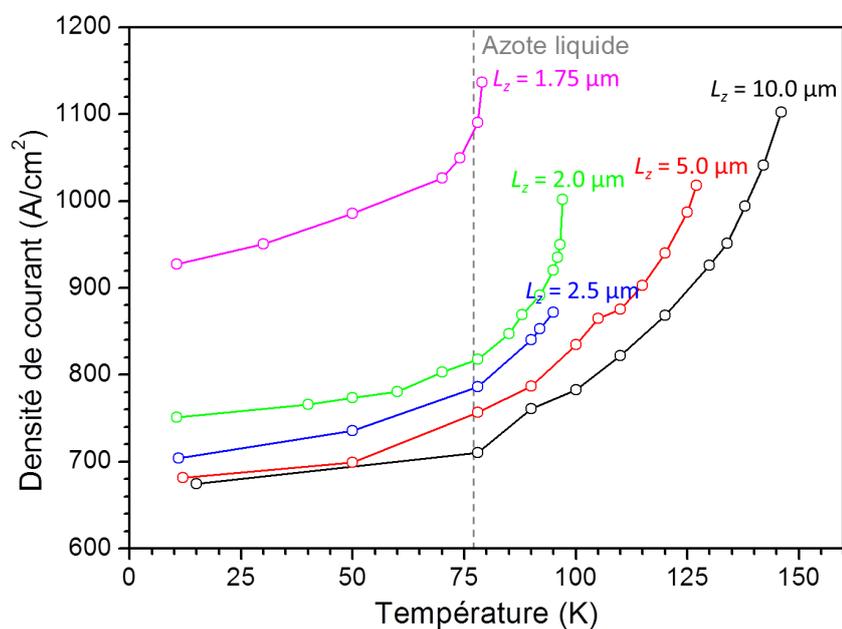


FIGURE 5.20 – Évolution de la densité de courant de seuil en fonction de la température dans les QCLs THz d'épaisseur $L_z = 1.75, 2.0, 2.5, 5.0$ et $10.0 \mu\text{m}$.

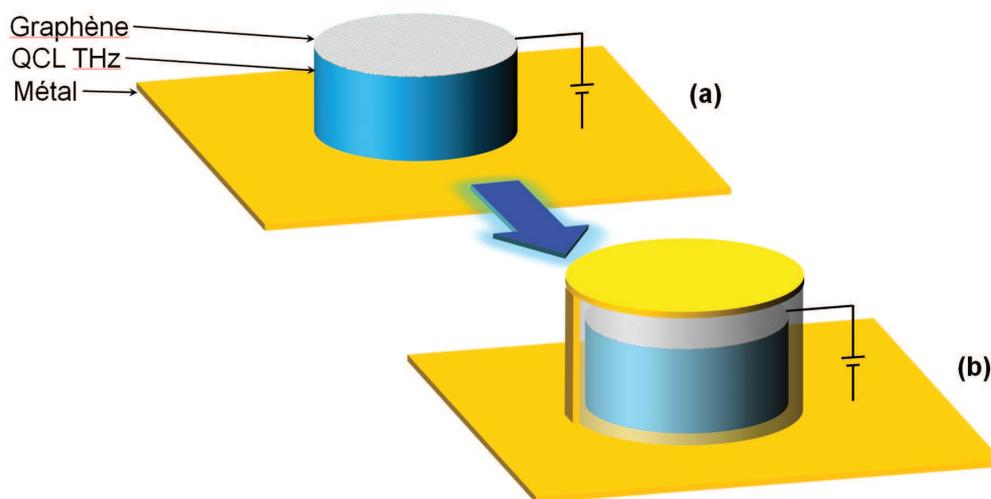


FIGURE 5.21 – Vers un laser THz libéré de la limite de diffraction dans les trois dimensions de l'espace. (a) Micro-disque métal - région active - graphène. (b) Micro-disque encapsulé dans une coquille diélectrique isolante (SiO_2) puis inséré dans un micro-disque hybride.

courant oscillant entre le contact métallique supérieur et le contact métallique inférieur. Ce courant est supporté par un ruban métallique qui connecte électriquement les deux contacts. On ne peut donc pas insérer directement la région active d'un QCL THz à la place du GaAs massif, car ce ruban métallique agirait comme un court-circuit.

Il n'est cependant pas impossible d'imaginer une configuration qui permettrait d'utiliser ces résonateurs hybrides tout en appliquant une différence de potentiel de part et d'autre de la région active. Afin d'y parvenir, il faudra d'abord résoudre le problème de l'application de la différence de potentiel aux bornes de la région active du laser à cascade quantique. Ce point représente un défi conceptuel qui pourrait être résolu par une approche telle que celle schématisée par la figure 5.21. Dans la configuration proposée, un micro-disque métal - région active - graphène est d'abord fabriqué (a), puis encapsulé dans un diélectrique isolant au point de vue électrique, par exemple une couche mince de SiO_2 déposée de façon conforme. Le graphène peut être utilisé comme une électrode transparente dans la gamme des fréquences THz [75] et la polarisation de la région active pourrait être alors obtenue en déportant le contact électrique loin du résonateur. Un tel dispositif inséré dans un micro-disque hybride métal - région active - métal (b) dont le mode fondamental est en résonance avec la fréquence nominale de la région active, permettrait de réaliser le premier laser THz sub-longueur d'onde dans les trois dimensions de l'espace.

Les perspectives de ce travail de thèse sont nombreuses : elles s'étendent de l'électrodynamique quantique en cavité au nanolaser. Les applications potentielles varient énormément en fonction de la configuration des résonateurs hybrides. Ils peuvent être utilisés comme des éléments passifs pour la détection, ou encore comme des éléments actifs tels que des antennes. Enfin, l'utilisation d'une région active fine en combinaison avec un résonateur hybride optimisé devrait permettre d'obtenir un laser térahertz ultra-compact libéré de la limite de diffraction, tout en introduisant pour la première fois la possibilité d'accorder la fréquence du laser en adaptant l'impédance équivalente de la combinaison d'éléments *LC*.

Bibliographie

Bibliographie

- [1] AJILI (L.), SCALARI (G.), FAIST (J.), BEERE (H.), LINFIELD (E.), RITCHIE (D.) et DAVIES (G.) « High power quantum cascade lasers operating at $\lambda = 87$ and $130 \mu\text{m}$ ». In : *Applied Physics Letters* vol. 85.n° 18 (2004), p. 3986–3988 (cf. p. 172).
- [2] ARMAROLI (A.), MORAND (A.), BENECH (P.), BELLANCA (G.) et TRILLO (S.) « Three-dimensional analysis of cylindrical microresonators based on the aperiodic Fourier modal method ». In : *J. Opt. Soc. Am. A* vol. 25.n° 3 (2008), p. 667–675 (cf. p. 44).
- [3] ASHCROFT (N.) *Solid state physics*. New York : Holt, Rinehart et Winston, 1976 (cf. p. 110).
- [4] BABA (T.) et SANO (D.) « Low-threshold lasing and Purcell effect in microdisk lasers at room temperature ». In : *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of* vol. 9.n° 5 (2003), p. 1340–1346 (cf. p. vii, 4).
- [5] BAENA (J. D.), MARQUÉS (R.), MEDINA (F.) et MARTEL (J.) « Artificial magnetic metamaterial design by using spiral resonators ». In : *Phys. Rev. B* vol. 69 (1 jan. 2004), p. 014402 (cf. p. 7).
- [6] BALANIS (C. A.) *Antenna Theory : Analysis and Design, 3rd Edition*. Wiley-Interscience, 2005 (cf. p. 80, 86, 87).
- [7] BASTARD (G.) *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*. Wiley-Interscience, 1991 (cf. p. 115, 118).
- [8] BEERE (H.), FOWLER (J.), ALTON (J.), LINFIELD (E.), RITCHIE (D.), KÖHLER (R.), TREDICUCCI (A.), SCALARI (G.), AJILI (L.), J. () et BARBIERI (S.) « MBE growth of terahertz quantum cascade lasers ». In : *Journal of Crystal Growth* vol. 278.n° 1–4 (2005). <ce :title>13th International Conference on Molecular Beam Epitaxy</ce :title>, p. 756–764 (cf. p. 141).

