



HAL
open science

Modélisation et simulation des composants optoélectroniques à puits quantiques

Nicolas Trenado

► **To cite this version:**

Nicolas Trenado. Modélisation et simulation des composants optoélectroniques à puits quantiques. Physique [physics]. Université de Rouen, 2002. Français. NNT : . tel-00010221

HAL Id: tel-00010221

<https://theses.hal.science/tel-00010221>

Submitted on 20 Sep 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DE ROUEN
U.F.R. DES SCIENCES ET TECHNIQUES

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR

Discipline : Physique

présentée et soutenue publiquement

par

Nicolas TRENADO

le 18 novembre 2002

Titre :

**Modélisation et simulation des composants
optoélectroniques à puits quantiques**

JURY

Alain CARENCO	Alcatel R&I, OPTO+	Examineur
François CASTELLA	Institut de Recherche Mathématique de Rennes	Rapporteur
Claude DELALANDE	Laboratoire de Physique de la Matière Condensée	Rapporteur
Kaouther KETATA	Laboratoire Électronique Microtechnologie Instrumentation	Directeur de thèse
Jean-François PALMIER	France Telecom R&D	Responsable de thèse
Sébastien SAUVAGE	Institut d'Électronique Fondamentale	Examineur

Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier très sincèrement **Jean-François PALMIER** qui m'a proposé le sujet de thèse. Je le remercie également pour sa disponibilité, ses nombreux conseils, les discussions extrêmement enrichissantes que j'ai pu avoir avec lui ainsi que pour ses encouragements tout au long de ce travail. Ce fut un réel plaisir de travailler avec lui durant ces trois années. Je remercie **Philippe BROSSON** qui faisait partie du groupe de modélisation et n'a jamais hésité pour répondre à mes questions.

J'en profite pour remercier **Jean FLICSTEIN** qui m'a permis de visiter l'ancien site de France Télécom R&D de Bagneux (autrefois nommé CNET de Bagneux).

Ce travail s'est déroulé au sein du G.I.E. OPTO+ qui réunissait France Télécom R&D et Alcatel. Je remercie les directions de ces deux entreprises qui ont permis le financement de cette thèse. Je tiens à remercier en particulier **André SCAVENNEC**, **Jean-Claude BOULEY** ainsi que **François BRILLOUET**.

Je remercie **François CASTELLA** ainsi que **Claude DELALANDE** qui ont accepté le lourd travail de rapporteur. Je remercie également **Kaouther KETATA**, **Alain CARENCO** et **Sébastien SAUVAGE** qui ont bien voulu participer à l'examen de cette thèse.

Je remercie tout particulièrement **Bertrand RIOU** pour avoir eu la patience de répondre à mes nombreuses questions concernant la technologie des lasers. Je remercie également **Luis LUCATERO** pour ses conseils et son aide linguistique ainsi qu'une collaboration qui, malheureusement, fut trop courte.

Je remercie **Abderrahim RAMDANE** qui a bien voulu me consacrer du temps pour m'expliquer comment effectuer des mesures de gain et m'avoir donné accès à un banc de mesure.

Je ne voudrais pas terminer cette partie sans remercier le personnel administratif qui a toujours été efficace pour répondre à mes demandes. Je pense en particulier à **Sylvie LE CALVEZ**, **Pascale TÉFAINE** et **Bernadette DUVAL**.

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

Table des matières

Remerciements	3
Introduction	9
Une nouvelle méthode de calcul du gain	13
1 Modèle du gain optique	15
1.1 Les hétérostructures III-V	15
1.1.1 États électroniques dans les semiconducteurs	19
1.1.2 La méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ et le modèle de Kane	22
1.1.3 Le modèle de Luttinger-Kohn	25
1.2 Approximation de la fonction enveloppe	27
1.3 Effets de la contrainte	29
1.4 Hamiltonien des électrons	33
1.4.1 Hamiltonien des électrons dans la bande de conduction	33
1.4.2 Hamiltonien des trous dans la bande de valence: description matricielle	33
1.5 Éléments de calcul du gain matériau et de l'absorption	35
1.6 Conclusion	39
2 Les différentes méthodes de calcul de la fonction enveloppe	41
2.1 Méthodes non Galerkin	41
2.1.1 Méthode des différences finies	41
2.1.2 Méthode de la matrice de transfert	43
2.1.3 Méthode des ondes planes	45
2.2 Méthode de Galerkin	48
2.2.1 Présentation de la méthode de Galerkin	48
2.2.2 La base des éléments finis	48
2.2.3 La base des états du puits simple	50
2.3 Conclusion	53
Modélisation et simulation des composants optoélectroniques à puits quantiques	5

3	Méthode de Galerkin sur la base des états du puits simple	55
3.1	Les états liés du puits simple	55
3.2	Application aux états de la bande de conduction	57
3.3	Extension au problème de la bande de valence	62
3.4	Conclusion	67
4	Comparaison entre les éléments finis et la base des états du puits simple	69
4.1	États résonnants	69
4.2	Problème de couplage de deux puits identiques	73
4.3	Cas du puits large	77
4.4	Comparaison avec une référence	79
4.5	Étude numérique de l'équation de Schrödinger	81
4.6	Hétérostructure à confinement séparé (SCH)	83
5	Calcul pratique du gain	87
5.1	Éléments de matrice optique du gain	87
5.2	Éléments de matrice optique de l'IVBA	89
5.3	Gain local	91
Application à la simulation des composants optiques à puits quantiques		93
6	Principaux modèles utilisés pour les composants actifs	95
6.1	Description du composant	95
6.2	Le modèle de dérive-diffusion	97
6.3	Couplage électrique-optique semi-classique	102
6.4	Approche par la matrice de densité	106
7	Développement d'un outil logiciel efficace	111
7.1	Paramètres matériaux, prise en compte de la contrainte	111
7.1.1	Loi de Vegard	112
7.1.2	Lois spécifiques	113
7.1.3	Contrainte sur InP ou GaAs	113
7.1.4	Mobilité des porteurs, loi de vitesse	115
7.1.5	Cas particulier des super-réseaux	116
7.2	Intégration du calcul du gain	118
8	Mesure du gain sous le seuil	123
8.1	Structure de test : le laser pn-BH	124
8.2	Brève description de la méthode Hakki-Paoli	126

Conclusion	133
Bibliographie	135
Notations	139
Annexes	141
A Équation de Schrödinger discrétisée	143
B Forme intégrée de l'équation de Boltzmann	149
C Mesure du gain en dessous du seuil	151

Introduction

Les composants optoélectroniques sont des éléments clés des réseaux de télécommunication qui font désormais partie de notre quotidien. Les réseaux terrestres sont pour la plupart des réseaux optiques à très haut débit (on arrive à des débits d'environ 8 Tbits/s en utilisant la méthode de multiplexage en longueur d'onde). Pour assurer le transfert des informations d'un bout à l'autre d'un réseau optique, des interfaces optoélectroniques sont nécessaires. Il faut pouvoir émettre des signaux lumineux et les véhiculer sans erreur à travers l'ensemble du réseau. Les lasers à contre réaction distribuée (DFB) qui sont des sources monochromatiques permettent l'émission de ces signaux lumineux dans les fibres optiques. Ces signaux, au cours de leur acheminement dans les fibres, subissent des atténuations : ils se dégradent. Ils peuvent être régénérés à l'aide d'amplificateurs optiques à semi-conducteur (SOA) ou bien par l'utilisation de fibres optiques dopées avec des terres rares telles que l'erbium. Cette dernière technique nécessite un pompage électronique qui est réalisé par des lasers de puissance de type Fabry-Pérot.

La réalisation de ces composants qui comprend l'épitaxie et la technologie auxquelles il faut ajouter la caractérisation pour évaluer leurs performances s'étend sur environ six mois. Le coût de fabrication de ces composants est, par ailleurs, très élevé. Il est donc préférable de pouvoir évaluer au mieux leurs performances avant de commencer un cycle de fabrication. C'est dans cet objectif que s'inscrit la modélisation et la simulation des composants.

On peut aborder la simulation selon deux axes différents. Le premier consiste à utiliser une simulation complète rendant compte de tous les phénomènes physiques et de la géométrie. C'est le cas des approches complètement quantiques ou des simulations tridimensionnelles. Avec ce type de simulation on traduit de manière exhaustive le fonctionnement du composant mais ceci au détriment du temps de calcul qui est très long : une petite partie de la simulation peut s'étendre sur plusieurs jours. Il devient alors difficile d'envisager un nombre important de simulations en changeant les paramètres de la structure à simuler. Le deuxième consiste à utiliser des modèles physiques très simplifiés pour accélérer les calculs. Un autre avantage attrayant est la rapidité de mise en œuvre numérique de ces modèles. Ce type de simulation n'est pas très adapté non plus car on demande à l'utilisateur de nombreux paramètres de simulation pour rendre compte des phénomènes physiques qui ont été négligés dans le modèle. Cela demande donc de la part de l'utilisateur une connaissance du comportement du composant avant de le simuler ce qui est contraire à l'objectif de la simulation.

On doit donc trouver un compromis en adaptant le schéma de simulation en fonction du type de

composant que l'on veut simuler. Autrement dit, prendre en compte les phénomènes physiques les plus marquants.

Les premiers lasers à semiconducteur étaient composés d'homojonctions. À cause de la diffusion des porteurs, leur courant de seuil était très élevé. H. Kroemer [1] et Zh. I. Alferov [2] ont proposé le concept d'hétérostructure de manière à bloquer les porteurs. L'introduction de puits quantiques a permis d'augmenter la zone de longueurs d'onde d'émission. Le calcul des états électroniques dans les composants à multipuits quantiques est donc à la base de la simulation. L'objectif de ce travail de thèse était de mettre en œuvre une méthode permettant d'accélérer le calcul de ces états. Plusieurs méthodes purement numériques telles que la méthode des éléments finis ou celle des différences finies ont déjà fait l'objet de mise en œuvre. Ces deux approches font appel à un maillage de la structure. D'autres comme la méthode de la matrice de transfert ou celle des ondes planes nécessitent une discrétisation de l'énergie. Nous tenterons d'évaluer comparativement toutes ces méthodes

Le but final de cette thèse est de contribuer à la réalisation d'un simulateur efficace et convivial. Dans ce but, trois axes de progrès ont été visés :

- une meilleure prise en compte des lois et des constantes physiques avec un très petit nombre de paramètres ajustables demandés à l'utilisateur. Par exemple, l'absorption inter-sous bandes de valence est déterminée directement à partir d'un calcul sophistiqué des états liés de valence, prenant en compte l'interaction spin-orbite;
- un choix de la méthode de calcul permettant d'éviter les "tournevis numériques" comme le maillage ou un nombre de fonctions d'interpolation à fixer par l'utilisateur;
- un souci de convivialité qui a pesé sur le choix des outils de développement s'orientant vers une programmation orientée objet.

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

La présentation de ce travail comprend deux parties. La première partie présente le modèle physique utilisé pour le calcul du gain. Nous rappelons les états électroniques dans les semiconducteurs et notamment dans les structures à puits quantiques. Un chapitre présente les différentes méthodes permettant le calcul des états liés dans les puits quantiques. Nous détaillons ensuite notre approche pour le calcul de ces états, objet de ce travail de thèse. Il était intéressant de comparer notre méthode avec celle des éléments finis, qui est couramment employée. Pour finir cette première partie, nous nous attardons sur le calcul pratique du gain et de l'absorption inter-bandes de valence dans les structures à multipuits quantiques.

Dans la deuxième partie, nous présentons les modèles physiques du simulateur dans lequel nous avons intégré le calcul du gain pour des structures à multipuits quantiques. Nous présentons le modèle de

transport de dérive-diffusion ainsi que le couplage électrique-optique semi-classique. Lorsqu'on est en présence de puits quantiques, les modèles classiques ne sont plus valables. Il faut donc faire appel à des modèles plus complexes pour rendre compte des phénomènes de transport dans ce type de composant. Nous essaierons alors de présenter l'approche de la matrice de densité simplifiée. Un chapitre est ensuite dédié à la présentation du simulateur de façon pratique en détaillant la base des matériaux disponibles et leurs caractéristiques. Un chapitre concernant la mesure du gain en dessous du seuil sur des lasers Fabry-Pérot termine cette partie.

Première partie

Une nouvelle méthode de calcul du gain

Chapitre 1

Modèle du gain optique

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

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

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

Le problème du gain concerne principalement la couche active, nous nous intéressons essentiellement au cas des structures à multipuits quantiques. Ce problème a déjà fait l'objet de nombreuses études publiées [3–12].

1.1 Les hétérostructures III-V

Les semiconducteurs constituent un cas particulier des cristaux de valence caractérisés par une conductivité importante à température ordinaire. Ces cristaux sont réalisés soit à partir des éléments de la colonne IV (C, Ge, Si...) ou par combinaison d'éléments des colonnes III et V (GaAs, AlAs, InSb...) ou encore des colonnes II et VI (ZnSe, CdTe...). Ils sont appelés cristaux de valence à cause de la liaison chimique qui réalise la cohésion du matériau. Le modèle le plus simple qui décrit cette

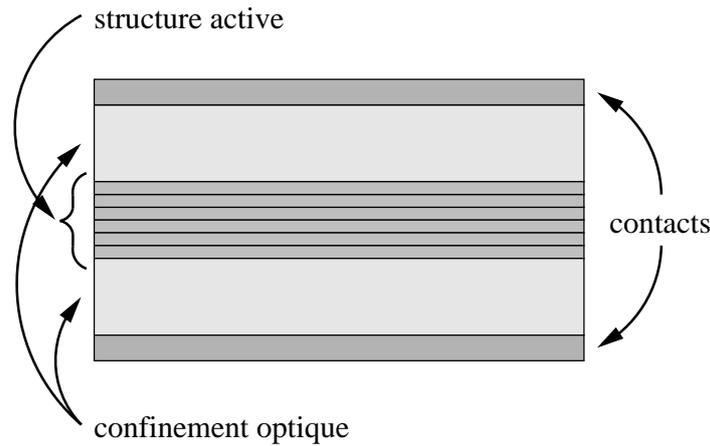


FIG. 1.1 – Schéma d'un composant optoélectronique

liaison est de type LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals).

F. Seitz propose une classification non restrictive des cristaux solides selon cinq types [13]:

- les métaux;
- les cristaux moléculaires;
- les cristaux ioniques;
- les cristaux de valence;
- les semiconducteurs.

Par le terme de solide, on entend un ensemble cristallin d'atomes et de molécules; c'est-à-dire que l'on s'intéresse aux matériaux dont les atomes sont rangés aux nœuds d'un réseau périodique dont le motif élémentaire est représenté sur la figure 1.2 pour les semiconducteurs à base d'éléments des colonnes III et V du tableau de Mendeleiev.

Dans les composés III-V, chaque atome III est en configuration tétraédrique avec quatre atomes V (voir figure 1.2). Les orbitales moléculaires sont des hybridations de type sp^3 où s et p sont les orbitales atomiques des atomes isolés :

$$|s\rangle, |p_x\rangle, |p_y\rangle, |p_z\rangle$$

Ces orbitales (voir figure 1.4) sont déduites en résolvant l'équation de Schrödinger, $H\psi = E\psi$ où H est le hamiltonien de l'électron dans son mouvement autour du noyau, somme de son énergie cinétique $\mathbf{p}^2/2m_0$ ($\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$) et de son énergie potentielle V dans le champ coulombien du noyau (figure 1.3), en supposant que l'on a un seul électron en interaction avec le noyau atomique :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

Pour des atomes contenant plusieurs électrons, ce sont les électrons de la couche externe qui vont participer aux liaisons chimiques et à la conduction électrique. On s'intéresse alors aux états des

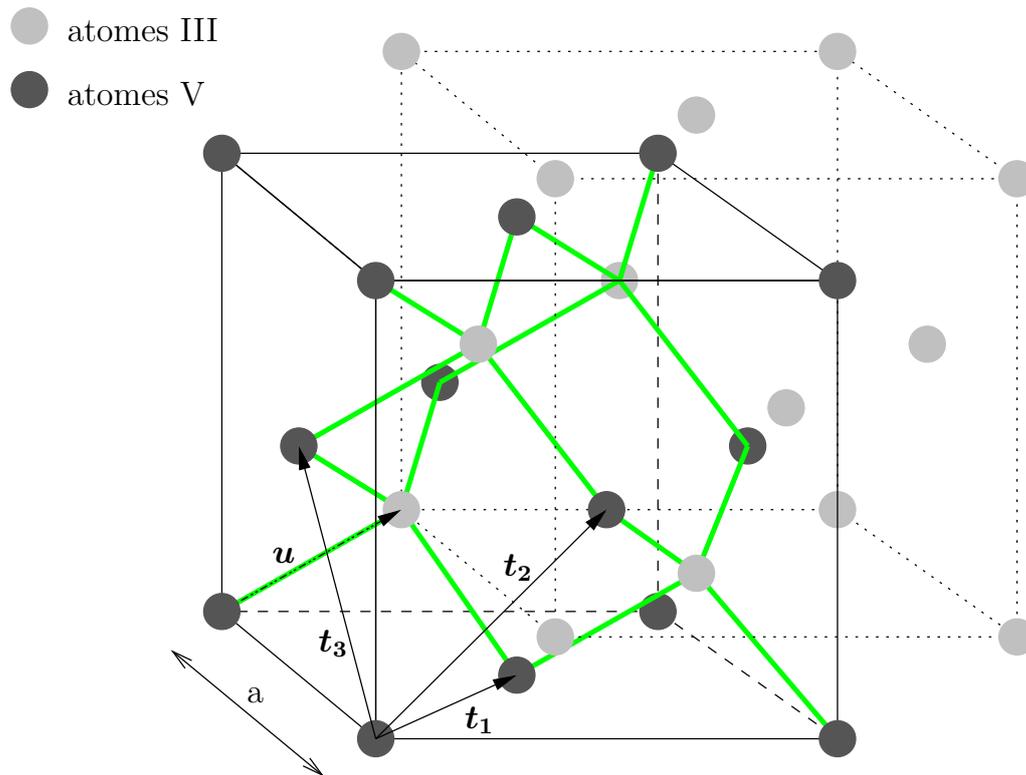


FIG. 1.2 – Maille élémentaire d'un composé III-V. Le vecteur \mathbf{u} représente le décalage entre les deux réseaux III et V. Les vecteurs \mathbf{t}_1 , \mathbf{t}_2 et \mathbf{t}_3 permettent de définir la translation qui décrit l'ensemble du cristal

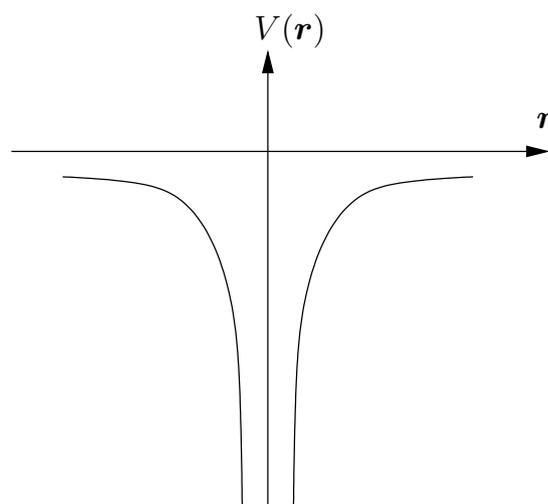


FIG. 1.3 – Énergie potentielle d'un électron dans le champ coulombien du noyau

électrons de valence en considérant un potentiel V écranté dû à la présence des électrons de la couche interne.

Lorsqu'on couple plusieurs atomes pour former une molécule, et par suite, un cristal, les états électroniques de la structure sont des combinaisons linéaires des états atomiques décrits précédemment. Dans le cas d'un matériau où le nombre d'atomes est de l'ordre de 10^{23} par cm^3 , les niveaux d'énergie des électrons se couplent pour former deux types d'états : des états de conduction qui vont permettre le transfert des charges à travers la structure et des états de valence qui participent à la cohésion du cristal. Le nombre de niveaux d'énergie est suffisamment élevé pour que l'on puisse considérer une continuité de l'énergie et parler de bandes d'énergies qui sont nommées respectivement bande de conduction et bande de valence comme cela est montré sur la figure 1.5. Il existe cependant, entre ces deux bandes, une zone d'énergie que les électrons n'occupent pas. La hauteur de cette zone est appelée énergie de gap E_g . Le semiconducteur est caractérisé par le fait qu'à $T=0$ K, tous les états de valence sont occupés alors que les états de conduction sont libres.

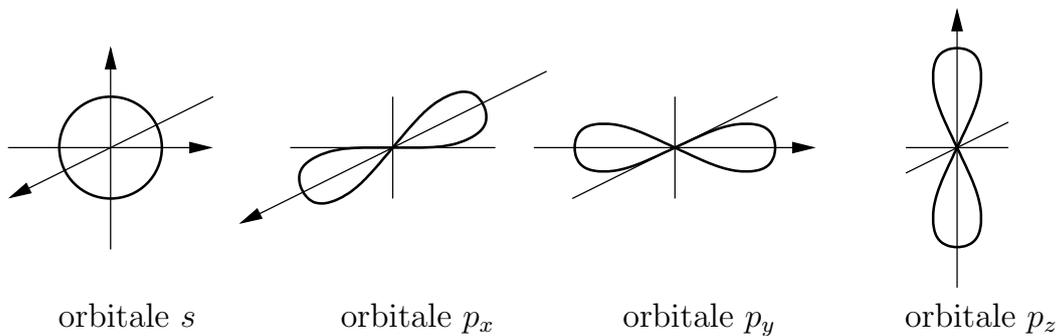


FIG. 1.4 – Orbitales atomiques s et p

L'intérêt des semiconducteurs réside dans le fait qu'ils peuvent à la fois conduire des charges et permettre l'émission stimulée par le passage d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence. La longueur d'onde λ du photon ainsi émis correspond à l'énergie E nécessaire pour passer d'une bande à l'autre ($E = hc/\lambda$). Dans une fibre optique en silice, les signaux lumineux les moins atténués correspondent aux longueurs d'onde 1,3 et 1,55 μm . Les matériaux qui permettent facilement d'obtenir ces longueurs d'onde sont les semiconducteurs composés III-V. Ces composés cristallisent dans le réseau Zinc-Blende, ce réseau est formé de deux réseaux cubiques à faces centrées Zn et S dont l'un est décalé par rapport à l'autre selon le vecteur $\mathbf{u} = (a/4, a/4, a/4)$, où a est la distance inter-atomique. L'ensemble du cristal peut être décrit en appliquant la translation de vecteur $\mathbf{t} = \mathbf{t}_1 + \mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_3$ à la maille élémentaire; autrement dit, la position de chaque atome du cristal peut se déduire de celle d'un atome de la maille élémentaire représentée figure 1.2 par le vecteur \mathbf{t} :

$$\mathbf{t} = n_1 \mathbf{t}_1 + n_2 \mathbf{t}_2 + n_3 \mathbf{t}_3 \quad (1.2)$$

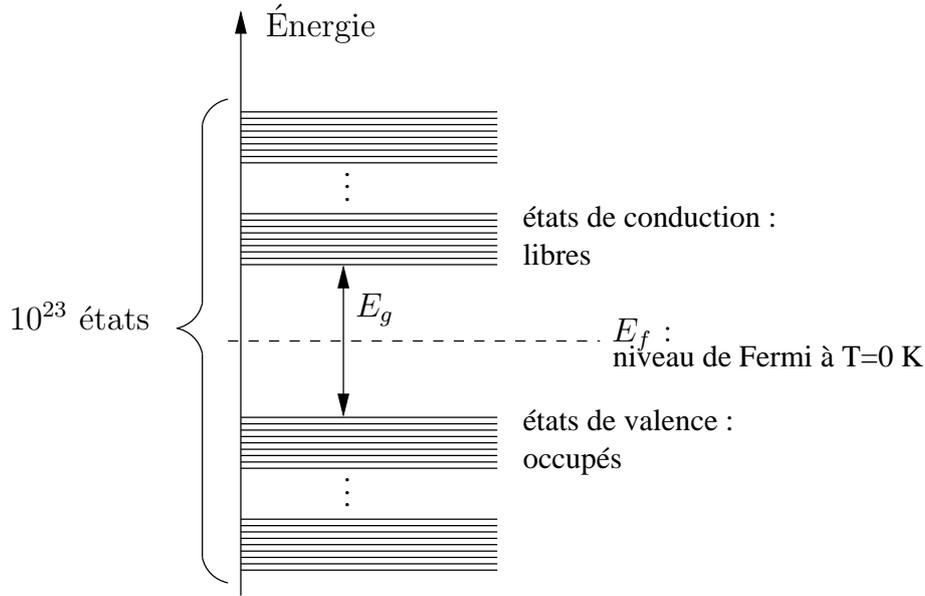


FIG. 1.5 – États électroniques dans un semiconducteur en prenant en compte tous les atomes

où n_1 , n_2 et n_3 sont des entiers. Le réseau de périodicité \mathbf{t} est appelé réseau direct ou réseau de Bravais. Cette périodicité du cristal va permettre de déterminer les états électroniques dans le semiconducteur sans avoir à considérer, en même temps, les 10^{23} atomes.

1.1.1 États électroniques dans les semiconducteurs

Le calcul des états en prenant en considération toutes les particules du cristal dont le nombre est de l'ordre de 10^{23} paraît prohibitif. En effet, il faudrait calculer des valeurs propres de matrices dont les dimensions seraient du même ordre de grandeur. On se sert donc de la structure périodique du cristal pour rendre le calcul plus accessible. Les états électroniques dans les semiconducteurs se déterminent en résolvant l'équation de Schrödinger :

$$H \psi = E \psi \quad (1.3)$$

H étant le hamiltonien et E, un état propre du système associé à la fonction d'onde ψ .

$$H \psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{2m_0} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

\mathbf{p} étant le moment cinétique de l'électron.

Le potentiel V , vu par un électron dans le cristal, étant périodique : $V(\mathbf{r} + \mathbf{t}) = V(\mathbf{r})$, le théorème de Bloch [14] permet d'écrire la fonction d'onde de l'électron sous la forme suivante (fonctions de Bloch) :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (1.5)$$

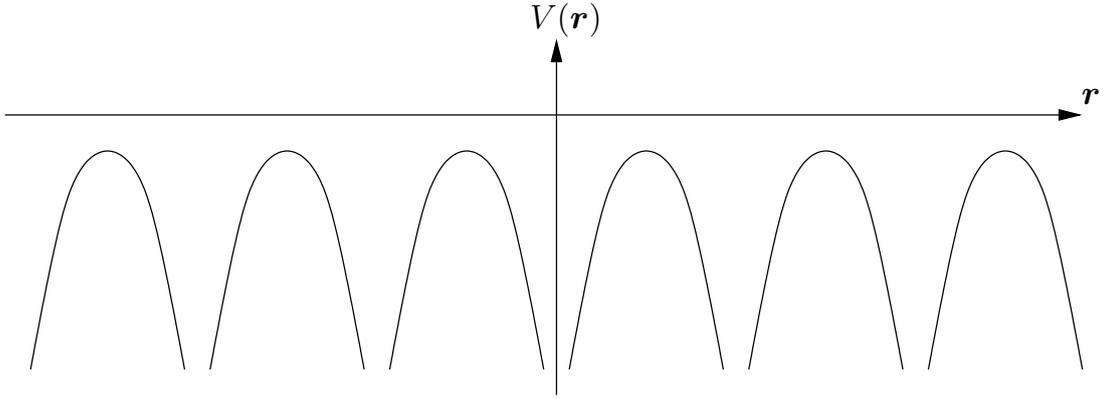


FIG. 1.6 – Image 1D simplifiée du potentiel vu par un électron dans un cristal

\mathbf{k} étant le vecteur d'onde et les fonctions u_k contenant la périodicité du réseau.

$$\mathbf{k} = \frac{n_1}{N_1} \mathbf{k}_1 + \frac{n_2}{N_2} \mathbf{k}_2 + \frac{n_3}{N_3} \mathbf{k}_3 \quad (1.6)$$

où N_1 , N_2 et N_3 sont les nombres de nœuds du réseau direct dans les directions de \mathbf{t}_1 , \mathbf{t}_2 et \mathbf{t}_3 .

$$\mathbf{k}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{t}_2 \times \mathbf{t}_3}{(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3)} \quad \mathbf{k}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{t}_3 \times \mathbf{t}_1}{(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3)} \quad \mathbf{k}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{t}_1 \times \mathbf{t}_2}{(\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \mathbf{t}_3)} \quad (1.7)$$

Les vecteurs \mathbf{k}_1 , \mathbf{k}_2 et \mathbf{k}_3 définissent le réseau réciproque dont la maille élémentaire est appelée zone de Brillouin. Cette zone est représentée dans le cas d'un réseau cubique à faces centrées sur la figure 1.7.

On montre également [14] que les fonctions u_k doivent vérifier l'équation aux valeurs propres suivante :

$$\left(\frac{1}{2m_0} (\mathbf{p} + \mathbf{k})^2 + V(\mathbf{r}) \right) u_k(\mathbf{r}) = E_k u_k(\mathbf{r}) \quad (1.8)$$

De nombreuses méthodes ont été mises en œuvre pour résoudre cette équation aux valeurs propres afin de déterminer les bandes d'énergie :

- la méthode LCAO (Linear Combination of Atomic Orbitals) consiste à écrire les orbitales moléculaires sous forme de combinaison linéaire des orbitales atomiques;
- la méthode OPW (Orthogonalized Plane Waves) décrit les états électroniques à partir des états de l'électron libre perturbé par la périodicité du cristal. Elle nécessite de traiter séparément les états de la couche interne et les états de valence;
- la méthode du pseudopotentiel permet de calculer à la fois les états de conduction et de valence en prenant en compte les états de la couche interne par un potentiel équivalent appelé pseudopotentiel.

La résolution de cette équation donne, en utilisant la méthode du pseudopotentiel [15], les bandes que l'on peut voir sur la figure 1.8 dans le cas du GaAs [10].

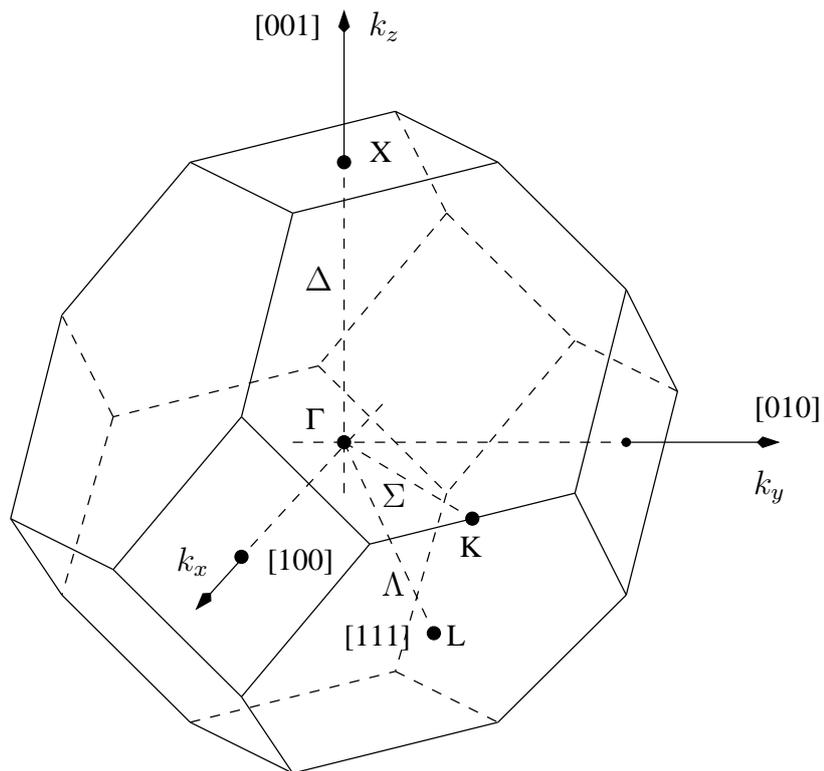


FIG. 1.7 – Zone de Brillouin d'un réseau cubique à faces centrées

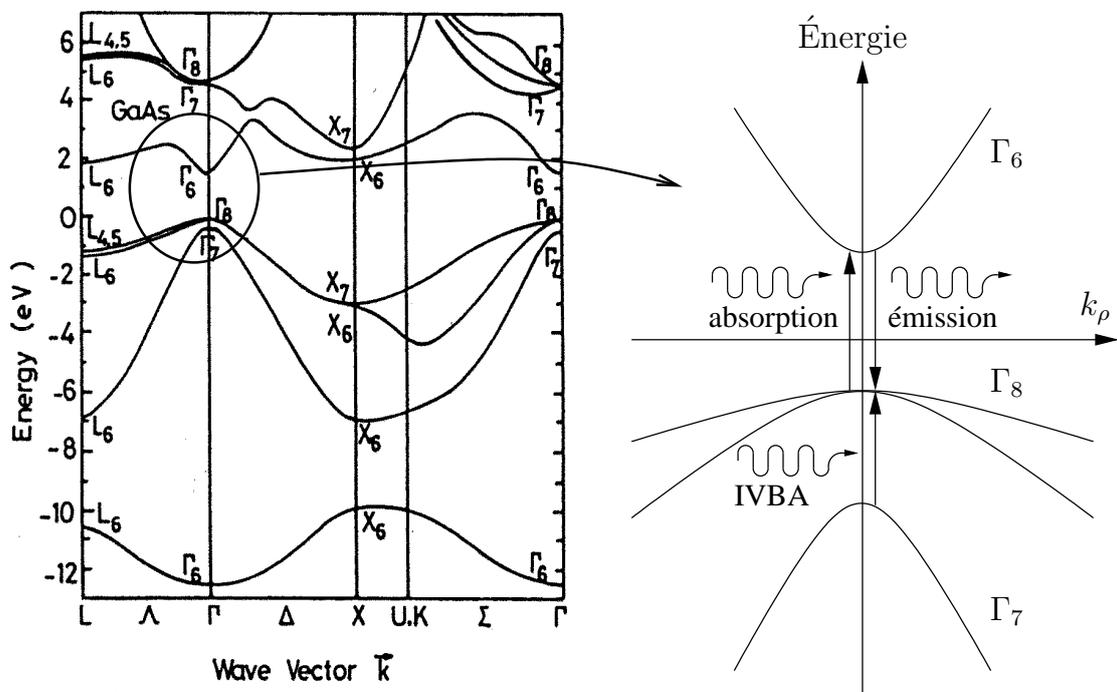


FIG. 1.8 – Bandes d'énergie du GaAs dans la zone de Brillouin

Le moment cinétique de l'électron n'est pas suffisant pour décrire l'ensemble des états électroniques possibles. On introduit alors un moment cinétique tenant compte du spin de l'électron, qui pour une même valeur énergétique peut avoir l'un des deux états notés : $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$. La fonction d'onde prend alors une forme bidimensionnelle. On ne peut pas négliger cet élément qui lève la dégénérescence des bandes Γ_7 et Γ_8 en $\mathbf{k} = 0$ et favorise ainsi les transitions optiques à grandes longueurs d'onde entre ces deux bandes appelées IVBA (Intra-Valence Band Absorption). Si l'on considère l'interaction Spin-Orbite, le hamiltonien est alors modifié et l'on doit résoudre [14] :

$$\left(\frac{1}{2m_0} (\mathbf{p} + \mathbf{k})^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{1}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})) \cdot (\mathbf{p} + \mathbf{k}) \right) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.9)$$

$\boldsymbol{\sigma}$ représente les matrices de Pauli :

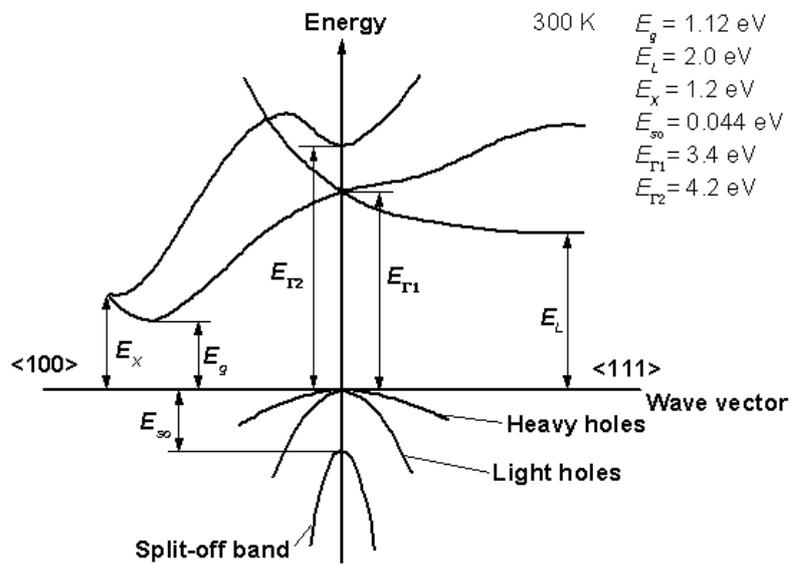
$$\bar{\bar{\sigma}}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \bar{\bar{\sigma}}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \bar{\bar{\sigma}}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.10)$$

À $T = 0\text{K}$, lorsque la bande de conduction est vide et que les bandes de valence sont remplies, il ne peut y avoir de transfert de charges dans la structure. À température ambiante, certains électrons passent de la bande de valence vers la bande de conduction. Il peut y avoir alors un déplacement des charges, la structure devient conductrice. Ce transfert entre ces deux bandes est également important pour les interactions lumière-matière. Dans le cas des bandes du GaAs (figure 1.8), le minimum de la bande de conduction ainsi que le maximum de la bande de valence se trouvent tous les deux au centre de la zone de Brillouin, en Γ . On dit que le matériau est à gap direct. Lorsque ces deux extrema ne sont pas tous les deux en Γ , on dit que le matériau est à gap indirect c'est le cas, par exemple, du silicium (voir les bandes figure 1.9a) et du germanium (voir les bandes figure 1.9b). La conservation des moments implique que si l'on passe d'un état de la bande de valence caractérisé par un moment \mathbf{k}_v à un état de la bande de conduction caractérisé par \mathbf{k}_c , on doit avoir : $\mathbf{k}_c = \mathbf{k}_v + \mathbf{k}_{opt}$ (règle de conservation des \mathbf{k}). Le moment dû au photon étant négligeable devant celui de l'électron, on doit avoir : $\mathbf{k}_c = \mathbf{k}_v$.

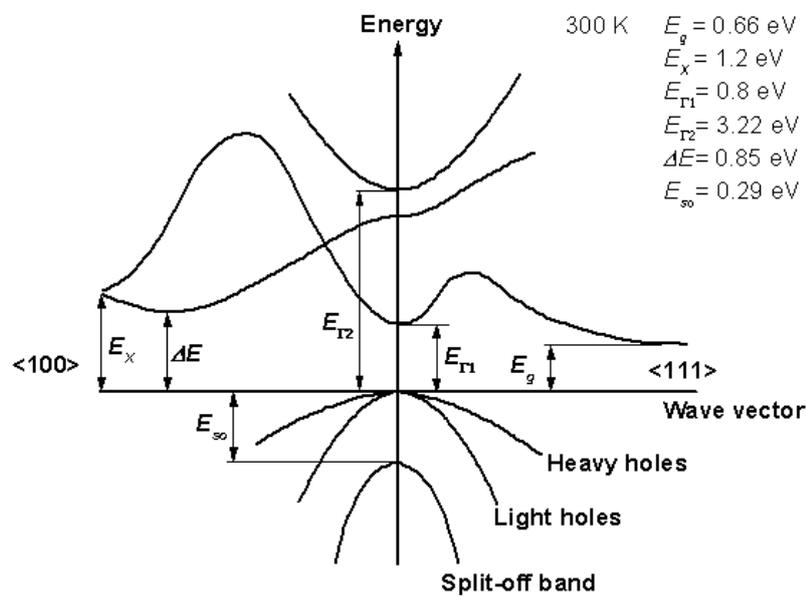
1.1.2 La méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ et le modèle de Kane

Pour les composants optoélectroniques, les bandes intéressantes pour les transitions optiques sont les bandes Γ_6 , Γ_7 et Γ_8 au voisinage du point Γ . E.O. Kane [16] propose, en utilisant la méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ pour résoudre l'équation (1.9), une approximation parabolique de ces bandes d'énergie au voisinage du centre de la zone de Brillouin ($\mathbf{k} \sim 0$). On écrit le hamiltonien de l'électron en faisant la somme d'une partie non perturbée (indépendante de \mathbf{k}) : H_0 et d'une perturbation dépendante de \mathbf{k} : $H'(\mathbf{k})$.