- [9] BENVENISTE (E.), VASANELLI (A.), DELTEIL (A.), DEVENSON (J.), TEISSIER (R.), BARANOV (A.), ANDREWS (A. M.), STRASSER (G.), SAGNES (I.) et SIRTORI (C.) « Influence of the material parameters on quantum cascade devices ». In : *Applied Physics Letters* vol. 93.n° 13, 131108 (2008), p. 131108 (cf. p. 170).
- [10] BLATT (F. J.) *Modern Physics*. McGraw-Hill College, 1992 (cf. p. 171).
- [11] BONNO (O.), THOBEL (J.-L.) et DESSENNE (F.) « Modeling of electron–electron scattering in Monte Carlo simulation of quantum cascade lasers ». In : *Journal of Applied Physics* vol. 97.n° 4, 043702 (2005), p. 043702 (cf. p. 160, 161).
- [12] BORENSTAIN (S.) et KATZ (J.) « Intersubband Auger recombination and population inversion in quantum-well subbands ». In : *Phys. Rev. B* vol. 39 (15 mai 1989), p. 10852–10857 (cf. p. 125).
- [13] BRORSON (S.), YOKOYAMA (H.) et IPPEN (E.) « Spontaneous emission rate alteration in optical waveguide structures ». In : *Quantum Electronics, IEEE Journal of* vol. 26.n° 9 (sept. 1990), p. 1492–1499 (cf. p. 121).
- [14] BUENO (M. A.) et ASSIS (A. K. T.) « A new method for inductance calculations ». In : *Journal of Physics D : Applied Physics* vol. 28.n° 9 (1995), p. 1802 (cf. p. 86, 87).
- [15] CALLEBAUT (H.) et HU (Q.) « Importance of coherence for electron transport in terahertz quantum cascade lasers ». In : *Journal of Applied Physics* vol. 98.n° 10, 104505 (2005), p. 104505 (cf. p. 160, 161).
- [16] CAMPMAN (K. L.), SCHMIDT (H.), IMAMOGLU (A.) et GOSSARD (A. C.) « Interface roughness and alloy-disorder scattering contributions to intersubband transition linewidths ». In : *Applied Physics Letters* vol. 69.n° 17 (1996), p. 2554–2556 (cf. p. 100).
- [17] CAPASSO (F.), MOHAMMED (K.) et CHO (A.) « Resonant tunneling through double barriers, perpendicular quantum transport phenomena in superlattices, and their device applications ». In : *Quantum Electronics, IEEE ...* (1986) (cf. p. xxii).
- [18] CHASSAGNEUX (Y.), PALOMO (J.), COLOMBELLI (R.), DHILLON (S.), SIRTORI (C.), BEERE (H.), ALTON (J.) et RITCHIE (D.) « Terahertz microcavity lasers with subwavelength mode volumes and thresholds in the milliamperage range ». In : *Applied Physics Letters* vol. 90.n° 9, 091113 (2007), p. 091113 (cf. p. vii, 4–6).
- [19] CHASSAGNEUX (Y.), WANG (Q.), KHANNA (S.), STRUPIECHONSKI (E.), COUDEVYLLE (J.), LINFIELD (E.), DAVIES (A.), NULL (), BELKIN (M.) et COLOMBELLI (R.) « Limiting Factors to the Temperature Performance of THz Quantum Cascade Lasers Based on the Resonant-Phonon Depopulation Scheme ». In : *Terahertz*

- Science and Technology, IEEE Transactions on* vol. 2.n° 1 (2012), p. 83–92 (cf. p. viii, 5, 148, 161, 162, 177).
- [20] CHASSAGNEUX (Y.) « Photonique pour les lasers à cascade quantique térahertz ». Thesis. Université Paris-Sud, Institut d'Electronique Fondamentale, 2009 (cf. p. 102, 124, 131).
- [21] CHEN (H.-T.), PADILLA (W. J.), ZIDE (J. M.), GOSSARD (A. C.), TAYLOR (A. J.) et AVERITT (R. D.) « Active terahertz metamaterial devices ». In : *Nature* vol. 444.n° 7119 (2006), p. 597–600 (cf. p. 8).
- [22] COHEN-TANNOUJJI (C.) *Mécanique quantique, tome 1*. Hermann, 1997 (cf. p. 129).
- [23] COHEN-TANNOUJJI (C.) *Mécanique quantique, tome 2*. Hermann, 1997 (cf. p. 113, 129).
- [24] COLOMBELLI (R.), CAPASSO (F.), GMACHL (C.), HUTCHINSON (A. L.), SIVCO (D. L.), TREDICUCCI (A.), WANKE (M. C.), SERGENT (A. M.) et CHO (A. Y.) « Far-infrared surface-plasmon quantum-cascade lasers at 21.5 μm and 24 μm wavelengths ». In : *Applied Physics Letters* vol. 78.n° 18 (2001), p. 2620–2622 (cf. p. xxiii).
- [25] COSTANTINI (D.), BOUSSEKSOU (A.), FEVRIER (M.), DAGENS (B.) et COLOMBELLI (R.) « Loss and Gain Measurements of Tensile-Strained Quantum Well Diode Lasers for Plasmonic Devices at Telecom Wavelengths ». In : *Quantum Electronics, IEEE Journal of* vol. 48.n° 1 (2012), p. 73–78 (cf. p. 138).
- [26] CROWE (T.), BISHOP (W.), PORTERFIELD (D.), HESLER (J.) et WEIKLE R.M. (I.) « Opening the terahertz window with integrated diode circuits ». In : *Solid-State Circuits, IEEE Journal of* vol. 40.n° 10 (oct. 2005), p. 2104–2110 (cf. p. xx).
- [27] DAVIES (J.) *The physics of low-dimensional semiconductors : an introduction*. Cambridge, U.K. New York, NY, USA : Cambridge University Press, 1998 (cf. p. 111, 112, 115).
- [28] DEGIRON (A.), MOCK (J. J.) et SMITH (D. R.) « Modulating and tuning the response of metamaterials at the unit cell level ». In : *Opt. Express* vol. 15.n° 3 (fév. 2007), p. 1115–1127 (cf. p. 63).
- [29] *Density Functional based Tight Binding (DFTB) method*. URL : www.dftb.org/home/ (cf. p. 112).
- [30] DETZ (H.), ANDREWS (A. M.), NOBILE (M.), KLANG (P.), MUJAGIĆ (E.), HESSER (G.), SCHRENK (W.), SCHÄFFLER (F.) et STRASSER (G.) « Intersubband optoelectronics in the InGaAs/GaAsSb material system ». In : t. 28. 3. AVS, 2010, C3G19–C3G23 (cf. p. 170, 174).

- [31] DEUTSCH (C.), KRALL (M.), BRANDSTETTER (M.), DETZ (H.), ANDREWS (A. M.), KLANG (P.), SCHRENK (W.), STRASSER (G.) et UNTERRAINER (K.) « High performance InGaAs/GaAsSb terahertz quantum cascade lasers operating up to 142 K ». In : *Applied Physics Letters* vol. 101.n° 21, 211117 (2012), p. 211117 (cf. p. 174).
- [32] DEVEAUD (B.), QUATTROPANI (A.), SCHWENDIMANN (P.) et FISICA (S.) italiana di. *Quantum Coherence in Solid State Systems : Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi"*. Ios PressInc, 2009 (cf. p. 71).
- [33] DEVENSON (J.), CATHABARD (O.), TEISSIER (R.) et BARANOV (A. N.) « InAs/AlSb quantum cascade lasers emitting at 2.75–2.97 μm ». In : *Applied Physics Letters* vol. 91.n° 25, 251102 (2007), p. 251102 (cf. p. xxiii).
- [34] DONOVAN (K.), HARRISON (P.) et KELSALL (R. W.) « Self-consistent solutions to the intersubband rate equations in quantum cascade lasers : Analysis of a GaAs/Al_xGa_{1-x}As device ». In : *Journal of Applied Physics* vol. 89.n° 6 (2001), p. 3084–3090 (cf. p. 128).
- [35] DUFOULEUR (J.), COLOMBO (C.), GARMA (T.), KETTERER (B.), UCCELLI (E.), NICOTRA (M.) et FONTCUBERTA I MORRAL (A.) « P-Doping Mechanisms in Catalyst-Free Gallium Arsenide Nanowires ». In : *Nano Letters* vol. 10.n° 5 (2010), p. 1734–1740 (cf. p. 120).
- [36] DUPONT (E.), FATHOLOLOUMI (S.) et LIU (H. C.) « Simplified density-matrix model applied to three-well terahertz quantum cascade lasers ». In : *Phys. Rev. B* vol. 81 (20 mai 2010), p. 205311 (cf. p. 128, 145).
- [37] ENCINAR (J.) et REBOLLAR (J.) « Convergence of numerical solutions of open-ended waveguide by modal analysis and hybrid modal-spectral techniques ». In : *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on* vol. 34.n° 7 (1986), p. 809–814 (cf. p. 39).
- [38] ENKRICH (C.), PÉREZ-WILLARD (F.), GERTHSEN (D.), ZHOU (J. F.), KOSCHNY (T.), SOUKOULIS (C. M.), WEGENER (M.) et LINDEN (S.) « Focused-Ion-Beam Nanofabrication of Near-Infrared Magnetic Metamaterials ». In : *Advanced Materials* vol. 17.n° 21 (2005), p. 2547–2549 (cf. p. 7, 8).
- [39] ESAKI (L.) et TSU (R.) « Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors ». In : *IBM Journal of Research and Development* vol. 14.n° 1 (1970), p. 61–65 (cf. p. xxii).
- [40] FAIST (J.), BECK (M.), AELLEN (T.) et GINI (E.) « Quantum-cascade lasers based on a bound-to-continuum transition ». In : *Applied Physics Letters* vol. 78.n° 2 (2001), p. 147–149 (cf. p. 141).

- [41] FAIST (J.), CAPASSO (F.), SIRTORI (C.), SIVCO (D. L.), HUTCHINSON (A. L.), CHU (S. N. G.) et CHO (A. Y.) « Measurement of the intersubband scattering rate in semiconductor quantum wells by excited state differential absorption spectroscopy ». In : *Applied Physics Letters* vol. 63.n° 10 (sept. 1993), p. 1354–1356 (cf. p. 124).
- [42] FAIST (J.), CAPASSO (F.), SIVCO (D. L.), SIRTORI (C.), HUTCHINSON (A. L.) et CHO (A. Y.) « Quantum Cascade Laser ». In : *Science* vol. 264.n° 5158 (1994), p. 553–556 (cf. p. xxiii).
- [43] FAN (K.), STRIKWERDA (A. C.), TAO (H.), ZHANG (X.) et AVERITT (R. D.) « Stand-up magnetic metamaterials at terahertz frequencies ». In : *Opt. Express* vol. 19.n° 13 (juin 2011), p. 12619–12627 (cf. p. 8).
- [44] FATHOLOLOUMI (S.), DUPONT (E.), CHAN (C.), WASILEWSKI (Z.), LAFRAMBOISE (S.), BAN (D.), MÁTYÁS (A.), JIRAUSCHEK (C.), HU (Q.) et LIU (H. C.) « Terahertz quantum cascade lasers operating up to 223 K with optimized oscillator strength and improved injection tunneling ». In : *Opt. Express* vol. 20.n° 4 (fév. 2012), p. 3866–3876 (cf. p. viii, xxiv, 5, 142).
- [45] FATHOLOLOUMI (S.), DUPONT (E.), CHAN (C.), WASILEWSKI (Z.), LAFRAMBOISE (S.), BAN (D.), MÁTYÁS (A.), JIRAUSCHEK (C.), HU (Q.) et LIU (H. C.) « Terahertz quantum cascade lasers operating up to 223 K with optimized oscillator strength and improved injection tunneling ». In : *Opt. Express* vol. 20.n° 4 (fév. 2012), p. 3866–3876 (cf. p. xxi).
- [46] FATHOLOLOUMI (S.), DUPONT (E.), WASILEWSKI (Z. R.), CHAN (C. W. I.), RAZAVIPOUR (S. G.), LAFRAMBOISE (S. R.), HUANG (S.), HU (Q.), BAN (D.) et LIU (H. C.) « Effect of oscillator strength and intermediate resonance on the performance of resonant phonon-based terahertz quantum cascade lasers ». In : *Journal of Applied Physics* vol. 113.n° 11, 113109 (2013), p. 113109 (cf. p. 162, 170).
- [47] FERREIRA (R.) et BASTARD (G.) « Evaluation of some scattering times for electrons in unbiased and biased single- and multiple-quantum-well structures ». In : *Phys. Rev. B* vol. 40 (2 juil. 1989), p. 1074–1086 (cf. p. 121).
- [48] GANSEL (J. K.), THIEL (M.), RILL (M. S.), DECKER (M.), BADE (K.), SAILE (V.), FREYMAN (G.) von, LINDEN (S.) et WEGENER (M.) « Gold Helix Photonic Metamaterial as Broadband Circular Polarizer ». In : *Science* vol. 325.n° 5947 (2009), p. 1513–1515 (cf. p. 8).
- [49] GARCIA (J. C.), ROSENCHER (E.), COLLOT (P.), LAURENT (N.), GUYAUX (J. L.), VINTER (B.) et NAGLE (J.) « Epitaxially stacked lasers with Esaki junctions : A bipolar cascade laser ». In : *Applied Physics Letters* vol. 71.n° 26 (1997), p. 3752–3754 (cf. p. 99).