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{1}{2m_0} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r})) \cdot \mathbf{p} \\ H'(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \mathbf{k}^2 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \left(\mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V(\mathbf{r}) \right) \end{aligned} \quad (1.11)$$



a)



b)

FIG. 1.9 – Structures de bandes du Si a) et du Ge b) montrant un gap indirect

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

$$H_0 u_{n0} = \epsilon_{n0} u_{n0} \quad (1.12)$$

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

- $|S \uparrow\rangle$ et $|S \downarrow\rangle$ pour les états de conduction qui correspondent à la même valeur propre E_s ;
- $|X \uparrow\rangle, |X \downarrow\rangle, |Y \uparrow\rangle, |Y \downarrow\rangle, |Z \uparrow\rangle$ et $|Z \downarrow\rangle$ pour les états de valence qui correspondent à la même valeur propre E_p . Les états de conduction, comme les états de valence sont donc dégénérés.

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

$$\begin{aligned} & |iS \downarrow\rangle, \quad \left| \frac{X - iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle, \quad |Z \downarrow\rangle, \quad \left| -\frac{X + iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle \\ & |iS \uparrow\rangle, \quad \left| -\frac{X + iY}{\sqrt{2}} \downarrow \right\rangle, \quad |Z \uparrow\rangle, \quad \left| \frac{X - iY}{\sqrt{2}} \downarrow \right\rangle \end{aligned}$$

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

$$H = \begin{bmatrix} H_{int} & 0 \\ 0 & H_{int} \end{bmatrix} \quad (1.13)$$

où :

$$H_{int} = \begin{bmatrix} E_s & 0 & kP & 0 \\ 0 & E_p - \frac{\Delta}{3} & \sqrt{2}\frac{\Delta}{3} & 0 \\ kP & \sqrt{2}\frac{\Delta}{3} & E_p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_p + \frac{\Delta}{3} \end{bmatrix} \quad (1.14)$$

Le paramètre de Kane P et l'énergie Δ (énergie de Split-Off) entre les bandes Γ_7 et Γ_8 , sont :

$$\begin{aligned} P &= -i \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_z | Z \rangle \\ \Delta &= \frac{3i\hbar}{4m_0^2 c^2} \left\langle X \left| \frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x \right| Y \right\rangle \end{aligned} \quad (1.15)$$

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

$$H_{int} = \begin{bmatrix} E_g & 0 & kP & 0 \\ 0 & -\frac{2\Delta}{3} & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & 0 \\ kP & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -\frac{\Delta}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (1.16)$$

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

$$E'(E' - E_g)(E' + \Delta) - k^2 P^2(E' + 2\Delta/3) = 0 \quad (1.17)$$

Pour une valeur très petite de k^2 , les trois valeurs propres seront très proches de $E' = E_g$, $E' = 0$ et $E' = -\Delta$. La dépendance de l'énergie selon k^2 s'obtient en remplaçant E' successivement par $E_g + E(k^2)$, $0 + E(k^2)$ et $-\Delta + E(k^2)$ dans l'équation (1.17). La variation d'énergie $E(k^2)$ étant très petite devant E_g et Δ , on peut établir les approximations suivantes (les quatre valeurs propres du hamiltonien sont notées E_c , E_{hh} , E_{lh} et E_{so}) :

$$\begin{aligned} E_c(k) &= E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{k^2 P^2(E_g + 2\Delta/3)}{E_g(E_g + \Delta)} \\ E_{hh}(k) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \\ E_{lh}(k) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{2k^2 P^2}{3E_g} \\ E_{so}(k) &= -\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{k^2 P^2}{3(E_g + \Delta)} \end{aligned} \quad (1.18)$$

On a donc une approximation parabolique de la dispersion des bandes d'énergie au voisinage de $k = 0$. Cependant, ce modèle n'est pas suffisamment précis car le couplage avec les autres bandes d'énergie a été négligé, il en résulte une erreur sur la masse effective des trous lourds. Même si dans les applications optoélectroniques, seules les bandes Γ_6 , Γ_7 et Γ_8 nous intéressent, le couplage avec les autres bandes est tel qu'il ne peut être négligé. Il faut donc faire appel à un modèle plus précis.

1.1.3 Le modèle de Luttinger-Kohn

Le modèle proposé par Luttinger-Kohn [17] prend en compte l'influence des autres bandes sur les bandes de trous lourds, de trous légers et de Split-Off. On sépare les bandes selon deux groupes A et B. Les bandes auxquelles on s'intéresse particulièrement qui sont les bandes de valence Γ_7 et Γ_8 sont dans le groupe A et toutes les autres sont dans le groupe B. On note que la bande de conduction est prise en compte dans le groupe B. On développe la fonction d'onde sur la base des fonctions $u_{j0}(\mathbf{r})$, solutions de l'équation (1.9) en $\mathbf{k} = 0$:

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{j'}^A a_{j'}(\mathbf{k}) u_{j'0}(\mathbf{r}) + \sum_{\gamma}^B a_{\gamma}(\mathbf{k}) u_{\gamma0}(\mathbf{r}) \quad (1.19)$$

Le hamiltonien est décomposé en deux parties :

$$H = H_0 + H' \quad (1.20)$$

avec :

$$\begin{aligned}
 H_0 &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \\
 H' &= \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \Pi \\
 \Pi &= \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V
 \end{aligned} \tag{1.21}$$

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

$$\begin{aligned}
 u_{10}(\mathbf{r}) &= \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle \\
 u_{20}(\mathbf{r}) &= \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{-1}{\sqrt{6}} |(X + iY) \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle \\
 u_{30}(\mathbf{r}) &= \left| \frac{3}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY) \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow\rangle \\
 u_{40}(\mathbf{r}) &= \left| \frac{3}{2}, \frac{-3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle \\
 u_{50}(\mathbf{r}) &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X + iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \\
 u_{60}(\mathbf{r}) &= \left| \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X - iY) \uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \downarrow\rangle
 \end{aligned} \tag{1.22}$$

Ces fonctions sont solutions de l'équation :

$$H(\mathbf{k} = 0)u_{j0}(\mathbf{r}) = E_j(0)u_{j0}(\mathbf{r}) \tag{1.23}$$

en posant le changement d'énergie suivant :

$$\begin{aligned}
 E_j(0) &= E_p + \frac{\Delta}{3} = 0 \text{ pour } j = 1,2,3,4 \\
 E_j(0) &= E_p - \frac{2\Delta}{3} = -\Delta \text{ pour } j = 5,6
 \end{aligned} \tag{1.24}$$

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

$$\sum_{j'}^A (U_{jj'}^A - E\delta_{jj'})a_{j'}(\mathbf{k}) = 0 \tag{1.25}$$

où :

$$U_{jj'}^A = H_{jj'} + \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \frac{H'_{j\gamma} H'_{\gamma j'}}{E_0 - E_\gamma} \tag{1.26}$$

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

$$U_{jj'}^A = \left[E_j(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{jj'} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \sum_{\alpha, \beta} \frac{k_\alpha k_\beta p_{j\gamma}^\alpha p_{j'\gamma}^\beta}{E_0 - E_\gamma} \quad (1.27)$$

Le hamiltonien obtenu est de la forme :

$$H = - \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -S/\sqrt{2} & \sqrt{2}R \\ -S^* & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{3/2}S \\ R^* & 0 & P-Q & S & \sqrt{3/2}S^* & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^* & S^* & P+Q & -\sqrt{2}R^* & -S^*/\sqrt{2} \\ -S^*/\sqrt{2} & -\sqrt{2}Q^* & \sqrt{3/2}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^* & \sqrt{3/2}S^* & \sqrt{2}Q^* & -S/\sqrt{2} & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \quad (1.28)$$

où :

$$\begin{aligned} P &= \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ Q &= \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \\ R &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[-\sqrt{3}\gamma_2(k_x^2 - k_y^2) + i2\sqrt{3}\gamma_3 k_x k_y \right] \\ S &= \frac{\hbar^2 \gamma_3}{m_0} \sqrt{3}(k_x - i k_y) k_z \end{aligned} \quad (1.29)$$

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

1.2 Approximation de la fonction enveloppe

Lorsqu'on utilise des hétérostructures, les deux phénomènes importants, à prendre en compte, sont la quantification due à la faible épaisseur des couches et la contrainte due à la différence de maille atomique des couches déposées sur le substrat. Le premier phénomène auquel nous nous intéressons est la quantification dans la direction (z) (voir figure 1.10).

Le modèle décrivant la densité de probabilité électronique dans les hétérostructures III-V est celui de la fonction d'onde enveloppe. Ce modèle revient à écrire que l'onde de Bloch de base dans chaque couche, gouvernée par les états "atomiques" propres à chaque matériau, est modulée par une enveloppe lentement variable à l'échelle de la distance inter-atomique :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi(z) u(\mathbf{r}) \quad (1.30)$$

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

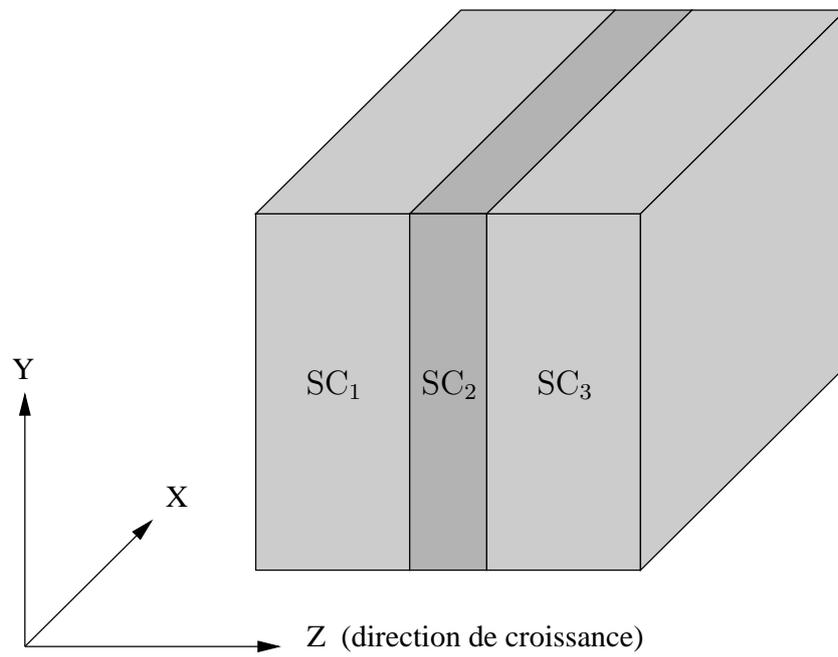


FIG. 1.10 – Définition des axes

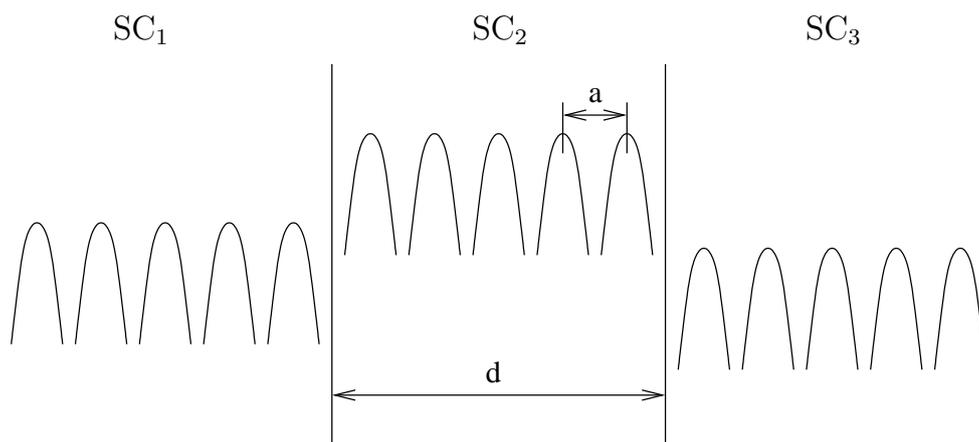


FIG. 1.11 – Potentiel vu par un électron dans une hétérostructure

Avec une hétérostructure, la périodicité du potentiel est rompue de par la différence des matériaux. L'électron n'est plus soumis à un potentiel uniquement périodique comme cela est montré sur la figure 1.11, le hamiltonien est alors de la forme :

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V_c(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \quad (1.31)$$

où $V_c(\mathbf{r})$ est le potentiel périodique propre à chaque matériau et $V(\mathbf{r})$ est un potentiel lentement variable en fonction de \mathbf{r} . Si $V(\mathbf{r}) = 0$, les solutions de l'équation de Schrödinger (1.3) sont des ondes de Bloch.

Nous proposons la notation suivante : (z) désigne la direction perpendiculaire aux couches et (xy), le plan parallèle à celles-ci. Pour la suite, nous définissons k_ρ , le module du moment \mathbf{k}_ρ , parallèle aux couches :

$$k_\rho^2 = k_x^2 + k_y^2 \quad (1.32)$$

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

1.3 Effets de la contrainte

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

Prenons le cas de deux cristaux comme le montre la figure 1.12.

Après épitaxie, le dépôt est déformé par le substrat (voir figure 1.13). Soit $\vec{X} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$, la position d'un atome de cristal du matériau SC_1 avant épitaxie. Sa nouvelle position est $\vec{X}' = \bar{\bar{\epsilon}} \vec{X}$ avec :

$$\bar{\bar{\epsilon}} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix}, \text{ tenseur de déformation du cristal dans le cas d'une déformation biaxiale.}$$

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_0 - a}{a} = \epsilon, \text{ c'est le substrat qui impose sa maille.}$$

a_0 étant le paramètre de maille du substrat et a celui de la couche déposée. De plus, la théorie de l'élasticité nous permet d'écrire les relations constitutives entre le tenseur d'élasticité $\bar{\bar{C}}$, le tenseur

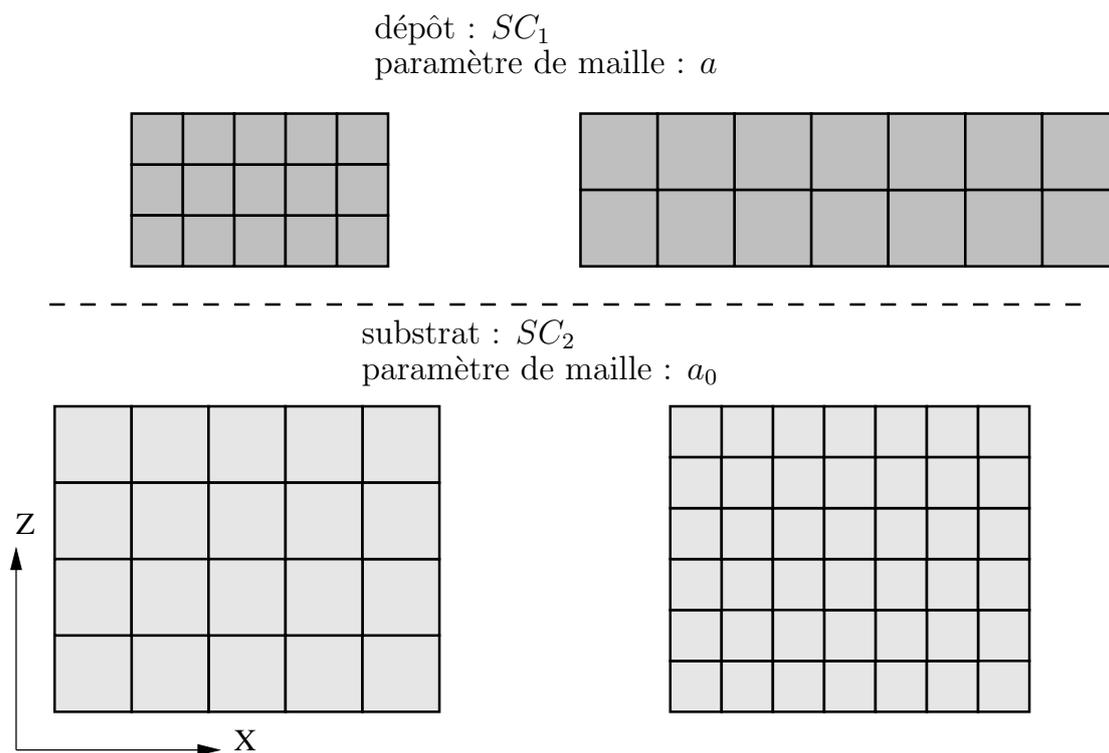


FIG. 1.12 – Cristaux non contraints

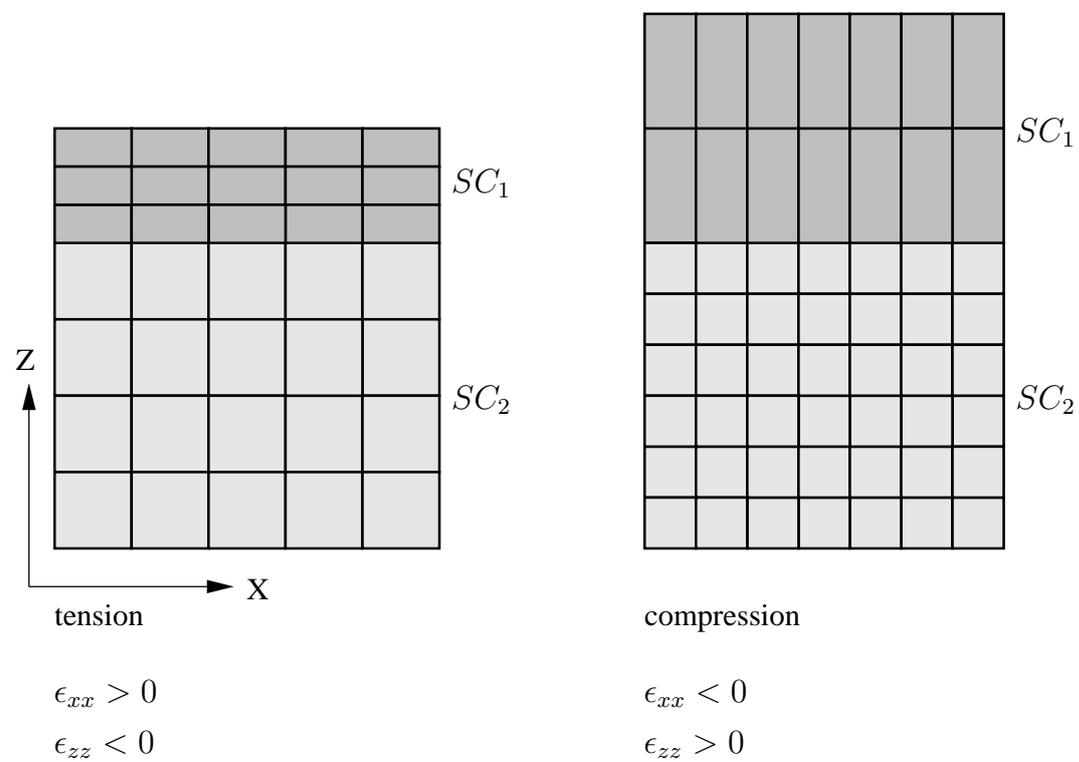


FIG. 1.13 – Structures contraintes

de contrainte $\bar{\sigma}$ et le tenseur de déformation $\bar{\epsilon}$:

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ij,kl} \epsilon_{kl} \quad (1.33)$$

Dans le cas d'un matériau linéaire et isotropique :

$$\sigma_{zz} = C_{zz,xx} \epsilon_{xx} + C_{zz,yy} \epsilon_{yy} + C_{zz,zz} \epsilon_{zz} \quad (1.34)$$

et $C_{zz,xx} = C_{zz,yy}$ notés C_{12} ($C_{zz,zz}$ est noté C_{11} car $C_{zz,zz} = C_{xx,xx}$ dans ce cas). On a alors : $\sigma_{zz} = 2C_{12} \epsilon_{xx} + C_{11} \epsilon_{zz}$. Le matériau ne subissant aucune contrainte, autre que la pression atmosphérique qui peut être négligée, suivant l'axe (z) ($\sigma_{zz} = 0$), on a :

$$\epsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{xx} \quad (1.35)$$

La contrainte entraîne une variation du potentiel comme cela est montré dans le cas d'un puits contraint en compression sur la figure 1.14.

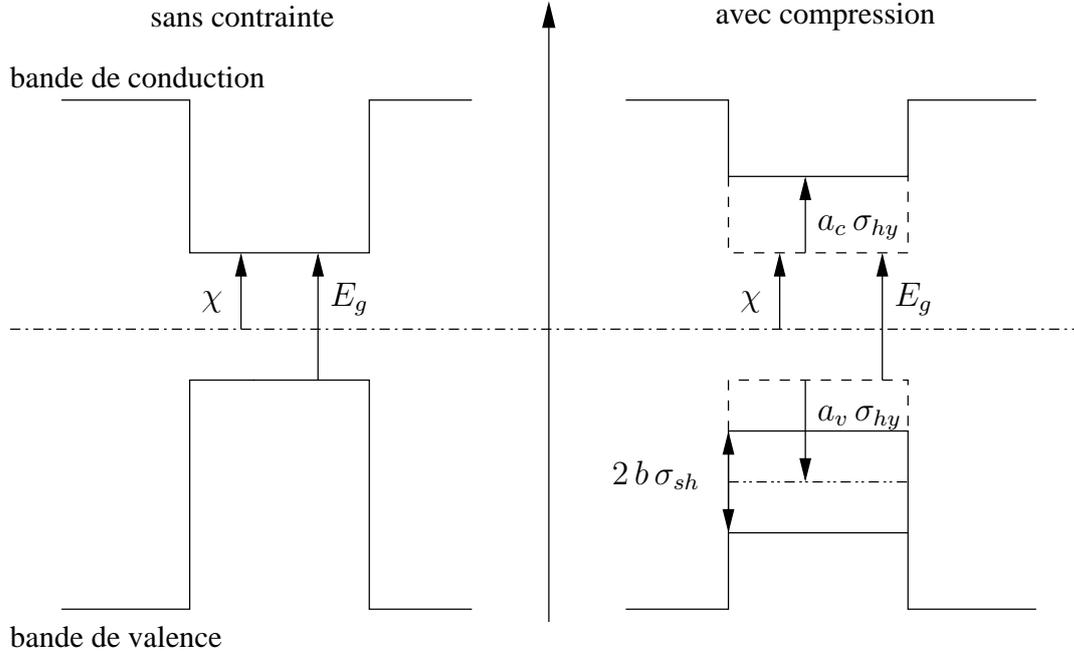


FIG. 1.14 – Déformation du potentiel en fonction de la contrainte (cas de la compression)

Pour la bande de conduction, $V_c = \chi + a_c (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})$, où χ est l'affinité du matériau et a_c , le potentiel de déformation.

$$V_c = \chi + 2 a_c \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \epsilon_{xx} \quad (1.36)$$

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

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

$$V_h = \chi - E_g + 2a_v \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon_{xx} + b \left(1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon_{xx} \quad (1.37)$$

$$V_l = \chi - E_g + a_v (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) - \frac{b}{2} (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} - 2\epsilon_{zz})$$

$$V_l = \chi - E_g + 2a_v \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon_{xx} - b \left(1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon_{xx} \quad (1.38)$$

En posant les quantités suivantes : $\sigma_{hy} = 2 \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon_{xx}$, contrainte hydrostatique, $\sigma_{sh} = \left(1 + \frac{2C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon_{xx}$, contrainte de cisaillement, on peut alors établir la variation du gap dans le matériau :

$$E_{g,h} = V_c - V_h = E_g + (a_c - a_v) \sigma_{hy} - b \sigma_{sh} \quad (1.39)$$

$$E_{g,l} = V_c - V_l = E_g + (a_c - a_v) \sigma_{hy} + b \sigma_{sh} \quad (1.40)$$

Le matériau $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ est souvent utilisé à partir d'un substrat InP, on dit qu'il est contraint

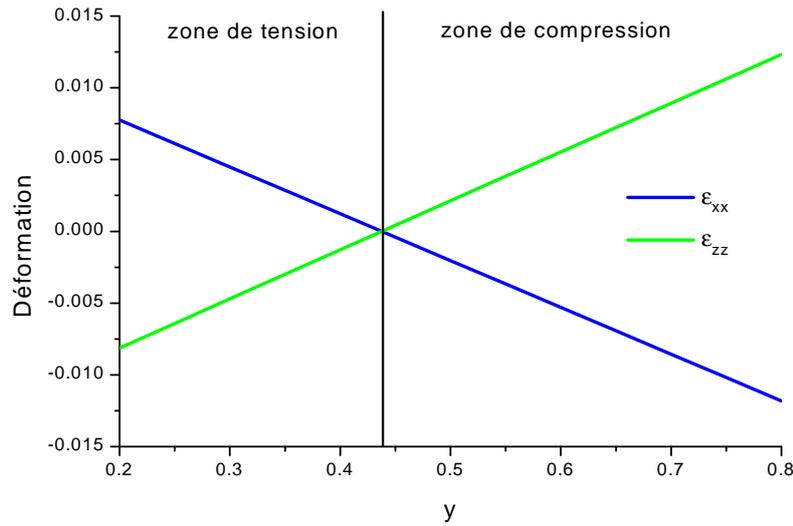


FIG. 1.15 – Variation de la déformation du matériau $\text{Ga}_{0.2}\text{In}_{0.8}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$, contraint sur InP, en fonction de y

sur InP. C'est en faisant varier la concentration des éléments que l'on va pouvoir modifier le gap et l'affinité des matériaux pour choisir la longueur d'onde d'émission d'un laser. Nous avons fixé la concentration en Ga à 0.2 et nous avons tracé les déformations selon les axes (x) et (z) en faisant varier la concentration en As de 0.2 à 0.8. Nous avons alors deux zones de contrainte comme nous pouvons le voir sur la figure 1.15. La première correspond à la zone de tension pour une concentration en As inférieure à 0.437 et pour une concentration en As supérieure, le matériau est alors contraint en compression. Pour une concentration en As de 0.437, le matériau est en accord de maille sur InP : il n'y a pas de contrainte.

1.4 Hamiltonien des électrons

1.4.1 Hamiltonien des électrons dans la bande de conduction

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

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_e} \frac{\partial}{\partial z} \right) + \frac{\hbar^2 k_\rho^2}{2m_e} + V_c(z) \right) \Psi(z) = E \Psi(z) \quad (1.41)$$

où V_c est le potentiel de conduction donné en (1.36), m_e est la masse effective de l'électron. Cette formulation prend en compte la dispersion en énergie selon le plan parallèle aux couches ainsi que la contribution à l'affinité et la variation hydrostatique de l'énergie de conduction. Sans couplage, la relation de dispersion en énergie selon k_ρ est donnée selon l'approximation parabolique :

$$E_c(k_\rho) = E_c(0) + \frac{\hbar^2}{2m_e} k_\rho^2 \quad (1.42)$$

Cependant cette approximation n'est pas toujours valable surtout quand la structure comporte des matériaux dont la masse effective dans chaque matériau est très différente. Un exemple montrant une différence entre l'approximation parabolique et le calcul exact est donné au chapitre 3.2.

1.4.2 Hamiltonien des trous dans la bande de valence : description matricielle

Le problème des états de valence est plus complexe en raison de la dégénérescence des trous lourds et des trous légers et de la proximité de la bande dite de split-off (spin-orbite). Les deux bandes de trous lourds et de trous légers se trouvent alors découplées à la fois par la quantification du mouvement dans la direction z et par la contrainte bi-axiale. Le modèle faisant intervenir ces deux contributions est le modèle de Pikus-Bir [18]. La représentation de la fonction d'onde des états au voisinage du gap dans un semi-conducteur IV ou III-V est donnée par les huit combinaisons de moment orbital et de spin (modèle de Kane ou de Luttinger). En découplant la bande de conduction on retient six états. La méthode de perturbation des états dégénérés conduit à un hamiltonien 6×6 qui peut être factorisé en deux blocs 3×3 [19] :

$$\overline{\overline{H}}_v = \begin{bmatrix} \overline{\overline{H}}^U & 0 \\ 0 & \overline{\overline{H}}^L \end{bmatrix} \quad (1.43)$$

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

$$B_1 = \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \\ |3\rangle \\ |4\rangle \\ |5\rangle \\ |6\rangle \end{pmatrix} \quad B_2 = \begin{pmatrix} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{pmatrix} \quad (1.44)$$

et

$$U = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & -i\alpha^* & 0 & 0 \\ 0 & i\beta & -\beta^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -i\beta & -\beta^* \\ \alpha & 0 & 0 & -i\alpha^* & 0 & 0 \\ 0 & -i\beta & -\beta^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -i\beta & -\beta^* \end{pmatrix} \quad (1.45)$$

où $\alpha = \exp(-i3\phi/2)/\sqrt{2}$, $\beta = \exp(-i\phi/2)/\sqrt{2}$ et $\tan(\phi) = k_x/k_y$.

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

$$\overline{\overline{H}}_v^{U,L} = - \begin{bmatrix} P + Q - V_h & R \mp iS & \sqrt{2}R \pm \frac{i}{\sqrt{2}}S \\ R^* \pm iS^* & P - Q - V_l & \sqrt{2}Q \pm i\sqrt{\frac{3}{2}}S \\ \sqrt{2}R^* \mp \frac{i}{\sqrt{2}}S^* & \sqrt{2}Q^* \mp i\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & P + \Delta_{so} - V \end{bmatrix} \quad (1.46)$$

avec :

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

$$\overline{H}_v^U = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_{hk\rho}} k_\rho^2 - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_{hz}} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right) + V_h(z) & -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_R} k_\rho^2 - \frac{1}{m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_R} k_\rho^2 + \frac{1}{m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) & -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_{lk\rho}} k_\rho^2 - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_{lz}} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right) + V_l(z) \\ -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\sqrt{2}}{m_R} k_\rho^2 - \frac{1}{\sqrt{2}m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) & -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\sqrt{2}}{m_0} (\gamma_2 k_\rho^2 - 2 \frac{\partial}{\partial z} (\gamma_2 \frac{\partial}{\partial z})) - \frac{\sqrt{3/2}}{m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) + b \sigma_{sh} \\ & -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\sqrt{2}}{m_R} k_\rho^2 + \frac{1}{\sqrt{2}m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\sqrt{2}}{m_0} (\gamma_2 k_\rho^2 - 2 \frac{\partial}{\partial z} (\gamma_2 \frac{\partial}{\partial z})) + \frac{\sqrt{3/2}}{m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) + b \sigma_{sh} & \\ & -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_{sk\rho}} k_\rho^2 - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_{sz}} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right) + V_s(z) \end{bmatrix} \quad (1.47)$$

où γ_1 , γ_2 et γ_3 sont les paramètres de Luttinger que l'on peut relier aux masses effectives des matériaux non contraints par les cinq relations suivantes :

$$\begin{aligned} m_{hz} &= \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2} & \text{et} & & m_{lz} &= \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2} \\ m_{hk\rho} &= \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma_2} & \text{et} & & m_{lk\rho} &= \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma_2} \\ m_{sz} &= m_{sk\rho} = \frac{m_0}{\gamma_1} \end{aligned} \quad (1.48)$$

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

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

En tenant compte des contraintes :

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

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

$$\psi_v = \begin{pmatrix} \psi_v^{hh} \\ \psi_v^{lh} \\ \psi_v^{sh} \end{pmatrix} \quad (1.49)$$

1.5 Éléments de calcul du gain matériau et de l'absorption

Les états électroniques étant connus, on peut alors calculer le gain matériau. Il s'agit d'évaluer le rapport entre le nombre net de photons et le nombre de photons injectés dans la zone active du composant. Quand on utilise les semiconducteurs pour les lasers ou les amplificateurs optiques, il faut pouvoir évaluer les phénomènes schématisés sur la figure 1.16, à savoir :

- l'absorption où l'énergie $\hbar\omega$ d'un photon est utilisée pour permettre à un électron de passer d'un état E_b de la bande de valence vers un état vide E_a de la bande de conduction tels que $E_a - E_b = \hbar\omega$;

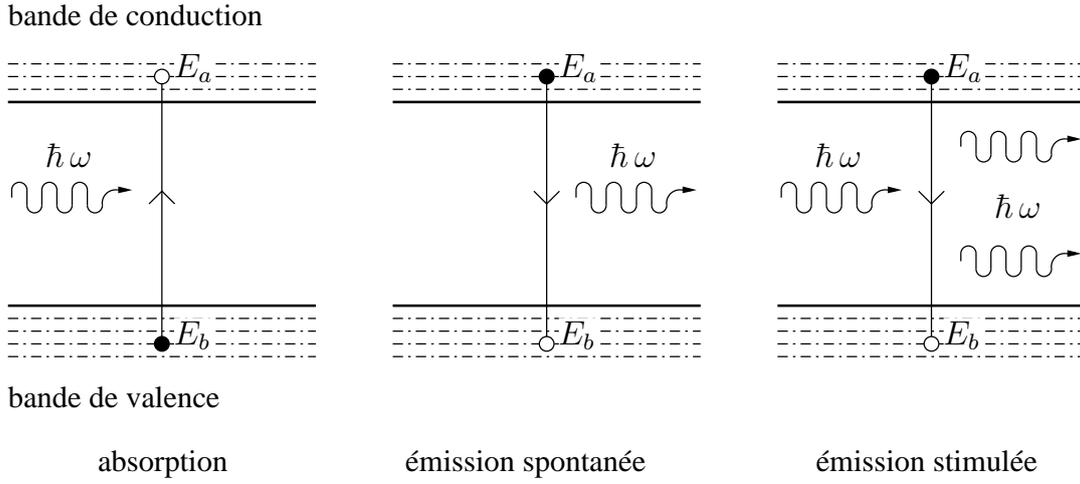


FIG. 1.16 – Schéma des transitions radiatives entre un état de la bande de valence et un état de la bande de conduction

- l'émission spontanée où un électron passe d'un état E_a de la bande de conduction vers un état vide E_b de la bande de valence en émettant un photon d'énergie $\hbar\omega = E_a - E_b$;
- l'émission stimulée où un photon d'énergie $\hbar\omega$ vient interagir avec le semiconducteur pour favoriser le passage d'un électron d'un état E_a de la bande de conduction vers un état vide E_b de la bande de valence en émettant un deuxième photon identique au premier.

L'interaction entre les photons et les électrons dans un semiconducteur est décrite par le hamiltonien suivant :

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{1}{2m_0} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) \\
 &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) - \frac{1}{2m_0} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \frac{e^2 \mathbf{A}^2}{2m_0}
 \end{aligned} \tag{1.50}$$

Ce hamiltonien peut se mettre sous la forme :

$$H = H_0 + H_{int} \tag{1.51}$$

avec :

$$H_{int} \simeq -\frac{e}{m_0} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \tag{1.52}$$

Le terme $e^2 \mathbf{A}^2 / 2m_0$ a été négligé car $|e\mathbf{A}| \ll |\mathbf{p}|$.

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

$$N_{inj} = \frac{S}{\hbar\omega} \tag{1.53}$$

Le potentiel vecteur \mathbf{A} du champ optique est de la forme :

$$\mathbf{A} = A_0 \cos(\mathbf{k} \mathbf{r} - \omega t) \mathbf{u} \quad (1.54)$$

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

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

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\omega A_0 \sin(\mathbf{k} \mathbf{r} - \omega t) \mathbf{u} \quad (1.55)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A} = -\frac{1}{\mu} A_0 \sin(\mathbf{k} \mathbf{r} - \omega t) \mathbf{k} \times \mathbf{u} \quad (1.56)$$

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

$$S = |\langle \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) \rangle| = \frac{n_r c \epsilon_0 \omega^2 A_0^2}{2} \quad (1.57)$$

n_r étant l'indice réel du matériau considéré, μ la perméabilité magnétique, ϵ_0 la constante diélectrique du vide et c la vitesse de la lumière dans le vide.

Le nombre de photons injectés est S divisé par l'énergie d'un photon :

$$N_{inj} = \frac{S}{\hbar \omega} = \frac{n_r c \epsilon_0 \omega A_0^2}{2 \hbar} \quad (1.58)$$

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

$$R_{v \rightarrow c} = \frac{2}{V} \sum_{n, m} \sum_{\mathbf{k}_\rho} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_n | H_{int} | \Psi_m \rangle|^2 \delta(E_c^n - E_v^m - \hbar \omega) f_v (1 - f_c) \quad (1.59)$$

$$R_{c \rightarrow v} = \frac{2}{V} \sum_{n, m} \sum_{\mathbf{k}_\rho} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_n | H_{int} | \Psi_m \rangle|^2 \delta(E_v^m - E_c^n - \hbar \omega) f_c (1 - f_v) \quad (1.60)$$

n parcourant les états de conduction et m les états de valence. Le premier facteur 2 vient du fait que l'on prend en compte les deux états de spin possibles pour l'électron [10, §3.7]. Comme nous l'avions abordé au paragraphe 1.1.1, la règle de conservation des moments implique que les moments de deux états électroniques permettant une transition via l'émission ou l'absorption d'un photon doivent être identiques. C'est pour cela que, dans les expressions de $R_{v \rightarrow c}$ et $R_{c \rightarrow v}$, la somme est faite sur le même moment \mathbf{k}_ρ pour les états de conduction et de valence.

D'autre part, l'électron à l'état n est caractérisé par la fonction d'onde :

$$\Psi_{c,n}^\sigma = \frac{e^{i \mathbf{k}_\rho \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{C}} \psi_{c,n}(k_\rho, z) |s \sigma\rangle \quad (1.61)$$

où $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow , la constante C étant choisie de manière à normer la fonction d'onde : $|\Psi_{c,n}^\sigma| = 1$
 Pour un trou, s'agissant de la partie haute du hamiltonien, on a :

$$\Psi_{v,m}^U = \frac{e^{i\mathbf{k}_\rho \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{C}} [\psi_{v,m}^{hh}(k_\rho, z) |1\rangle + \psi_{v,m}^{lh}(k_\rho, z) |2\rangle + \psi_{v,m}^{sh}(k_\rho, z) |3\rangle] \quad (1.62)$$

pour un état de la partie basse du hamiltonien :

$$\Psi_{v,m}^L = \frac{e^{i\mathbf{k}_\rho \cdot \mathbf{r}}}{\sqrt{C}} [\psi_{v,m}^{hl}(k_\rho, z) |4\rangle + \psi_{v,m}^{ll}(k_\rho, z) |5\rangle + \psi_{v,m}^{sl}(k_\rho, z) |6\rangle] \quad (1.63)$$

U et L représentant la partie haute et basse du hamiltonien des trous de la bande de valence (1.46).
 Les facteurs d'occupation des bandes de conduction et de valence f_c et f_v sont donnés par les relations suivantes :

$$f_c = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_c - E_{fc}}{k_B T}\right)} \quad \text{et} \quad f_v = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_v - E_{fv}}{k_B T}\right)} \quad (1.64)$$

f_c et $1 - f_c$ représentent, respectivement, l'occupation des électrons et des trous dans la bande de conduction. De même, f_v et $1 - f_v$ représentent, respectivement, l'occupation des électrons et des trous dans la bande de valence.

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

$$N_{net} = R_{v \rightarrow c} - R_{c \rightarrow v} = \frac{2}{V} \sum_{n,m} \sum_{\mathbf{k}_\rho} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_n | H_{int} | \Psi_m \rangle|^2 \delta(E_v^m - E_c^n - \hbar\omega) (f_v - f_c) \quad (1.65)$$

or :

$$\langle \Psi_n | H_{int} | \Psi_m \rangle = -\frac{e A_0}{2 m_0} \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}_{cv} \quad (1.66)$$

l'élément de matrice \mathbf{p}_{cv} dépendant des fonctions de Bloch, incluant également les fonctions enveloppes. On peut donc exprimer le nombre net de photons émis en fonction de A_0 :

$$N_{net} = \frac{\pi e^2 A_0^2}{V \hbar m_0^2} \sum_{n,m} \sum_{\mathbf{k}_\rho} |\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2 \delta(E_v^m - E_c^n - \hbar\omega) (f_v - f_c) \quad (1.67)$$

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

$$g_{mat} = -\frac{N_{net}}{N_{inj}} = \frac{\pi e^2}{n_r \epsilon_0 c m_0^2 \omega} \frac{2}{V} \sum_{n,m} \sum_{\mathbf{k}_\rho} |\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2 \delta(E_v^m - E_c^n - \hbar\omega) (f_c - f_v) \quad (1.68)$$

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

$$g_{ivba} = \frac{\pi e^2}{n_r \epsilon_0 c m_0^2 \omega} \frac{2}{V} \sum_{n,m} \sum_{\mathbf{k}_\rho} |\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p}_{nm}|^2 \delta(E_v^m - E_v^n - \hbar\omega) (f_v^m - f_v^n) \quad (1.69)$$

Le calcul des éléments de matrice optique pour le gain et l'IVBA ainsi que le problème de la fonction de Dirac seront abordés au chapitre 5.