- [50] GEISER (M.), CASTELLANO (E.), SCALARI (G.), BECK (M.), NEVOU (L.) et FAIST (J.) « Ultrastrong Coupling Regime and Plasmon Polaritons in Parabolic Semiconductor Quantum Wells ». In : *Phys. Rev. Lett.* vol. 108 (10 mar. 2012), p. 106402 (cf. p. vii, 4, 59, 61, 62, 77, 96).
- [51] GEISER (M.), CASTELLANO (E.), SCALARI (G.), BECK (M.), NEVOU (L.) et FAIST (J.) « Ultrastrong Coupling Regime and Plasmon Polaritons in Parabolic Semiconductor Quantum Wells ». In : *Phys. Rev. Lett.* vol. 108 (10 mar. 2012), p. 106402 (cf. p. 76).
- [52] GEISER (M.), WALTHER (C.), SCALARI (G.), BECK (M.), FISCHER (M.), NEVOU (L.) et FAIST (J.) « Strong light-matter coupling at terahertz frequencies at room temperature in electronic LC resonators ». In : *Applied Physics Letters* vol. 97.n° 19, 191107 (2010), p. 191107 (cf. p. 6, 42, 59–62, 76, 77, 96).
- [53] GIBBS (W.) *Vector Analysis*. 1922 (cf. p. 9).
- [54] GLAZER (A.) *Space groups for solid state scientists*. Oxford : Academic, 2013 (cf. p. 110).
- [55] GMACHL (C.), CAPASSO (E.), TREDICUCCI (A.), SIVCO (D. L.), HUTCHINSON (A. L.), CHU (S. N. G.) et CHO (A. Y.) « Noncascaded intersubband injection lasers at $\lambda \approx 7.7 \mu\text{m}$ ». In : *Applied Physics Letters* vol. 73.n° 26 (1998), p. 3830–3832 (cf. p. 99).
- [56] GOL'TSMAN (G. N.), VACHTOMIN (Y. B.), ANTIPOV (S. V.), FINKEL (M. I.), MASLENIKOV (S. N.), SMIRNOV (K. V.), POLYAKOV (S. L.), SVECHNIKOV (S. I.), KAUROVA (N. S.), GRISHINA (E. V.) et VORONOV (B. M.) « NbN phonon-cooled hot-electron bolometer mixer for terahertz heterodyne receivers ». In : (2005), p. 95–106 (cf. p. 95).
- [57] GORDON (R.) « Light in a subwavelength slit in a metal : Propagation and reflection ». In : *Physical Review B* vol. 73.n° 15 (2006), p. 153405 (cf. p. 39, 42).
- [58] GREENE (F. M.) « The near-zone magnetic field of a small circular-loop antenna ». In : *J. Res. NBS* vol. 71.n° 4 (1967), p. 319–326 (cf. p. 80, 95).
- [59] *Handbook Series on Semiconductor Parameters , Vol 1*. World Scientific Pub Co Inc, 1996 (cf. p. 170, 171).
- [60] *Handbook Series on Semiconductor Parameters , Vol 2*. World Scientific Pub Co Inc, 1996 (cf. p. 170).
- [61] HARTIG (M.), GANIÈRE (J. D.), SELBMANN (P. E.), DEVEAUD (B.) et ROTA (L.) « Density dependence of carrier-carrier-induced intersubband scattering in GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells ». In : *Phys. Rev. B* vol. 60 (3 juil. 1999), p. 1500–1503 (cf. p. 125).

- [62] HARTIG (M.), HAACKE (S.), SELBMANN (P. E.), DEVEAUD (B.), TAYLOR (R. A.) et ROTA (L.) « Efficient Intersubband Scattering via Carrier-Carrier Interaction in Quantum Wells ». In : *Phys. Rev. Lett.* vol. 80 (9 mar. 1998), p. 1940–1943 (cf. p. 125).
- [63] HEAVISIDE (O.) « On the Forces, Stresses, and Fluxes of Energy in the Electromagnetic Field ». In : *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. (A.)* vol. 183 (1892), p. 423–480 (cf. p. 9).
- [64] HEEBNER (J. E.), BOND (T. C.) et KALLMAN (J. S.) « Generalized formulation for performance degradations due to bending and edge scattering loss in microdisk resonators ». In : *Opt. Express* vol. 15.n° 8 (2007), p. 4452–4473 (cf. p. 44).
- [65] HEYMAN (J. N.), UNTERRAINER (K.), CRAIG (K.), GALDRIKIAN (B.), SHERWIN (M. S.), CAMPMAN (K.), HOPKINS (P. F.) et GOSSARD (A. C.) « Temperature and Intensity Dependence of Intersubband Relaxation Rates from Photovoltage and Absorption ». In : *Phys. Rev. Lett.* vol. 74 (14 avr. 1995), p. 2682–2685 (cf. p. 125).
- [66] HEYMAN (J. N.), UNTERRAINER (K.), CRAIG (K.), WILLIAMS (J.), SHERWIN (M. S.), CAMPMAN (K.), HOPKINS (P. F.), GOSSARD (A. C.), MURDIN (B. N.) et LANGERAK (C. J. G. M.) « Far-infrared pump-probe measurements of the intersubband lifetime in an AlGaAs/GaAs coupled-quantum well ». In : *Applied Physics Letters* vol. 68.n° 21 (1996), p. 3019–3021 (cf. p. 125).
- [67] HORIKOSHI (Y.) « Migration-enhanced epitaxy of GaAs and AlGaAs ». In : *Semiconductor Science and Technology* vol. 8.n° 6 (1993), p. 1032 (cf. p. 174).
- [68] *Intersubband Transitions in Quantum Wells : Physics and Device Applications II, Volume 66 (Semiconductors and Semimetals)*. Academic Press, 1999 (cf. p. 134).
- [69] JACKSON (J. D.) *Classical Electrodynamics*. London : John Wiley et Sons Inc, 1975 (cf. p. 9, 46, 77, 86).
- [70] JIRAUSCHEK (C.), MATYAS (A.) et LUGLI (P.) « Modeling bound-to-continuum terahertz quantum cascade lasers : The role of Coulomb interactions ». In : *Journal of Applied Physics* vol. 107.n° 1, 013104 (2010), p. 013104 (cf. p. 128).
- [71] JONSSON (B.) et ENG (S.) « Solving the Schrodinger equation in arbitrary quantum-well potential profiles using the transfer matrix method ». In : *Quantum Electronics, IEEE Journal of* vol. 26.n° 11 (nov. 1990), p. 2025–2035 (cf. p. 116).
- [72] KANE (E.) In : *Journal of Physics and Chemistry of Solids* vol. 1.n° 1–2 (1956), p. 82–99 (cf. p. 171).

- [73] KANE (M. J.), MILLIDGE (S.), EMENY (M. T.), LEE (D.), GUY (D. R. P.) et WHITEHOUSE (C. R.) *Intersubband transitions in quantum wells*. New York : Plenum Press, 1992 (cf. p. 174).
- [74] KAZARINOV (R.) et SURIS (R.) « Possibility of the amplification of electromagnetic waves in a semiconductor with a superlattice ». In : *Sov. Phys. Semicond* (1971) (cf. p. xxii, 131, 145, 146).
- [75] KIM (Y.-H.), KWON (S.-H.), LEE (J. M.), HWANG (M.-S.), KANG (J.-H.), PARK (W. I.) et PARK (H.-G.) « Graphene-contact electrically driven microdisk lasers ». In : *Nat Commun* vol. 3 (2012), p. 1123 (cf. p. 180).
- [76] KING (R. W.) « The loop antenna for transmission and reception ». In : *Antenna Theory, part I (New York : McGraw-Hill, 1969)* (1969), p. 458–482 (cf. p. 80, 95).
- [77] KITTEL (C.) *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 2004 (cf. p. 110, 113, 114, 120).
- [78] KNAP (W.), LUSAKOWSKI (J.), PARENTY (T.), BOLLAERT (S.), CAPPY (A.), POPOV (V. V.) et SHUR (M. S.) « Terahertz emission by plasma waves in 60 nm gate high electron mobility transistors ». In : *Applied Physics Letters* vol. 84.n° 13 (mar. 2004), p. 2331–2333 (cf. p. xx).
- [79] KÖHLER (R.), IOTTI (R. C.), TREDICUCCI (A.) et ROSSI (F.) « Design and simulation of terahertz quantum cascade lasers ». In : *Applied Physics Letters* vol. 79.n° 24 (2001), p. 3920–3922 (cf. p. 125).
- [80] KOHLER (R.), TREDICUCCI (A.), BELTRAM (F.), BEERE (H. E.), LINFIELD (E. H.), DAVIES (A. G.), RITCHIE (D. A.), IOTTI (R. C.) et ROSSI (F.) « Terahertz semiconductor-heterostructure laser ». In : *Nature* vol. 417.n° 6885 (mai 2002), p. 156–159 (cf. p. xxi, xxiii, 101).
- [81] KUMAR (S.) « Recent Progress in Terahertz Quantum Cascade Lasers ». In : *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of* vol. 17.n° 1 (jan. 2011), p. 38–47 (cf. p. xxi).
- [82] KUMAR (S.) « Recent Progress in Terahertz Quantum Cascade Lasers ». In : *Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE Journal of* vol. 17.n° 1 (2011), p. 38–47 (cf. p. 5).
- [83] KUMAR (S.), CHAN (C. W. I.), HU (Q.) et RENO (J. L.) « Two-well terahertz quantum-cascade laser with direct intrawell-phonon depopulation ». In : *Applied Physics Letters* vol. 95.n° 14, 141110 (2009), p. 141110 (cf. p. 170).
- [84] KUMAR (S.), HU (Q.) et RENO (J. L.) « 186 K operation of terahertz quantum-cascade lasers based on a diagonal design ». In : *Applied Physics Letters* vol. 94.n° 13, 131105 (2009), p. 131105 (cf. p. 142, 170).

- [85] LEE (A. W. M.), QIN (Q.), KUMAR (S.), WILLIAMS (B. S.), HU (Q.) et RENO (J. L.) « Real-time terahertz imaging over a standoff distance (> 25 meters) ». In : *Applied Physics Letters* vol. 89.n° 14, 141125 (2006), p. 141125 (cf. p. xxiii).
- [86] LEE (S.-C.) et WACKER (A.) « Nonequilibrium Green's function theory for transport and gain properties of quantum cascade structures ». In : *Phys. Rev. B* vol. 66 (24 déc. 2002), p. 245314 (cf. p. 128).
- [87] LEVINE (B. F.) « Quantum-well infrared photodetectors ». In : *Journal of Applied Physics* vol. 74.n° 8 (oct. 1993), R1–R81 (cf. p. xxiii).
- [88] LEVINE (B. F.), CHOI (K. K.), BETHEA (C. G.), WALKER (J.) et MALIK (R. J.) « New 10 μm infrared detector using intersubband absorption in resonant tunneling GaAlAs superlattices ». In : *Applied Physics Letters* vol. 50.n° 16 (1987), p. 1092–1094 (cf. p. xxii).
- [89] LIM (C.), HONG (M.), CHEN (Z.), HAN (N.), LUK'YANCHUK (B.) et CHONG (T.) « Hybrid metamaterial design and fabrication for terahertz resonance response enhancement ». In : *Optics express* vol. 18.n° 12 (2010), p. 12421–12429 (cf. p. 63).
- [90] LINDEN (S.), ENKRICH (C.), WEGENER (M.), ZHOU (J.), KOSCHNY (T.) et SOUKOULIS (C. M.) « Magnetic Response of Metamaterials at 100 Terahertz ». In : *Science* vol. 306.n° 5700 (2004), p. 1351–1353 (cf. p. 8).
- [91] LLOYD-HUGHES (J.), SCALARI (G.), KOLCK (A.) van, FISCHER (M.), BECK (M.) et FAIST (J.) « Coupling terahertz radiation between sub-wavelength metal-metal waveguides and free space using monolithically integrated horn antennae ». In : *Opt. Express* vol. 17.n° 20 (sept. 2009), p. 18387–18393 (cf. p. vii, 5, 95).
- [92] LUKIN (M. D.), YELIN (S. F.) et FLEISCHHAUER (M.) « Entanglement of Atomic Ensembles by Trapping Correlated Photon States ». In : *Phys. Rev. Lett.* vol. 84 (18 mai 2000), p. 4232–4235 (cf. p. 73).
- [93] LUO (H.), LAFRAMBOISE (S. R.), WASILEWSKI (Z. R.), AERS (G. C.), LIU (H. C.) et CAO (J. C.) « Terahertz quantum-cascade lasers based on a three-well active module ». In : *Applied Physics Letters* vol. 90.n° 4, 041112 (2007), p. 041112 (cf. p. 142, 144, 148, 158, 164).
- [94] LUO (K.), ZHENG (H.), LU (Z.), XU (J.), XU (Z.), ZHANG (T.), LI (C.), YANG (X.) et TIAN (J.) « Subband separation energy dependence of intersubband relaxation time in wide quantum wells ». In : *Applied Physics Letters* vol. 70.n° 9 (1997), p. 1155–1157 (cf. p. 125).
- [95] MAIER (S.) *Plasmonics : fundamentals and applications*. Springer, 2007 (cf. p. 32).

- [96] MANOLATOU (C.) et RANA (F.) « Subwavelength Nanopatch Cavities for Semiconductor Plasmon Lasers ». In : *Quantum Electronics, IEEE Journal of* vol. 44.n° 5 (mai 2008), p. 435–447 (cf. p. 42).
- [97] MARQUES (R.), MESA (F.), MARTEL (J.) et MEDINA (F.) « Comparative analysis of edge- and broadside- coupled split ring resonators for metamaterial design - theory and experiments ». In : *Antennas and Propagation, IEEE Transactions on* vol. 51.n° 10 (2003), p. 2572–2581 (cf. p. 7).
- [98] MARTIN (M.), MANGENEY (J.), CROZAT (P.), CHASSAGNEUX (Y.), R. (C.), ZEROUNIAN (N.), VIVIEN (L.) et BLARY (K.) « Gigahertz modulation of tunable terahertz radiation from photomixers driven at telecom wavelengths ». In : *Applied Physics Letters* vol. 93.n° 13, 131112 (2008), p. 131112 (cf. p. xxi).
- [99] MAXWELL (J. C.) et PHYSICS (). *Treatise on Electricity and Magnetism, Vol. 1*. Dover Publications, 1954 (cf. p. 9).
- [100] MILOVANOVIC (G.) et KOSINA (H.) « A semiclassical transport model for quantum cascade lasers based on the Pauli master equation ». English. In : *Journal of Computational Electronics* vol. 9 (3-4 2010), p. 211–217 (cf. p. 128).
- [101] NEAVE (J.), DOBSON (P.), HARRIS (J.), DAWSON (P.) et JOYCE (B.) « Silicon doping of MBE-grown GaAs films ». English. In : *Applied Physics A* vol. 32 (4 1983), p. 195–200 (cf. p. 114).
- [102] NING (C. Z.) « Semiconductor nanolasers ». In : *physica status solidi (b)* vol. 247.n° 4 (2010), p. 774–788 (cf. p. 4).
- [103] NOGINOV (M.), ZHU (G.), BELGRAVE (A.), BAKKER (R.), SHALAEV (V.), NARIMANOV (E.), STOUT (S.), HERZ (E.), SUTTEEWONG (T.) et WIESNER (U.) « Demonstration of a spaser-based nanolaser ». In : *Nature* vol. 460.n° 7259 (2009), p. 1110–1112 (cf. p. 5, 6).
- [104] NOZAKI (K.) et BABA (T.) « Laser characteristics with ultimate-small modal volume in photonic crystal slab point-shift nanolasers ». In : *Applied Physics Letters* vol. 88.n° 21, 211101 (2006), p. 211101 (cf. p. 6).
- [105] OLEGO (D.), CHANG (T. Y.), SILBERG (E.), CARIDI (E. A.) et PINCZUK (A.) « Compositional dependence of band-gap energy and conduction-band effective mass of In_{1-x-y}Ga_xAl_yAs lattice matched to InP ». In : *Applied Physics Letters* vol. 41.n° 5 (1982), p. 476–478 (cf. p. 170).
- [106] ORDAL (M. A.), LONG (L. L.), BELL (R. J.), BELL (S. E.), BELL (R. R.), R. W. ALEXANDER (J.) et WARD (C. A.) « Optical properties of the metals Al, Co, Cu, Au, Fe, Pb, Ni, Pd, Pt, Ag, Ti, and W in the infrared and far infrared ». In : *Appl. Opt.* vol. 22.n° 7 (1983), p. 1099–1119 (cf. p. 8, 29, 35, 47, 48, 90, 104).
- [107] ORFANIDIS (S. J.) *Electromagnetic Waves and Antennas* (cf. p. 59, 61, 62).