1.6 Conclusion

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

Chapitre 2

Les différentes méthodes de calcul de la fonction enveloppe

La forme de Ben-Daniel-Duke (1.41) n'a pas de solution analytique si la masse effective et le potentiel varient en fonction de l'axe (z). Dans le but d'améliorer à la fois la précision et l'efficacité selon le type de structure que l'on veut simuler, nous comparons plusieurs méthodes de calcul des états liés et des dispersions des bandes d'énergie dans les hétérostructures. On peut classer ces méthodes de calcul selon qu'elles sont essentiellement numériques (différences finies, éléments finis) ou bien semi-analytiques (ondes planes, matrice de transfert). Cependant, afin de situer notre travail, nous préférons présenter ces techniques selon qu'elles s'appuient ou non sur la méthode de Galerkin, qui sera l'objet du présent travail.

En effet, nous proposons une nouvelle approche particulièrement efficace et rapide en temps de calcul que nous avons appliquée dans le cas de potentiels constants par morceaux. Elle peut cependant être plus générale et s'appliquer si la forme du potentiel entre les puits peut être définie de manière analytique.

2.1 Méthodes non Galerkin

2.1.1 Méthode des différences finies

Il s'agit d'une des plus anciennes techniques numériques de résolution des équations différentielles ou aux dérivées partielles décrite par Euler [20] et commentée par Ames [21]. Cette méthode est utilisée pour des problèmes discrétisés via les développements de Taylor. Si $f(z)$ est une fonction univoque, continue et indéfiniment dérivable dans \mathbb{R} on démontre qu'il existe un réel ξ ($z < \xi < z + \Delta z$) tel que :

$$f(z + \Delta z) = f(z) + \Delta z f'(z) + \dots + \frac{(\Delta z)^n}{n!} f^{(n)}(z) + \frac{(\Delta z)^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \quad (2.1)$$

De même :

$$f(z - \Delta z) = f(z) - \Delta z f'(z) + \frac{(\Delta z)^2}{2!} f''(z) + \dots \quad (2.2)$$

De ces deux relations, on peut déduire trois approximations pour $f'(z)$:

$$f'(z) = \frac{f(z + \Delta z) - f(z)}{\Delta z} + O(\Delta z) \text{ décentrée avant} \quad (2.3)$$

$$f'(z) = \frac{f(z) - f(z - \Delta z)}{\Delta z} + O(\Delta z) \text{ décentrée arrière} \quad (2.4)$$

$$f'(z) = \frac{f(z + \Delta z) - f(z - \Delta z)}{2 \Delta z} + O(\Delta z^2) \text{ dérivée centrée} \quad (2.5)$$

et une approximation pour la dérivée seconde :

$$f''(z) = \frac{f(z + \Delta z) + f(z - \Delta z) - 2f(z)}{(\Delta z)^2} + O(\Delta z^2) \quad (2.6)$$

où $O(y)$ tend vers 0 comme y . Il est intéressant de noter que l'approximation en dérivée centrée est meilleure dans la mesure où le terme d'erreur est en $O(\Delta z^2)$ alors qu'il est en $O(\Delta z)$ dans les autres schémas.

Pour l'équation de Schrödinger (1.41) (cas des électrons dans la bande de conduction), l'utilisation de ces schémas peut conduire à un problème discrétisé qui est sensiblement différent du problème original :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + V \psi = E \psi \quad (2.7)$$

discrétisé sur un maillage uniforme, $z = z_i$, $z + \Delta z = z_{i+1}$, $z - \Delta z = z_{i-1}$. Le hamiltonien est alors discrétisé en chaque nœud i du maillage représenté sur la figure 2.1:

$$\begin{aligned} H_i &= \frac{\left(\frac{1}{m} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right)_{i+1/2} - \left(\frac{1}{m} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right)_{i-1/2}}{\Delta z} + V_i \psi_i \\ &= \frac{\left(\frac{1}{m_{i+1/2}} \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{\Delta z} \right) - \left(\frac{1}{m_{i-1/2}} \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{\Delta z} \right)}{\Delta z} + V_i \psi_i \\ &= \frac{1}{(\Delta z)^2} \left[\frac{1}{m_{i+1/2}} \psi_{i+1} + \frac{1}{m_{i-1/2}} \psi_{i-1} - \frac{2}{m_i} \psi_i \right] + V_i \psi_i \end{aligned} \quad (2.8)$$

L'opérateur ainsi discrétisé, portant sur $\vec{\psi} = (\psi_1, \dots, \psi_N)$, n'est plus hermitique si $m_{i+1/2} \neq m_{i-1/2}$, ce qui peut conduire à des problèmes de recherche des valeurs propres. Il convient donc de veiller scrupuleusement au schéma de discrétisation. Nous reviendrons sur les propriétés du hamiltonien discrétisé au paragraphe 4.5.

La discrétisation du hamiltonien des trous dans la bande de valence (1.47) conduit à la diagonalisation d'une matrice tridiagonale par blocs.

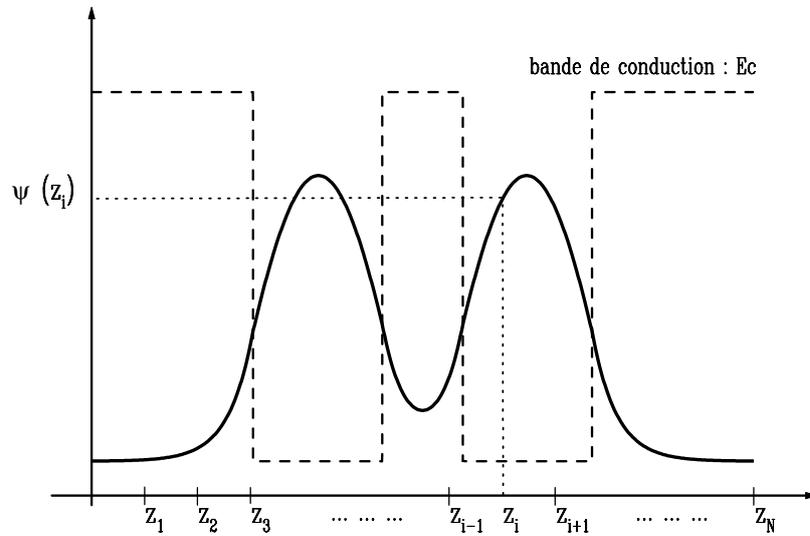


FIG. 2.1 – Fonction d’onde du premier niveau d’énergie dans une structure à deux puits quantiques; la fonction d’onde est en trait plein, la bande de conduction est en tirets

2.1.2 Méthode de la matrice de transfert

La méthode de la matrice de transfert consiste à propager la fonction d’onde à travers chacune des couches de l’hétérostructure comme cela est schématisé sur la figure 2.2. Cette méthode a été présentée par S.L. Chuang [22]. La fonction d’onde est écrite sous forme de combinaison linéaire d’une onde transmise et d’une onde réfléchi. Pour la bande de conduction :

$$\psi(z) = A e^{j k_i (z-z_i)} + B e^{-j k_i (z-z_i)} \quad (2.9)$$

où $k_i = \frac{\sqrt{2 m_i^* |V_{ci} - E|}}{\hbar}$ est le vecteur d’onde.

Dans le cas de la description complète d’un état de la bande de valence, il faudrait considérer un état à 6 dimensions : 2 fois (trous lourds + trous légers + split-off). On aurait alors six composantes pour définir la fonction d’onde. Nous présentons la méthode restreinte au cas de la partie haute du hamiltonien et en négligeant le couplage avec la bande de split-off. Le hamiltonien utilisé dans l’article de Chuang est celui présenté dans le chapitre précédent (voir 1.4.2), restreint au couplage trous lourds – trous légers qui peut se mettre sous la forme :

$$H = - \left[\begin{array}{cc} P + Q + \zeta & \tilde{R} \\ \tilde{R}^* & P - Q - \zeta \end{array} \right] + V_h(z) \quad (2.10)$$

où $\tilde{R} = |R| - i|S|$.

La diagonalisation du hamiltonien conduit à deux valeurs propres :

$$E_{H,L} - V_h(z) = P \pm \sqrt{(Q + \zeta)^2 + \tilde{R} \tilde{R}^*} \quad (2.11)$$

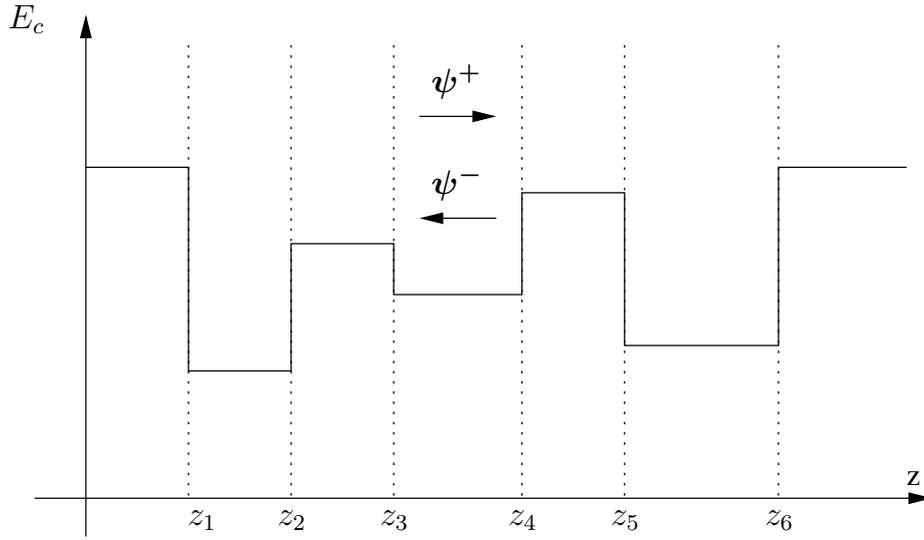


FIG. 2.2 – Décomposition de la fonction d'onde électronique dans le cas de la méthode de la matrice de transfert suivant le schéma d'une onde propagative et d'une onde réfléchie

associées aux vecteurs propres :

$$F_H = \begin{bmatrix} F_{1H} \\ F_{2H} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P - (Q + \zeta) - E \\ -\tilde{R}^* \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

et

$$F_L = \begin{bmatrix} F_{1L} \\ F_{2L} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{R} \\ E - P - (Q + \zeta) \end{bmatrix} \quad (2.13)$$

Les valeurs propres et vecteurs propres du hamiltonien sont fonctions des paramètres matériaux donc sont différents pour chacune des couches de la structure et ont des termes en k_ρ^2 , k_z^2 , k_x^2 et k_y^2 . On peut donc exprimer k_z^2 en fonction de E. L'équation (2.11) peut donc s'écrire sous la forme :

$$k_z^2 = A(E) \pm B(E) \quad (2.14)$$

Cela donne donc quatre valeurs pour k_z : $\pm k_z^H$ et $\pm k_z^L$.

Dans chaque couche j de l'hétérostructure, la fonction d'onde prend la forme d'un vecteur à deux composantes :

$$\begin{aligned} \psi_j(z) = \begin{bmatrix} \psi_{Hj}(z) \\ \psi_{Lj}(z) \end{bmatrix} &= A_{Hj} \mathbf{F}_{Hj} e^{i k_z^{Hj}(z-z_j)} + A_{Lj} \mathbf{F}_{Lj} e^{i k_z^{Lj}(z-z_j)} \\ &+ B_{Hj} \mathbf{F}_{Hj}^- e^{-i k_z^{Hj}(z-z_j)} + B_{Lj} \mathbf{F}_{Lj}^- e^{-i k_z^{Lj}(z-z_j)} \end{aligned} \quad (2.15)$$

où :

– k_H et k_L sont les vecteurs d'onde des trous lourds (H) et des trous légers (L).

- F_H, F_L, F_H^- et F_L^- sont les vecteurs propres correspondant aux valeurs propres E du hamiltonien H.

La continuité, aux interfaces, de la fonction d'onde ψ_j et de l'opérateur vitesse :

$$\begin{bmatrix} u \frac{\partial}{\partial z} & v \\ -v & w \frac{\partial}{\partial z} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{Hj} \\ \psi_{Lj} \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

permettent d'établir la relation de récurrence suivante entre les différents coefficients :

$$M_j \begin{bmatrix} A_{Hj} \\ A_{Lj} \\ B_{Hj} \\ B_{Lj} \end{bmatrix} = M_{j+1} P_{j+1} \begin{bmatrix} A_{Hj+1} \\ A_{Lj+1} \\ B_{Hj+1} \\ B_{Lj+1} \end{bmatrix} \quad (2.17)$$

Dans la première et la dernière zone de la structure qui sont des barrières de potentiel, la fonction d'onde doit être évanescence ce qui implique $A_{H1} = A_{L1} = 0$ et $B_{HN} = B_{LN} = 0$. On peut alors établir l'équation de dispersion suivante :

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ B_{H1} \\ B_{L1} \end{bmatrix} = U \begin{bmatrix} A_{HN} \\ A_{LN} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

où

$$\begin{aligned} U &= M_1^{-1} M_2 P_2 M_2^{-1} \dots M_N P_N \\ &= \begin{bmatrix} U_a & U_b \\ U_c & U_d \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (2.19)$$

les blocs U_a, U_b, U_c et U_d sont de dimension 2×2 . On peut alors chercher les états liés en annulant, par exemple, le déterminant de U_a . On est amené à résoudre : $\det|U_a| = 0$.

Pour une valeur E de l'énergie, on propage l'onde à travers la structure. Si cette valeur correspond à un état stationnaire du système alors les continuités de la fonction d'onde et de l'opérateur vitesse doivent être assurées à chaque interface. De plus, les conditions aux limites impliquent : $\psi(-\infty) = \psi(+\infty) = \mathbf{0}$. C'est donc en parcourant l'axe des énergies et en testant chacune des valeurs que l'on va pouvoir déterminer les états liés de la structure.

Cette méthode s'est avérée difficile de mise en œuvre. En effet tout repose sur la précision en énergie pour résoudre $\det|U_a| = 0$. Quand un grand nombre de sous-bandes de valence sont couplées, une très faible erreur en énergie provoque un changement de sous-bande inexact. Nous reviendrons sur ce problème à propos de la structure à confinement séparé (SCH) au paragraphe 4.6.

2.1.3 Méthode des ondes planes

La méthode proposée par D. Gershoni [23] pour le calcul des états dans les hétérostructures est basée sur le modèle de Kane, modifié par Pikus-Bir pour tenir compte des contraintes. Il s'agit d'une

méthode $\mathbf{k.p}$ généralisée sur la base 8×8 :

$$\begin{aligned} &|s \uparrow\rangle, |p_x \uparrow\rangle, |p_y \uparrow\rangle, |p_z \uparrow\rangle \\ &|s \downarrow\rangle, |p_x \downarrow\rangle, |p_y \downarrow\rangle, |p_z \downarrow\rangle \end{aligned}$$

On obtient un hamiltonien du type :

$$H = \begin{bmatrix} G & \Gamma \\ -\Gamma^* & G^* \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

où G et Γ sont des matrices de dimension 4×4 . Les résultats de la méthode $k.p$ donnent des termes en k^2 , k_j et $k_i k_j$ ($j = x, y$ ou z) avec la règle :

$$k_j \rightarrow \frac{1}{i} \frac{\partial}{\partial x_j}$$

L'équation générale de Schrödinger est :

$$H_0 \Psi = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right) \Psi = E \Psi \quad (2.21)$$

où $V(r)$ contient l'ensemble des potentiels vu par un électron (SO, contrainte, ...). Dans cette méthode, l'approximation de la fonction enveloppe est également utilisée :

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n U_n(\mathbf{r}) F_n(\mathbf{r}) \quad (2.22)$$

$U_n(\mathbf{r})$ sont les fonctions d'onde de centre de zone et $F_n(\mathbf{r})$ sont les fonctions enveloppes. n parcourt les états les plus proches du gap en centre de zone. En appliquant l'équation de Schrödinger à (2.20) et (2.22), on obtient 8 équations différentielles couplées :

$$\sum_n [H(\mathbf{r}, \mathbf{k})]_{m,n} F_n(\mathbf{r}) = E F_m(\mathbf{r}) \quad (2.23)$$

Les auteurs proposent une modification du système différentiel pour tenir compte des conditions aux interfaces qui sont :

$$\begin{aligned} &\Psi(z) \quad \text{continue} \\ &\frac{1}{m} \frac{\partial \Psi(z)}{\partial z} \quad \text{continue} \\ &\left\{ \begin{array}{l} Q \frac{\partial}{\partial x_j} \rightarrow \frac{1}{2} \left[Q \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} Q \right] \\ Q \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \rightarrow \frac{1}{2} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} Q \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} Q \frac{\partial}{\partial x_j} \right] \end{array} \right. \end{aligned}$$

La dépendance spatiale des paramètres matériaux est exprimée en fonction de sauts en $x = x_0$:

$$Q(x) = Q_A + (Q_B - Q_A) \Theta(x - x_0) \quad (2.24)$$

avec :

$$\Theta(x - x_0) = \begin{cases} 0 & x < x_0 \\ 1 & x \geq x_0 \end{cases} \quad (2.25)$$

Dans l'article de Gershoni, on introduit volontairement des fonctions de Dirac à l'interface qui se traduisent par des développements en série de Fourier avec de nombreux termes :

$$F_n(\mathbf{r}) = \sum_{j,l,m}^{\infty} F_n(j,l,m) \phi_{j,l,m}(x,y,z) \quad (2.26)$$

où $\phi_{j,l,m}$ sont des ondes planes :

$$\phi_{j,l,m}(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{2i\pi(j\frac{x}{L_x} + l\frac{y}{L_y} + m\frac{z}{L_z})} \quad (2.27)$$

Pour obtenir l'équation de dispersion en \mathbf{k} , on multiplie l'équation (2.23) par $\phi_{j,l,m}^*(x,y,z)$ et on intègre :

$$\sum_{n' j' l' m'} H_{n n'}(j' l' m', j l m) F_{n'}(j' l' m') \quad (2.28)$$

où n et n' vont de 1 à 8 et $j l m j' l' m'$ avec autant de termes que le développement en série de Fourier le permet. Si le problème de F ne dépend que de x , on peut se passer de projeter sur l et m ce qui conduit à un problème de dimension $8 \times M$, M étant le nombre de composantes de Fourier :

$$F_n(x) = \sum_{j=-J}^J F_n(j) \phi_j(x) e^{ik_x y + ik_z z} \quad (2.29)$$

(k_x et k_y sont arbitraires et sont en fait des paramètres du problème). Les éléments de matrice sont donnés par :

$$H_{n n'}(j', j, k_y, k_z) = \int_0^X \phi_{j'}^*(x) H_{n n'} \left(x, k_y, k_z, \frac{\partial}{\partial x} \right) \phi_j(x) dx \quad (2.30)$$

Pour une simple hétérojonction, on retrouve bien la méthode de la matrice de transfert.

Cette méthode est connue pour être sûre et stable contrairement à la matrice de transfert. Cependant l'introduction explicite des fonctions de Dirac pour respecter les conditions de raccord fait qu'un très grand nombre d'ondes planes doit être pris en compte. On aboutit alors à une matrice séculaire pleine ce qui se traduit par un temps de calcul prohibitif.

2.2 Méthode de Galerkin

2.2.1 Présentation de la méthode de Galerkin

Considérons, par exemple, une équation différentielle à deux dimensions (2.31), linéaire de la forme générale :

$$L(u(x,y)) = 0 \quad (2.31)$$

sur un domaine D de \mathbb{R}^2 où L est un opérateur différentiel linéaire et u , une fonction de deux variables définie sur le domaine D . Les conditions aux limites étant données par : $S(u(x,y)) = 0$. La méthode de Galerkin [24] permet d'écrire une solution approchée en décomposant la fonction cherchée u sous forme de combinaison linéaire de fonctions f_i vérifiant $S(f_i) = 0$ dont on connaît les expressions analytiques :

$$u(x,y) = u_0(x,y) + \sum_{i=1}^n a_i f_i \quad (2.32)$$

Soit R , le résidu apparaissant en remplaçant (2.32) dans (2.31) :

$$R = L(u) = L(u_0) + \sum_{i=1}^n a_i L(f_i) \quad (2.33)$$

Les coefficients a_i sont obtenus en résolvant le système d'équations :

$$\langle R | f_k \rangle = 0, k = 1, \dots, n \quad (2.34)$$

Le produit scalaire étant défini de la manière suivante :

$$\langle f | g \rangle = \iint_D f^* g \, dx \, dy \quad (2.35)$$

f^* étant le conjugué de f .

2.2.2 La base des éléments finis

La méthode des éléments finis est un cas particulier de la méthode de Galerkin. Dans le logiciel ETHER (Etude du Transport dans les HETéRojonctions) [25], le problème 1D est discrétisé suivant les éléments finis de Lagrange d'ordre n , on écrit la fonction d'onde cherchée sous la forme :

$$\psi(z) = \sum_j a_j \varphi_j(z) \quad (2.36)$$

où j parcourt les nœuds du maillage de la structure. La fonction φ_j , j étant un nœud d'un élément K , est définie de la manière suivante :

$$\varphi_j(z) = 0 \text{ en dehors de } K, \quad (2.37)$$

$$\varphi_j(z) = \prod_{i=1, i \neq j}^{n+1} \frac{z_i - z}{z_i - z_j} \text{ sur } K. \quad (2.38)$$

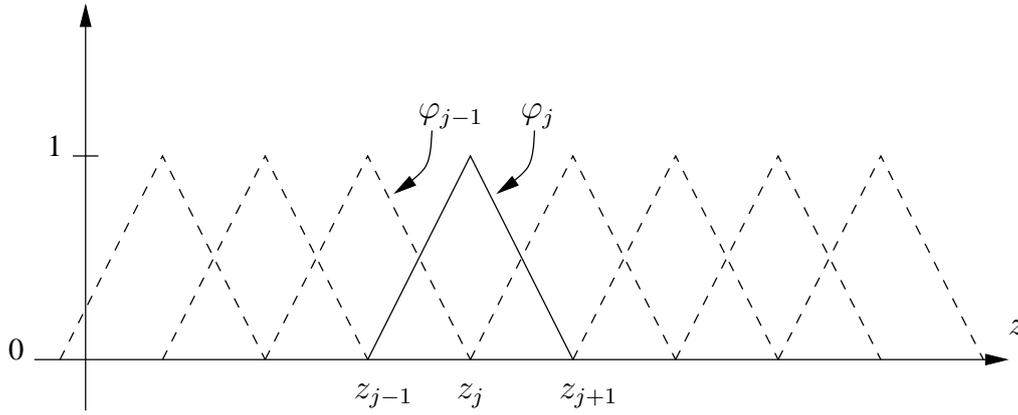


FIG. 2.3 – Éléments finis de Lagrange au premier ordre

Les fonctions de base à l'ordre 1 sont représentées sur la figure 2.3.

C'est le passage à la formulation faible, c'est-à-dire la projection sur les fonctions de base, qui permet de résoudre le problème. L'équation (1.3) est multipliée par une fonction de base et est ensuite intégrée sur la fenêtre de calcul. Pour la bande de conduction, par exemple, on obtient :

$$\sum_K \left(\int_K -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \psi(z)}{\partial z} \right) \varphi_i(z) dz + \int_K V(z) \psi(z) \varphi_i(z) dz \right) = \sum_K \int_K E \psi(z) \varphi_i(z) dz \quad (2.39)$$

En intégrant par parties, on a :

$$\begin{aligned} \left(\sum_K \left[-\frac{\hbar^2}{2} \varphi_i(z) \frac{\partial \psi(z)}{\partial z} \right]_K \right) + \sum_K \left(\int_K \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial \psi(z)}{\partial z} \frac{\partial \varphi_i(z)}{\partial z} + \int_K V(z) \psi(z) \varphi_i(z) dz \right) \\ = E \sum_K \int_K \psi(z) \varphi_i(z) dz \quad (2.40) \end{aligned}$$

Les continuités de la fonction d'onde et de l'opérateur vitesse ainsi que les conditions aux limites de Neumann pour ψ ou de Dirichlet pour φ impliquent :

$$\sum_K \left[-\frac{\hbar^2}{2} \varphi_i(z) \frac{\partial \psi(z)}{\partial z} \right]_K = 0 \quad (2.41)$$

En remplaçant ψ par sa forme linéaire, nous avons :

$$\sum_j a_j \left(\sum_K \int_K \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial \varphi_j(z)}{\partial z} \frac{\partial \varphi_i(z)}{\partial z} + V(z) \varphi_j(z) \varphi_i(z) \right) dz \right) = E \sum_j a_j \left(\sum_K \int_K \varphi_j(z) \varphi_i(z) dz \right) \quad (2.42)$$

On doit donc résoudre un système aux valeurs propres de dimension n :

$$\overline{\overline{A}} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = E \overline{\overline{B}} \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

Les éléments des matrices $\overline{\overline{A}}$ et $\overline{\overline{B}}$ sont respectivement :

$$A_{i,j} = \sum_K \int_K \left(\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial \varphi_j(z)}{\partial z} \frac{\partial \varphi_i(z)}{\partial z} + V(z) \varphi_j(z) \varphi_i(z) \right) dz \quad (2.44)$$

$$B_{i,j} = \sum_K \int_K \varphi_j(z) \varphi_i(z) dz \quad (2.45)$$

On voit que la méthode des éléments finis repose sur deux paramètres importants qui sont K (définissant le maillage) et n , l'ordre des éléments. Maintenant, si nous appliquons cette méthode à la même discrétisation de l'équation de Schrödinger au paragraphe §2.1.1 en différences finies, nous voyons que la méthode des éléments finis conduit à un opérateur discrétisé hermitique : $A_{ij} = A_{ji}^*$ et $B_{ij} = B_{ji}$.

L'application de cette méthode au hamiltonien des trous dans la bande de valence (1.47) conduit à une matrice tridiagonale par blocs :

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \psi = E \begin{pmatrix} B_{11} \\ B_{22} \\ B_{33} \end{pmatrix} \psi \quad (2.46)$$

Si la fonction d'onde s'écrit sous la forme :

$$\psi = (| \psi_h(z_1), \dots, \psi_h(z_n) | \psi_l(z_1), \dots, \psi_l(z_n) | \psi_s(z_1), \dots, \psi_s(z_n) |),$$

les sous-matrices $A_{11}, \dots, A_{33}, B_{11}, \dots, B_{33}$ sont des matrices réelles tridiagonales symétriques.

On peut changer l'ordre d'écriture de la fonction d'onde en regroupant les termes, non plus en fonction de leur état (trou lourd, trou léger ou état de la bande de split-off) mais en fonction du maillage :

$\psi = (| \psi_h(z_1), \psi_l(z_1), \psi_s(z_1) |, \dots, | \psi_h(z_n), \psi_l(z_n), \psi_s(z_n) |)$. On est alors conduit à rechercher les valeurs propres d'une matrice bande à 11 diagonales non nulles.

2.2.3 La base des états du puits simple

Nous abordons ici, la méthode développée au cours de ce travail de thèse pour le calcul des états liés dans une structure à multipuits quantiques. Elle sera décrite de façon plus exhaustive au chapitre 3. Il est intéressant de noter que les puits ne doivent pas forcément être identiques. On peut faire varier leur largeur et la hauteur des barrières qui les entourent. Cependant, contrairement à des méthodes plus générales comme celle des éléments finis ou de la matrice de transfert, notre traitement ne peut s'appliquer que si l'on peut identifier des puits dans la structure.

La méthode de Galerkin n'impose pas de règle particulière sur le choix des fonctions de base excepté le fait qu'il faut pouvoir calculer les produits scalaires définis en (2.35). L'idée, dans une structure à plusieurs puits quantiques, est de se servir des états des puits simples constituant la structure pour constituer la base de la combinaison linéaire. On calcule d'abord les états des puits supposés isolés comme sur la figure 2.4a. Dans chacun des puits, on a un seul état : dans le puits 1, on a un état associé à la fonction d'onde que l'on note φ_1 , dans le puits 2, un état associé à une fonction d'onde

φ_2 . Puis on couple les puits pour calculer les états dans l'ensemble de la structure. Dans l'exemple considéré, les deux puits sont identiques et l'association de leur état conduit à deux états liés dans la structure complète comme nous pouvons le voir sur la figure 2.4b. Ces deux états, E_1 et E_2 , sont associés aux fonctions d'onde notées ψ_1 et ψ_2 , combinaison linéaire de φ_1 et φ_2 :

$$\begin{aligned}\psi_1 &= \varphi_1 + \varphi_2 \\ \psi_2 &= \varphi_1 - \varphi_2\end{aligned}\tag{2.47}$$

Les états des puits sont alors modifiés pour former les états de la structure. Cette technique peut s'apparenter à la méthode LCAO où l'on calcule d'abord les états atomiques (on suppose l'atome isolé) puis on couple ces états pour calculer les états moléculaires.

L'avantage d'une telle base de calcul est multiple :

- il n'y a pas besoin de mailler la structure;
- les fonctions de base choisies ont déjà la forme des fonctions que l'on cherche, exponentielles et sinusoïdales;
- à condition de calculer analytiquement les intégrales des produits scalaires, le temps de calcul est fortement réduit.

Il peut être, par ailleurs, intéressant d'évaluer l'erreur faite en utilisant cette base de fonctions. Ceci, en comparant à 1 les deux quantités suivantes :

$$\frac{H \psi_1(z)}{E_1 \psi_1(z)} \quad \text{et} \quad \frac{H \psi_2(z)}{E_2 \psi_2(z)}\tag{2.48}$$

On peut alors en déduire l'erreur faite en fonction de z .

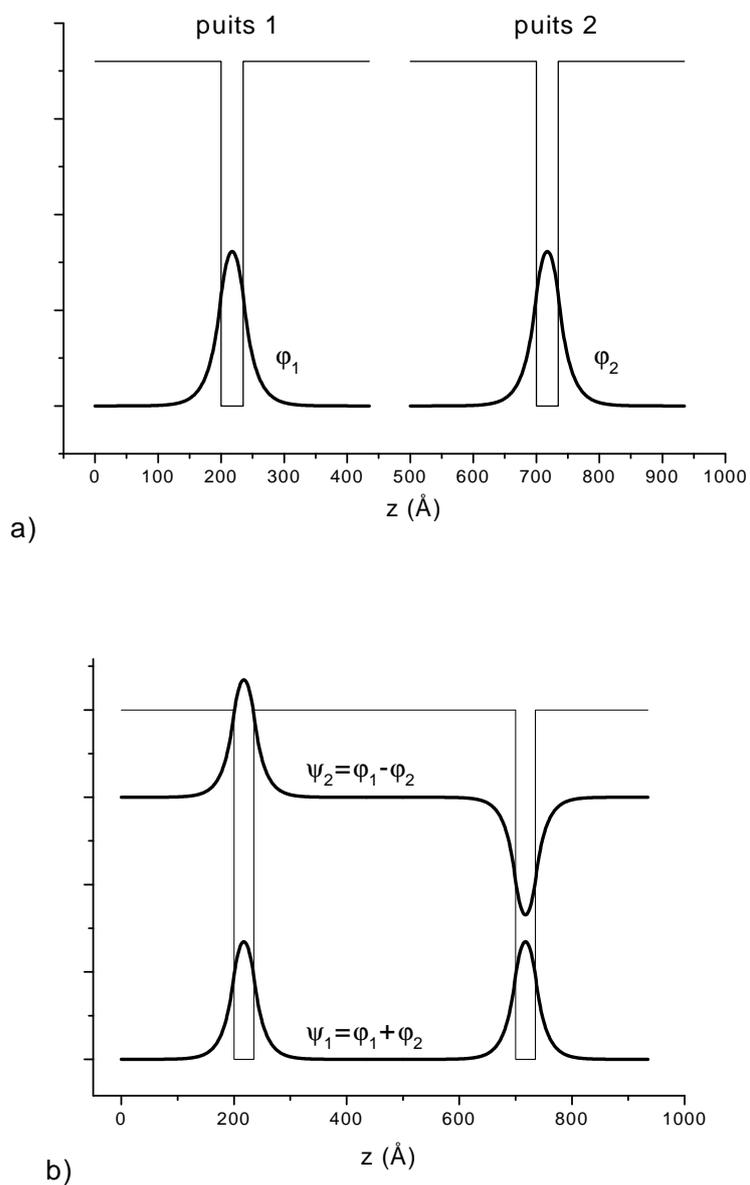


FIG. 2.4 – Fonctions d'onde de deux puits couplés (b) contenant chacun un état lié lorsqu'ils sont indépendants (a)

2.3 Conclusion

Nous avons présenté les différentes méthodes pour calculer les états liés d'une structure à multi-puits quantiques ainsi que leurs fonctions d'onde associées.

L'utilisation des différences finies et des éléments finis nécessitent un maillage de la structure dont les résultats vont dépendre. Les calculs seront également liés au choix du domaine de simulation car c'est sur ce domaine que sont appliquées les conditions aux limites. De plus, dans le cas des différences finies, le hamiltonien est modifié car c'est sa forme discrétisée qui est utilisée.

L'approche par la matrice de transfert semblait intéressante par son caractère très général mais la difficulté de mise en œuvre reste un inconvénient majeur.

Dans le cas d'une structure où l'on peut identifier des puits de potentiel pour lesquels il est possible d'avoir une expression analytique des états liés, la méthode que nous proposons semble très efficace. La mise en œuvre est détaillée dans le chapitre suivant.

Chapitre 3

Méthode de Galerkin sur la base des états du puits simple

Dans ce chapitre, nous allons détailler l'application la méthode de Galerkin sur la base des états du puits simple [26]. Après un rappel sur ce que sont les états liés dans un puits de potentiel, nous montrerons comment l'appliquer dans le cas de couplage entre puits pour une seule bande (cas de la bande de conduction). Dans un deuxième temps, nous décrirons son application dans le cas de bandes couplées (cas de la bande de valence) pour lesquelles le hamiltonien a une forme matricielle. Il faut donc, dans ce cas, pouvoir identifier les fonctions de base en décomposant le hamiltonien en plusieurs parties.

3.1 Les états liés du puits simple

La base de la méthode est le calcul des états liés dans un puits de potentiel. Nous cherchons à résoudre l'équation de Schrödinger selon l'approximation de Ben-Daniel-Duke (1.41).

Prenons le cas d'un puits simple asymétrique (cas de la figure 3.1); la recherche des états liés conduit à des solutions de la forme [27] :

$$\varphi_n(z) = \begin{cases} A_{g,n} \exp(k_{g,n} z) & z \leq 0 \\ A_{w,n} \sin(k_{w,n} z + \delta_n) & 0 \leq z \leq L_w \\ A_{d,n} \exp(-k_{d,n} z) & z \geq L_w \end{cases} \quad (3.1)$$

où :

$$k_{g,n} = \frac{\sqrt{2 m_g^* (V_g - E_n)}}{\hbar} \quad k_{w,n} = \frac{\sqrt{2 m_w^* E_n}}{\hbar} \quad k_{d,n} = \frac{\sqrt{2 m_d^* (V_d - E_n)}}{\hbar} \quad (3.2)$$

m_g^* , m_w^* et m_d^* étant la masse effective de l'électron dans, respectivement, la barrière de gauche, le puits et la barrière de droite.

En effet, dans chaque matériau, la masse effective et le potentiel sont constants. Dans la barrière de gauche $\varphi_g(z) = A_g \exp(k_g z)$, dans le puits $\varphi_w(z) = A_w \sin(k_w z + \delta)$ et dans la barrière de droite

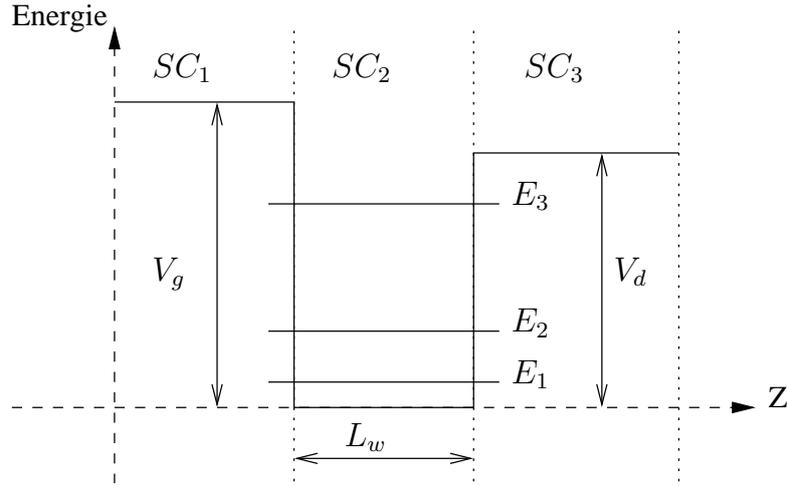


FIG. 3.1 – Puits de potentiel asymétrique (les barrières de gauche et de droite ne sont pas identiques)

$\varphi_d(z) = A_d \exp(-k_d z)$. Les conditions aux interfaces :

$$\psi \text{ continue}$$

et

$$\frac{1}{m^*} \frac{\partial \psi}{\partial z} \text{ continue}$$

permettent d'écrire le système d'équations :

$$\begin{cases} A_g = A_w \sin(\delta) \\ A_g \frac{k_g}{m_g^*} = A_w \frac{k_w}{m_w^*} \cos(\delta) \\ A_w \sin(k_w L_w + \delta) = A_d \exp(-k_d L_w) \\ A_w \frac{k_w}{m_w^*} \cos(k_w L_w + \delta) = -A_d \frac{k_d}{m_d^*} \exp(-k_d L_w) \end{cases} \quad (3.3)$$

On a donc :

$$\begin{aligned} \tan(\delta) &= \frac{m_g^* k_w}{k_g m_w^*} \\ \tan(k_w L_w + \delta) &= -\frac{m_d^* k_w}{k_d m_w^*} \end{aligned} \quad (3.4)$$

d'où l'équation de dispersion :

$$k_w L_w + \arctan\left(\frac{m_g^* k_w}{k_g m_w^*}\right) + \arctan\left(\frac{m_d^* k_w}{k_d m_w^*}\right) + n \pi = 0 \quad (3.5)$$

Les états liés dans le puits sont situés en-dessous de la barrière de plus bas potentiel: $V_{inf} = \min(V_g, V_d)$. Cette limite pour $E = V_{min}$ nous permet de connaître le nombre d'états confinés dans le puits en fonction de la masse effective de l'électron dans chaque matériau, des barrières de potentiel et de la

largeur du puits. Nous changeons de notation pour expliquer la façon de calculer le nombre d'états liés. Nous notons V_{sup} le plus grand potentiel et les masses dans les barrières sont maintenant notées m_{inf}^* et m_{sup}^* respectivement dans la barrière de plus bas potentiel et dans la barrière de plus haut potentiel. On peut alors écrire l'équation de dispersion :

$$k_w L_w + \arctan\left(\frac{m_{sup}^* k_w}{k_{sup} m_w^*}\right) + \arctan\left(\frac{m_{inf}^* k_w}{k_{inf} m_w^*}\right) + n \pi = 0 \quad (3.6)$$

Lorsque $E \rightarrow V_{inf}$,

$$\arctan\left(\frac{m_{inf}^* k_w}{k_{inf} m_w^*}\right) \rightarrow \frac{\pi}{2} \quad (3.7)$$

On peut alors en déduire le nombre d'états liés $n_{états}$ dans la structure :

$$n_{états} = 0.5 + \frac{2 L_w}{\hbar} \sqrt{2 m_w^* V_{inf}} + \frac{1}{\pi} \arctan\left(\sqrt{\frac{m_{sup}^* V_{inf}}{m_w^* |V_g - V_d|}}\right) \quad (3.8)$$

Le nombre d'états étant connu, on peut chercher, par dichotomie la valeur des états liés pour chaque n de 1 à $n_{états}$.

3.2 Application aux états de la bande de conduction

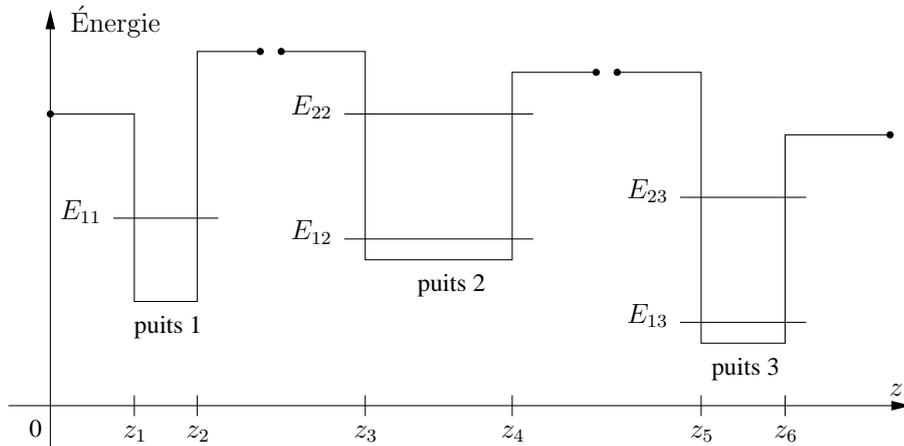


FIG. 3.2 – Bande de conduction faisant apparaître plusieurs puits quantiques; les états E_{ij} sont les états calculés dans chacun des puits découplé des autres

Dans le cas d'une structure comparable à celle représentée sur la figure 3.2, nous proposons d'utiliser la méthode de Galerkin pour déterminer les états liés directement à partir de chacun des puits isolés. Cela revient à projeter la fonction d'onde sur la base formée par les états calculés dans chaque puits isolé.