- [108] PAGE (H.), BECKER (C.), ROBERTSON (A.), GLASTRE (G.), ORTIZ (V.) et SIRTORI (C.) « 300 K operation of a GaAs-based quantum-cascade laser at lambda [approximate] 9 μm ». In : *Applied Physics Letters* vol. 78.n° 22 (2001), p. 3529–3531 (cf. p. 173).
- [109] PAIELLA (R.) *Intersubband Transitions in Quantum Structures*. McGraw-Hill Companies, The, 2006 (cf. p. 117).
- [110] PALIK (E.) *Handbook of optical constants of solids*. T. 3. Academic press, 1998 (cf. p. 29, 35, 90).
- [111] PARK (H.-G.), KIM (S.-H.), KWON (S.-H.), JU (Y.-G.), YANG (J.-K.), BAEK (J.-H.), KIM (S.-B.) et LEE (Y.-H.) « Electrically Driven Single-Cell Photonic Crystal Laser ». In : *Science* vol. 305.n° 5689 (2004), p. 1444–1447 (cf. p. 6, 30).
- [112] PARKER (E. H. C.), KUBIAK (R. A.), KING (R. M.) et GRANGE (J. D.) « An investigation into silicon doping of MBE (100) GaAs ». In : *Journal of Physics D : Applied Physics* vol. 14.n° 10 (1981), p. 1853 (cf. p. 114).
- [113] PENDRY (J. B.), HOLDEN (A. J.), ROBBINS (D. J.) et STEWART (W. J.) « Low frequency plasmons in thin-wire structures ». In : *Journal of Physics : Condensed Matter* vol. 10.n° 22 (1998), p. 4785 (cf. p. 7).
- [114] PENDRY (J.), HOLDEN (A. J.), ROBBINS (D. J.) et STEWART (W. J.) « Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena ». In : *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on* vol. 47.n° 11 (1999), p. 2075–2084 (cf. p. 7).
- [115] *Publish or Perish*. 2007. URL : <http://www.harzing.com/pop.htm> (cf. p. xvii).
- [116] RAZEGHI (M.) *Fundamentals of Solid State Engineering*. Springer, 2010 (cf. p. 171).
- [117] RITCHIE (D.) « Low threshold THz QC lasers with thin core regions ». In : *Electronics Letters* vol. 43 (5 mar. 2007), 285–286(1) (cf. p. 164).
- [118] ROCHAT (M.), BECK (M.), FAIST (J.) et OESTERLE (U.) « Measurement of far-infrared waveguide loss using a multisection single-pass technique ». In : *Applied Physics Letters* vol. 78.n° 14 (2001), p. 1967–1969 (cf. p. 108).
- [119] ROCKSTUHL (C.), ZENTGRAF (T.), GUO (H.), LIU (N.), ETRICH (C.), LOA (I.), SYASSEN (K.), KUHL (J.), LEDERER (F.) et GIESSEN (H.) « Resonances of split-ring resonator metamaterials in the near infrared ». English. In : *Applied Physics B* vol. 84 (1-2 2006), p. 219–227 (cf. p. 8).
- [120] SAKAI (K.) *Terahertz Optoelectronics*. Springer, 2005 (cf. p. xxi).

- [121] SCALARI (G.), MAISSEN (C.), TURČINKOVÁ (D.), HAGENMÜLLER (D.), DE LIBERATO (S.), CIUTI (C.), REICHL (C.), SCHUH (D.), WEGSCHEIDER (W.), BECK (M.) et FAIST (J.) « Ultrastrong Coupling of the Cyclotron Transition of a 2D Electron Gas to a THz Metamaterial ». In : *Science* vol. 335.n° 6074 (2012), p. 1323–1326 (cf. p. 8, 59, 63).
- [122] SCALARI (G.), WALTHER (C.), FISCHER (M.), TERAZZI (R.), BEERE (H.), RITCHIE (D.) et FAIST (J.) « THz and sub-THz quantum cascade lasers ». In : *Laser And Photonics Reviews* vol. 3.n° 1-2 (2009), p. 45–66 (cf. p. 140).
- [123] SCALARI (G.), AJILI (L.), FAIST (J.), BEERE (H.), LINFIELD (E.), RITCHIE (D.) et DAVIES (G.) « Far-infrared ($\lambda = 87 \mu\text{m}$) bound-to-continuum quantum-cascade lasers operating up to 90 K ». In : *Applied Physics Letters* vol. 82.n° 19 (2003), p. 3165–3167 (cf. p. 141, 172).
- [124] SCALARI (G.), TERAZZI (R.), GIOVANNINI (M.), HOYLER (N.) et FAIST (J.) « Population inversion by resonant tunneling in quantum wells ». In : *Applied Physics Letters* vol. 91.n° 3, 032103 (2007), p. 032103 (cf. p. 128).
- [125] SCHEUER (J.), GREEN (W. M. J.), DEROSE (G. A.) et YARIV (A.) « Lasing from a circular Bragg nanocavity with an ultrasmall modal volume ». In : *Applied Physics Letters* vol. 86.n° 25, 251101 (2005), p. 251101 (cf. p. 5, 6).
- [126] SCHMIELAU (T.) et M. F. PEREIRA (J.) « Nonequilibrium many body theory for quantum transport in terahertz quantum cascade lasers ». In : *Applied Physics Letters* vol. 95.n° 23, 231111 (2009), p. 231111 (cf. p. 128).
- [127] SCHROTTKE (L.), GIEHLER (M.), WIENOLD (M.), HEY (R.) et GRAHN (H. T.) « Compact model for the efficient simulation of the optical gain and transport properties in THz quantum-cascade lasers ». In : *Semiconductor Science and Technology* vol. 25.n° 4 (2010), p. 045025 (cf. p. 128).
- [128] SHAMONIN (M.), SHAMONINA (E.), KALININ (V.) et SOLYMAR (L.) « Properties of a metamaterial element : Analytical solutions and numerical simulations for a singly split double ring ». In : *Journal of Applied Physics* vol. 95.n° 7 (2004), p. 3778–3784 (cf. p. 7).
- [129] SHELBY (R. A.), SMITH (D. R.), NEMAT-NASSER (S. C.) et SCHULTZ (S.) « Microwave transmission through a two-dimensional, isotropic, left-handed metamaterial ». In : *Applied Physics Letters* vol. 78.n° 4 (2001), p. 489–491 (cf. p. 8).
- [130] SIEGEL (P.) « Terahertz technology ». In : *Microwave Theory and Techniques, IEEE Transactions on* vol. 50.n° 3 (mar. 2002), p. 910–928 (cf. p. xix).
- [131] SIRTORI (C.), CAPASSO (E.), FAIST (J.), HUTCHINSON (A.), SIVCO (D.) et CHO (A.) « Resonant tunneling in quantum cascade lasers ». In : *Quantum Electronics, IEEE Journal of* vol. 34.n° 9 (sept. 1998), p. 1722–1729 (cf. p. 127, 131, 132, 145).

- [132] SMET (J. H.), FONSTAD (C. G.) et HU (Q.) « Intrawell and interwell intersubband transitions in multiple quantum wells for far-infrared sources ». In : *Journal of Applied Physics* vol. 79.n° 12 (1996), p. 9305–9320 (cf. p. 121, 122, 124, 125).
- [133] SMET (J. H.), FONSTAD (C. G.) et HU (Q.) « Intrawell and interwell intersubband transitions in multiple quantum wells for far-infrared sources ». In : *Journal of Applied Physics* vol. 79.n° 12 (1996), p. 9305–9320 (cf. p. 125).
- [134] SMITH (D. R.), PADILLA (W. J.), VIER (D. C.), NEMAT-NASSER (S. C.) et SCHULTZ (S.) « Composite Medium with Simultaneously Negative Permeability and Permittivity ». In : *Phys. Rev. Lett.* vol. 84 (18 mai 2000), p. 4184–4187 (cf. p. 63).
- [135] SOMMERFELD (A.) *Electrodynamics (Lectures on Theoretical Physics, Vol. 3)*. Academic Press, 1964 (cf. p. 9).
- [136] STAELIN (D. H.), MORGENTHALER (A. W.) et KONG (J. A.) *Electromagnetic Waves*. Prentice Hall, 1993 (cf. p. 77).
- [137] STEINMETZ (T.), KURZ (S.) et CLEMENS (M.) « Domains of Validity of Quasistatic and Quasistationary Field Approximations ». In : *Theoretical Engineering (ISTET), 2009 XV International Symposium on*. 2009, p. 1–5 (cf. p. 7).
- [138] STRUPIECHONSKI (E.), GRASSANI (D.), FOWLER (D.), JULIEN (F. H.), KHANNA (S. P.), LI (L.), LINFIELD (E. H.), DAVIES (A. G.), KRYSA (A. B.) et COLOMBELLI (R.) « Vertical subwavelength mode confinement in terahertz and mid-infrared quantum cascade lasers ». In : *Applied Physics Letters* vol. 98.n° 10, 101101 (2011), p. 101101 (cf. p. viii, 96, 147).
- [139] STRUPIECHONSKI (E.), XU (G.), BREKENFELD (M.), TODOROV (Y.), ISAC (N.), ANDREWS (A. M.), KLANG (P.), SIRTORI (C.), STRASSER (G.), DEGIRON (A.) et COLOMBELLI (R.) « Sub-diffraction-limit semiconductor resonators operating on the fundamental magnetic resonance ». In : *Applied Physics Letters* vol. 100.n° 13, 131113 (2012), p. 131113 (cf. p. vii, 177).
- [140] STRUPIECHONSKI (E.), XU (G.), CAVALIÉ (P.), ISAC (N.), DHILLON (S.), TIGNON (J.), BEAUDOIN (G.), SAGNES (I.), DEGIRON (A.) et COLOMBELLI (R.) « Hybrid electronic-photonic subwavelength cavities operating at terahertz frequencies ». In : *Phys. Rev. B* vol. 87 (4 jan. 2013), p. 041408 (cf. p. vii, 177).
- [141] TAN (I.-H.), SNIDER (G. L.), CHANG (L. D.) et HU (E. L.) « A self-consistent solution of Schrödinger–Poisson equations using a nonuniform mesh ». In : *Journal of Applied Physics* vol. 68.n° 8 (1990), p. 4071–4076 (cf. p. 117).
- [142] TAO (H.), KADLEC (E. A.), STRIKWERDA (A. C.), FAN (K.), PADILLA (W. J.), AVERITT (R. D.), SHANER (E. A.) et ZHANG (X.) « Microwave and terahertz wave sensing with metamaterials ». In : *Opt. Express* vol. 19.n° 22 (oct. 2011), p. 21620–21626 (cf. p. 63).

- [143] TODOROV (Y.), ANDREWS (A. M.), COLOMBELLI (R.), DE LIBERATO (S.), CIUTI (C.), KLANG (P.), STRASSER (G.) et SIRTORI (C.) « Ultrastrong Light-Matter Coupling Regime with Polariton Dots ». In : *Phys. Rev. Lett.* vol. 105 (19 nov. 2010), p. 196402 (cf. p. vii, 4).
- [144] TODOROV (Y.), TOSETTO (L.), TEISSIER (J.), ANDREWS (A. M.), KLANG (P.), COLOMBELLI (R.), SAGNES (I.), STRASSER (G.) et SIRTORI (C.) « Optical properties of metal-dielectric-metal microcavities in the THz frequency range ». In : *Opt. Express* vol. 18.n° 13 (juin 2010), p. 13886–13907 (cf. p. 42, 73, 75, 96).
- [145] TOK (E. S.), NEAVE (J. H.), ASHWIN (M. J.), JOYCE (B. A.) et JONES (T. S.) « Growth of Si-doped GaAs(110) thin films by molecular beam epitaxy ; Si site occupation and the role of arsenic ». In : *Journal of Applied Physics* vol. 83.n° 8 (1998), p. 4160–4167 (cf. p. 114).
- [146] ULRICH (J.), ZOBL (R.), FINGER (N.), UNTERRAINER (K.), STRASSER (G.) et GORNIK (E.) « Terahertz-electroluminescence in a quantum cascade structure ». In : *Physica B : Condensed Matter* vol. 272.n° 1–4 (1999), p. 216–218 (cf. p. 101).
- [147] UNUMA (T.), TAKAHASHI (T.), NODA (T.), YOSHITA (M.), SAKAKI (H.), BABA (M.) et AKIYAMA (H.) « Effects of interface roughness and phonon scattering on intersubband absorption linewidth in a GaAs quantum well ». In : *Applied Physics Letters* vol. 78.n° 22 (2001), p. 3448–3450 (cf. p. 100, 125).
- [148] URZHUMOV (Y. A.) et SHVETS (G.) « Optical magnetism and negative refraction in plasmonic metamaterials ». In : *Solid State Communications* vol. 146.n° 5–6 (2008). Special section on Negative Refraction and Metamaterials for Optical Science and Engineering, p. 208–220 (cf. p. 8, 58, 59).
- [149] VALENTINE (J.), ZHANG (S.), ZENTGRAF (T.), ULIN-AVILA (E.), GENOV (D. A.), BARTAL (G.) et ZHANG (X.) « Three-dimensional optical metamaterial with a negative refractive index ». In : *nature* vol. 455.n° 7211 (2008), p. 376–379 (cf. p. 8).
- [150] VITIELLO (M. S.), SCAMARCIO (G.), SPAGNOLO (V.), WILLIAMS (B. S.), KUMAR (S.), HU (Q.) et RENO (J. L.) « Measurement of subband electronic temperatures and population inversion in THz quantum-cascade lasers ». In : *Applied Physics Letters* vol. 86.n° 11, 111115 (2005), p. 111115 (cf. p. 161).
- [151] WADE (A.), FEDOROV (G.), SMIRNOV (D.), KUMAR (S.), WILLIAMS (B.), HU (Q.) et RENO (J.) « Magnetic-field-assisted terahertz quantum cascade laser operating up to 225 K ». In : *Nat Photon* vol. 3.n° 1 (jan. 2009), p. 41–45 (cf. p. xxi).
- [152] WALTHER (C.), FISCHER (M.), SCALARI (G.), TERAZZI (R.), HOYLER (N.) et FAIST (J.) « Quantum cascade lasers operating from 1.2 to 1.6 THz ». In : *Applied Physics Letters* vol. 91.n° 13, 131122 (2007), p. 131122 (cf. p. xxiii).