On note φ_{ij} , la fonction d'onde associée à l'état i dans le puits j . Soit ψ , une fonction d'onde de l'ensemble de la structure. On la décompose sur chacun des états calculés dans les puits supposés découplés :

$$\psi(z) = \sum_{j=1}^{N_{\text{puits}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{états}}(j)} c_{ij} \varphi_{ij}(z) \quad (3.9)$$

où N_{puits} est le nombre de puits dans la structure et $N_{\text{états}}(j)$, le nombre d'états liés dans le puits j .

En notant le résidu $R = H\psi - E\psi$, on doit avoir :

$$\begin{aligned} \langle R | \varphi_{kl} \rangle &= 0 \\ \langle H\psi - E\psi | \varphi_{kl} \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (3.10)$$

Soit, en remplaçant ψ par son expression :

$$\sum_{j=1}^{N_{\text{puits}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{états}}(j)} c_{ij} \langle \varphi_{ij} | H | \varphi_{kl} \rangle = E \sum_{j=1}^{N_{\text{puits}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{états}}(j)} c_{ij} \langle \varphi_{ij} | \varphi_{kl} \rangle \quad (3.11)$$

On est alors ramené à résoudre un système linéaire :

$$\overline{\overline{M}} \vec{C} = E \overline{\overline{R}} \vec{C} \quad (3.12)$$

où \vec{C} et E sont, respectivement, les vecteurs propres et les valeurs propres de la matrice $\overline{\overline{R}}^{-1} \overline{\overline{M}}$.

Les composantes du vecteur \vec{C} sont les coefficients de la combinaison linéaire.

Les éléments de la matrice $\overline{\overline{M}}$ sont : $M_{ij,kl} = \langle \varphi_{ij} | H | \varphi_{kl} \rangle$, représentant les intégrales de couplage.

Les éléments de la matrice $\overline{\overline{R}}$ sont : $R_{ij,kl} = \langle \varphi_{ij} | \varphi_{kl} \rangle$, représentant les intégrales de recouvrement.

Connaissant la forme des fonctions d'onde dans toute la structure, les éléments des matrices $\overline{\overline{M}}$ et $\overline{\overline{R}}$ sont calculés de façon analytique :

$$\begin{aligned} M_{ij,kl} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{ij}^\dagger(z) \underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_j^*} \frac{\partial \varphi_{kl}(z)}{\partial z} \right) + V_c(z) \varphi_{kl}(z) \right]}_{I(z)} dz \\ &= \int_{-\infty}^{z_1} I(z) dz + \int_{z_1}^{z_2} I(z) dz + \dots + \int_{z_N}^{+\infty} I(z) dz \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} R_{ij,kl} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\varphi_{ij}^\dagger(z) \varphi_{kl}(z)}_{J(z)} dz \\ &= \int_{-\infty}^{z_1} J(z) dz + \int_{z_1}^{z_2} J(z) dz + \dots + \int_{z_N}^{+\infty} J(z) dz \end{aligned} \quad (3.14)$$

On décompose les intégrales sur les $N + 1$ couches de la structure (sur la structure représentée sur la figure 3.2, $N = 6$). Nous avons pris le soin de vérifier qu'il n'y a pas de problème de convergence des intégrales en prenant des ondes évanescentes dans les barrières extrêmes. Autrement dit, pour $z \leq z_1$, $k > 0$ donc $\int_{-\infty}^{z_1} I(z) dz$ et $\int_{-\infty}^{z_1} J(z) dz$ convergent. Et pour $z \geq z_N$, $k < 0$ donc $\int_{z_N}^{+\infty} I(z) dz$ et $\int_{z_N}^{+\infty} J(z) dz$ convergent.

Prenons l'exemple de la figure 3.2, les fonctions de base sont les suivantes :

φ_{11} , φ_{21} , correspondent à l'état de base et au premier état excité du puits 1 isolé.

φ_{12} , φ_{22} , correspondent à l'état de base et aux deux premiers états excités du puits 2 isolé.

φ_{13} , φ_{23} , correspondent à l'état de base et aux deux premiers états excités du puits 3 isolé.

Les matrices $\overline{\overline{M}}$ et $\overline{\overline{R}}$ sont donc :

$$\overline{\overline{M}} = \begin{bmatrix} \langle \varphi_{11} | H | \varphi_{11} \rangle & \cdots & \langle \varphi_{11} | H | \varphi_{23} \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_{23} | H | \varphi_{11} \rangle & \cdots & \langle \varphi_{23} | H | \varphi_{23} \rangle \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

$$\overline{\overline{R}} = \begin{bmatrix} \langle \varphi_{11} | \varphi_{11} \rangle & \cdots & \langle \varphi_{11} | \varphi_{23} \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_{23} | \varphi_{11} \rangle & \cdots & \langle \varphi_{23} | \varphi_{23} \rangle \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

La fonction d'onde d'un état n de la structure va s'écrire sous la forme :

$$\psi_n(z) = c_1 \varphi_{11} + c_2 \varphi_{12} + c_3 \varphi_{22} + c_4 \varphi_{13} + c_5 \varphi_{23} \quad (3.17)$$

n étant la n -ème valeur propre associée au vecteur propre $(c_1, c_2, c_3, c_4, c_5)$ de la matrice $\overline{\overline{R}}^{-1} \overline{\overline{M}}$.

Nous avons appliqué ce calcul dans le cas de la structure composée de couches en $\text{Ga}_{0.2}\text{InAs}_{0.43}\text{P}$ (formant des barrières) et en $\text{Ga}_{0.2}\text{InAs}_{0.75}\text{P}$ dont le diagramme de bande est représenté sur la figure 3.3.

Nous avons comparé la dispersion des sous-bandes de conduction dans le cas d'une approximation parabolique et dans le cas plus exact où nous calculons les états avec la méthode de Galerkin pour chaque valeur de k_ρ sur la figure 3.4. Nous voyons nettement sur cette figure que l'approximation parabolique n'est plus valable dans le cas où on couple plusieurs puits quantiques. En effet, il faut prendre en compte la différence des matériaux : d'une part les puits ne sont pas forcément identiques et d'autre part la présence des électrons dans les barrières n'est plus négligeable lorsque les puits sont couplés. L'erreur de l'approximation parabolique est négligeable pour de petites valeurs de k_ρ pour les états de plus basse énergie (E_{c1} et E_{c2}) mais devient importante (E_{c3} et E_{c4}) pour des états proches du niveau d'énergie de la barrière même pour $k_\rho = 0$ dans le cas de l'état E_{c5} .

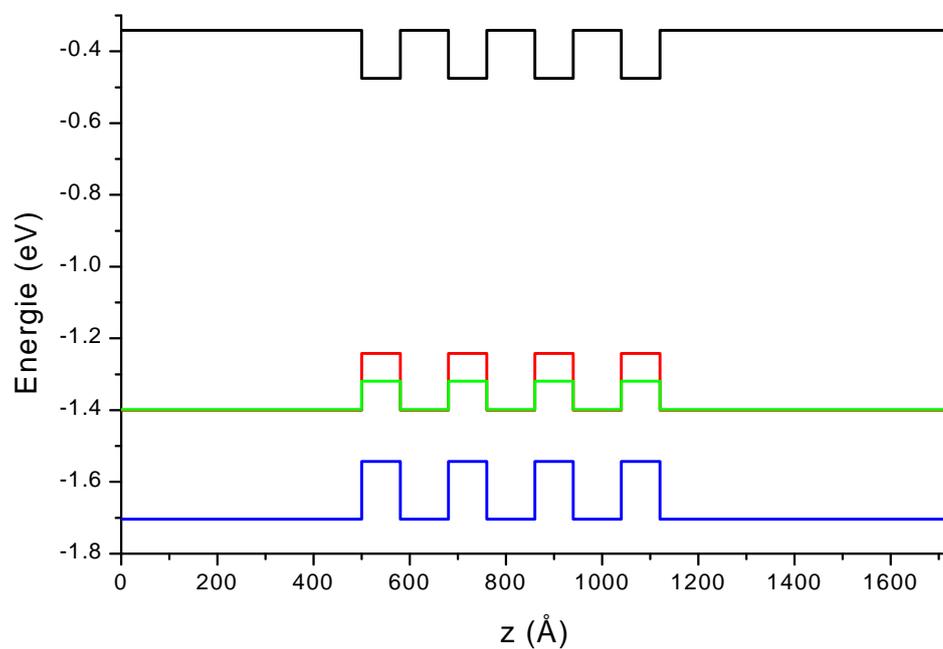


FIG. 3.3 – Diagramme de bande d'une structure composée de couches en $Ga_{0.2}InAs_{0.43}P$ (barrières) et en $Ga_{0.2}InAs_{0.75}P$ (puits)

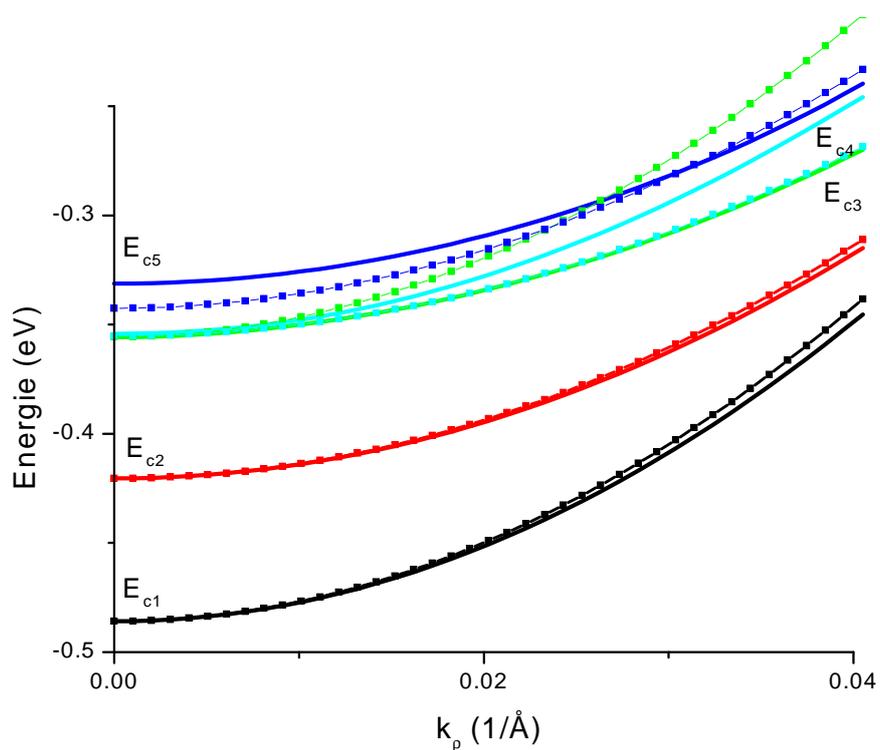


FIG. 3.4 – Sous bandes de conduction montrant une différence entre l'approximation parabolique (carrés) et le calcul plus exact pour chaque valeur de k_p (traits pleins)

3.3 Extension au problème de la bande de valence

Dans ce paragraphe, nous généralisons l'application de la méthode de Galerkin au calcul des états liés des trous dans la bande de valence. Nous rappelons que dans le modèle considéré, la fonction d'onde enveloppe d'un état i de valence est de dimension trois et peut s'écrire sous la forme :

$$\psi_{v,i} = \begin{bmatrix} \psi_{h,i} \\ \psi_{l,i} \\ \psi_{s,i} \end{bmatrix} \quad (3.18)$$

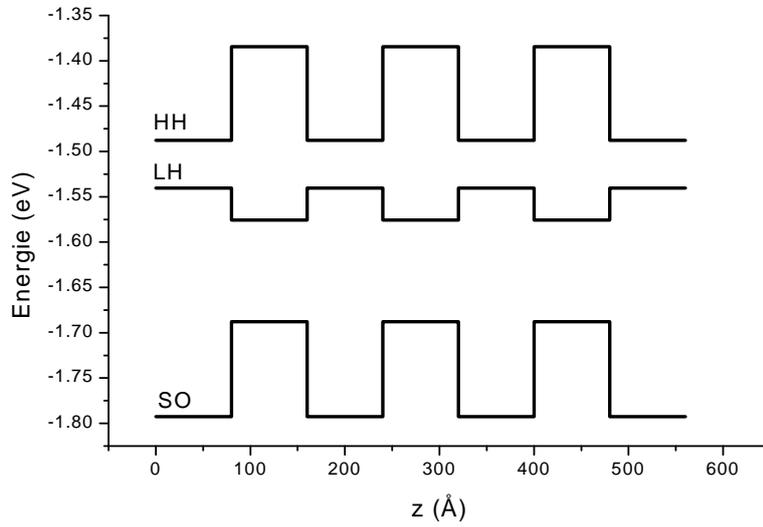


FIG. 3.5 – Bande de valence faisant apparaître une différence entre le potentiel vu par les trous lourds (HH) et celui vu par les trous légers (LH); les puits sont en GaInAsP (80Å) et les barrières en InAsP (80Å), la structure étant contrainte sur substrat InP

Le hamiltonien de valence H_v (1.47) peut se décomposer en plusieurs parties :

$$H_v = H_0 + H_{so} + H_{k_p} \quad (3.19)$$

Le hamiltonien H_0 est un hamiltonien diagonal sans aucun couplage entre bandes. On calcule les états liés de chacune des bandes supposée isolée : bande de trous lourds, bande de trous légers et bande de Split-Off. Le hamiltonien $H_0 + H_{so}$ permet, en prenant en compte le couplage avec la bande de Split-Off, le calcul des états de valence en $k_p = 0$. On sépare H_0 et H_{so} pour pouvoir calculer séparément les états de trous lourds, de trous légers et ceux de la bande de Split-Off. En effet, comme nous pouvons le voir dans l'exemple de la figure 3.5, les puits de potentiel pour chacune des bandes

de valence ne se situent pas forcément au même niveau dans la structure.

$$H_0 = \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_{hz}} \frac{\partial}{\partial z} \right) + V_h & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_{lz}} \frac{\partial}{\partial z} \right) + V_l & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\gamma_1}{m_0} \frac{\partial}{\partial z} \right) + V_{so} \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

$$H_{so} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{2} \hbar^2}{2 m_0} \frac{\partial}{\partial z} \left(2 \gamma_2 \frac{\partial}{\partial z} \right) + b \sigma_{sh} \\ 0 & \frac{\sqrt{2} \hbar^2}{2 m_0} \frac{\partial}{\partial z} \left(2 \gamma_2 \frac{\partial}{\partial z} \right) + b \sigma_{sh} & 0 \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

$$H_{k_\rho} = -\frac{\hbar^2}{2} \begin{bmatrix} \frac{1}{m_{hk_\rho}} k_\rho^2 & \frac{1}{m_R} k_\rho^2 - \frac{1}{m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\sqrt{2}}{m_R} k_\rho^2 + \frac{1}{\sqrt{2} m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{1}{m_R} k_\rho^2 + \frac{1}{m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} & \frac{1}{m_{lk_\rho}} k_\rho^2 & \frac{\sqrt{2} \gamma_2}{m_0} k_\rho^2 + \frac{\sqrt{3/2}}{m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\sqrt{2}}{m_R} k_\rho^2 - \frac{1}{\sqrt{2} m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\sqrt{2} \gamma_2}{m_0} k_\rho^2 - \frac{\sqrt{3/2}}{m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\gamma_1}{m_0} k_\rho^2 \end{bmatrix} \quad (3.22)$$

Le hamiltonien H_0 , étant diagonal, permet de traiter chaque bande de façon découplée et de nous ramener au problème précédent §3.1. En effet, nous pouvons séparer les calculs dans chaque type de bande : trous lourds, trous légers et Split-Off.

Nous allons donc déterminer la base des fonctions de base en résolvant pour chacune des bandes $q = h, l, s$ les solutions φ_q^0 de l'équation :

$$\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_{qz}} \frac{\partial \varphi_q^0}{\partial z} \right) + V_q(z) \varphi_q^0 = E_q^0 \varphi_q^0 \quad (3.23)$$

En traitant ce problème, on peut donc savoir le nombre d'états de valence confinés dans la structure et avoir une base de décomposition des fonctions d'onde des trous. Pour avoir un calcul plus précis des états de valence en $k_\rho = 0$, il faut appliquer la méthode de Galerkin en considérant la somme $H_0 + H_{so}$ qui couple les trous légers et les états de la bande de split-off.

Une fois la base établie, on peut alors faire le calcul général pour n'importe quelle valeur de k_ρ . Le problème est plus complexe qu'au paragraphe précédent dans la mesure où la fonction d'onde est multidimensionnelle. Pour établir la matrice dont la diagonalisation permet le calcul des états liés, nous avons regroupé les termes selon leur indice h, l ou s :

$$\overline{\overline{R}} = \begin{bmatrix} \langle \varphi_{h,i}^0 | \varphi_{h,j}^0 \rangle & \langle \varphi_{h,i}^0 | \varphi_{l,j}^0 \rangle & \langle \varphi_{h,i}^0 | \varphi_{s,j}^0 \rangle \\ \langle \varphi_{l,i}^0 | \varphi_{h,j}^0 \rangle & \langle \varphi_{l,i}^0 | \varphi_{l,j}^0 \rangle & \langle \varphi_{l,i}^0 | \varphi_{s,j}^0 \rangle \\ \langle \varphi_{s,i}^0 | \varphi_{h,j}^0 \rangle & \langle \varphi_{s,i}^0 | \varphi_{l,j}^0 \rangle & \langle \varphi_{s,i}^0 | \varphi_{s,j}^0 \rangle \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

$$\overline{\overline{M}} = \begin{bmatrix} \langle \varphi_{h,i}^0 | H_{h,h} | \varphi_{h,j}^0 \rangle & \langle \varphi_{h,i}^0 | H_{h,l} | \varphi_{l,j}^0 \rangle & \langle \varphi_{h,i}^0 | H_{h,s} | \varphi_{s,j}^0 \rangle \\ \langle \varphi_{l,i}^0 | H_{l,h} | \varphi_{h,j}^0 \rangle & \langle \varphi_{l,i}^0 | H_{l,l} | \varphi_{l,j}^0 \rangle & \langle \varphi_{l,i}^0 | H_{l,s} | \varphi_{s,j}^0 \rangle \\ \langle \varphi_{s,i}^0 | H_{s,h} | \varphi_{h,j}^0 \rangle & \langle \varphi_{s,i}^0 | H_{s,l} | \varphi_{l,j}^0 \rangle & \langle \varphi_{s,i}^0 | H_{s,s} | \varphi_{s,j}^0 \rangle \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

Nous détaillons ci-dessous les éléments servant à l'assemblage de la matrice $\overline{\overline{M}}$.

Pour les termes diagonaux :

$$\begin{aligned} H_{h,h} &= -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_{hk_\rho}} k_\rho^2 - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_{hz}} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right) + V_h(z) \\ H_{l,l} &= -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_{lk_\rho}} k_\rho^2 - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_{lz}} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right) + V_l(z) \\ H_{s,s} &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\gamma_1 k_\rho^2 - \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma_1 \frac{\partial}{\partial z} \right) \right) + V_s(z) \end{aligned} \quad (3.26)$$

Pour le couplage entre bande de trous lourds et bande de trous légers :

$$\begin{aligned} H_{h,l} &= -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_R} k_\rho^2 - \frac{1}{m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ H_{l,h} &= -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_R} k_\rho^2 + \frac{1}{m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (3.27)$$

Pour le couplage entre bande de trous lourds et bande de Split-Off :

$$\begin{aligned} H_{h,s} &= -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\sqrt{2}}{m_R} k_\rho^2 + \frac{1}{\sqrt{2}m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) \\ H_{s,h} &= -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\sqrt{2}}{m_R} k_\rho^2 - \frac{1}{\sqrt{2}m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) \end{aligned} \quad (3.28)$$

Pour le couplage entre bande de trous légers et bande de Split-Off :

$$\begin{aligned} H_{l,s} &= -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\sqrt{2}}{m_0} \left(\gamma_2 k_\rho^2 - 2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma_2 \frac{\partial}{\partial z} \right) \right) - \frac{\sqrt{3/2}}{m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) + b \sigma_{sh} \\ H_{s,l} &= -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\sqrt{2}}{m_0} \left(\gamma_2 k_\rho^2 - 2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma_2 \frac{\partial}{\partial z} \right) \right) + \frac{\sqrt{3/2}}{m_S} k_\rho \frac{\partial}{\partial z} \right) + b \sigma_{sh} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Ce couplage, même s'il est faible n'est pas négligeable et il est important de le prendre en compte. L'application de notre méthode au cas de la figure 3.5 donne la dispersion des sous-bandes de valence de la figure 3.6. Il est important de noter que les bandes de se croisent pas.

Il nous paraissait intéressant, à titre informatif, de montrer la différence de dispersion des sous-bandes de valence lorsqu'on tient compte ou non du couplage avec la bande de Split-Off et avec les approximations paraboliques correspondantes (voir figure 3.7).

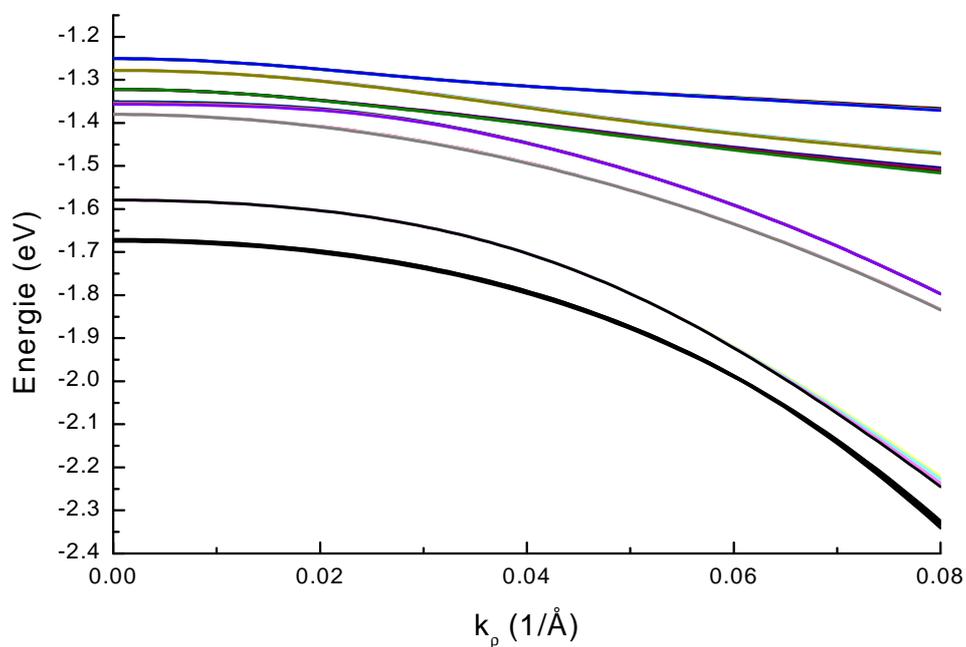


FIG. 3.6 – Sous bandes de valence prenant en compte les états liés de trous lourds et légers ainsi que ceux de la bande de Split-Off

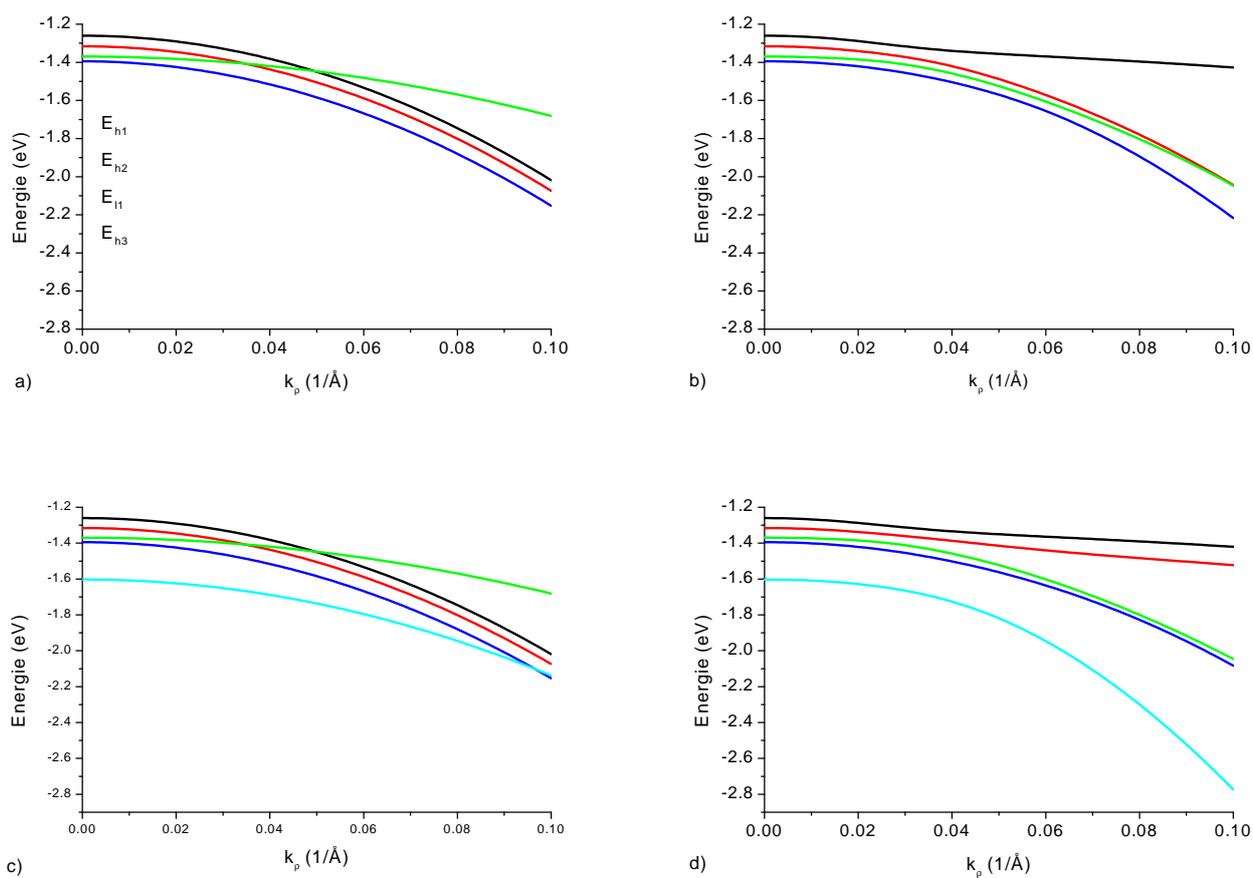


FIG. 3.7 – Différence des sous-bandes de valence entre l'approximation parabolique et le calcul exact. En a) et b), pas de couplage avec la bande de Split-Off; en c) et d), prise en compte du couplage avec la bande de Split-Off

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons proposé une nouvelle base de fonctions pour appliquer la méthode de Galerkin afin de résoudre l'équation de Schrödinger, dans l'approximation de la fonction enveloppe, pour des structures à multipuits quantiques.

Nous avons d'abord appliqué notre méthode au calcul des états liés des électrons dans la bande de conduction. Ensuite, nous avons généralisé la méthode au cas des bandes couplées pour calculer les états liés des trous dans les bandes de valence.

La contrainte majeure liée à cette méthode est la nécessité de pouvoir identifier des puits de potentiel, éléments de base de notre calcul.

Dans cette approche, la bande de conduction est découplée des autres bandes. Nous pourrions étendre la méthode au cas des structures où l'énergie de gap n'est plus suffisamment importante pour négliger le couplage entre la bande de conduction et les bandes de valence.

De plus, nous traitons ici le cas des bandes plates, c'est-à-dire que le potentiel est supposé constant dans chacune des couches de l'hétérostructure. Il serait intéressant d'étendre également la méthode en présence de champ électrique extérieur. En effet, en présence d'un champ électrique externe, le potentiel n'est plus constant dans chaque matériau mais varie de façon linéaire comme cela est représenté sur la figure 3.8. Les états liés dans chacun des puits de ce type de structure peuvent être déterminés par les fonctions d'Airy.

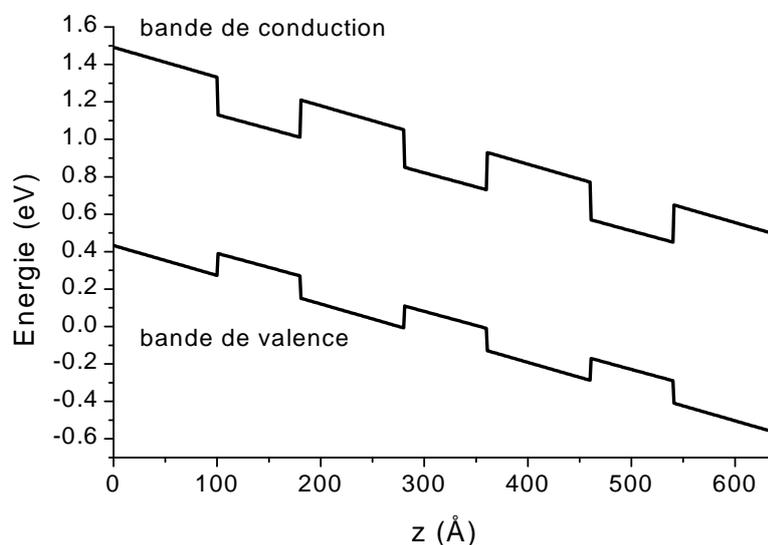


FIG. 3.8 – Bandes de conduction et de valence dans une structure à puits quantiques en présence d'un champ électrique externe

Chapitre 4

Comparaison entre les éléments finis et la base des états du puits simple

Dans ce chapitre, nous comparons les fonctions d'onde et les bandes d'énergie calculées par les méthodes des éléments finis et la méthode des états du puits simple. Le logiciel ETHER (Étude du Transport dans les HÉTéRojonctions) est basé sur la méthode des éléments finis et nous avons implémenté notre nouvelle méthode dans le logiciel BCBV (Bande de Conduction - Bande de Valence). L'utilisation de ces deux logiciels permet de mettre en évidence les différences de résultat observées entre ces deux méthodes, plus précisément l'erreur liée à la résolution du problème discrétisé. Pour nous aider à comprendre cette erreur, nous nous appuyerons sur une analyse numérique de la méthode des différences finies. Des approches telles que les différences finies ou celle de Galerkin conduisent à la diagonalisation de matrices afin de déterminer les états confinés dans une structure à multipuits quantiques. Ce sont les vecteurs propres issus de cette diagonalisation qui vont influencer l'allure des fonctions d'onde car ce sont les coefficients des combinaisons linéaires sur lesquelles on développe les fonctions cherchées. Le problème de couplage intervient au niveau des états de conduction lorsqu'on couple plusieurs puits et ne peut être négligé même dans le cas d'un puits simple au niveau des états de valence car on couple plusieurs bandes.

4.1 États résonnants

Une manière intéressante d'aborder le problème du couplage entre plusieurs puits quantiques est celui du cas d'états résonnants. Prenons une structure comprenant trois puits quantiques (figure 4.1b). Les largeurs des puits ont été choisies de manière à ce qu'il y ait un état de même valeur en énergie dans chacun des puits lorsqu'ils sont isolés. Dans notre exemple, il s'agit de l'état du puits 1 : E_{11} , du deuxième état du puits 2 : E_{22} et du troisième état du puits 3 : E_{33} (voir figure 4.1a). Lorsqu'on couple les puits pour former la structure de la figure 4.1b, les fonctions d'onde correspondantes à ces états ne s'évanouissent pas alors que le calcul dans le cas du puits isolé impose une expression exponentielle décroissante à l'extérieur du puits. Le fait que ces états aient la même valeur en énergie

conduit à une forte présence de ces états dans les trois puits comme le montrent les fonctions d'onde sur la figure 4.1c : les états résonnent entre eux. Avec un calcul par éléments finis comme cela est représenté sur la figure 4.2, il faut faire attention à l'ordre des éléments choisi pour avoir des fonctions d'onde correctes. Dans ce cas, les éléments finis d'ordre 1 (figure 4.2a) ne sont pas suffisants, il faut faire appel au moins à l'ordre 3 (figure 4.2b) pour avoir le résultat attendu. Avec le calcul que nous avons développé, les fonctions d'onde apparaissent sans erreur, il n'y a pas besoin d'ajuster ni le nombre, ni la forme des fonctions de base pour obtenir le bon résultat.

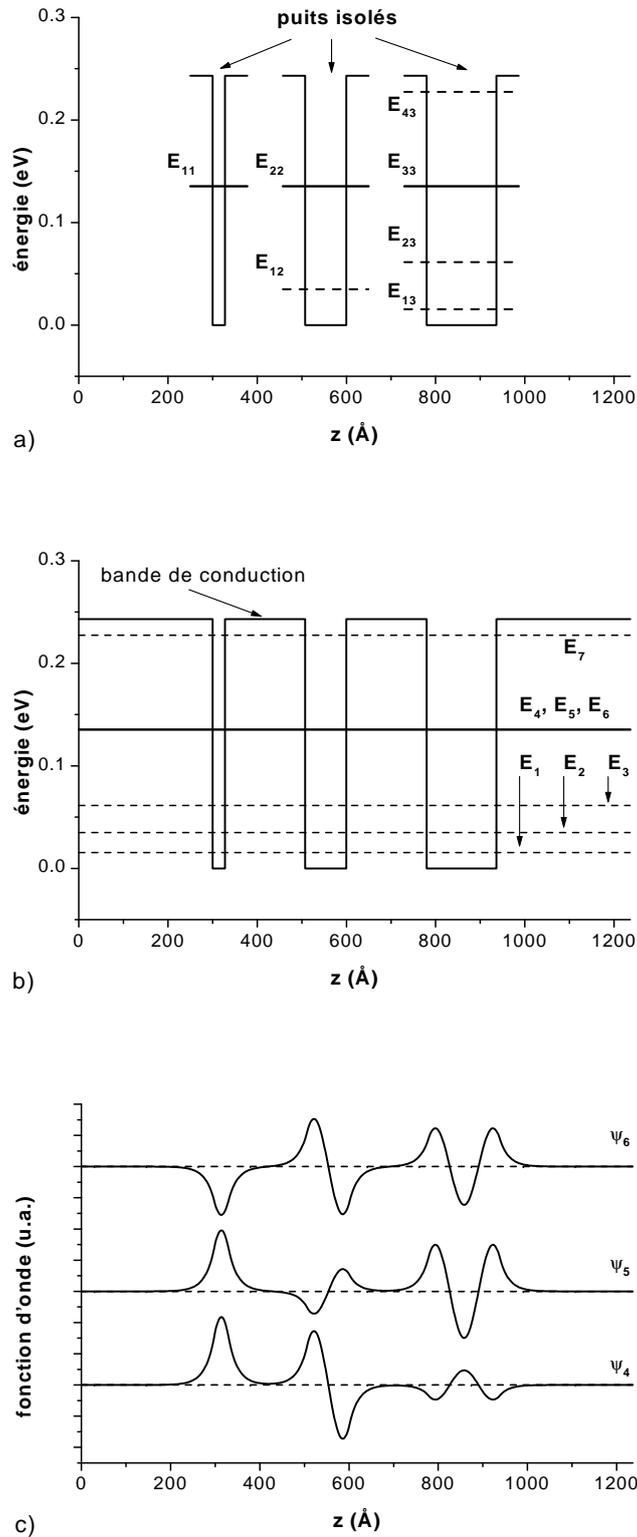


FIG. 4.1 – Fonctions d'onde d'états résonnants dans une structure à trois puits quantiques; a) États calculés dans les puits isolés; b) États de puits couplés; c) Fonctions d'onde des états qui résonnent calculées par BCBV

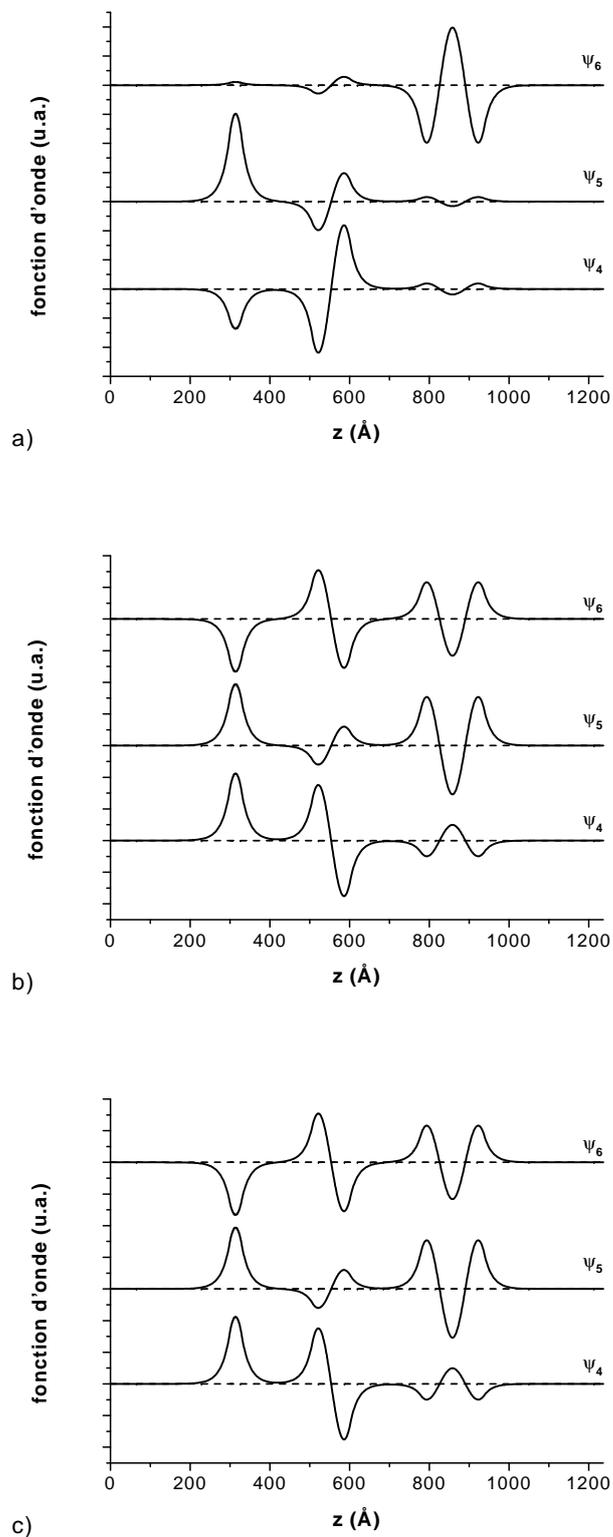


FIG. 4.2 – Fonctions d'onde d'états résonnants dans une structure à trois puits quantiques; calculées par: a) Ether P1, b) Ether P3 et c) Ether P5

4.2 Problème de couplage de deux puits identiques

Une autre comparaison qui nous a semblé intéressante est le cas de deux puits identiques faiblement couplés. La structure de test choisie est constituée de 2 puits en GaAs entourés par des barrières en $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$. La bande de conduction de cette structure est représentée figure 4.3. Pour la méthode des éléments finis, nous avons choisi des polynômes d'ordre 5 avec un maillage d'environ un millier de points sur la structure.

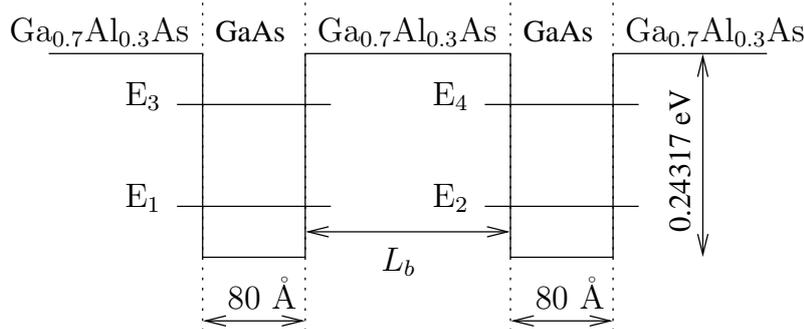


FIG. 4.3 – Bande de conduction faisant apparaître deux puits couplés

Si l'on prend deux puits strictement identiques, on s'attend à ce que les fonctions d'onde soient symétriques ou antisymétriques. Lorsque les puits sont très couplés ($L_b = 80 \text{ \AA}$), les deux méthodes produisent des résultats identiques et corrects (voir les figures 4.4a et 4.4b).