- [153] WALTHER (C.), SCALARI (G.), AMANTI (M. I.), BECK (M.) et FAIST (J.) « Microcavity Laser Oscillating in a Circuit-Based Resonator ». In : *Science* vol. 327.n° 5972 (2010), p. 1495–1497 (cf. p. vii, 4, 6, 42, 54, 59–62, 76, 77, 96).
- [154] WASELIKOWSKI (S.), KRATT (K.), BADILITA (V.), WALLRABE (U.), KORVINK (J. G.) et WALTHER (M.) « Three-dimensional microcoils as terahertz metamaterial with electric and magnetic response ». In : *Applied Physics Letters* vol. 97.n° 26, 261105 (2010), pages (cf. p. 8).
- [155] WASHBURN (A. L.) et BAILEY (R. C.) « Photonics-on-a-chip : recent advances in integrated waveguides as enabling detection elements for real-world, lab-on-a-chip biosensing applications ». In : *Analyst* vol. 136 (2 2011), p. 227–236 (cf. p. 4).
- [156] WEST (L.) et EGLASH (S.) « First observation of an extremely large dipole infrared transition within the conduction band of a GaAs quantum well ». In : *Applied Physics Letters* (1985) (cf. p. xxii).
- [157] WILLIAMS (B. S.) « Terahertz quantum cascade lasers ». Thesis. Massachusetts Institute of Technology, Dept. of Electrical Engineering et Computer Science, 2003 (cf. p. 129, 130, 132).
- [158] WILLIAMS (B. S.) « Terahertz quantum-cascade lasers ». In : *Nat Photon* vol. 1.n° 9 (sept. 2007), p. 517–525 (cf. p. 140, 169).
- [159] WILLIAMS (B. S.), KUMAR (S.), CALLEBAUT (H.), HU (Q.) et RENO (J. L.) « Terahertz quantum-cascade laser at $\lambda \approx 100 \mu\text{m}$ using metal waveguide for mode confinement ». In : *Applied Physics Letters* vol. 83.n° 11 (2003), p. 2124–2126 (cf. p. 102).
- [160] WILLIAMS (B.), KUMAR (S.), HU (Q.) et RENO (J.) « High-power terahertz quantum cascade lasers ». In : *Lasers and Electro-Optics, 2006 and 2006 Quantum Electronics and Laser Science Conference. CLEO/QELS 2006. Conference on*. 2006, p. 1–2 (cf. p. xxiv).
- [161] WILSON (C.), JOHANSSON (G.), POURKABIRIAN (A.), SIMOEN (M.), JOHANSSON (J.), DUTY (T.), NORI (F.) et DELSING (P.) « Observation of the dynamical Casimir effect in a superconducting circuit ». In : *Nature* vol. 479.n° 7373 (2011), p. 376–379 (cf. p. 73).
- [162] WU (T. T.) « Theory of the Thin Circular Loop Antenna ». In : *Journal of Mathematical Physics* vol. 3.n° 6 (1962), p. 1301–1304 (cf. p. 80, 95).
- [163] YARIV (A.) *Quantum Electronics*. Wiley, 1989 (cf. p. 99).
- [164] YEN (T. J.), PADILLA (W. J.), FANG (N.), VIER (D. C.), SMITH (D. R.), PENDRY (J. B.), BASOV (D. N.) et ZHANG (X.) « Terahertz Magnetic Response from Artificial Materials ». In : *Science* vol. 303.n° 5663 (2004), p. 1494–1496 (cf. p. 8).

BIBLIOGRAPHIE

- [165] YU (P.) et CARDONA (M.) *Fundamentals of Semiconductors : Physics and Materials Properties (Graduate Texts in Physics)*. Springer, 2010 (cf. p. 121, 171).
- [166] ZHELUDEV (N. I.) et KIVSHAR (Y. S.) « From metamaterials to metadevices ». In : *Nature materials* vol. 11.n° 11 (2012), p. 917–924 (cf. p. 7).
- [167] ZMUIDZINAS (J.) et RICHARDS (P.) « Superconducting detectors and mixers for millimeter and submillimeter astrophysics ». In : *Proceedings of the IEEE* vol. 92.n° 10 (oct. 2004), p. 1597–1616 (cf. p. 95).

BIBLIOGRAPHIE

BIBLIOGRAPHIE

BIBLIOGRAPHIE

Résumé

Les deux grands défis actuels pour l'optoélectronique térahertz (THz) sont d'une part, le besoin de miniaturiser les sources de rayonnement térahertz, et d'autre part, la nécessité d'améliorer leurs performances actuelles. Parmi les sources de rayonnement térahertz existantes, le laser à cascade quantique (QCL) est à ce jour le meilleur candidat pour remplir ces critères. Afin d'y parvenir, il faut cependant apporter des solutions aux verrous qui limitent la miniaturisation des QCLs THz. Le premier est d'ordre fondamental, et tient au fait que les dimensions des cavités photoniques usuelles sont soumises à la limite de diffraction. Le second verrou provient du fait que la recherche de compacité des sources se traduit généralement par la détérioration de leur puissance optique de sortie et de la directionnalité du faisceau laser. Une nouvelle famille de résonateurs THz métal - semiconducteur - métal (M-SC-M) est présentée de façon théorique et expérimentale. Ces dispositifs, inspirés des oscillateurs électroniques *LC*, ont permis d'atteindre un volume effectif record $V_{\text{eff}} = L_x L_y L_z / \lambda_{\text{eff}}^3 = 5 \cdot 10^{-6}$, où $L_{x,y,z}$ sont les dimensions de la cavité et λ_{eff} est la longueur d'onde de résonance dans le cœur du résonateur (GaAs). Ces résonateurs hybrides photoniques-électroniques ont la particularité d'être libérés de la limite de diffraction dans les trois dimensions spatiales, et bénéficient pour la première fois de toutes les fonctionnalités habituellement réservées aux dispositifs électroniques. Une application aux polaritons inter-sous-bandes THz a permis d'obtenir des résultats à l'état de l'art, démontrant d'une part que ces résonateurs hybrides conservent leurs propriétés photoniques, et d'autre part qu'ils permettent un couplage lumière-matière fort. En parallèle de ce travail, la faisabilité d'un QCL THz avec une région active extrêmement fine est démontrée expérimentalement. Une étude systématique des caractéristiques du laser en fonction de l'épaisseur de la région active (L_z) a permis la réduction de $L_z = 10 \mu\text{m}$ ($\approx \lambda_{\text{eff}}/2.7$) jusqu'à la valeur record de $L_z = 1.75 \mu\text{m}$ ($\approx \lambda_{\text{eff}}/13$) dans une cavité Fabry-Pérot M-SC-M. Malgré l'augmentation des pertes optiques, l'effet laser est obtenu au-dessus de la température de l'azote liquide (78 K) pour la région active la plus fine. Ces résultats sont très encourageants pour le développement de régions actives plus performantes, et permettent d'envisager le développement de micro-cavités lasers avec des volumes effectifs extrêmement sub-longueur d'onde. Les perspectives de ce travail de thèse s'étendent de l'électrodynamique quantique en cavité au nanolaser. Les applications potentielles varient énormément en fonction de la configuration des résonateurs hybrides. Ils peuvent être utilisés comme des éléments passifs pour la détection, ou encore comme des éléments actifs tels que des antennes. Enfin, l'utilisation d'une région active fine en combinaison avec un résonateur hybride devrait permettre d'obtenir un QCL THz ultra-compact libéré de la limite de diffraction, tout en introduisant pour la première fois la possibilité d'accorder la fréquence du laser en adaptant l'impédance complexe équivalente de la combinaison d'éléments *LC*.