Si les puits sont peu couplés ($L_b = 300 \text{ \AA}$), les matrices de couplage dans le calcul par éléments finis sont mal conditionnées et le bruit numérique conduit à des résultats erronés. Les résultats entre les deux méthodes diffèrent. On voit sur la figure 4.5a que la symétrie ou antisymétrie des fonctions d'onde n'est plus respectée.

Le choix de l'ordre des éléments est très important. Nous avons calculé les fonctions d'onde avec $L_b = 300 \text{ \AA}$ avec des éléments finis d'ordre 1. Les résultats figure 4.6 montrent que ni les symétries ni le théorème d'oscillation [27] ne sont respectés. Le théorème d'oscillation prévoit que la fonction d'onde ψ_k correspondante au k -ème état lié doit s'annuler $k-1$ fois. Il était pourtant vérifié avec les éléments finis d'ordre 5. Les fonctions d'onde ψ_1 et ψ_2 semblent être inversées ainsi que les fonctions ψ_3 et ψ_4 . En effet, la fonction ψ_1 ne devrait pas couper l'axe des abscisses alors que la fonction ψ_2 devrait le couper une fois. Il en est de même pour les deux autres : la fonction ψ_3 devrait couper deux fois l'axe des abscisses alors que la fonction ψ_4 devrait le couper trois fois.

Nous avons fait plusieurs essais en faisant varier l'ordre des éléments finis ainsi que le nombre de nœuds du maillage, nous avons regardé dans chacun des cas si le théorème des oscillations ainsi que les symétries des fonctions d'onde étaient respectés. Les résultats figurant dans le tableau 4.1 montrent que dans les meilleurs cas, seul le théorème d'oscillation est respecté. Nous n'avons pas réussi à obtenir la symétrie des fonctions d'onde. Le cas des éléments finis P3 avec 111 points de maillage est particulier car il n'apparaissait aucun couplage entre les puits. Les fonctions d'onde

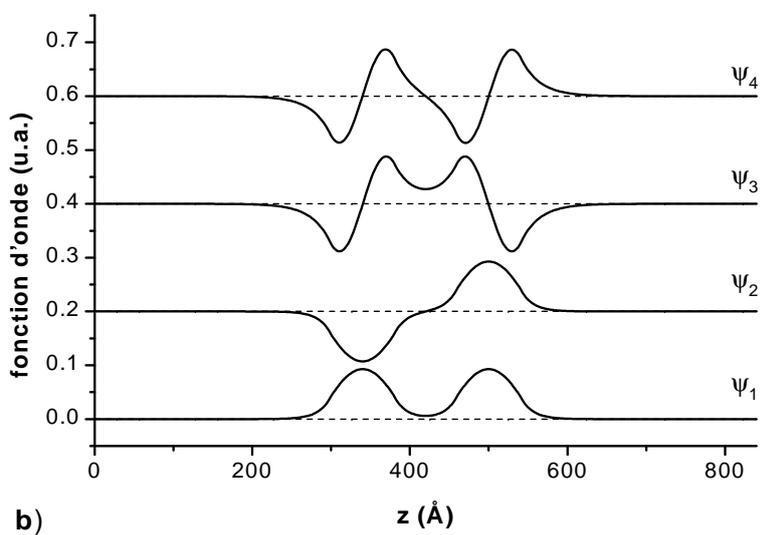
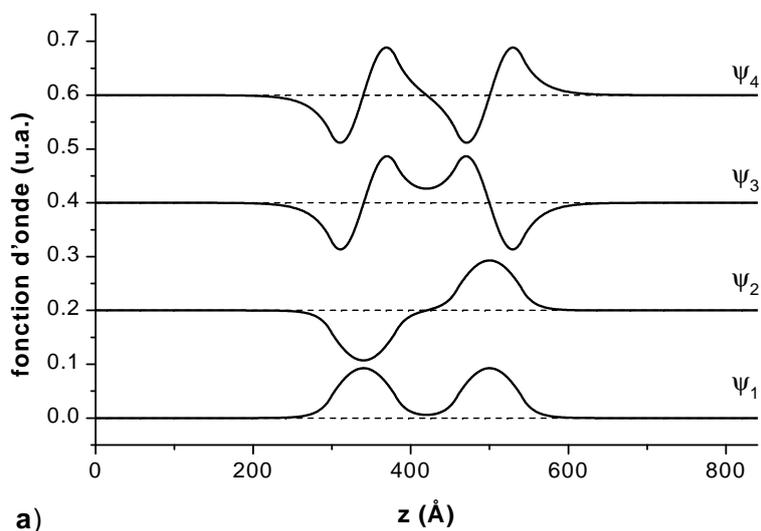


FIG. 4.4 – Fonctions d'onde de deux puits couplés séparés de 80\AA ; a) calculées par *ETHER*; b) calculées par *BCBV*

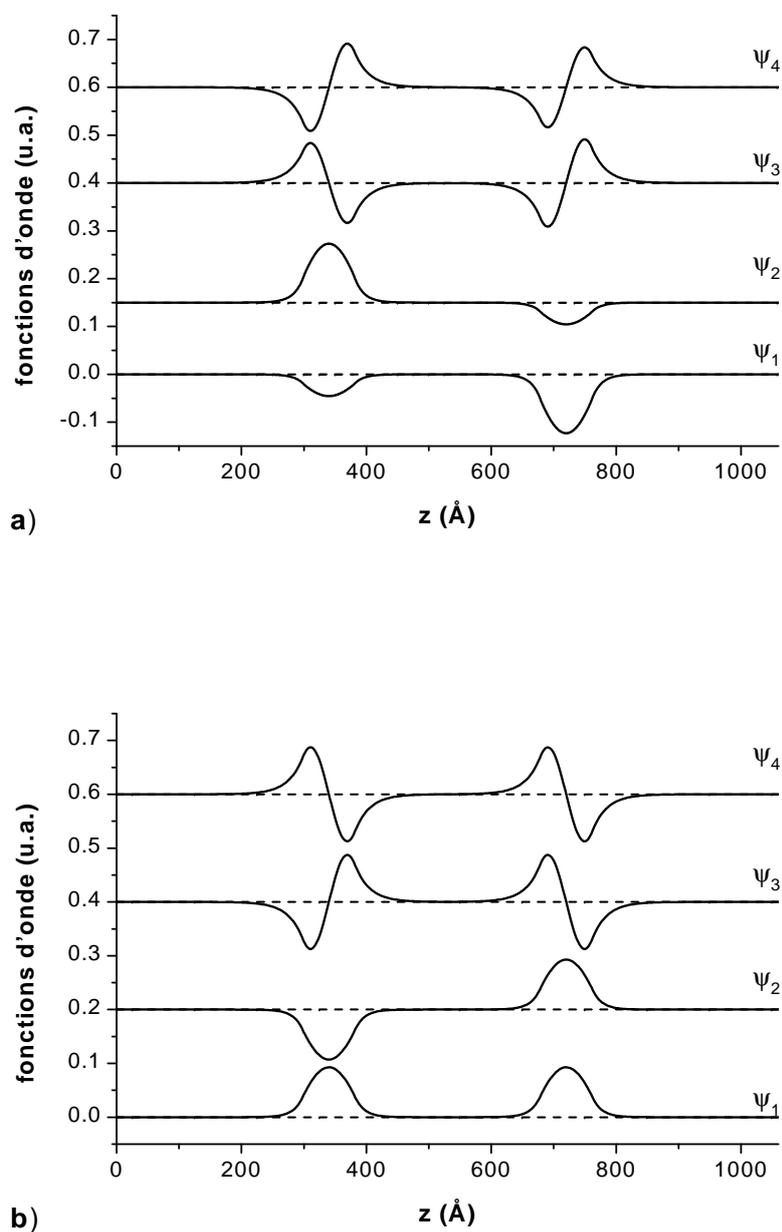


FIG. 4.5 – Fonctions d'onde de deux puits couplés séparés de 300Å; a) calculées par ETHER avec des éléments finis P5; b) calculées par BCBV

étaient localisées dans chaque puits.

Ordre des éléments	Nombre de nœuds	Symétrie	Oscillations
P1	89	non	oui
P1	106	meilleure	non
P1	156	non	oui
P1	256	meilleure	non
P3	97	non	non
P3	111	-	-
P3	166	non	non
P3	271	meilleure	non
P5	81	non	non
P5	101	non	oui
P5	151	non	oui
P5	251	non	oui

TAB. 4.1 – Observation de la symétrie des fonctions d'onde et du théorème d'oscillation dans le cas de deux puits identiques faiblement couplés (séparé par une barrière de 300\AA)

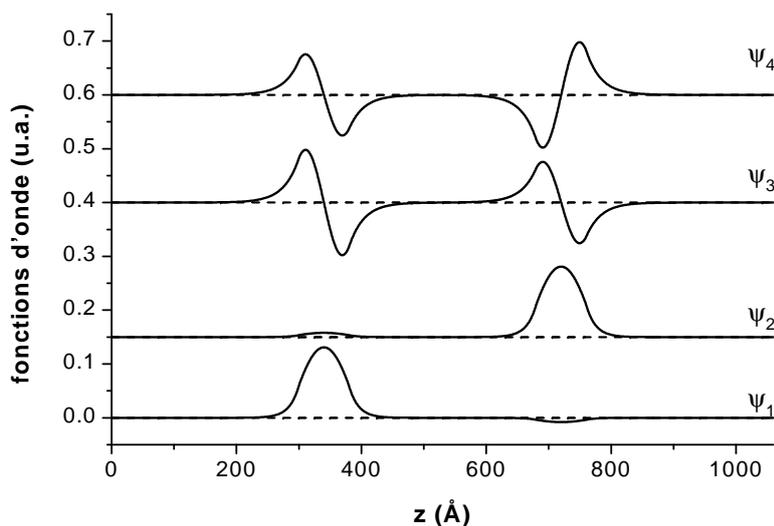


FIG. 4.6 – Fonctions d'onde de deux puits couplés séparés de 300\AA et calculées avec des éléments finis P1

4.3 Cas du puits large

Un autre problème de couplage concerne les bandes de valence. En effet, même si l'on considère des matériaux où l'énergie de gap est suffisamment grande pour traiter de façon découplée les bandes de conduction et de valence, on ne peut négliger le couplage entre les trous lourds et les trous légers. Le fait que les masses des trous lourds et des trous légers s'inversent suivant la direction k_ρ fait que l'on doit observer une non parabolicité des sous bandes d'énergie. Cette propriété est aussi bien respectée lorsqu'on utilise la méthode des éléments finis et notre nouvelle méthode. Cependant, les résultats ne sont pas les mêmes. En effet, comme nous pouvons le voir sur les figures 4.7a et 4.7b, les courbures de bandes sont différentes. Nous avons alors pris le cas d'un puits très large (300 Å) et comparé chacun des résultats aux bandes du matériau massif. On s'attend donc à ce que les bandes données par le calcul quantique se rapprochent des bandes calculées dans le cas du matériau massif. Ce qui est bien le cas pour les résultats avec une base de Galerkin sur les puits simples mais pas dans le cas des éléments finis P1. La structure de test est un seul puits quantique de 300 Å en GaAs entouré de deux barrières en GaAlAs.

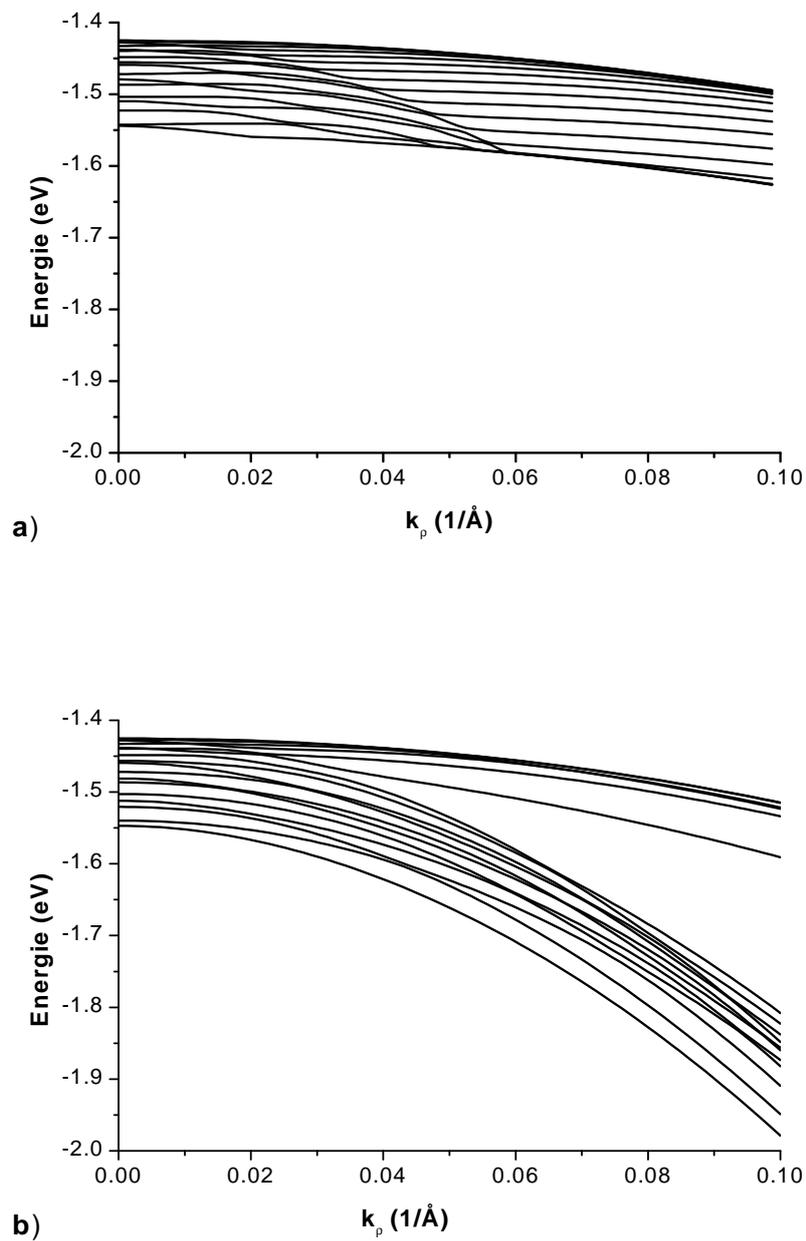


FIG. 4.7 – Bandes de valence d'un puits de 300Å; a) calculées par ETHER; b) calculées par BCBV

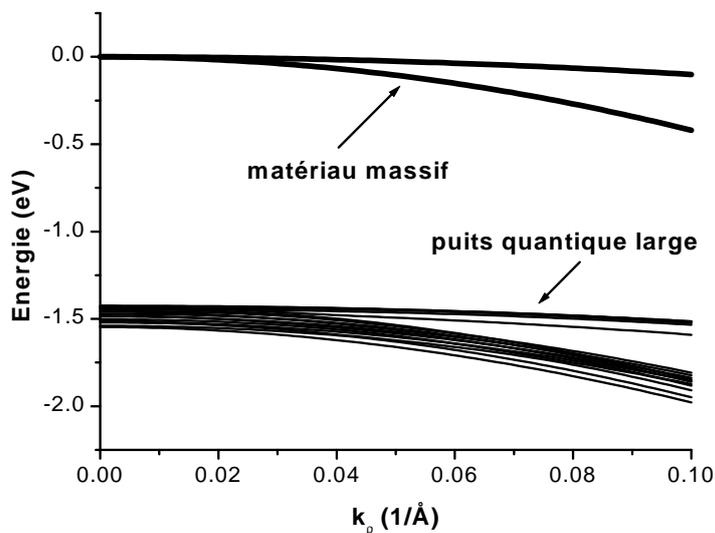
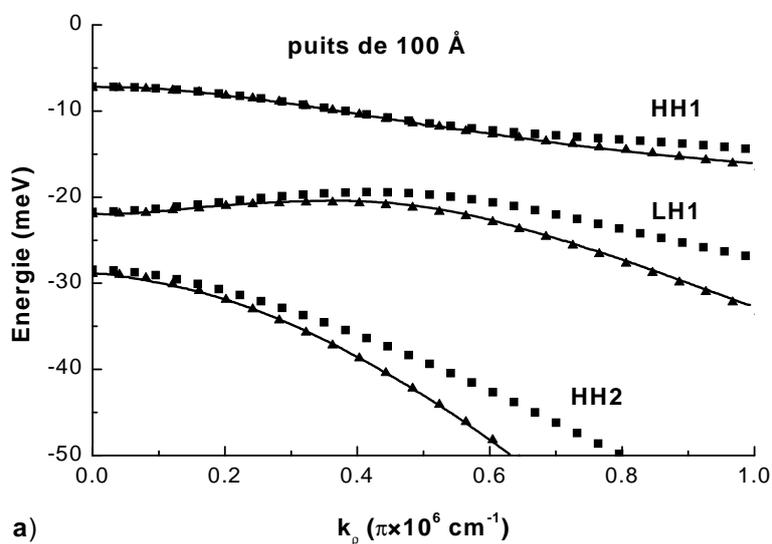


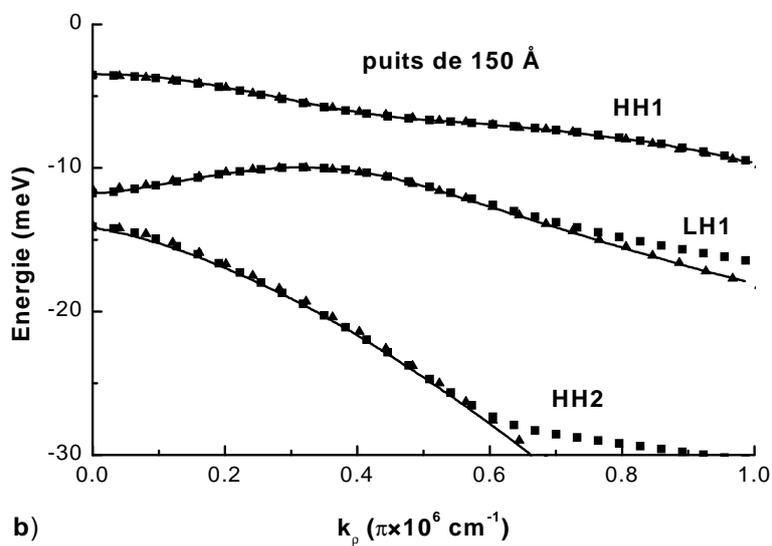
FIG. 4.8 – Comparaison des bandes de valence entre un puits quantique large (calculées par BCBV) et le matériau massif correspondant dans la cas d'un puits en GaAs

4.4 Comparaison avec une référence

Nous avons également comparé les résultats par rapport à une référence bibliographique de G. Bastard et J.A. Brum [11]. La structure de test est un puits en GaAs entouré de deux barrières en $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$. Nous avons comparé les résultats pour deux largeurs de puits différentes : 100 et 150 Å. Nous pouvons observer sur la figure 4.9 les différences entre la référence en traits pleins, la méthode que nous avons développé en triangles et la méthode des éléments finis en carrés. Il y a un très bon accord entre la référence et notre méthode. Par contre les résultats fournis par les éléments finis diffèrent. Cette différence est plus prononcée dans le cas du puits de 100 Å (4.9a) que dans le cas du puits de 150 Å (4.9b).



a)



b)

FIG. 4.9 – Comparaison des trois premières bandes de valence d'un puits quantique entre la référence [11] en traits pleins, ETHER en carrés et BCBV en triangles; a) pour un puits de 100Å; b) pour un puits de 150Å

4.5 Étude numérique de l'équation de Schrödinger

Le problème du couplage relevé au paragraphe 4.2 dans les méthodes discrétisées peut être illustré grâce aux différences finies. Pour illustrer notre propos, nous allons nous attacher à résoudre de façon analytique l'équation de Schrödinger dont le hamiltonien est discrétisé. Les détails de calcul sont donnés en annexe A. Nous considérerons, par souci de simplification, une écriture normalisée de l'équation et nous négligeons l'effet des masses. L'équation à résoudre est alors la suivante :

$$-\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + V \psi = E \psi \quad (4.1)$$

Prenons, dans un premier temps, le cas d'un puits de potentiel infini comme montré sur la figure 4.10 où $z \in [0, L_w]$. Le fait que le puits soit infini permet de poser les conditions aux limites c'est-à-dire

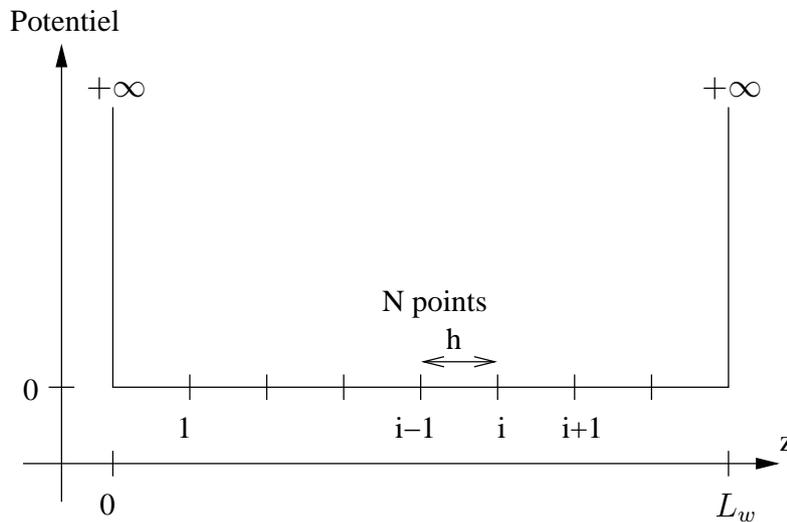


FIG. 4.10 – Puits de potentiel infini

que les fonctions d'onde sont nulles aux bords du puits. Autrement dit : $\psi(0) = 0$ et $\psi(L_w) = 0$. En discrétisant l'équation (4.1) avec un schéma centré, on obtient l'équation suivante :

$$\frac{\psi_{i+1} + \psi_{i-1} - 2\psi_i}{h^2} + V_i \psi_i = E \psi_i \quad (4.2)$$

Dans le cas du puits de la figure 4.10, V_i est nul. La recherche des solutions conduit alors au calcul du déterminant de dimension N suivant, en posant $a = 1/h$:

$$\begin{vmatrix} 2a - E & -a & 0 & \cdots & 0 \\ -a & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -a \\ 0 & \cdots & 0 & -a & 2a - E \end{vmatrix} = 0 \quad (4.3)$$

Le calcul de ce déterminant peut se faire de façon analytique. En effet, on peut établir une relation de récurrence entre les déterminants Δ_n , Δ_{n-1} et Δ_{n-2} des rangs n , $n-1$ et $n-2$:

$$\Delta_n = (-2a - E) \Delta_{n-1} - a^2 \Delta_{n-2} \quad (4.4)$$

Les valeurs propres E_n , solutions de l'équation (4.1) sont :

$$E_n = 2a \left(1 - \cos \left(\frac{\varphi_n}{2} \right) \right) \quad (4.5)$$

où $\varphi_n = n\pi/(N+1)$. Ceci est un résultat bien connu [28] qui nous servira de point de départ.

Pour simplifier le problème du couplage de deux puits, nous prenons une structure de deux puits entourés de barrières infinies (voir figure 4.11). Ceci permet de poser des conditions aux limites en annulant les fonctions d'onde aux bords de la structure. Dans les deux puits, nous supposons un maillage identique de N_1 points et un maillage de N_2 points dans la barrière servant de couplage aux puits. L'énergie de la barrière est W .

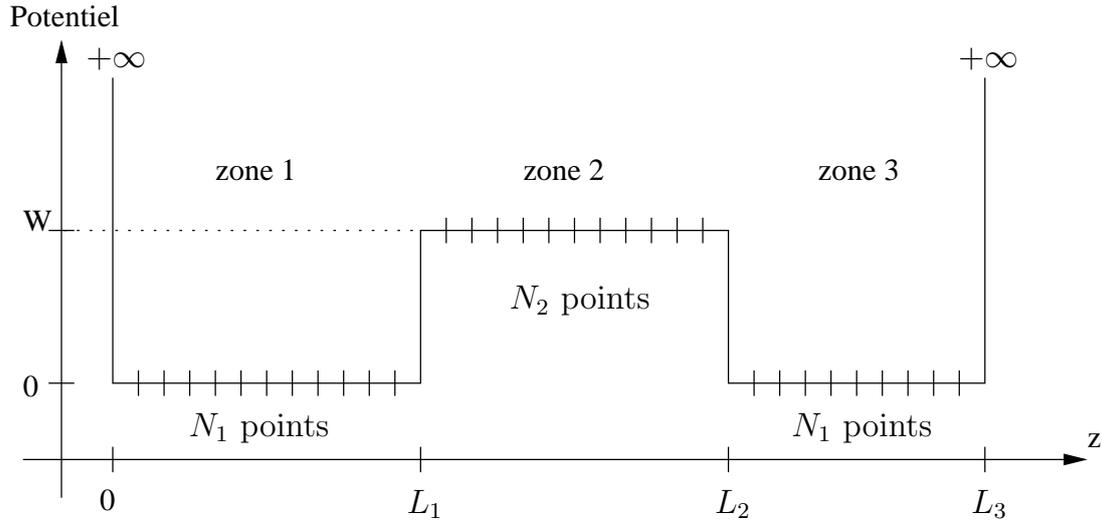


FIG. 4.11 – Deux puits de potentiel semi-infinis couplés

Le déterminant conduisant à l'équation séculaire peut se décomposer en blocs tridiagonaux chacun d'eux étant symétrique mais dont le potentiel V est différent selon la région. Pour deux potentiels différents la relation (4.4) peut être généralisée :

$$\Delta_{N_1+N_2}^{(1,2)} = \Delta_{N_1}^{(1)} \Delta_{N_2}^{(2)} - a^2 \Delta_{N_1-1}^{(1)} \Delta_{N_2-1}^{(2)} \quad (4.6)$$

Le changement de potentiel est pris en compte dans les sous-déterminants notés $\Delta^{(i)}$. En prenant $V = 0$ dans les puits et $V = W$ dans la barrière de la région 2, on peut déduire l'équation séculaire

d'après (4.6) :

$$\begin{aligned} \Delta = & \left(\frac{\sin((N_1 + 1)\varphi)}{\sin(\varphi)} \right)^2 \frac{\sinh((N_2 + 1)\chi)}{\sinh(\chi)} \\ & - 2 \frac{\sinh(N_2 \chi)}{\sinh(\chi)} \frac{\sin(N_1 \varphi)}{\sin(\varphi)} \frac{\sin((N_1 + 1)\varphi)}{\sin(\varphi)} \\ & + \left(\frac{\sin(N_1 \varphi)}{\sin(\varphi)} \right)^2 \frac{\sinh((N_2 - 1)\chi)}{\sinh(\chi)} = 0 \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{cases} E = 2a(1 - \cos(\varphi)) \\ \chi = a \operatorname{argch} \left(1 + \frac{W - E}{2a} \right) \end{cases} \quad (4.8)$$

Dans le cas d'états quasi dégénérés ($N_2 \gg N_1$), les deux solutions de l'équation (4.7) ne peuvent être facilement calculées. Nous pouvons cependant décomposer cette équation de façon à faire apparaître deux équations distinctes :

$$\frac{\sin((N_1 + 1)\varphi)}{\sin(N_1 \varphi)} = \frac{\sinh(N_2 \chi) \pm \sinh(\chi)}{\sinh((N_2 + 1)\chi)} \quad (4.9)$$

En utilisant l'équation (4.9) plutôt que l'équation (4.7), nous obtenons des fonctions d'onde qui respectent le théorème des oscillations. En effet, l'utilisation directe de programmes d'algèbre linéaire pour résoudre l'équation (4.7) dépend de l'implémentation des programmes, de la précision numérique des ordinateurs et bien sûr du nombre de points de maillage N_1 ainsi que du pas de discrétisation h . Ce problème est contourné en séparant les deux parties de l'équation (4.9). Ce problème n'apparaît pas en utilisant la méthode de Galerkin sur la base que nous avons proposée au chapitre 3.

4.6 Hétérostructure à confinement séparé (SCH)

Dans le modèle que nous avons utilisé, nous n'avons pas pris en compte les états électroniques du continuum, c'est-à-dire les états dont le niveau d'énergie est situé au-dessus des barrières de potentiel. Nous nous sommes donc intéressés à des structures de type SCH (Separate Confinement Heterostructure) comme représentée sur la figure 4.12 et dont le rôle dans le composant est de guider le mode optique. Les grandes largeurs de ces couches de confinement (typiquement de l'ordre de 600\AA) par rapport à la largeur des puits nous permettent de prendre en compte des états se rapprochant des états du continuum dont l'énergie est située entre les potentiels V_{c1} et V_{c2} de la figure 4.12.

La fonction d'onde s'écrit :

- dans la zone 1, $\psi(z) = A_1 \exp(k_1 z) + B_1 \exp(-k_1 z)$
- dans la zone 2, $\begin{cases} \psi(z) = A_2 \sin(k_2 z) + B_2 \cos(k_2 z) & \text{si } E < V_{c2} \\ \psi(z) = A_2 \sinh(k_2 z) + B_2 \cosh(k_2 z) & \text{si } E \geq V_{c2} \end{cases}$
- dans la zone 3, $\psi(z) = A_3 \sin(k_3 z) + B_3 \cos(k_3 z)$

Il y a deux déterminants suivant que l'on considère une énergie au-dessus ou au-dessous de V_{c1} . Les états confinés sont déterminés en étudiant les zéros du déterminant en fonction de l'énergie. La précision du calcul est très importante pour les états situés en-dessous de V_{c1} .

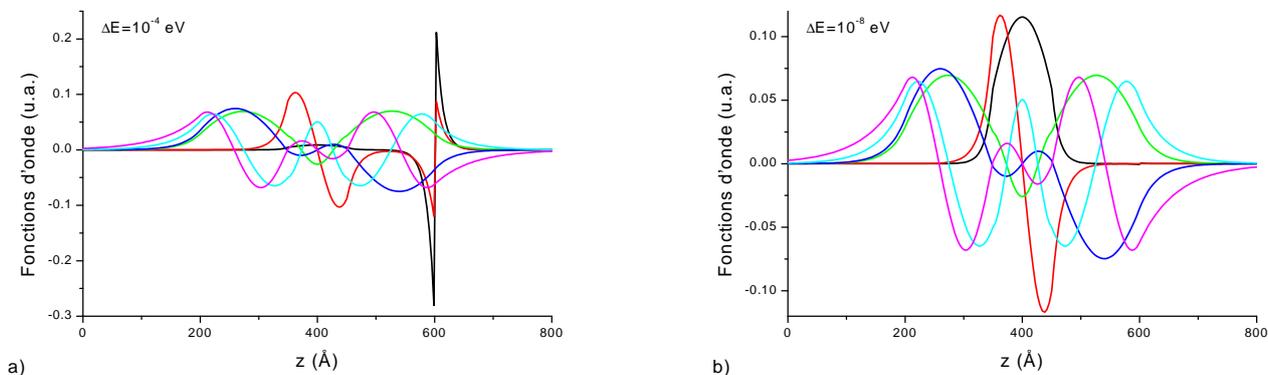


FIG. 4.13 – Fonctions d'onde d'une structure de type SCH. a) La précision sur l'énergie est de 10^{-4} eV. b) La précision sur l'énergie est de 10^{-8} eV.

On peut voir sur la figure 4.13a que les fonctions d'onde des deux premiers états, qui ont une valeur au-dessous de V_{c1} , sont faussées lorsque la précision sur le calcul de l'énergie est trop faible de l'ordre de 10^{-4} eV. Si le calcul est plus précis, de l'ordre de 10^{-8} eV, les fonction d'onde que l'on peut voir sur la figure 4.13b sont alors correctes. L'erreur se produit pour les fonctions d'onde dont l'état est situé au-dessous du potentiel V_{c1} et s'explique par le fait que la forme de la fonction d'onde dans les zones 2 et 4 est en sinh et cosh. Les coefficients A_i et B_i sont déterminés en fixant un des coefficients de façon arbitraire et en déduisant tous les autres à partir des conditions de raccordement aux interfaces une fois l'énergie propre trouvée. L'imprécision sur l'énergie va entraîner une erreur sur les coefficients surtout lorsqu'il s'agit des fonctions en sinh et cosh faisant appel à la fonction exponentielle qui va fortement amplifier l'erreur due au manque de précision sur l'énergie. Ceci peut expliquer la difficulté de mise en œuvre de l'approche par la matrice de transfert présentée au paragraphe 2.1.2 proposée par S.L. Chuang [22].

Chapitre 5

Calcul pratique du gain

L'objet de ce chapitre est de préciser les éléments des matrices optiques servant au calcul du gain et de l'absorption interbande de valence que nous avons évoqué au paragraphe 1.5. Il faut différencier le calcul du gain de celui de l'IVBA car dans le cas de la formulation du gain, on s'intéresse aux transitions entre les électrons de la bande de conduction et les trous de la bande de valence alors que dans le cas de l'IVBA, il s'agit de transitions entre les électrons et les trous de la bande de valence. Nous proposerons, par ailleurs, une formulation du gain local, qui prend en compte le fait que les fonctions d'onde ne sont pas localisées uniquement dans les puits de potentiel mais s'évanouissent dans les barrières.

5.1 Éléments de matrice optique du gain

Nous rappelons l'expression du gain optique utilisé dans le modèle :

$$g_{mat} = \frac{\pi e^2}{n_r \varepsilon_0 c m_0^2 \omega} \frac{2}{V} \sum_{n,m} \sum_{\mathbf{k}_\rho} |\hat{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2 \delta(E_v^m - E_c^n - \hbar\omega)(f_c - f_v) \quad (5.1)$$

La somme discrète sur \mathbf{k}_ρ peut se transformer en somme continue par la relation :

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_\rho} = \frac{1}{L_a} \int_0^{+\infty} \frac{k_\rho}{2\pi} dk_\rho \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} \quad (5.2)$$

où L_a est la largeur de la zone active. Dans le cas d'un puits quantique, cette largeur est égale à la largeur du puits quantique et si la structure est composée de plusieurs puits quantiques découplés, la largeur de la zone active correspond à la somme des largeurs de chacun des puits.

Pour calculer les éléments de matrice optique du gain matériau, on doit évaluer le terme $|\hat{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2$:

$$|\hat{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}^{\sigma\eta}|^2 = |\langle \Psi_{c,n}^\sigma | \hat{e} \cdot \mathbf{p} | \Psi_{v,m}^\eta \rangle|^2 \quad (5.3)$$

où σ réfère au spin et η à la partie haute U ou basse L .

$$\begin{aligned}
 |1\rangle &= \alpha \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle - i \alpha^* \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\
 |2\rangle &= i \beta \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \beta^* \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\
 |3\rangle &= -i \beta \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \beta^* \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\
 |4\rangle &= \alpha \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle - i \alpha^* \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\
 |5\rangle &= i \beta \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \beta^* \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\
 |6\rangle &= -i \beta \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \beta^* \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

Nous rappelons que $\alpha = \exp(-i 3 \phi/2)/\sqrt{2}$ et $\beta = \exp(-i \phi/2)/\sqrt{2}$.

À partir de là, il faut considérer les deux types de polarisation TE (transverse électrique) et TM (transverse magnétique) pour calculer les éléments de matrice optique $|\hat{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}|^2$ ([12]). Plaçons nous dans le cas d'une polarisation TE où le champ électrique est suivant la direction x ou y .

Prenons un état de spin \uparrow pour un électron de la bande de conduction et un état U pour un trou de la bande de valence :

$$\begin{aligned}
 |\hat{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}^{\sigma\eta}|^2 &= |\langle \Psi_{c,n}^\uparrow | p_x | \Psi_{v,m}^U \rangle|^2 \\
 &= |\langle \psi_{c,n} | \psi_{v,m}^{hh} \rangle \langle S \uparrow | p_x | 1 \rangle + \langle \psi_{c,n} | \psi_{v,m}^{lh} \rangle \langle S \uparrow | p_x | 2 \rangle + \langle \psi_{c,n} | \psi_{v,m}^{sh} \rangle \langle S \uparrow | p_x | 3 \rangle|^2 \\
 &= |\langle S | p_x | X \rangle|^2 \left| \left(\frac{-\alpha}{\sqrt{2}} \right) \langle \psi_{c,n} | \psi_{v,m}^{hh} \rangle + \left(\frac{-\beta^*}{\sqrt{6}} \right) \langle \psi_{c,n} | \psi_{v,m}^{lh} \rangle + \left(\frac{-\beta^*}{\sqrt{3}} \right) \langle \psi_{c,n} | \psi_{v,m}^{sh} \rangle \right|^2 \\
 &= \frac{|\langle S | p_x | X \rangle|^2}{12} \left\{ 3 |\langle \psi_{c,n} | \psi_{v,m}^{hh} \rangle|^2 + |\langle \psi_{c,n} | \psi_{v,m}^{lh} + \sqrt{2} \psi_{v,m}^{sh} \rangle|^2 \right\}
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

De la même manière, on calcule ces éléments dans le cas d'une polarisation TM :

$$|\hat{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}^{\sigma\eta}|^2 = \frac{|\langle S | p_x | X \rangle|^2}{3} \left| \left\langle \psi_{c,n} | \psi_{v,m}^{lh} - \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_{v,m}^{sh} \right\rangle \right|^2 \tag{5.6}$$

pour les matériaux III-V, on prend en moyenne : $|\langle S | p_x | X \rangle|^2 = 23 e m_0/2$.

La règle d'or de Fermi dans les expressions (1.59) et (1.60) ne peut être appliquée aussi brutalement. En effet, les électrons et les trous sont en forte interaction avec d'autres excitations élémentaires :

- les phonons
- les plasmons

Le calcul exact de la somme de toutes les interactions via les phonons par exemple, aboutissant à une transition réelle de la bande de conduction vers la bande de valence via des niveaux virtuels est

hors de portée. Une approche phénoménologique consiste à remplacer les fonction de Dirac par une Lorentzienne car :

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{\gamma}{\gamma^2 + E_t^2} = \pi \delta(E_t) \quad (5.7)$$

d'où :

$$\delta(E_v^m - E_c^n - \hbar\omega) \rightarrow \frac{\hbar/\tau_{in}}{(E_c^n - E_v^m - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \frac{1}{\pi} \quad (5.8)$$

où τ_{in} est le temps de relaxation intrabande. τ_{in} ayant la dimension d'un temps peut être assimilé à un temps de collision interne (~ 0.1 ps). D'autres formes d'amortissement collisionnel non lorentzien ont été donnés, voir par exemple [29] pour une fonction gaussienne, cependant l'approche par la matrice de densité au paragraphe 6.4 fournit une justification de la transformation (5.8).

Le gain matériau g_{mat} s'écrit alors :

$$g_{mat} = \frac{e^2}{n_r \epsilon_0 c m_0^2 \omega L_z} \sum_{n,m} \int_0^{+\infty} |\hat{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}^{\sigma\eta}|^2 \frac{(f_c - f_v) (\hbar/\tau_{in})}{(E_c^n - E_v^m - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \frac{k_\rho}{\pi} dk_\rho \quad (5.9)$$

À partir de l'expression du gain (5.9), on peut calculer séparément les termes d'absorption $\beta_{v \rightarrow c}$ entre la bande de valence et la bande de conduction ainsi que l'émission spontanée α_{sp} entre la bande de conduction et la bande de valence :

$$\beta_{v \rightarrow c} = \frac{e^2}{n_r \epsilon_0 c m_0^2 \omega L_z} \sum_{n,m} \int_0^{+\infty} |\hat{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}^{\sigma\eta}|^2 \frac{f_v(1 - f_c) (\hbar/\tau_{in})}{(E_c^n - E_v^m - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \frac{k_\rho}{\pi} dk_\rho \quad (5.10)$$

$$\alpha_{sp} = \frac{e^2}{n_r \epsilon_0 c m_0^2 \omega L_z} \sum_{n,m} \int_0^{+\infty} |\hat{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}^{\sigma\eta}|^2 \frac{f_c(1 - f_v) (\hbar/\tau_{in})}{(E_c^n - E_v^m - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \frac{k_\rho}{\pi} dk_\rho \quad (5.11)$$

Ceci est donc la formulation du gain en ne prenant en compte que les transitions entre les électrons de la bande de conduction et les trous de la bande de valence. Mais des transitions sont également possibles entre les trous et les électrons de la bande de valence.

5.2 Éléments de matrice optique de l'IVBA

Y.C. Chang et R.B. James [30] ont dérivé le hamiltonien de Luttinger-Kohn pour le calcul des éléments de la matrice optique afin d'évaluer les transitions intrabande de valence en prenant en compte les bandes de trous lourds et de trous légers (hamiltonien 4×4). T. Cho et al. [31] ont étendu le calcul en tenant compte du couplage avec la bande de Split-Off (hamiltonien 6×6). L'absorption g_{ivba} s'écrit :

$$g_{ivba} = \frac{e^2}{n_r \epsilon_0 c m_0^2 \omega V} \sum_{n,m} \sum_{\mathbf{k}_\rho} |\hat{e} \cdot P_{nm}(k_\rho)|^2 \frac{(f_m - f_n) (\hbar/\tau_{in})}{(E_v^n - E_v^m - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \quad (5.12)$$

avec : $\hat{e} \cdot P_{nm} = (\hbar^2/m_0) \hat{e} \cdot \sum_{ij} (P_{ij}^{m,n} O_{ij}^{m,n} + Q_{ij}^{m,n} D_{ij}^{m,n})$

V est le volume de la structure, i et j parcourent la base B_2 du hamiltonien des trous. Les éléments de matrice $P_{ij}^{m,n}$ et $Q_{ij}^{m,n}$ sont donnés par la matrice :

$$\begin{pmatrix} A_1 & B & C & 0 & D & E \\ B^* & A_2 & 0 & C & F & G \\ C^* & 0 & A_2 & -B & G & F \\ 0 & C^* & -B^* & A_1 & -E^* & D \\ D^* & F^* & G^* & -E & H & 0 \\ E^* & G^* & F^* & D^* & 0 & H \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

Les éléments de cette matrice sont résumés dans le tableau 5.1.

	$\hat{e} \cdot P$	$\hat{e} \cdot Q$
A_1	$-(\gamma_1 + \gamma_2) k_x$	0
A_2	$-(\gamma_1 - \gamma_2) k_x$	0
B	0	$i 2 \sqrt{3} \gamma_3$
C	$-\sqrt{3} \gamma_2 k_x + i 2 \sqrt{3} \gamma_3 k_z$	0
D	0	$-\sqrt{6} \gamma_3$
E	$i \sqrt{6} \gamma_2 k_x + 2 \sqrt{6} \gamma_3 k_y$	0
F	$i \sqrt{2} \gamma_2 k_x$	0
G	0	$-3 \sqrt{2} \gamma_3$
H	$-\gamma_1 k_x$	0

TAB. 5.1 – Coefficients définissant les éléments des matrices $\hat{e} \cdot P$ et $\hat{e} \cdot Q$

Les éléments O_{ij}^{mn} et D_{ij}^{mn} sont calculés à partir des intégrales de recouvrement des fonctions d'onde :

$$\begin{aligned} O_{ij}^{mn} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_i^m(z)^* \varphi_j^n(z) dz \\ D_{ij}^{mn} &= -i \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_i^m(z)^* \frac{\partial \varphi_j^n(z)}{\partial z} dz \end{aligned} \quad (5.14)$$

Ces pertes IVBA, comme le gain, sont calculées à partir des intégrales de recouvrement des fonctions d'onde mais ici, φ_i est un élément de la fonction d'onde des trous associée au hamiltonien exprimé dans la base B_2 . Or les fonctions d'onde ont été calculées dans la base transformée B_1 . Il faut donc utiliser la transformation unitaire U pour calculer les intégrales de recouvrement :

$$\begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \\ \varphi_4 \\ \varphi_5 \\ \varphi_6 \end{pmatrix} = U^{-1} \begin{pmatrix} \psi_{hh} \\ \psi_{lh} \\ \psi_{sh} \\ \psi_{hl} \\ \psi_{ll} \\ \psi_{sl} \end{pmatrix} \quad (5.15)$$

$$\begin{pmatrix} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{-3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\exp(i3\phi/2)}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & \frac{\exp(i3\phi/2)}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & -i \frac{\exp(i\phi/2)}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & i \frac{\exp(i\phi/2)}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & -\frac{\exp(-i\phi/2)}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{\exp(-i\phi/2)}{\sqrt{2}} & 0 \\ i \frac{\exp(-i3\phi/2)}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -i \frac{\exp(-i3\phi/2)}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \frac{\exp(i\phi/2)}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -i \frac{\exp(i\phi/2)}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & -\frac{\exp(-i\phi/2)}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & -\frac{\exp(-i\phi/2)}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \\ |3\rangle \\ |4\rangle \\ |5\rangle \\ |6\rangle \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

Les éléments φ_i sont maintenant exprimés en fonction de l'angle ϕ et g_{ivba} devient :

$$g_{ivba} = \frac{e^2}{n_r m_0^2 c \epsilon_0 \omega L_a} \sum_{m,n} \int_{k_\rho} \frac{(f_m - f_n) (\hbar/\tau_{in})}{(E_v^n - E_v^m - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \frac{k_\rho}{2\pi} \left(\int_0^{2\pi} |\hat{e} \cdot P_{nm}(k_\rho)|^2 \frac{d\phi}{2\pi} \right) dk_\rho \quad (5.17)$$

Le calcul de l'IVBA sera donc plus long que celui du gain car les éléments de matrice optique sont donnés dans la base du hamiltonien de Pikus-Bir non diagonal. Les fonctions d'onde étant calculées dans la base du hamiltonien diagonalisé, il faut donc ajouter le calcul de l'intégrale sur ϕ .

5.3 Gain local

Une approximation très usitée consiste à considérer que les porteurs sont confinés uniquement dans les puits. Ceci serait le cas avec des barrières de potentiel infinies mais en pratique, les barrières de potentiel sont finies et la présence de porteur dans les barrières n'est plus négligeable surtout lorsque les puits sont couplés. Ceci est également justifié pour des états proches des barrières et notamment dans le cas des trous légers. La densité volumique de porteurs est calculée en supposant une répartition uniforme dans le puits et uniquement dans le puits :

$$n = \frac{1}{2\pi L_a} \int_0^{+\infty} \frac{k_\rho}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)} dk_\rho \quad (5.18)$$

La dimension de n est en $[L^{-3}]$.

Dans une structure à plusieurs puits quantiques, on va évaluer une densité surfacique, on ne divisera pas par la largeur du puits :

$$n_s = \frac{1}{2\pi} \int_0^{+\infty} \frac{k_\rho}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)} dk_\rho \quad (5.19)$$

La dimension de n_s sera alors en $[L^{-2}]$.

En 2D si on regarde la variation du gain en fonction de z , on a :

$$\begin{aligned} g_{mat}(z) &= g_w H(0, L_a) \\ &= \frac{g_{2D}}{L_a} H(0, L_a) \end{aligned} \quad (5.20)$$

où la fonction $H(0, L_a)$ vaut 1 dans le puits et 0 à l'extérieur du puits.

Au lieu de la fonction $H(0, L_a)$, on peut prendre quelque chose de plus réaliste, en multipliant les facteurs d'occupation des bandes f_c et f_v respectivement par le module carré des fonctions d'onde des électrons et des trous : $|\psi_c|^2$ et $|\psi_v|^2$.

On peut alors écrire une expression du gain en fonction de z :

$$g(z) = \frac{e^2}{n_r \varepsilon_0 c m_0^2 \omega} \sum_{n,m} \int_0^{+\infty} |\hat{e} \cdot \mathbf{p}_{cv}^{\sigma\eta}|^2 \frac{(f_c |\psi_c(z)|^2 - f_v |\psi_v(z)|^2) (\hbar/\tau_{in}) k_\rho}{(E_c^n - E_v^m - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \frac{k_\rho}{\pi} dk_\rho \quad (5.21)$$

Cette formulation n'est pas rigoureuse mais redonne bien le gain intégré sur la structure.

Deuxième partie

Application à la simulation des composants
optiques à puits quantiques

Chapitre 6

Principaux modèles utilisés pour les composants actifs

6.1 Description du composant

À chaque composant est associé un procédé technologique de fabrication dont les éléments principaux sont :

- l'épitaxie des couches dans la direction (z);
- les masques utilisés en lithographie pour le plan (x,y), résultant également par une mise en forme sur différents niveaux (z) par gravure ou recroissance de couches.

Il n'est pas de notre propos de détailler ce procédé. En revanche pour les lasers et les amplificateurs à semiconducteurs (SOA) nous utilisons dans les modèles une description également séparée en (z) et plan (x,y) 6.1. Cependant cette description est simplifiée en comparaison avec la géométrie et l'analyse physico-chimique des composants réels.

En général, le modèle tiendra compte de *toutes* les couches épitaxiées dans la direction (z). Il est à noter qu'une certaine imprécision demeurera toujours quant aux valeurs annoncées des paramètres (compositions, épaisseurs, dopage).

Pour la description dans le plan (x,y), les simulateurs ETHER et BCBV tiennent compte de la largeur du ruban auquel est appliqué une tension. L'utilisation d'un ruban étroit (largeur de l'ordre de 1 à 2 μm) est imposé par le caractère monomode transverse à respecter pour éviter de perdre de l'énergie sur les modes d'ordre supérieur et pour conserver la qualité du champ lointain. La largeur du ruban doit être réduite aux deux extrémités pour favoriser le couplage aux fibres optiques (voir schéma de la figure 6.2) dont la largeur de mode fondamental est dans la gamme de 5 à 10 μm . Le rétrécissement dû au ruban permet d'adapter à peu près la taille du mode guidé à celui de la fibre optique. Les logiciels ETHER ou BCBV tiendront compte des variations du ruban pour l'optique mais pour le transport et le calcul du gain, seule la direction (z) est prise en compte.

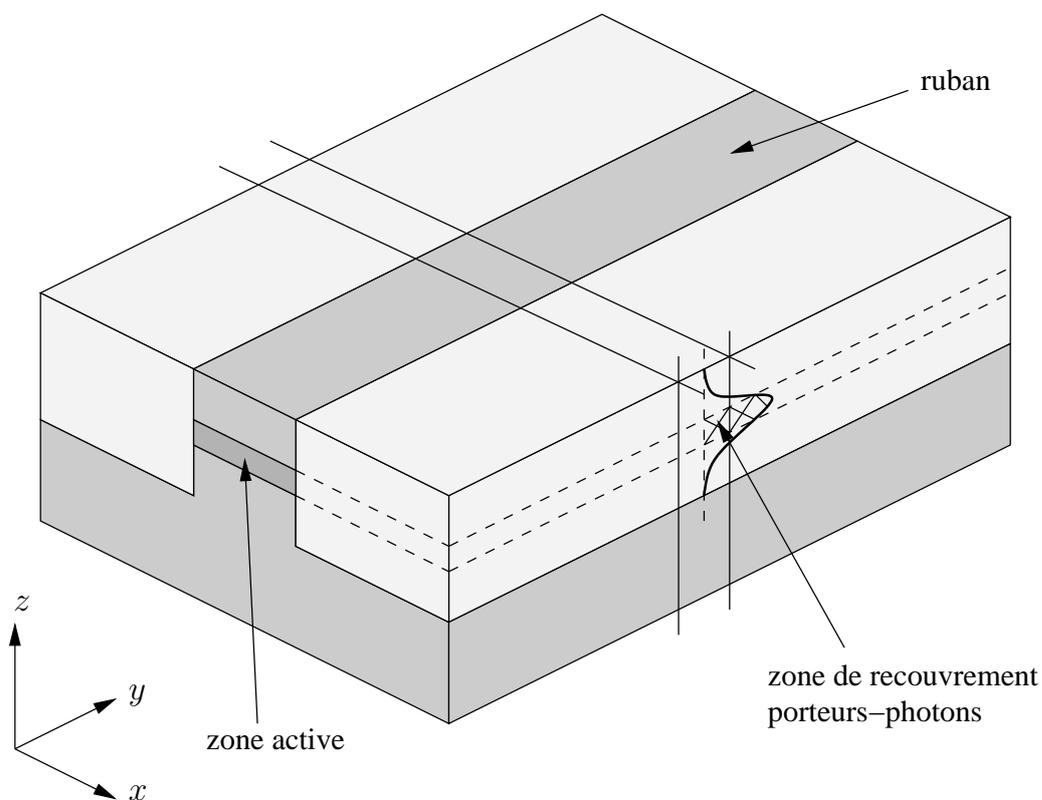


FIG. 6.1 – Schéma d'un composant optoélectronique

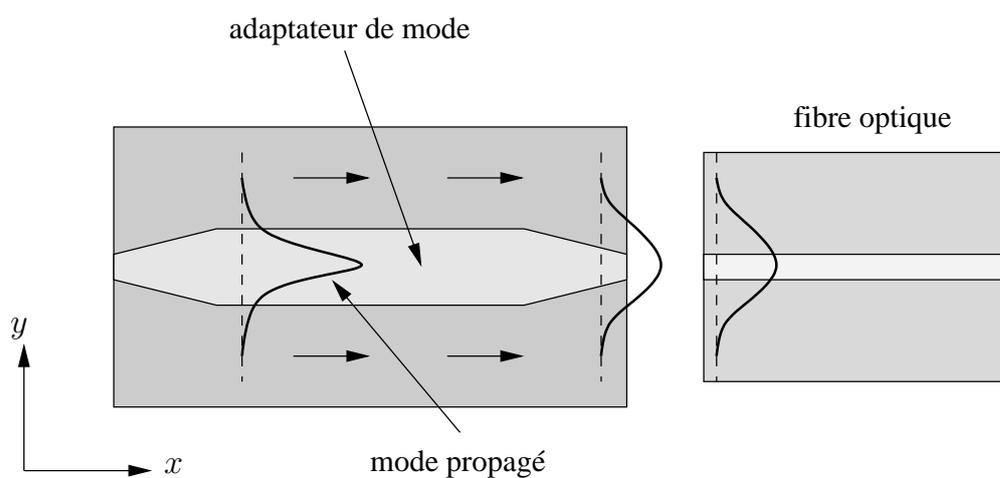


FIG. 6.2 – Schéma d'un couplage composant-fibre à l'aide d'un adaptateur de mode

6.2 Le modèle de dérive-diffusion

L'intérêt des composants optoélectroniques est de pouvoir utiliser les propriétés optiques des matériaux pour convertir l'énergie électrique en énergie optique ou inversement. Pour optimiser ce processus, il faut d'une part conduire les porteurs mais également favoriser une zone de transitions radiatives en bloquant les porteurs dans cette zone; ceci, en mettant un matériau permettant de former une barrière de potentiel.

Pour cette raison, les structures ne sont pas homogènes : il n'y a pas le même matériau dans toute la structure. L'inhomogénéité dans la structure peut être classée suivant sa taille:

- si cette taille est de l'ordre de la longueur d'onde de De Broglie $\lambda_{DB} = (2\pi\hbar)/\sqrt{3m^*k_B T}$ associée à l'électron dans le semiconducteur (typiquement entre 10 et 50 nm), le transport et les propriétés optiques sont très perturbés. On rencontre plusieurs exemples d'inhomogénéité de ce type à propos des MOS, des hétérojonctions, des puits quantiques et des diodes tunnel. Ceci agit de façon très particulière sur les fonctions d'onde comme nous l'avons évoqué au paragraphe 1.2 et sur le transport. Le niveau d'altération est tel que tous les modèles quasi hydrodynamiques (Drude-Zener, par exemple) dans lesquels les porteurs de charge sont assimilés à des particules classiques munies de leur masse effective ne sont plus valables;
- si la taille est très grande devant toutes les grandeurs physiques microscopiques qui caractérisent les porteurs de charge (longueur d'onde de De Broglie, libre parcours moyen), on peut admettre que le potentiel électro-statique varie de façon assez molle pour ne pas altérer les solutions locales de l'équation de Schrödinger. On considérera alors l'énergie de la particule en fonction de sa position dans l'espace réel et du vecteur \mathbf{k} bien que le principe d'Heisenberg [32, p.28] mentionne qu'on ne peut déterminer avec précision à la fois la position dans l'espace réel et l'impulsion \mathbf{k} d'une particule. Cependant les erreurs faites sont d'autant plus faibles que la variation du potentiel est plus lente;
- si la taille est comprise entre la dimension microscopique et macroscopique, c'est le cas dit mésoscopique. C'est le cas le plus difficile à traiter qui ne peut être résolu par aucune des méthodes classiques.

Nous nous plaçons dans le cas d'une simulation à une dimension. C'est-à-dire que l'on considère que les couches semiconductrices qui composent la structure à simuler ont des dimensions latérales (selon les axes x et y) très grandes par rapport à l'épaisseur (qui est selon z). Le potentiel électrostatique ainsi que toutes les grandeurs physiques donnant l'état des charges peuvent être représentées suivant l'axe z (voir figure 6.3). En admettant que les potentiels aux deux extrémités sont bien déterminés, les lois de l'électrostatique se résument à l'équation de Poisson qui relie la constante diélectrique du matériau ε_R , le champ électrique $\mathbf{F}(F_x, F_y, F_z)$ et la charge ρ :

$$\operatorname{div}(\varepsilon_R \mathbf{F}) = \rho \quad (6.1)$$

On peut exprimer la charge ρ en fonction des concentrations volumiques des électrons n , des trous p ainsi que celles des ions donneurs N_d^+ et accepteurs N_a^- : $\rho = e(p - n + N_d^+ - N_a^-)$. De plus, le champ

électrique est relié au potentiel φ par la relation :

$$\mathbf{F} = -\nabla \varphi \quad (6.2)$$

Le modèle choisi est à une dimension selon z , l'équation de Poisson peut donc s'exprimer de la manière suivante :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_R \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) = e(n - p - N_d^+ + N_a^-) \quad (6.3)$$

A cette équation, il faut associer les conditions aux limites portant sur les potentiels aux extrémités du composant qui peuvent être, par exemple (figure 6.3-a) :

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= \varphi_0 \\ \varphi(L_s) &= \varphi_1 \end{aligned} \quad (6.4)$$

Pour étudier de façon complète les phénomènes de transport dans les semi-conducteurs, il faudrait résoudre, en toute rigueur, l'équation de Boltzmann faisant intervenir le temps t , la fonction de distribution dans la sous-bande i considérée f_i dépendante de la position \mathbf{r} , et le moment k :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \frac{q}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \nabla_k f_i + \mathbf{v}_k \cdot \nabla_r f_i = S_0(f_i) - \frac{f_i}{\tau_0} + S_e(f_i) - \frac{f_i}{\tau_e} \quad (6.5)$$

Il y a autant d'équation de Boltzmann couplées que de sous-bandes i . S_0 et S_e sont les termes de collisions et de recombinaison-génération (R-G). Les paramètres τ_0 et τ_e traduisent respectivement un temps de collision interne entre les particules et un temps R-G. L'indice i réfère au niveau d'énergie considéré, c'est-à-dire qu'il faut résoudre autant d'équations de Boltzmann qu'il y a de sous-bandes d'énergie.

En toute rigueur, la solution du transport exige que l'on résolve l'équation de Boltzmann (6.5) de façon auto-consistante avec l'équation de Poisson (6.1).

Cette résolution semble complexe, notamment s'il faut tenir compte de tous les états électroniques. En pratique, la plupart des phénomènes sont bien décrits par le modèle, plus simple, de dérive-diffusion-recombinaison. Dans ce modèle, on considère la forme intégrée de l'équation (6.5) qui est l'équation de continuité des charges pour les électrons et les trous, tenant compte de la génération G et de la recombinaison R des porteurs :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{q} \operatorname{div}(\mathbf{J}_n) + R - G &= 0 \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{q} \operatorname{div}(\mathbf{J}_p) + R - G &= 0 \end{aligned} \quad (6.6)$$

q étant la valeur algébrique de la charge (dans le cas de l'électron $q = -e$, dans celui d'un trou $q = e$).

Deux phénomènes interviennent dans le terme de courant \mathbf{J} que l'on peut décomposer en deux parties : $\mathbf{J} = \mathbf{J}_D + \mathbf{J}_d$, \mathbf{J}_D étant le courant de dérive et \mathbf{J}_d celui de diffusion.

Un des phénomènes de transport qui apparaît en milieu inhomogène, c'est le courant de diffusion : les

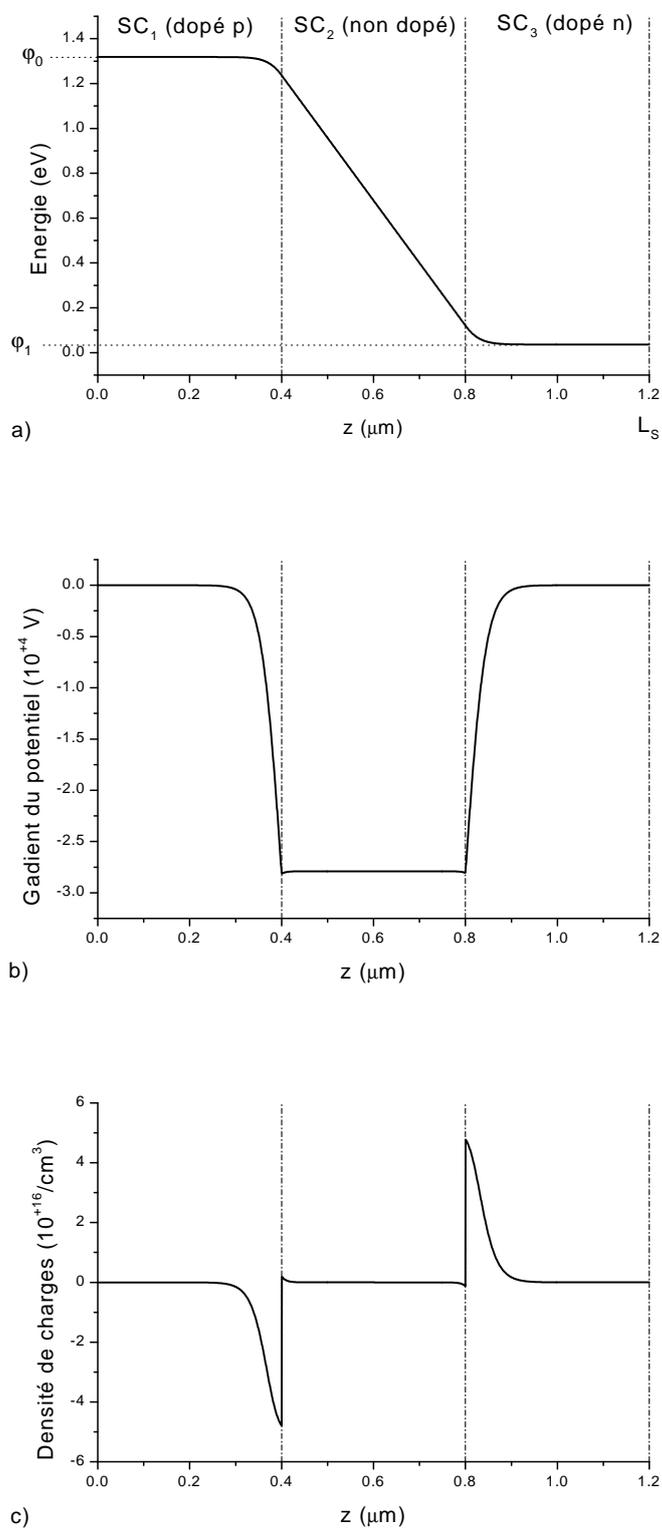


FIG. 6.3 – Courbes en fonction de z représentant en a) le potentiel, en b) le gradient de potentiel et en c) la densité de charges d'une structure de type p-i-n

porteurs tendent à aller des régions les plus peuplées vers les régions les moins peuplées. Il correspond au terme $\mathbf{v}_k \cdot \nabla_r f_i$ de l'équation (6.5). Ce phénomène est décrit par la loi de Fick qui relie les courants de diffusion des porteurs \mathbf{J}_{dn} et \mathbf{J}_{dp} aux concentrations d'électrons n et de trous p :

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_{dn} &= e D_n \nabla n \\ \mathbf{J}_{dp} &= -e D_p \nabla p\end{aligned}\tag{6.7}$$

où D_n et D_p sont les constantes de diffusion des électrons et des trous.

Le deuxième correspondant au terme $\mathbf{F} \cdot \nabla_k f_i$ de l'équation (6.5) est dû à l'action du champ électrique \mathbf{F} qui produit un courant \mathbf{J}_D que l'on appelle courant de dérive :

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_{Dn} &= e n \mu_n \mathbf{F} \\ \mathbf{J}_{Dp} &= e p \mu_p \mathbf{F}\end{aligned}\tag{6.8}$$

Au voisinage de l'équilibre, on montre que les constantes de diffusion peuvent être reliées aux mobilités par la relation d'Einstein :

$$D_i = \frac{k_B T}{e} \mu_i\tag{6.9}$$

En régime stationnaire où $\partial n / \partial t = \partial p / \partial t = 0$ et en considérant seulement la direction z , les relations de dérive-diffusion (6.6) associées à l'équation de Poisson (6.3) forment le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial z} D_n \frac{\partial n}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} n \mu_n \frac{\partial \varphi}{\partial z} - R + G = 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} D_p \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} p \mu_p \frac{\partial \varphi}{\partial z} - R + G = 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_R \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) = e (n - p - N_d^+ + N_a^-) \end{cases}\tag{6.10}$$

C'est le système d'équations de base qui est résolu dans le logiciel BCBV que nous présentons au chapitre 7.

De manière à optimiser les composants, on introduit des puits quantiques qui agissent de façon particulière sur les phénomènes de transport.

Pour étudier les phénomènes de transport, on doit alors distinguer deux parties :

- la partie massive (3D) du composant où l'énergie est continue dans les trois directions. On peut y appliquer les théories classiques;
- la partie quantique (2D) dans laquelle l'énergie est quantifiée selon la direction perpendiculaire aux interfaces.

Comme nous l'avons déjà évoqué, l'équation (6.5), intégrro-différentielle est difficile à résoudre. Dans les hétérostructures, on va simplifier l'équation en supposant que le terme de courant de diffusion est négligeable devant le terme de courant de recombinaison (schématisés sur la figure 6.4). En régime

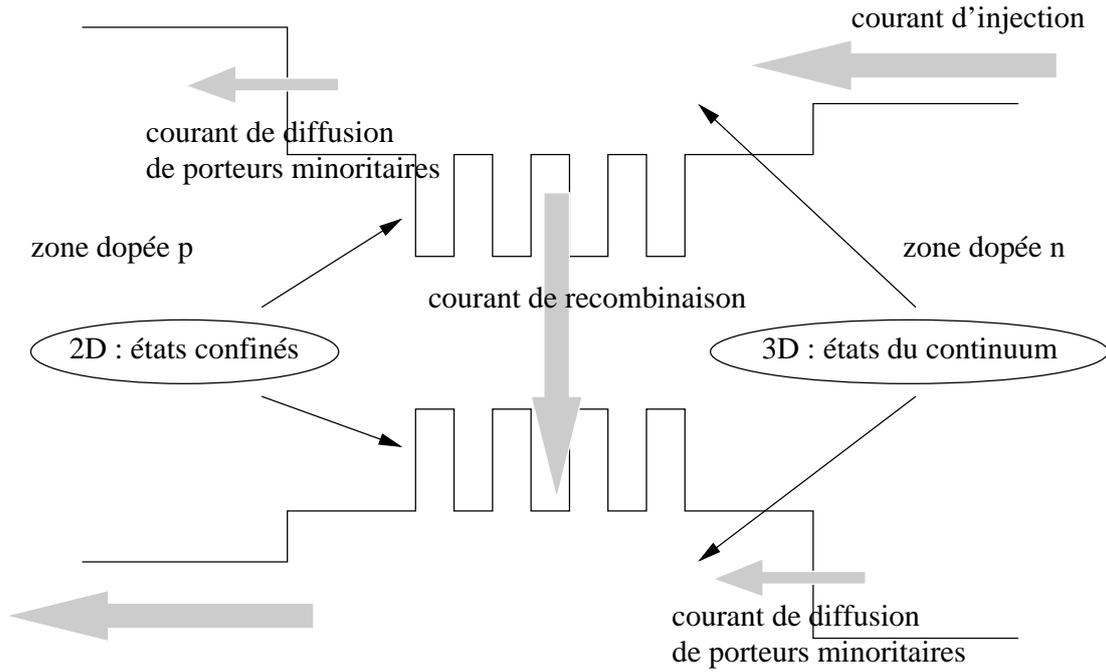


FIG. 6.4 – Schéma des différents termes de courant dans la zone active

permanent :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} &= -\frac{1}{e} \frac{\partial J_n}{\partial z} - R_{cv} = 0 \\ \frac{\partial p}{\partial t} &= \frac{1}{e} \frac{\partial J_p}{\partial z} - R_{cv} = 0 \end{aligned} \quad (6.11)$$

La conservation du courant implique :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(J_n + J_p) &= 0 \\ \Rightarrow J_n(z) + J_p(z) &= \text{constante} \end{aligned} \quad (6.12)$$

$$R_{cv} = B_{sp}(np - n_i^2) \Rightarrow n(z) = e R_{cv} z \quad (6.13)$$

En intégrant sur la partie de la zone active, c'est-à-dire de 0 à L_z , on a :

$$J = e R_{cv} L_z \quad (6.14)$$

et par conséquent :

$$\begin{cases} J_p(x) = e R_{cv}(L_z - x) \\ J_n(x) = e R_{cv} x \end{cases} \quad (6.15)$$

Ce résultat justifie que dans les modèles ultra-simplifiés l'équation de continuité se réduit à :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{J}_n - R_{cv} = \frac{I}{e \operatorname{Vol}} - R_{cv} \quad (6.16)$$

où Vol est le volume actif du matériau, $\operatorname{Vol} = L_z L_x L_y$ avec $I = S J$ soit le courant perpendiculaire total.

6.3 Couplage électrique-optique semi-classique

Dans ce chapitre n désigne l'indice du matériau, N et P les concentrations volumiques des porteurs. La simulation des composants optoélectroniques nécessite la description du champ électromagnétique ou la fréquence optique, que nous appelons champ optique. On admettra que le champ électrique \mathbf{E} de l'onde optique, distinct du champ électro-statique \mathbf{F} , varie comme:

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}(\mathbf{r}) e^{i\omega t} \quad (6.17)$$

où ω est la pulsation reliée à la longueur d'onde dans le vide par $\omega = k_0 c = 2\pi c/\lambda$. Le champ magnétique \mathbf{H} associé sera toujours relié à l'induction \mathbf{B} par $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$, c'est-à-dire que les milieux considérés n'ont pas de propriété magnétique particulière. En revanche les charges électriques fixes et en mouvement créent une relation complexe entre l'induction électrique \mathbf{D} et le champ \mathbf{E} :

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \mathbf{E} \quad (6.18)$$

ε est la permittivité diélectrique à la pulsation ω elle peut être très différente de sa valeur à $\omega = 0$, ε_R déjà vue à propos de l'équation de Poisson statique du modèle de dérive-diffusion. Les vecteurs \mathbf{E} et \mathbf{H} obéissent aux équations de Maxwell [33]:

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} \quad (6.19a)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = \mathbf{J} + \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (6.19b)$$

En électronique classique, il est usuel d'éliminer artificiellement la densité de courant \mathbf{J} de l'équation (6.19b) en définissant une permittivité complexe ε :

$$\varepsilon = \varepsilon_R - \frac{i\sigma_0}{\omega \varepsilon_0 (1 + i\omega\tau)} \quad (6.20)$$

où σ_0 est la conductivité à fréquence nulle et τ le temps de relaxation de la vitesse des porteurs. Les effets de conduction des porteurs libres à la fréquence optique seront donc inclus dans la constante diélectrique ε , cette contribution à la partie imaginaire de ε est usuellement appelée "absorption plasmon", l'équation (6.19b) devient alors:

$$\mathbf{J} = \frac{\sigma_0 \mathbf{E}}{1 + i\omega\tau} \rightarrow \nabla \times \mathbf{H} = \varepsilon_0 \varepsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (6.21)$$

L'utilisation de la constante diélectrique haute fréquence ε permet de rassembler (6.19) en une seule équation:

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} - \frac{\omega^2}{c^2} \varepsilon \mathbf{E} = \mathbf{0} \quad (6.22)$$

La conductivité introduite dans l'équation (6.21) ne fait intervenir que les interactions entre porteurs d'une même bande (effet Joule). En présence de transitions inter-bandes ou inter-sous-bandes, la

susceptibilité diélectrique est également modifiée. La partie imaginaire $\Im(\varepsilon)$ est directement liée au gain optique par la relation :

$$\Im(\varepsilon) = \frac{g \bar{n}}{k_0} \quad (6.23)$$

où g est le gain, k_0 le vecteur d'onde dans le vide et \bar{n} l'indice réel. Les transitions au voisinage du gap font également intervenir une variation de l'indice réel qui est un phénomène primordial pour les composants actifs (c'est ce phénomène qui conduit au "chirp" des lasers).

Deux approches sont alors possibles.

La première est celle d'Henry et *al.* [34] et, admettant de petites variations de l'indice et du gain linéaires avec la concentration de porteurs N , elle permet d'écrire :

$$\alpha_H = \text{constante} = -2 k_0 \frac{\frac{\partial n_r}{\partial N}}{\frac{\partial g}{\partial N}} = -2 k_0 \frac{\delta n_r}{\delta g} \quad (6.24)$$

où n_r est la partie réelle de l'indice. En rassemblant alors (6.23) et (6.24), on peut résumer la variation de ε :

$$\varepsilon = \bar{n}^2 - \alpha_H \frac{\bar{n} g}{k_0} + i g \frac{\bar{n}}{k_0} \quad (6.25)$$

La deuxième approche est de considérer le calcul du gain optique faisant intervenir l'élargissement spectral par une fonction :

$$g \rightarrow \sum_{k,j} A_{kj} \frac{\Gamma}{\Delta \omega_{kj}^2 + \Gamma^2} \quad (6.26)$$

La partie réelle de l'indice peut être calculée de la même façon :

$$\delta n_r \rightarrow -\frac{1}{2 k_0} \left(\sum_{k,j} A_{kj} \frac{\Delta \omega_{kj}}{\Delta \omega_{kj}^2 + \Gamma^2} \right) \quad (6.27)$$

Cette seconde méthode est plus précise que la première car on constate généralement que le coefficient de Henry α_H défini par (6.24) est loin d'être constant dans toute la plage de longueur d'onde intéressante.

Il y a lieu d'intégrer dans ε la contribution des transitions inter-sous-bandes et en particulier entre sous-bandes de valence (IVBA) comme cela a été calculé au chapitre 5. Les modélisations élémentaires simplifient le problème en posant :

$$g_{net} = g - \alpha_P^n N - \alpha_P^p P - \alpha_{IVBA} P \quad (6.28)$$

où $\alpha_P^{n,p}$ sont relatifs à l'absorption plasmon (collisions intra-bandes) et α_{IVBA} un coefficient d'absorption IVBA. Pour une longueur d'onde constante, cette approximation n'est pas trop fautive. Cependant l'approche consistant à calculer en même temps le gain et l'absorption IVBA en fonction de λ , N et P nous paraît meilleure et plus cohérente. La résolution générale de (6.22) dans la géométrie des composants est assez difficile, il y a lieu de simplifier le problème pour le rendre soluble par les méthodes numériques courantes. La géométrie étroite et allongée du composant tel qu'il est schématisé sur la figure 6.1 permet de l'assimiler à un guide d'onde optique et de séparer les variables

x et y de la variable z , direction de propagation. Si nous nous intéressons à la composante E_x et en posant $k_0 = \omega/c$:

$$\Delta_T E_x + \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + k_0^2 \varepsilon E_x + \frac{\partial}{\partial x}(\mathbf{E} \cdot \nabla \ln(\varepsilon)) = 0 \quad (6.29)$$

À partir des conditions aux limites sur \mathbf{E} et \mathbf{H} autour du composant et sur les facettes d'entrée et de sortie ($z = 0$ et $z = L$) la résolution de (6.29) peut être faite par propagation tranche par tranche en calculant $E_x(z + dz)$ à partir de $E_x(z)$.

Une approche plus simple consiste à ne considérer que les modes de propagation pour lesquels les variables (x, y) sont complètement séparées :

$$E_x = E_x(x, y) e^{-i\beta z} \quad (6.30)$$

Une telle solution sera obtenue si le guide est invariant par translation selon z , mais il faudra toujours associer une petite composante E_z qui n'est pas nulle pour les guides optiques contrairement au cas des guides d'ondes électroniques. Un tel mode est appelé quasi-TE (Transverse Electrique).

En considérant un vecteur H_y on obtient des équations analogues à (6.29) et (6.30) définissant des modes quasi-TM (Transverse Magnétique). Une description plus complète régissant les modes quasi-TE et quasi-TM est donnée dans la référence [35]. Pour un guide non invariant par translation nous continuerons d'utiliser les modes quasi-TE et quasi-TM en admettant une variation très lente des dimensions latérales. Cette hypothèse n'est pas absurde si la longueur du composant (de l'ordre du nm) est très grande devant les dimensions transverses (de l'ordre du μm). En reportant (6.30) dans (6.29) on obtient alors :

$$\Delta_T E_x + \frac{\partial}{\partial x} \left(E_x \frac{\partial \ln \varepsilon}{\partial x} \right) + (k_0^2 \varepsilon - \beta^2) E_x = 0 \quad (6.31)$$

Pour un guide plan (dimensions latérales infinies selon x) E_x et ε étant indépendants de x on aboutit à une recherche des modes propres analogue à la recherche des états propres du puits quantique pour l'équation de Schrödinger aux conditions aux limites près. Les conditions aux limites sur le champ E_x parallèle aux interfaces est la continuité (modes TE) alors que pour E_x perpendiculaire aux interfaces, il faut considérer la continuité de $D = \varepsilon E$ [36]. Pour les valeurs propres de β vérifiant (6.31) on définit aussi l'indice effectif $\beta = k_0 n_{eff}$.

Pour un guide plan avec une seule couche guidante d'indice n_1 et un indice externe n_0 , l'équation de dispersion peut être obtenue analytiquement :

$$\tan \left(\frac{K L_y}{2} \right) = \sqrt{\frac{n_{eff}^2 - n_0^2}{n_1^2 - n_{eff}^2}} \quad (6.32)$$

Cette solution simple donnée par (6.32) conduit à un champ E_x variant comme les premières fonctions d'onde du puits quantique (voir 6.5).

En général, dans le problème électrique-optique couplé, on n'utilisera pas l'équation (6.32) car l'indice de la couche active est complexe et variable avec la concentration de porteurs. Cependant

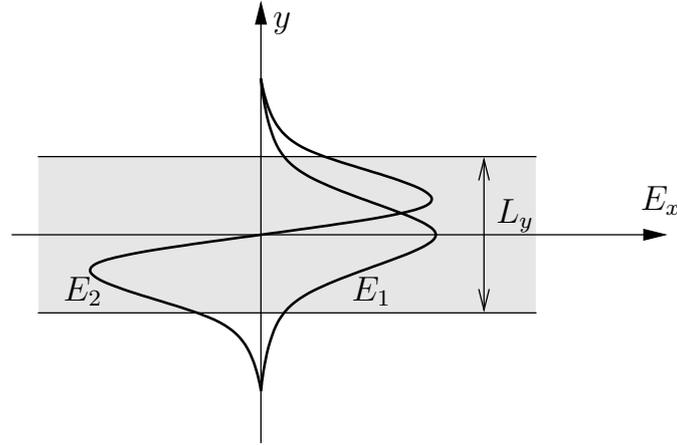


FIG. 6.5 – Deux premiers modes propres de l'équation (6.32)

cette méthode peut être appliquée pour résoudre de façon approchée le problème du facteur de recouvrement. On appelle facteur de confinement Γ le facteur qui relie le coefficient d'amplification du mode ($\Im(\beta)$) avec le gain du matériau. Nous avons vu que pour une onde plane, ce facteur est 1 puisqu'on a directement une onde en $\exp(i\omega t - ikz + gz/2)$. Avec un champ E_x optique comme celui qui est tracé sur la figure 6.5 seule la partie du champ recouvrant la couche active pour $0 < y < L_y$ contribue au gain. On aura donc :

$$g_{net} = \Gamma g_{mat} \quad (6.33)$$

avec :

$$\Gamma = \frac{\iint_{\Omega_a} E_x^2 dx dy}{\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} E_x^2 dx dy} \quad (6.34)$$

où Ω_a est le domaine du matériau ayant du gain. Pour un gain matériau g_{mat} constant par morceaux, la densité de photons variant comme $|E_x|^2$, on a $\beta_i = g_{net}/2$ ($\beta = \beta_r + i\beta_i$). Le calcul de Γ pour le mode fondamental du guide est un élément essentiel de la modélisation du composant.

Le couplage électrique-optique semi-classique consiste donc à inclure l'effet des porteurs de charges et les transitions entre états électroniques dans le milieu actif dans la constante diélectrique optique ε :

- effet du gain optique;
- effet des transitions intrabandes;
- effet des transitions inter sous-bandes.

En parallèle, le couplage des photons aux électrons par les équations de transport est directement inclus dans la continuité des charges, par le taux d'émission R_{stim} :

$$R_{stim} = N_{phot} g v_g \quad (6.35)$$

où v_g est la vitesse de groupe et N_{phot} la densité volumique de photons. Il est d'usage de décomposer

N_{phot} pour un mode se propageant dans la direction (z) :

$$N_{phot} = N_P(z) A(x,y) \quad (6.36)$$

avec une norme à 1 pour la fonction de forme A . N_P est la densité de photons par tranche dans la direction (z).

Ayant déjà introduit les pertes optiques liées aux charges électriques, il convient de reporter d'autres pertes dans le composant :

- pertes par diffusion sur les bords du guide
- pertes par rayonnement, conversion du mode
- pertes aux facettes des miroirs pour un laser

Le modèle de Adams [28] revu par P. Brosseau [37] met en œuvre une équation d'évolution très simple par les deux modes contra propagatifs F^+ et F^- ainsi que l'émission spontanée amplifiée (ASE) convertie dans ces modes S^+ et S^- :

$$\frac{dF^\pm}{dz} = \pm \frac{1}{2} g F^\pm \quad (6.37)$$

avec $N_{phot}(z) = S^+ + S^- + |F^+|^2 + |F^-|^2$.

L'équation (6.37) et ses analogues pour S^+ et S^- sont largement utilisées pour la modélisation "tranche par tranche" des lasers et des amplificateurs optiques [38].

L'approche semi-classique peut paraître trop "bricolée" compte tenu du calcul quantique détaillé qui est fait dans les chapitres précédents. Nous allons évoquer dans les paragraphes suivants en quoi consiste une approche quantique raisonnable au moyen de la matrice de densité et ce que l'on peut raisonnablement en attendre.

6.4 Approche par la matrice de densité

Cette approche n'est pas complètement quantique, le champ optique reste décrit par un champ électromagnétique classique, comme au paragraphe précédent. L'approche par la matrice de densité est nécessaire si la distribution statistique des porteurs s'écarte notablement de la distribution à l'équilibre. En particulier, on peut soupçonner que le principe d'exclusion de Pauli qui n'autorise que deux états à occuper pour le même \mathbf{k} entraîne un appauvrissement de la probabilité d'occupation autour de \mathbf{k} , si la fréquence des transitions interbandes est très élevée. Ce "trou" dans la distribution se produira pour une valeur de k_ρ telle que :

$$E_g + \frac{\hbar}{2} \left(\frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v} \right) k_\rho^2 = \hbar\omega \quad (6.38)$$

où m_c et m_v sont les masses de densité d'états, respectivement, pour les sous-bandes de conduction et de valence.

Les énergies $E_{f_{c,v}} = \frac{\hbar^2 k_\rho^2}{2m_{c,v}} + E_{c,v}$ correspondent aux énergies des quasi-niveaux de Fermi. La condition (6.38) associée au fait que le gain optique correspondant est positif correspond au critère

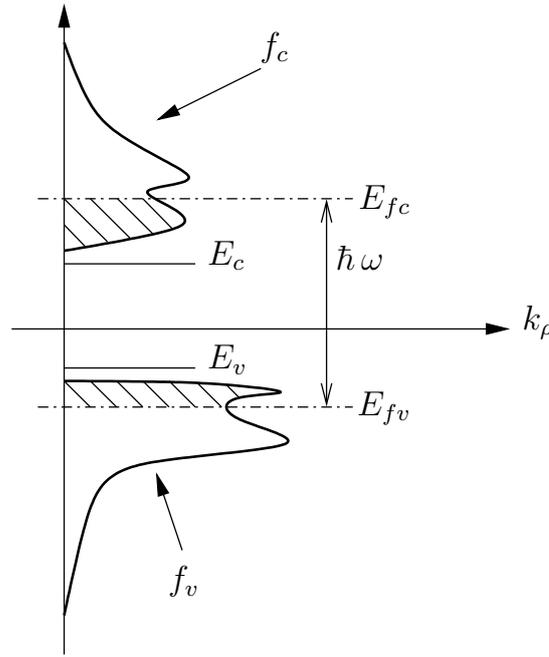


FIG. 6.6 – Distribution des porteurs faisant apparaître les déformations de f_c et f_v autour de E_{fc} et E_{fv}

de Bernard-Duraffourg [39]. Si les processus de diffusion intrabande, principalement électron-phonon, autorisant les changements de vecteur d'onde et/ou d'énergie ne sont pas très fréquents, une forte inversion et une densité de photons élevée entrainera une déformation notable des distributions statistiques des porteurs f_c et f_v dans les bandes. Ce phénomène est appelé "spectral hole burning". Pour un laser au dessus du seuil la concentration en porteurs ne change pas trop, en revanche le taux d'émission stimulée est directement proportionnel à la densité de photons et continue d'augmenter avec le courant. En utilisant les relations du modèle ultra simplifié (6.16) :

$$\frac{I}{e Vol} \cong - \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{stim} = R_{stim} = N_{phot} g v_g \quad (6.39)$$

où N_{phot} est la densité de photons, g le gain optique et v_g la vitesse de groupe associée au flux de photons.

Un traitement heuristique et radical de la déformation de f_c et f_v autour de E_{fc} et E_{fv} consiste à modifier (6.39) en écrivant :

$$R_{stim} = \frac{N_{phot} g v_g}{1 + \kappa N_{phot}} \quad (6.40)$$

c'est-à-dire que R_{stim} a une valeur limite de saturation. On peut concevoir intuitivement que le temps limite associé sera donné par :

$$\tau_{sat} = \frac{\kappa}{\frac{\partial g}{\partial N} v_g} \leq \tau_{in} \quad (6.41)$$

En effet si la fréquence des transitions stimulées devient très grande devant τ_{in} les distributions f_c et f_v doivent se déformer notablement. C'est principalement pour décrire ce phénomène que certains

auteurs ont abordé le transport électronique fortement couplé au champ optique par le biais de la matrice de densité.

Nous ne reviendrons pas sur la définition et l'équation de mouvement de la matrice de densité [27]. Dans ce contexte, une bonne introduction en est faite par Asada [40, 41] dont nous rappelons ici les grandes lignes. Supposons que nous puissions calculer p_v , la probabilité d'occupation de l'état d'un électron $|\psi_v\rangle$. La matrice de densité statistique, en utilisant la notation de Dirac est donnée par l'opérateur ρ :

$$\rho = \sum_v |\psi_v\rangle p_v \langle \psi_v| \quad (6.42)$$

Cette matrice permet de calculer la valeur moyenne statistique sur un grand ensemble de réalisations des états $|\psi_v\rangle$. Pour toute observable associée à l'opérateur A :

$$A = \sum_{nm} \rho_{nm} A_{mn} = \text{Tr}(\rho A) \quad (6.43)$$

L'équation de Liouville quantique qui gouverne l'évolution de ρ dans le temps :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [H, \rho] \quad (6.44)$$

où H est le hamiltonien total agissant sur un électron qu'il est usuel de décomposer en trois termes :

$$H = H_0 + H_c + H' \quad (6.45)$$

où :

- H_0 est le hamiltonien à 1 électron du cristal rigide idéal donnant les bandes dans l'approximation de la fonction enveloppe (voir paragraphe 1.2);
- H_c est le hamiltonien associé au champ électrique de l'onde optique \mathbf{E} :

$$H_c = -e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} \quad (6.46)$$

- H' est un hamiltonien perturbant le cristal rigide par exemple dû au couplage électron-phonon.

Pour référer les éléments de matrice de ρ il conviendrait de rechercher l'équation d'évolution de $\rho_{j k' v}^{i k c}$, $\rho_{j k' c}^{i k c}$ et $\rho_{j k' v}^{i k v}$, car il faudrait bien distinguer les sous-bandes selon qu'elles sont relatives aux états de conduction ou aux états de valence.

Dans l'approche simplifiée [41], on admet que l'effet de H' sur l'évolution de ρ se traduit par trois temps de relaxation τ_n , τ_s et τ_{in} , tandis que les commutateurs $[H_0, \rho]$ et $[H_c, \rho]$ sont calculés rigoureusement.

Développant (6.44) sur les éléments diagonaux ρ_{nn} et non diagonaux ρ_{nm} (n est un état de conduction et m un état de valence) il vient :

$$\frac{\partial \rho_{nn}}{\partial t} = \sum_{n'} (\rho_{nn'} \mathbf{R}_{n'n} - \mathbf{R}_{nn'} \rho_{n'n}) \frac{\mathbf{E}}{i\hbar} - \frac{\rho_{nn} - \tilde{\rho}_n}{\tau_n} - \frac{\rho_{nn} - \bar{\rho}_n}{\tau_s} + \Lambda_n \quad (6.47a)$$

$$\frac{\partial \rho_{nm}}{\partial t} = i\omega_{nm} \rho_{nm} + \sum_{n'} (\rho_{nn'} \mathbf{R}_{n'm} - \mathbf{R}_{nn'} \rho_{n'm}) \frac{\mathbf{E}}{i\hbar} - \frac{\rho_{nm}}{\tau_{in}} \quad (n \neq m) \quad (6.47b)$$

où \mathbf{R}_{nm} est l'élément de matrice de $e\mathbf{r}$, $\omega_{nm} = E_n - E_m$, \mathbf{E} le champ électrique aux fréquences optiques, $\tilde{\rho}_n$ la distribution en *quasi équilibre* (distribution de Fermi-Dirac en présence de la pompe), $\bar{\rho}_n$ la distribution à l'équilibre, τ_s le temps d'émission spontanée, Λ_n le taux de génération (pompe) et τ_{in} un temps de collision effectif agissant sur ρ_{nm} ($n \neq m$), que l'on prend usuellement égal à :

$$\frac{1}{\tau_{in}} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\tau_c} + \frac{1}{\tau_v} \right) \quad (6.48)$$

Le terme de pompe Λ_n ne peut être calculé rigoureusement dans cette approche, il nécessitera une théorie prenant en compte *l'inhomogénéité dans l'espace* de ρ (terme en $\nabla_r \rho_{nm}$) comme dans l'équation de Boltzmann (6.5).

Pour l'analyse ultérieure on peut se contenter d'admettre que les distributions en quasi équilibre $\tilde{\rho}_n$ sont obtenues à partir du courant par les termes de génération Λ_n tels que :

$$\frac{I}{e} = \int_{Vol. \text{ actif}} \sum_n \Lambda_n d^3r \quad (6.49)$$

Pour obtenir la constante diélectrique contenant le gain et la variation d'indice, on calcule la moyenne de la polarisation P . On développe ρ et P selon les puissances de E :

$$\begin{cases} \rho = \rho^{(0)} + \rho^{(1)} E + \rho^{(2)} |E|^2 + \dots \\ P = P^{(1)} E + P^{(3)} E^3 + \dots \end{cases} \quad (6.50)$$

Du fait que $R_{nn} = 0$ (règle de sélection) il vient deux résultats essentiels :

$$\begin{aligned} \rho_{nm}^{(1)} &= \frac{\rho_{nm}^{(0)} \mathbf{R}_{nm} - \rho_{mm}^{(0)} \mathbf{R}_{nm}}{i\omega + \frac{1}{\tau_{in}} - \omega_{nm}} \frac{E}{i\hbar} \\ \mathbf{P} &= N \sum_n |R_{nm}|^2 \frac{\rho_{nn}^{(0)} - \rho_{mm}^{(0)}}{i\hbar} \frac{\mathbf{E}}{\frac{1}{\tau_{in}} + i(\omega - \omega_{nm})} \end{aligned} \quad (6.51)$$

et pour la partie linéaire du gain :

$$g = \frac{\omega}{\bar{n}^2 \varepsilon_0 \hbar} N \sum_n \frac{|R_{nm}|^2 (\rho_{nn}^{(0)} - \rho_{mm}^{(0)})}{(\omega - \omega_{nm})^2 + (1/\tau_{in})^2} \frac{1}{\tau_{in}} \quad (6.52)$$

Ces résultats coïncident exactement avec l'approche précédente (5.9) et justifient mieux l'origine de la Lorentzienne qui était introduite de façon artificielle dans les chapitres précédents.

Notons enfin que le développement (6.50) permet d'obtenir les termes d'ordre supérieur, en particulier la dépendance de g avec $|E|^2$. On écrit de façon générale, pour un mode p :

$$g_p = g_p - \sum_q B_{pq} |E_q|^2 \quad (6.53)$$

Il est indispensable de calculer l'effet de *tous* les modes sur le gain. Nous ne reproduirons pas ici les calculs de $\rho_{nn}^{(2)}$ et $\rho_{nn}^{(3)}$ ainsi que de $P^{(3)}$ [40]. Une expression intéressante peut être utilisée dans une

modélisation poussée du gain :

$$\begin{aligned}
 B_{pq} &= \frac{\hbar \omega_p}{2 \bar{n}^2 \varepsilon_0} \int_{E_g}^{+\infty} \frac{\langle R^4 \rangle (f_c - f_v) g_{cv} (I_1 + I_2)}{i(\hbar \omega_q - E_{cv}) + (\hbar/\tau_{in})} dE_{cv} \\
 I_1 &= \Re \left(\frac{2(\tau_c + \tau_v)}{\tau_{in}(\hbar \omega_p - E_{cv})^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \right) \\
 I_2 &= \Re \left[\left(\frac{1}{i(\hbar \omega_p - E_{cv}) + (\hbar/\tau_{in})} + \frac{1}{-i(\hbar \omega_q - E_{cv}) + (\hbar/\tau_{in})} \right) \right. \\
 &\quad \left. \cdot \left(\frac{1}{i\hbar(\omega_p - \omega_q) + (\hbar/\tau_c)} + \frac{1}{i\hbar(\omega_p - \omega_q) + (\hbar/\tau_v)} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{6.54}$$

\Re désignant la partie réelle. Si l'on veut conserver une variation phénoménologique de g avec N_{phot} , on voit donc qu'il convient d'utiliser (6.53) plutôt que (6.40), les deux formes ne pouvant être réductibles, la génération de nombreux modes parasites contribuant à réduire d'autant le gain par le mode principal.

Chapitre 7

Développement d'un outil logiciel efficace

Le logiciel de simulation BCBV [42], dont l'élaboration fut commencée au laboratoire du C.N.E.T. Bagnaux, est un programme écrit en C++ [43]. Son développement s'est ensuite poursuivi au sein du Groupement d'Intérêt Économique OPTO+. Ce programme résout, à une dimension, les équations de transport et de Poisson pour un empilement de couches semi-conductrices. Le diagramme des bandes: BC (pour bande de conduction), BV (pour bande de valence) est une représentation commode de l'état électrique d'une structure semi-conductrice. Au niveau du développement, le langage de programmation utilisé permet la programmation orientée objet. L'avantage de ce type de programmation est une très grande modularité des programmes. On peut donc assembler très facilement, dans un même logiciel, des éléments de programme différents. L'outil de développement logiciel est Borland C++ Builder [44] qui permet la gestion et l'utilisation de nombreux composants tels que l'interface graphique pour permettre l'interaction avec l'utilisateur comme, par exemple, les fenêtres de dialogue ou le tracé de courbes.

7.1 Paramètres matériaux, prise en compte de la contrainte

L'ingénierie des bandes nécessite un classement des matériaux semi-conducteurs. Dans le logiciel BCBV, les matériaux sont classés de la manière suivante :

- les alliages binaires et semiconducteurs usuels \rightarrow Si, Ge, GaAs, AlAs, InP, InAs, GaP;
- les alliages ternaires \rightarrow GaAlAs, InAlAs, InAsP, GaInP, GaInAs;
- les alliages quaternaires \rightarrow GaInAsP, GaInAlAs;
- les super-réseaux qui sont des empilements alternés et périodiques de deux matériaux ABA-BAB...qui ne peuvent ni être assimilés à des alliages ni se comporter comme une suite de couches ayant des propriétés individuelles car la période est comparable à la longueur d'onde de DeBroglie. La structure de bande est donc particulière;
- les couches graduelles qui comportent une variation continue de paramètre selon la direction (z). Cette variation s'appuie sur les paramètres des deux matériaux qui l'encadrent.

Binaires et usuels	Ternaires	Quaternaires
Si	$\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$	$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$
Ge	$\text{In}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$	$\text{Al}_y\text{Ga}_x\text{In}_{1-x-y}\text{As}$
GaAs	$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$	
InP	$\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$	
AlAs	GaInAlAs	
InAs	SiGe	
GaP		
GaInAs47		
AlInAs48		
GaInP51		

TAB. 7.1 – Liste des matériaux disponibles dans BCBV

Dans la colonne des matériaux binaires et usuels, nous avons regroupé deux matériaux particuliers : $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ et $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.48}\text{As}$ qui sont en accord de maille sur l'InP. À partir de ces deux matériaux, on place dans la colonne des ternaires du tableau 7.1 le GaInAlAs qui est un quaternaire particulier : $(\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As})_x(\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.48}\text{As})_{1-x}$

Pour chacun des matériaux pouvant être utilisés, il faut déterminer ce qu'on appelle les paramètres matériaux. La base de données repose en fait sur les matériaux de la première catégorie les paramètres des matériaux des autres catégories étant déterminés à partir de ceux-ci. Les paramètres matériaux comme l'énergie de gap, l'affinité, la masse effective des électrons, les paramètres de Luttinger, la mobilité des électrons et des trous, etc sont renseignés dans un fichier de données pour les matériaux binaires.

7.1.1 Loi de Végard

Lorsqu'on fait une structure avec des matériaux ternaires et quaternaires, les paramètres matériaux sont calculés par la loi de Végard.

Les matériaux ternaires T sont formés à partir de deux matériaux binaires AC et BC ayant un élément commun. Si x est la concentration en A, $1 - x$ est la concentration en B (par exemple le matériau $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ est formé de GaAs et de InAs), un paramètre matériau P_T de ce ternaire varie selon une loi linéaire, fonction du paramètre A et de celui de B :

$$P(x) = (1 - x)P_{AC} + xP_{BC} \quad (7.1)$$

Pour les matériaux quaternaires de type $\text{A}_{\text{III}}\text{B}_{\text{III}}\text{C}_{\text{V}}\text{D}_{\text{V}}$, comme le $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$, on n'a plus une loi linéaire mais une loi quadratique :

$$P(x,y) = xyP_{AC} + x(1-y)P_{AD} + y(1-x)P_{BC} + (1-x)(1-y)P_{BD} \quad (7.2)$$

Pour les matériaux quaternaires de type $A_{III}B_{III}C_{III}D_V$ comme le $Ga_{1-x-y}In_xAl_yAs$ ne portant que trois matériaux AD, BD, CD :

$$P(x,y) = (1 - x - y) P_{AD} + x P_{BD} + y P_{CD} \quad (7.3)$$

Pour certaines propriétés physiques, ces formes sont insuffisantes. Cela concerne essentiellement le gap direct, l'affinité, les mobilités, les lois de vitesse et l'indice optique au voisinage du gap.

7.1.2 Lois spécifiques

Matériau	Gap direct (E_g)	Affinité (χ)
$Ga_{1-x}Al_xAs$ $x \leq 0.4$ $x > 0.4$	$1.424 + 1.247 x$ $1.923 + 1.247 x + 0.997 x^2$	$0.65 (E_g - 1.424)$ $0.3242 + 0.8106 x + 1.2763 x^2$
$Ga_xIn_{1-x}As$	$0.36 + 0.66227 x + 0.40176 x^2$	$-0.53 - 0.3134 x + 0.8434 x^2$
$Al_xIn_{1-x}As$	$0.36 + 1.902 x + 0.767 x^2$	$-0.53 + 0.6623 x + 1.1377 x^2$
$Ga_xIn_{1-x}P$	$1.35 + 0.6998 x + 0.55022 x^2$	$-0.22 + 0.76 x$
$(GaInAs47)_{1-x}(AlInAs48)_x$	$0.76 + 0.49 x + 0.20 x^2$	$-0.491 + 0.541 x$
$Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$	$1.350 + 0.668 x - 1.068 y$ $+0.758 x^2 + 0.078 y^2$ $-0.068 x y - 0.322 x^2 y + 0.03 x y^2$	$\Delta E_v = 0.06 x + 0.4 y$ $-0.15 x y$ $\Delta E_c = \chi$ $= \chi_{Inp} - 1.35 + \Delta E_v + E_g$
$In_{1-x-y}Ga_xAl_yAs$	$0.36 + 2.093 y + 0.629 x$ $+0.577 y^2 + 0.436 x^2$ $+1.013 x y - 2 x y (1 - x - y)$	$\chi = -0.72 (1.43 - E_g)$

TAB. 7.2 – Tableau regroupant les lois plus exactes de variation de gap et d'affinité pour certains matériaux

Le tableau 7.2 regroupe les lois plus appropriées pour le calcul du gap direct et de l'affinité qui sont des paramètres fondamentaux pour la simulation des composants, ainsi que les paramètres de Luttinger, les masses effectives et l'indice optique [45].

7.1.3 Contrainte sur InP ou GaAs

Les deux substrats utilisés à OPTO+ sont le GaAs et l'InP. Nous avons présenté l'effet de la contrainte sur les bandes d'énergie au paragraphe §1.3. Ici nous en rappelons les principales caractéristiques en présentant les paramètres utilisés dans BCBV.

Les déformations du cristal sont fonction de la maille du substrat $a_0[\text{substrat}]$ et de celle du matériau

que l'on dépose a :

$$\begin{aligned}\epsilon_{xx} &= \frac{a_0[\text{substrat}] - a}{a} \\ \epsilon_{zz} &= -2\epsilon_{xx} \frac{C_{12}}{C_{11}}\end{aligned}\tag{7.4}$$

Notons $E_a = a_c - a_v$, le potentiel de déformation hydrostatique. Pour les matériaux utilisés dans BCBV, de manière générale, on a 2/3 de déformation dans la bande de conduction et 1/3 dans la bande de valence :

$$\Delta E_c = \frac{4}{3} E_a \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon_{xx}\tag{7.5}$$

$$\Delta E_v = -\frac{2}{3} E_a \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon_{xx}\tag{7.6}$$

Soit E_b , le potentiel de déformation de cisaillement :

$$\xi = -E_b \left(1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \epsilon_{xx}\tag{7.7}$$

On définit le gap contraint E_g^{hydro} dû à la déformation hydrostatique :

$$E_g^{hydro} = E_g + \Delta E_c - \Delta E_v\tag{7.8}$$

Et les deux gap contraints correspondants aux trous lourds et aux trous légers sont donc :

$$\begin{aligned}E_g^{HH} &= E_g^{hydro} + \xi \\ E_g^{LH} &= E_g^{hydro} - \xi\end{aligned}\tag{7.9}$$

L'affinité contrainte χ du matériau considéré peut donc être déduite par la relation :

$$\chi = \chi_{non\ constraint} + (E_g^{hydro} - E_g)\tag{7.10}$$

Nous avons regroupé ces notations sur la figure 7.1

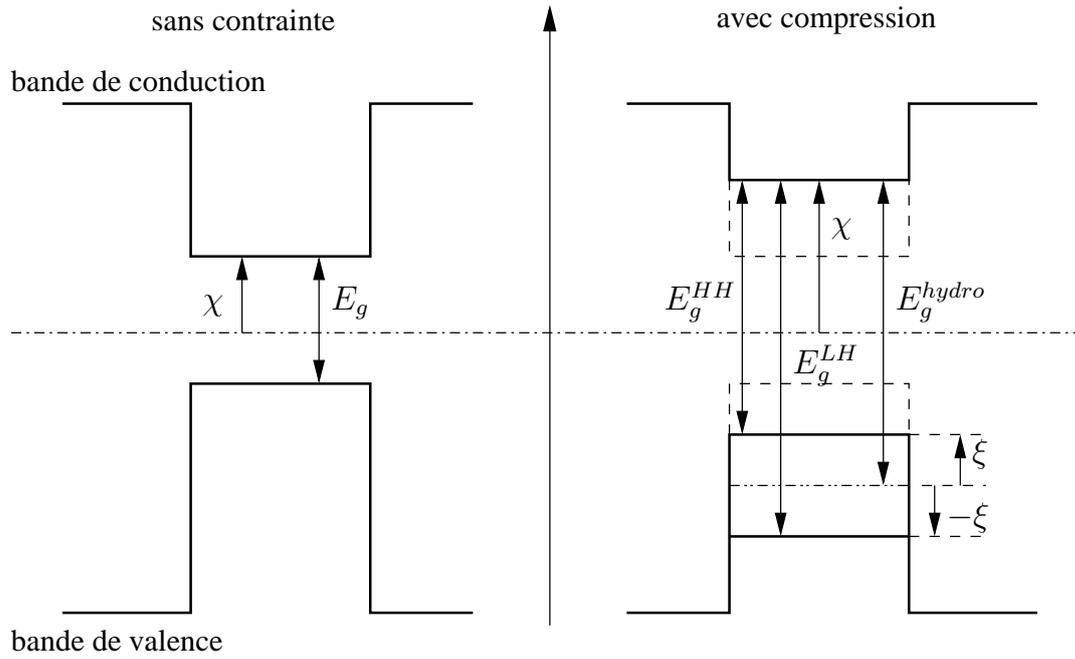


FIG. 7.1 – Paramètres matériaux liés à la contrainte

7.1.4 Mobilité des porteurs, loi de vitesse

La mobilité des porteurs (μ_n pour les électrons et μ_p pour les trous) est un paramètre important de la simulation pour caractériser le déplacement des porteurs dans la structure. C'est un coefficient positif tel que :

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_n &= e n \mu_n \nabla f_n \\ \mathbf{J}_p &= e p \mu_p \nabla f_p \end{aligned} \quad (7.11)$$

On part de lois de vitesse de dérive en fonction du champ :

$$\mathbf{v}_D = \mu(F) \mathbf{F} \quad (7.12)$$

$\mu(F)$ étant positif, on prendra une loi paire : $\mu(-F) = \mu(F)$

Pour simplifier ce point, on prendra $F = |\mathbf{F}|$ pour la suite de cette présentation :

$$\mu = \mu_0 \frac{1 + \alpha(F/F_c)^n}{1 + \beta(F/F_c)^{n+1}} \quad (7.13)$$

de telle sorte que si $F \rightarrow \infty$ alors la vitesse v_D tend vers une vitesse limite v_L :

$$v_L = \mu_0 F_c (\alpha/\beta) \quad (7.14)$$

Cette forme reproduit assez bien une loi avec un pic de vitesse v_{pic} supérieur à la vitesse limite.

$$\begin{aligned}
 \eta &= \frac{1}{\frac{\mu_0 F_c}{v_{pic}} - 1} \\
 F_c &= \frac{\beta v_L}{\alpha \mu_0} \\
 \alpha &= \frac{v_L v_{pic}}{\eta \mu_0 (v_{pic} - v_L) F_c} \\
 \beta &= \frac{v_{pic}}{\eta (v_{pic} - v_L)}
 \end{aligned} \tag{7.15}$$

Si $v_{pic} < v_L$, il n'y a plus de maximum, on change alors de forme de loi :

$$\mu = \mu_0 \frac{F}{\sqrt{1 + (F/F_c)^2}} \tag{7.16}$$

Dans la base de données des matériaux, on renseigne les paramètres μ_0 , v_{pic} et v_L . On procède à un calcul éventuel par une loi de Végard selon la classe du matériau. Cependant, μ_0 dépend aussi du dopage. Pour un ternaire, on a :

$$\mu_0 = \frac{x \mu_0(B) + (1 - x) \mu_0(A)}{(1 + \Gamma_D N_D)^q} \tag{7.17}$$

Pour le GaAs :

$$\begin{cases} \Gamma_D = 5.5 \cdot 10^{-17} \\ q = 0.233 \end{cases}$$

Le logiciel BCBCV permet également d'effectuer des simulations sur des structures de type super-réseaux comportant un grand nombre de puits et de barrières identiques.

7.1.5 Cas particulier des super-réseaux

Les super-réseaux sont des structures formées d'un empilement périodique de couches à partir de deux matériaux différents de manière à former une succession périodique de puits et de barrières (voir figure 7.2).

Contrairement aux multipuits quantiques, la mobilité perpendiculaire a un sens si le champ électrique n'est pas trop élevé.

Dans BCBV, connaissant a , b , x_a , x_b , on calcule la suite des mini-bandes :

- mini-bande Γ électrons;
- mini-bande X et L (peuvent influencer figure 7.3);
- mini-bandes HH et LH.

A partir de cela, on calcule la mobilité dans l'approche du temps de relaxation constant :

$$v_D = \mu_0 \frac{I_1\left(\frac{\Delta}{2k_B T}\right)}{I_0\left(\frac{\Delta}{2k_B T}\right)} \frac{|F|}{1 + (F/F_c)^2} \tag{7.18}$$

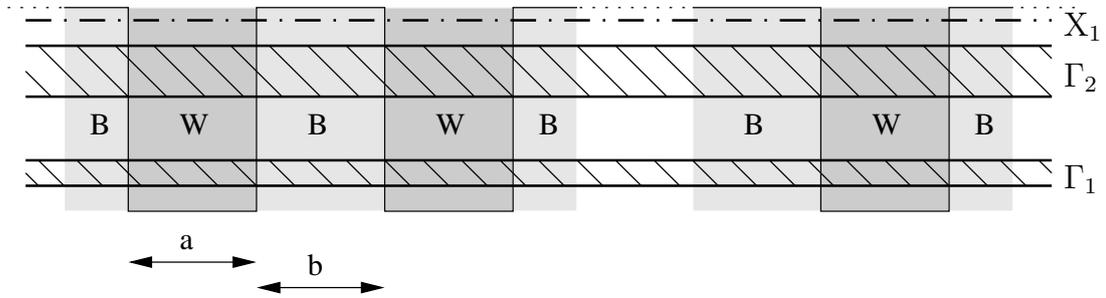


FIG. 7.2 – Diagramme de bande d'un super-réseau avec les mini-bandes Γ et X

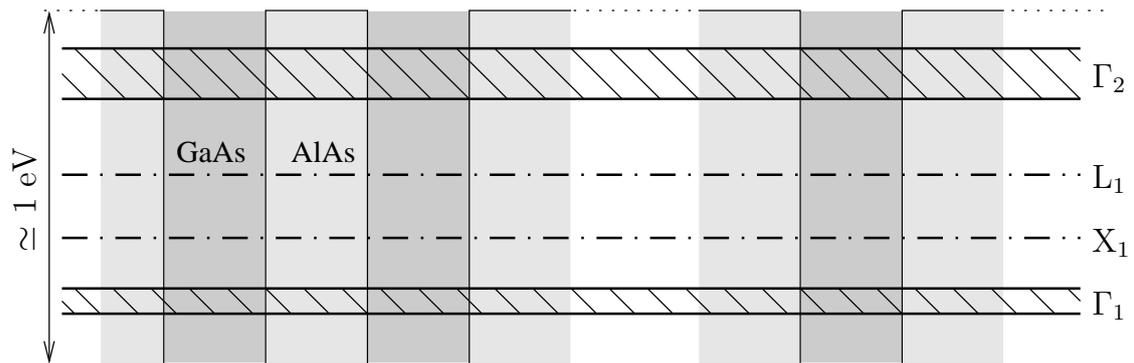


FIG. 7.3 – Diagramme de bande d'un super-réseau constitué de GaAs et d'AlAs

$$F_c = \frac{\hbar}{d\tau} \quad (7.19)$$

- $d = a + b$ est la période;
- Δ est la largeur de mini-bande calculée par Kronig-Penney [3];
- τ est le temps de collision unique et constant dans ce modèle simple;
- I_0 et I_1 sont les fonctions de Bessel modifiées.

On voit que si le champ devient trop élevé, le modèle de dérive-diffusion ne peut plus marcher car la vitesse tend vers zéro et non pas vers une limite.

7.2 Intégration du calcul du gain

Comme nous l'avons évoqué en introduction de ce chapitre, le logiciel BCBV propose une interface d'entrée (voir figure 7.4) agréable à l'utilisateur.

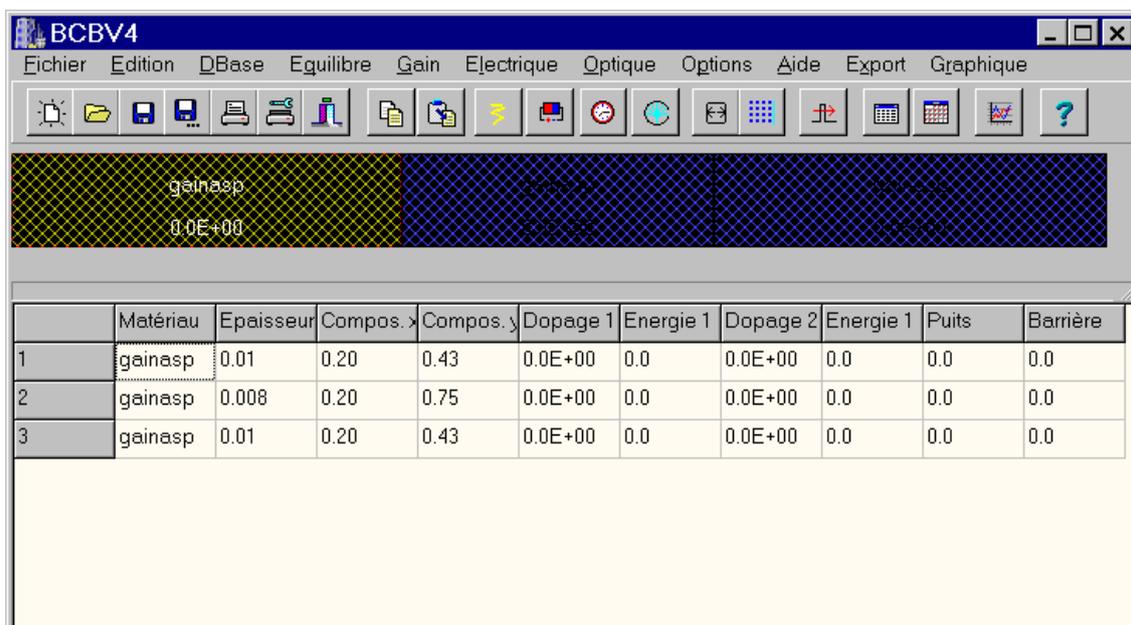


FIG. 7.4 – Fenêtre de départ du logiciel BCBV

Il peut alors, à partir de cette fenêtre, entrer par couches de matériaux la structure qu'il veut simuler. Prenons le cas d'un laser typique dont la zone active est constituée d'une couche d'InP dopée P, d'une série d'alternance de couches $\text{Ga}_{0.2}\text{In}_{0.8}\text{As}_{0.43}\text{P}_{0.57}$ et $\text{Ga}_{0.2}\text{In}_{0.8}\text{As}_{0.75}\text{P}_{0.25}$ puis pour finir d'une couche d'InP dopée N. Le diagramme des bandes de conduction et de valence est donné sur la figure 7.5. Lorsqu'on applique une tension aux bornes de cette structure, le diagramme des bandes se modifie sous l'influence du champ électrique externe appliqué. On peut alors voir sur la figure 7.6b que dans la zone des puits quantiques, les bandes sont presque plates. On peut donc considérer que, dans chaque couche, l'affinité et le gap sont constants. On peut ainsi calculer les états confinés de

la structure ainsi que le gain par la méthode que nous avons développée au chapitre 3. On peut également supposer que les niveaux de Fermi, en pointillés sur la figure 7.6, sont constants dans la zone des puits quantiques.

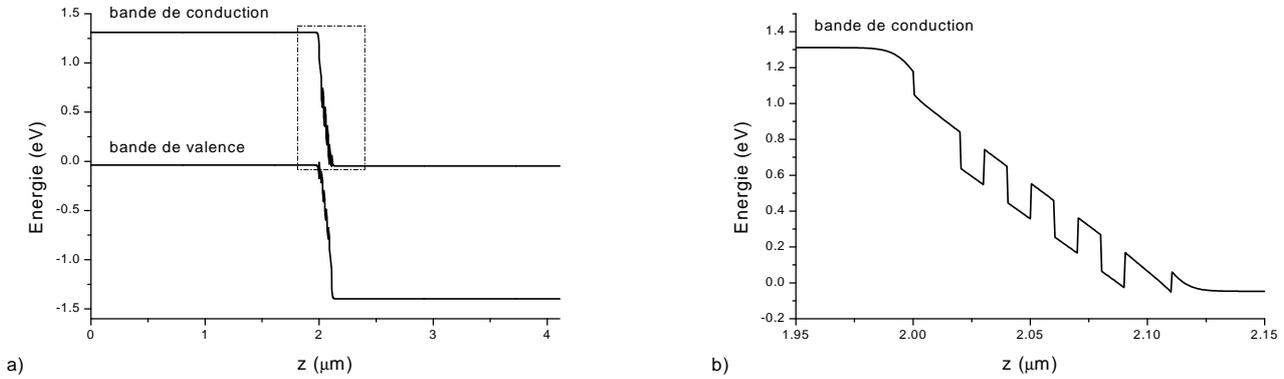


FIG. 7.5 – Bandes de conduction et de valence d'une structure laser à multipuits quantiques sans tension appliquée; b) zoom de la partie encadrée de la figure a

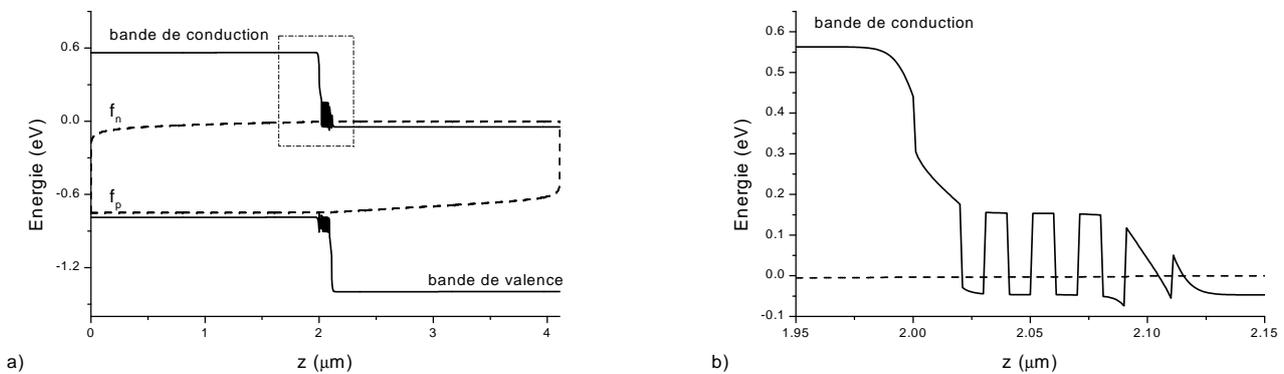


FIG. 7.6 – Bandes de conduction et de valence d'une structure laser à multipuits quantiques avec une tension appliquée à ses bornes; b) Zoom de la partie encadrée de la figure a

La structure du logiciel est donnée sur le schéma 7.7. Après que l'utilisateur ait constitué sa structure à partir de la base des matériaux du logiciel, chacun des paramètres matériaux (comme le gap, l'affinité, la masse effective des porteurs, la mobilité des porteurs, etc.) est calculé en fonction de la contrainte éventuelle. Il est également possible d'utiliser un matériau hors de la base existante à condition de renseigner tous les paramètres nécessaires à la simulation. Le module de gain est directement accessible depuis la fenêtre 7.4, on a alors la fenêtre 7.8 qui sert d'interface pour entrer

les paramètres de la simulation du gain. Ces paramètres sont :

- la plage de longueurs d'ondes, *Lambda min* et *Lambda max* en μm ;
- le *Nombre de points en Lambda*;
- la plage de densités de porteurs, *Densité porteurs min* et *Densité porteurs max* en cm^{-3} ;
- le nombre de courbes de gain (nombre de densités de porteurs différentes, *Nombres de densités*).

Lorsque le calcul est fait, le logiciel fournit les états liés dans la bande de conduction, dans la bande de valence en séparant les états de trous lourds et de trous légers. Ces états sont donnés en $k_\rho = 0$. On obtient également le gain différentiel g_0 et la densité de transparence n_0 (pour chaque type de polarisation TE et TM) en admettant que dans les MQW, le maximum de gain varie de façon linéaire en fonction du logarithme népérien de la densité de porteurs soit :

$$g_{max} = g_0 \ln \left(\frac{n}{n_0} \right) \quad (7.20)$$

Cette loi étant donnée par une approximation linéaire faite à partir du maximum de gain pour chaque courbe, on donne le coefficient de régression linéaire.

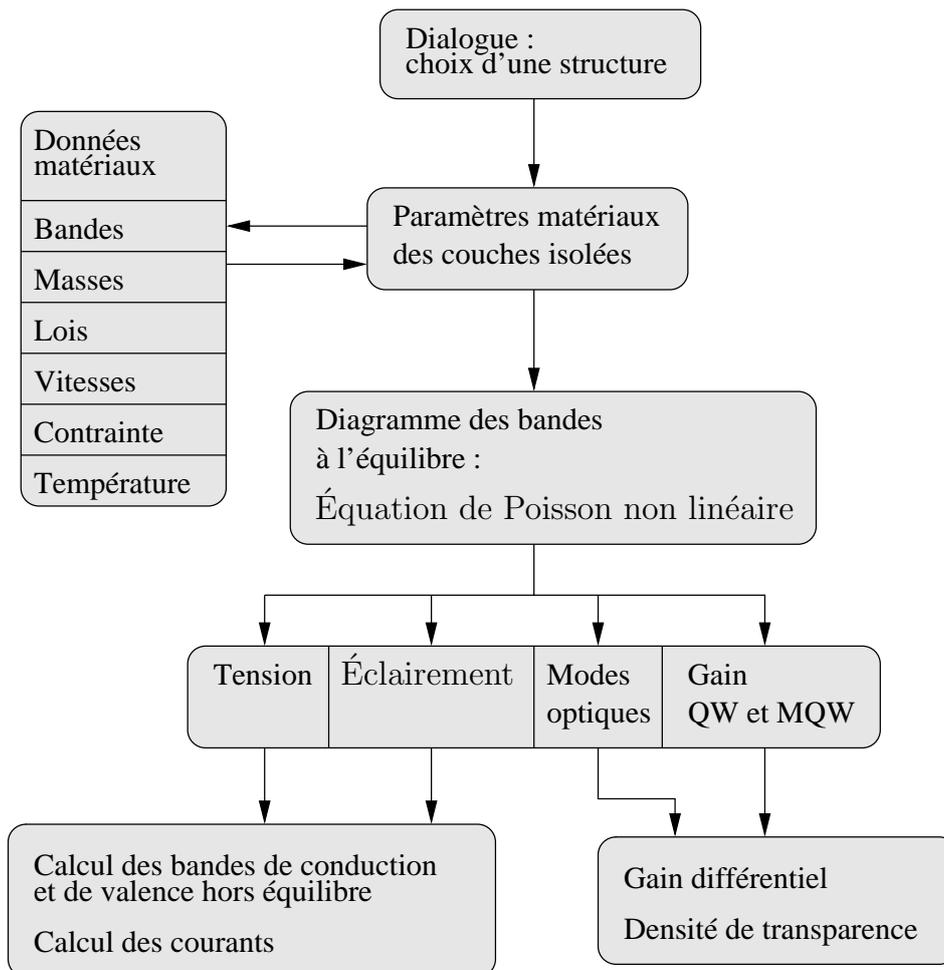


FIG. 7.7 – Position du module du calcul du gain dans BCBV

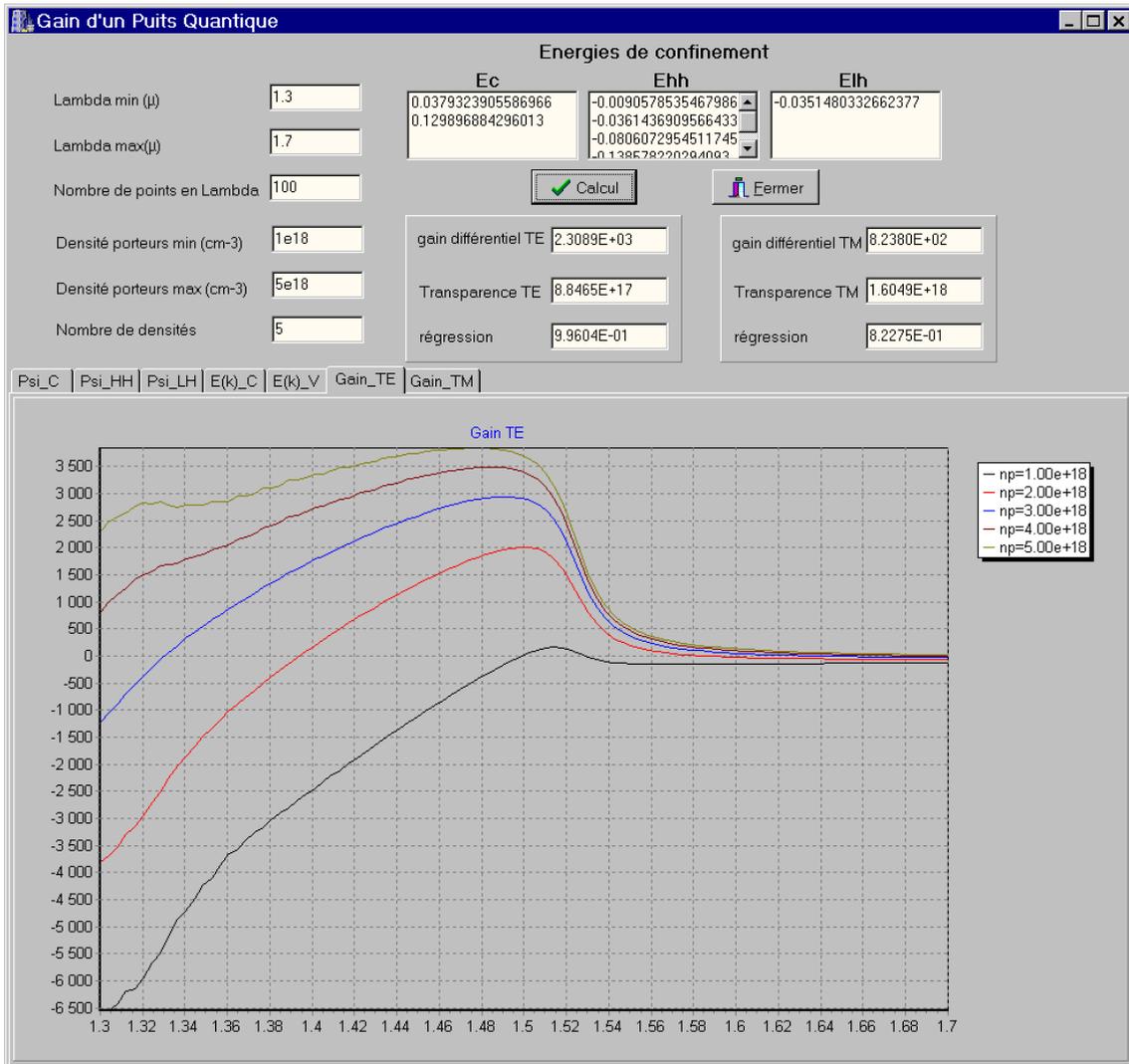


FIG. 7.8 – Module de gain du logiciel BCBV

Chapitre 8

Mesure du gain sous le seuil

La simulation étant destinée au dimensionnement des composants, il est maintenant indispensable de procéder à une validation des calculs que nous avons présentés, en particulier au chapitre 3. Une méthode de mesure du gain basée sur la structure de laser à cavité Fabry-Pérot permet d'obtenir la dépendance spectrale du gain net (gain modal diminué des pertes internes) pour une structure guidante à puits quantiques (schématisée sur la figure 8.1). Cette méthode permet d'obtenir directement les courbes de gain en fonction de la longueur d'onde, paramétrées par le courant total (situé en dessous du courant de seuil). Les courbes théoriques étant paramétrées par la densité de porteurs dans la couche active, il convient donc d'établir un lien entre le courant total et la densité de porteurs pour établir un lien entre les deux familles de courbes (simulation et mesures).

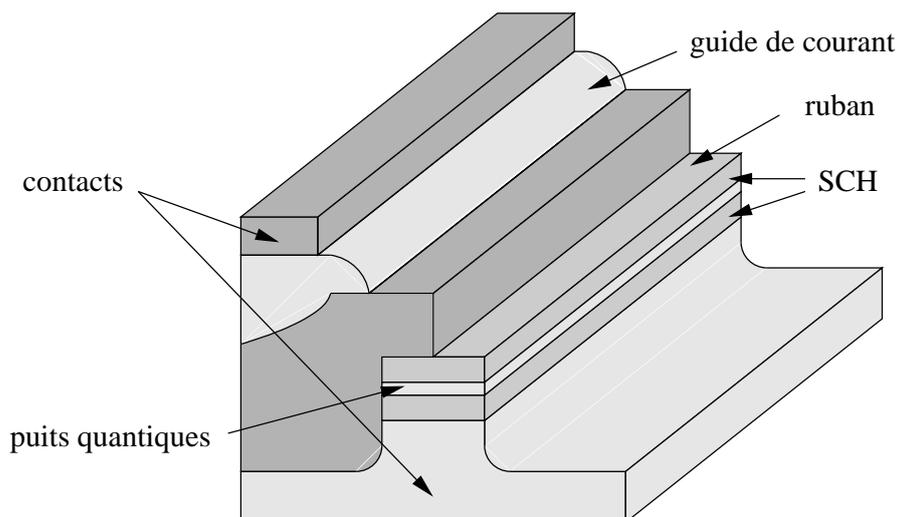


FIG. 8.1 – Coupe 3D de la structure d'un laser de type pn-BH

8.1 Structure de test : le laser pn-BH

Les lasers sur lesquels nous avons effectué des mesures sont représentés, en coupe, sur la figure 8.1. Nous avons fait des mesures sur un laser de longueur d'onde d'environ $1,3\mu\text{m}$ référencé par le numéro de plaque 1.3 et un de $1,55\mu\text{m}$ référencé par le numéro 1.55. La technologie de ces deux type de laser est semblable. Le substrat utilisé est l'InP. On part de ce substrat pour faire croître, par épitaxie, les différentes couches du composant. Le laser a une structure BRS (Buried Ridge Structure) [46] dont le schéma serait celui représenté sur la figure 8.2 sans les zones 2, c'est-à-dire que la partie centrale du laser (zone 3) est enterrée de manière à être protégée. La matière présente autour du laser (zone 1) favorise les courants de fuite. Une solution, simple à réaliser, consiste à implanter des ions H^+ dans la partie dopée p, autour de la zone active, mais avec cette technique, on est limité en courant ($\simeq 250\text{ mA}$). Une autre solution, plus complexe à mettre en œuvre, consiste à générer deux régions dopées n (zone 2) des deux côtés de la zone active de façon à y guider le courant. Ce type de laser est appelé laser pn-BH (pn-Buried Heterostructure) [47].

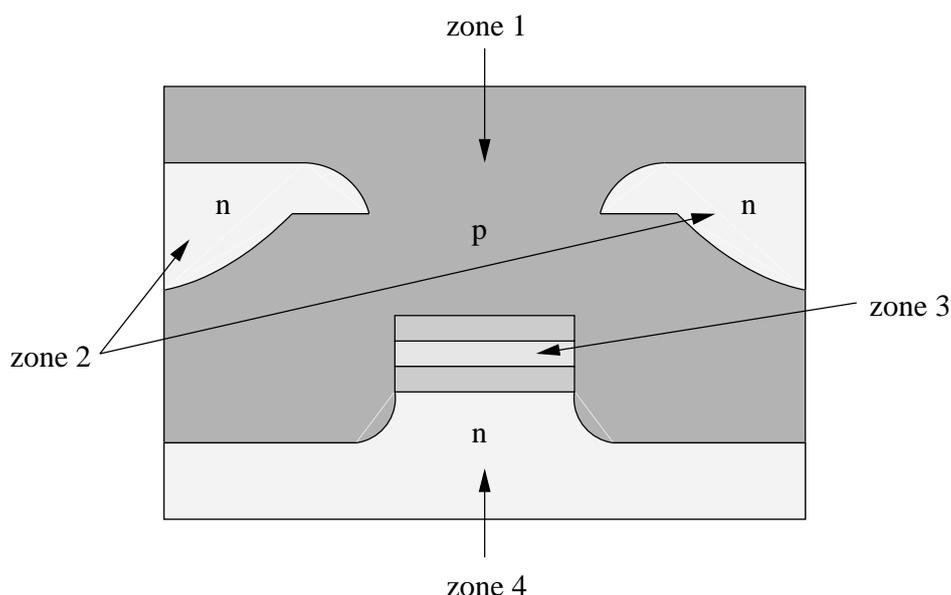


FIG. 8.2 – Coupe 2D, plan (x,z) , d'un laser de type pn-BH

La zone active est constituée de plusieurs puits quantiques formés par succession de GaInAsP avec différentes fractions molaires pour constituer des puits de potentiel.

Fonction	Composition	Épaisseur(nm)
Buffer	InP	500
Buffer	InP	475
SCH-1	GaInAsP	
MQW(barrières)	GaInAsP	8
MQW(puits)	GaInAsP	8
SCH-2	GaInAsP	
Spacer	InP	
Autre	GaInAsP	50
Spacer	InP	20

TAB. 8.1 – *Épitaxie de la plaque 1.3*

Fonction	Composition	Épaisseur(nm)
Buffer	InP	500
SCH-1	GaInAsP	
MQW(barrières)	GaInAsP	10
MQW(puits)	GaInAsP	8
SCH-2	GaInAsP	
Spacer	InP	
Cladding	InP	20

TAB. 8.2 – *Épitaxie de la plaque 1.55*

8.2 Brève description de la méthode Hakki-Paoli

B.W. Hakki et T.L. Paoli [48] ont proposé une méthode permettant la mesure du gain au-dessous du seuil laser. Cette méthode s'appuie sur la mesure du spectre de la cavité laser pour un courant donné, inférieur au courant de seuil.

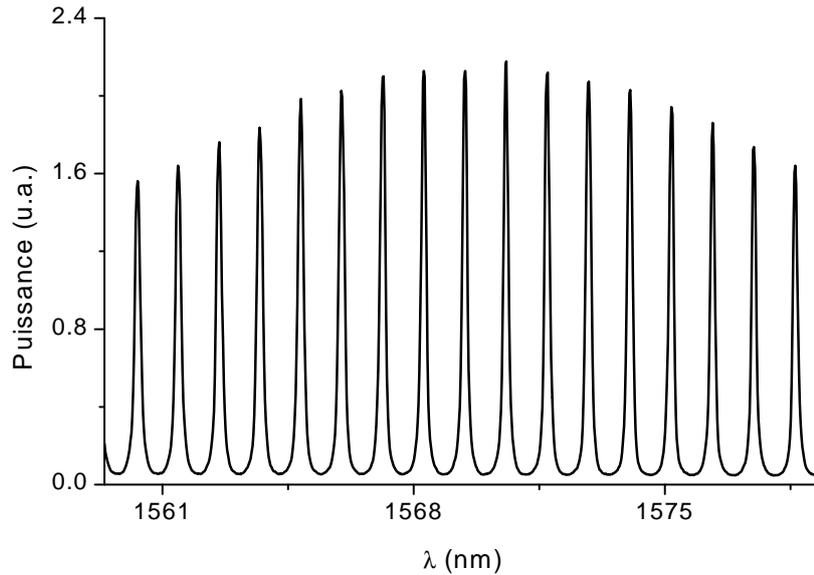


FIG. 8.3 – Puissance émise par une cavité laser Fabry-Pérot en fonction de la longueur d'onde

La mesure de la puissance en fonction de la longueur d'onde donne un spectre comme celui représenté sur la figure 8.3. Le spectre fait apparaître des maxima (P_{max}) et des minima (P_{min}) que l'on peut relier au gain par la relation (voir annexe C) :

$$g = g_{mod} - \alpha_i = \frac{1}{2L_z} \ln(R_1 R_2) + \frac{1}{L_z} \ln \left(\frac{\sqrt{P_{max}} + \sqrt{P_{min}}}{\sqrt{P_{max}} - \sqrt{P_{min}}} \right) \quad (8.1)$$

où g_{mod} est le gain modal, produit du gain matériau g_{mat} par le facteur de recouvrement Γ . R_1 et R_2 sont les coefficients de réflectivité aux facettes et α_i traduit les pertes dans la cavité. Pour obtenir la valeur des pertes de la cavité, on peut les mesurer sur le spectre de gain obtenu. À la transparence, i.e. $g_{mat} = 0$ et $g = \alpha_i$. Le problème qui se pose dans la pratique est de mesurer un gain pratiquement nul. Le bruit intervient alors de façon très importante et il devient impossible d'évaluer α_i .

Une mesure complémentaire consiste à mesurer le courant de seuil d'un même type de laser mais avec des longueurs différentes. La puissance émise par le laser est nulle jusqu'au courant de seuil I_{th} et varie ensuite linéairement en fonction du courant :

$$\begin{cases} P = 0 & I < I_{th} \\ P = \eta_d(I - I_{th}) & I \geq I_{th} \end{cases} \quad (8.2)$$

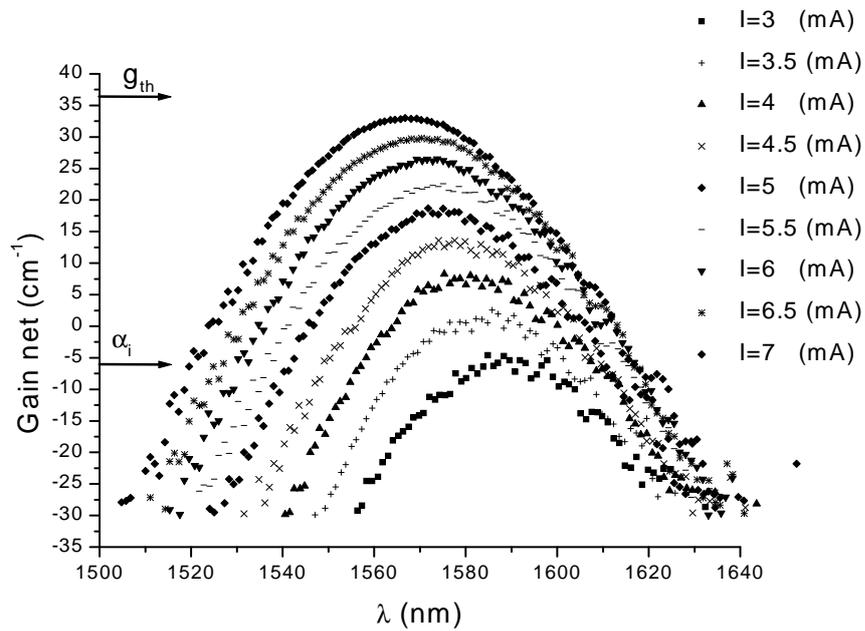


FIG. 8.4 – Mesure du spectre de gain d'un laser de la plaque 1.55

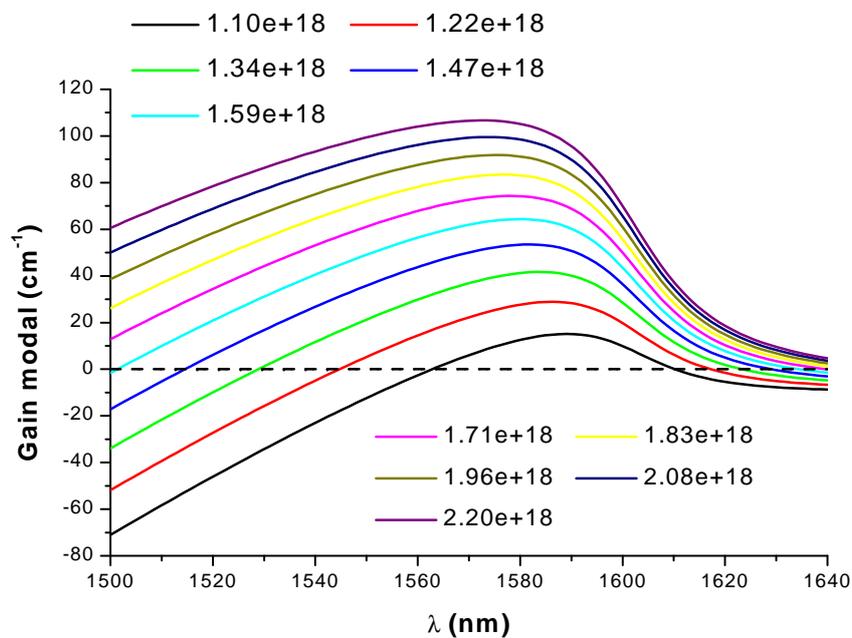


FIG. 8.5 – Simulation du gain avec BCBV d'un laser de la plaque 1.55

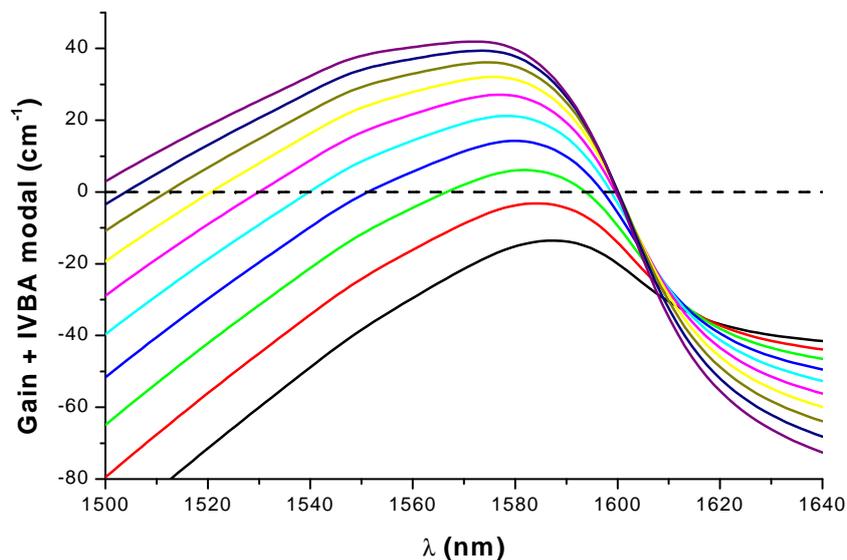


FIG. 8.6 – Simulation du gain avec BCBV d'un laser de la plaque 1.55 prenant en compte le spectre d'IVBA (mêmes densités de porteurs que pour la figure 8.5)

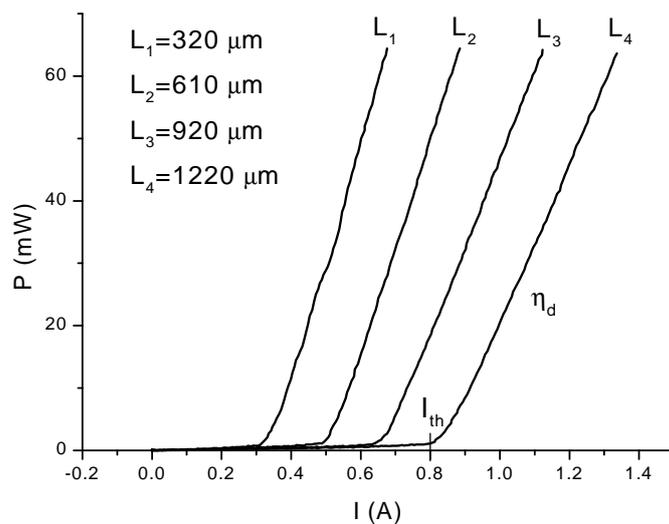


FIG. 8.7 – Mesure de la puissance en fonction du courant pour différentes longueurs de lasers

où η_d est le rendement quantique externe. Une mesure est représentée sur la figure 8.7.

Or η_d peut être exprimé [49] en fonction de la longueur L du laser :

$$\frac{1}{\eta_d} = \frac{\alpha_i}{\eta_i} \frac{2L}{\ln\left(\frac{1}{R_1 R_2}\right)} + \frac{1}{\eta_i} \quad (8.3)$$

η_i étant le rendement quantique interne.

Pour les structures qui nous intéressent, le coefficient de réflexion aux facettes est le même pour les deux donc $R_1 = R_2 = R$ et par conséquent :

$$\frac{1}{\eta_d} = \frac{\alpha_i}{\eta_i \ln\left(\frac{1}{R}\right)} L + \frac{1}{\eta_i} \quad (8.4)$$

En reportant chacune des mesures de η_d en fonction de la longueur, on peut en déduire les coefficients α_i et η_i . Dans le cas de la figure 8.7, α_i est de l'ordre de 6 cm^{-1} .

En plaçant $g - \alpha_i = 0$ sur la figure 8.4, on constate que la première courbe à $I = 3 \text{ mA}$ est proche des conditions de transparence si l'on admet que l'absorption aux grandes longueurs d'onde est de 30 cm^{-1} environ sur toute la plage de courant.

Sur cette même figure, nous pouvons également placer la valeur g_{th} pour le seuil du laser :

$$g_{th} = \frac{1}{2L} \ln(R_1 R_2) \quad (8.5)$$

Nous avons donc une expression de $g - \alpha_i$ incluant les pertes plasmon et IVBA pour des concentrations de porteurs entre la transparence et le seuil. En comparant avec la figure issue de la simulation 8.5, obtenue avec les paramètres suivants :

- $\tau_{in} = 0.1 \text{ ps}$;
- $\lambda_{min} = 1500 \text{ nm}$ et $\lambda_{max} = 1640 \text{ nm}$;
- $n_{min} = 1.1e18 \text{ cm}^{-3}$ et $n_{max} = 2.2e18 \text{ cm}^{-3}$.

nous relevons quelques caractéristiques :

- le maximum de gain de la dernière courbe ($I=7 \text{ mA}$) juste avant le seuil correspond bien à la condition de seuil (8.5);
- la condition de transparence est obtenue pour $g - \alpha_i = 0$ et semble correspondre à un gain maximum nul pour la première courbe ($I=3 \text{ mA}$).

En revanche, aux plus grandes longueurs d'onde, le maximum de gain est négatif ce qui correspond à une absorption excédentaire. Les courbes obtenues sont trop dispersées dans cette plage de longueurs d'onde ($\lambda > 1600 \text{ nm}$) pour que l'on puisse en déduire une loi phénoménologique, mais l'ordre de grandeur de l'absorption supplémentaire correspond bien à la somme de deux contributions à savoir l'IVBA et les pertes par porteurs libres. La différence entre les simulations des figures 8.5 et 8.6 est la prise en compte du spectre de l'IVBA en fonction de la longueur d'onde dans la simulation de la figure 8.6. Cette prise en compte permet de se rapprocher qualitativement et quantitativement des mesures représentées figure 8.4.

Ces courbes $g(\lambda, I)$ peuvent être rapprochées des courbes théoriques $g(\lambda, n)$ à condition d'établir une bonne variation du courant avec la densité de porteurs. Dans ces conditions il faut connaître plusieurs paramètres avant de calculer cette dépendance (voir approche semi-classique) :

- τ_n et τ_p contribuant au terme R_{RSH} ;
- C_{AUN} et C_{AUP} pour tenir compte de l'influence de l'effet Auger;
- B du terme R_{spont} , le taux d'émission spontanée.

En prenant également en compte l'absorption plasmon qui intervient directement dans le calcul de la constante diélectrique et en tenant compte du facteur de recouvrement Γ :

$$\Gamma = \frac{\iint_{S_A} |E_{x,y}|^2 dx dy}{\iint_{S_T} |E_{x,y}|^2 dx dy} \quad \text{où } S_A \text{ est la zone active et } S_T \text{ est la surface totale} \quad (8.6)$$

On peut alors simuler complètement, dans un modèle électrique-optique couplé, les variations du courant en fonction de la densité de porteurs avec la tension appliquée.

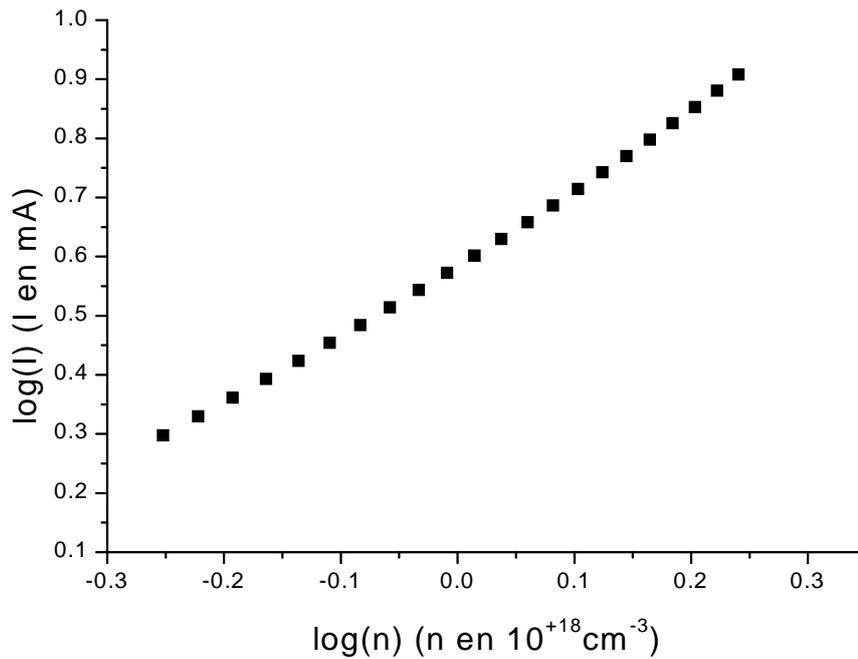


FIG. 8.8 – Variation de la densité de porteurs en fonction du courant total

Nous avons obtenu la courbe 8.8 avec la suite de paramètres suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} - C_{AUG} = 2e-29 \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}; \\ - B = 0.8e-11 \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}; \\ - \tau_n = 0.8e-9 \text{ s}; \\ - \tau_p = 0.8e-9 \text{ s}. \end{array} \right.$$

Pour comparer les valeurs absolues du gain différentiel, il faut pouvoir relier le gain modal au gain matériau. Pour cela nous devons calculer le facteur de recouvrement Γ (8.6). Ce facteur est calculé par le logiciel ALCOR [50] qui permet également le calcul des modes optiques tels ceux représentés sur la figure 8.9 pour la structure. Dans le cas du laser que l'on veut simuler, ce facteur est : $\Gamma = 0.0713$.

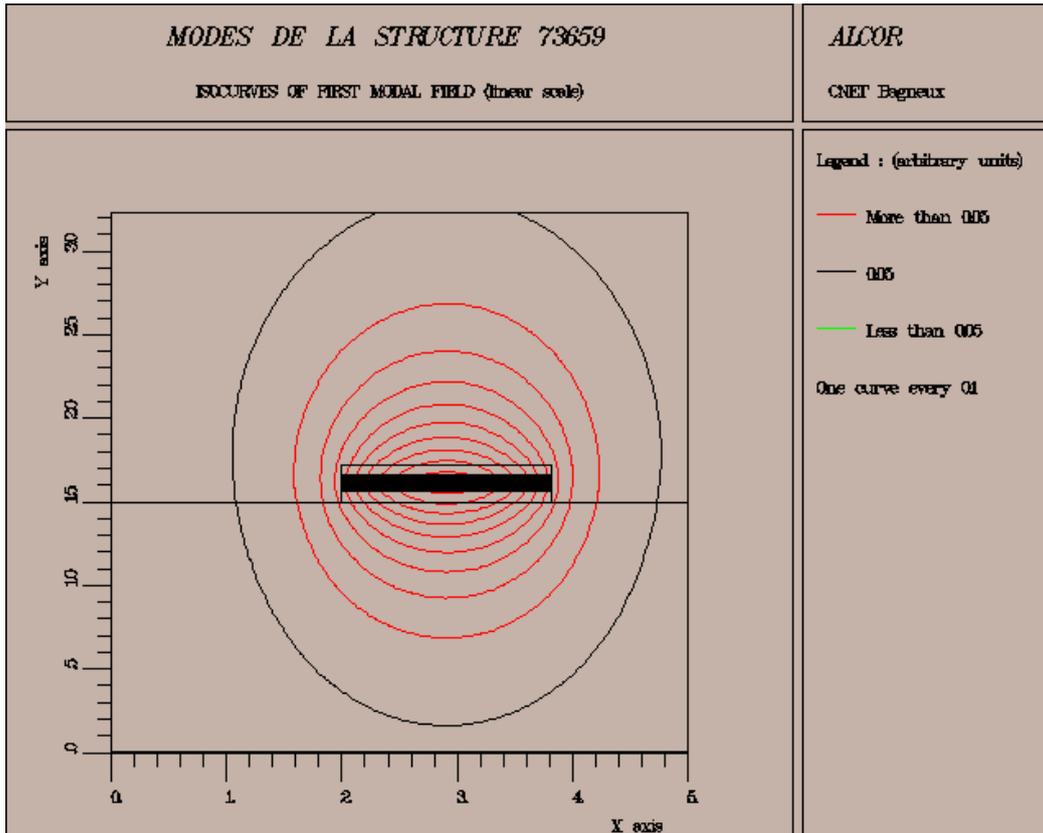


FIG. 8.9 – Calcul des modes d'un laser de la plaque 1.55 par Alcor

La comparaison directe des deux familles de courbes est très difficile. En revanche, on peut comparer les ordres de grandeur du gain différentiel g_0 obtenu en ajustant les variations du maximum de gain g_{max} avec la densité de porteurs n pour une loi :

$$g_{max} = g_0 \ln \left(\frac{n}{n_0} \right) \quad (8.7)$$

Si le courant varie comme n^γ , cette loi peut être transformée en :

$$g_{max} = \frac{g_0}{\gamma} \ln \left(\frac{I}{I_0} \right) \quad (8.8)$$

Pour la simulation, le gain différentiel est $g_0 = 80 \text{ cm}^{-1}$ alors que pour les courbes expérimentales, on a $g_0 = 43 \text{ cm}^{-1}$. Il faut néanmoins tenir compte du coefficient γ . Une autre comparaison intéressante

est celle de la variation de la longueur d'onde λ_{max} correspondante au gain maximum pour chaque valeur de courant. Pour les mesures cette variation est comprise entre 1566 et 1572 nm alors que pour la simulation, cette plage est légèrement décalée, entre 1572 et 1587 nm.

Une analyse similaire pourrait être effectuée avec les courbes de gain mesuré pour un laser de la plaque 1.3, représentées sur la figure 8.10.

Ces mesures ayant été faites en fin de thèse, nous n'avons pas eu le temps d'affiner tous les paramètres de simulation, et notamment de prendre en compte la renormalisation du gap (BGR). Un autre élément important est la variation de l'indice en fonction de la densité de porteurs.

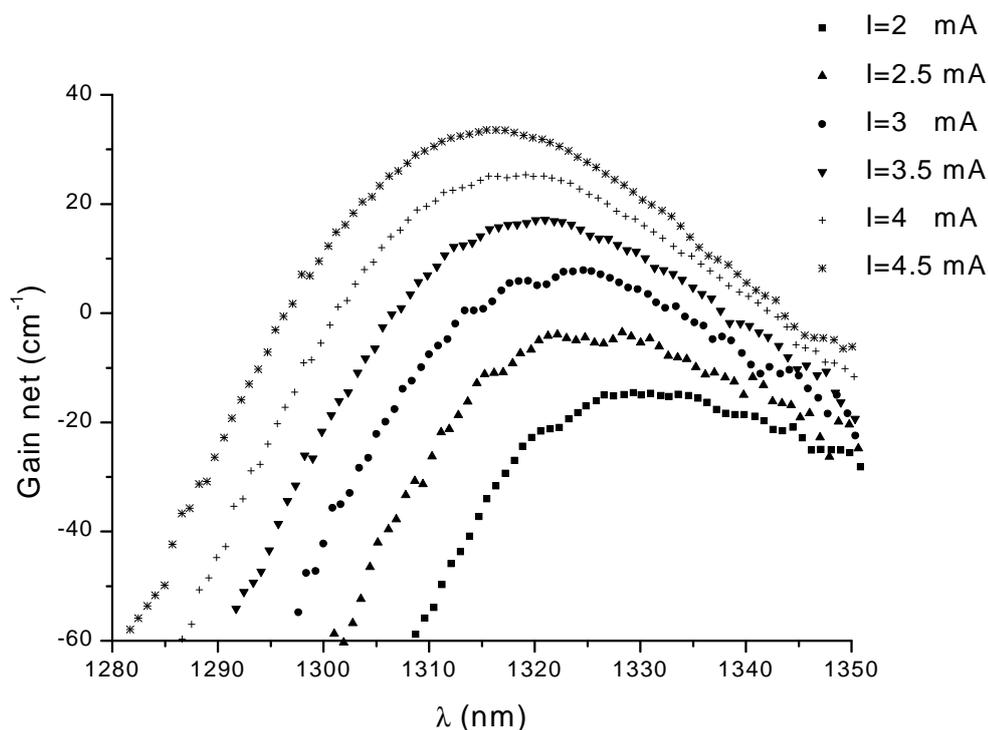


FIG. 8.10 – Mesure du spectre de gain d'un laser de la plaque 1.3

Conclusion

L'objectif principal de cette thèse était de fournir une approche physique précise des structures à multi-puits quantiques s'écartant notablement de l'application brutale des méthodes discrétisées (comme celles des éléments finis ou des différences finies).

Nous avons montré que pour le calcul du gain optique et des paramètres associés (δn_r , taux d'émission spontanée) une méthode de Galerkin avec une base de fonctions bien choisie présentait plusieurs avantages :

- élimination des "tournevis numériques", donc assurance de la reproductibilité des résultats pour différents utilisateurs du logiciel de simulation appliqué aux mêmes structures semiconductrices;
- meilleure précision des résultats et robustesse plus grande pour les cas limites (faible couplage des puits, limite quantique-classique).

Par ailleurs, nous avons détaillé quel était le point faible des méthodes discrétisées dans le cas de deux puits couplés. Nous avons également établi le lien entre le transport semi-classique et les fondements d'un modèle statistique raisonnable à partir du modèle d'Asada de la matrice de densité. Ceci, pour un semi-conducteur soumis à un flux de photons de densité moyenne et en couplage avec la résolution de l'équation de Helmholtz pour le mode optique.

Une telle modélisation à partir des données de base des matériaux constituant les puits, les barrières et les autres couches semi-conductrices du composant, laisse *très peu* de paramètres ajustables à la disposition de l'utilisateur. Il fallait donc également valider cette approche en comparant les prédictions du modèle avec quelques résultats expérimentaux. Nous avons montré une validation assez satisfaisante par le spectre de gain de deux lasers de longueurs d'onde différentes dans une plage de densité de porteurs entre la transparence et le seuil. Quelques imprécisions restent néanmoins à clarifier.

Un des buts de la simulation est de permettre aux concepteurs de composants de dimensionner les paramètres géométriques et physico-chimiques qui entrent dans la fabrication (compositions, épaisseurs et dopage des couches de quaternaire par exemple). Dans ce but nos calculs de gain pour les multipuits quantiques non identiques ont été intégrés dans un logiciel convivial (BCBV). Le travail de développement logiciel correspondant n'a pas été explicité dans ce mémoire de thèse, bien qu'ayant occupé une part importante du temps.

Les perspectives de notre travail peuvent être tracées dans deux directions. Dans la première direction, nous proposons de généraliser la méthode de Galerkin sur la base des puits simples en tenant

compte du champ électrique local sur chaque puits et d'un potentiel de forme quelconque entre deux puits. Les fonctions d'onde de base d'un puits sous champ étant parfaitement connues (fonctions d'Airy). Un tel développement permettra d'inclure les composants à électro-absorption dans BCBV. Dans la seconde direction, nous proposons de calculer plus précisément les effets obtenus aux fortes densités photoniques et électroniques en utilisant les termes d'ordre supérieur de la matrice de densité. Un tel développement permettrait de mieux modéliser les amplificateurs à puits quantiques en régime de saturation optique ou électrique.

Pour les deux développements que nous proposons, le principe d'éviter le maillage et les méthodes discrétisées peut être maintenu, hormis pour le découpage en tranches dans la direction de propagation qui est nécessaire pour tenir compte des variations dans cette direction. Par ailleurs, le choix des outils de programmation (C++) permet d'espérer que le développement du logiciel de simulation puisse survivre à la durée de cette thèse.

Enfin, les lecteurs familiers de la physique des semiconducteurs pourront s'étonner que l'approche des modèles à un électron, y compris pour la matrice de densité, aient été exclusivement utilisés dans ce travail. Il est probable que des modèles plus précis, associés à des expériences fournissant des résultats moins bruités permettront d'introduire des modèles physiques à "N corps" pour obtenir un meilleur accord modèle-expérience.

Bibliographie

- [1] H. KROEMER. A proposed class of heterojunction lasers. In *IEEE*, volume 51, pages 1782–1783, 1963.
- [2] Zh.I. ALFEROV and R.F. KAZARINOV. *Semiconductor laser with electrical pumping*. U.S.S.R., 1963. Patent 181737.
- [3] G. BASTARD. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructure*. Les Éditions de Physique, Les Ulis, France, 1988.
- [4] M. ALTARELLI. Electronic structure and semiconductor-semimetal transition in InAs-GaSb superlattices. *Physical Review B*, 28(2), july 1983.
- [5] M. ASADA, A. KAMEYAMA, and Y. SUEMATSU. Gain and Intervalence Band Absorption in Quantum-Well Lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, QE-20(7), july 1984.
- [6] U. ECKENBERG and M. ALTARELLI. Calculation of hole subbands at the GaAs-Al_xGa_{1-x}As interface. *Physical Review B*, 30(6), september 1984.
- [7] D.A. BROIDO and L.J. SHAM. Effective masses of holes at GaAs-AlGaAs heterojunctions. *Physical Review B*, 31(2), january 1985.
- [8] T. ANDO. Hole Subbands at GaAs/AlGaAs Heterojunctions and Quantum Wells. *Journal of the Physical Society of Japan*, 54(4), april 1985.
- [9] L.C. ANDREANI, A. PASQUARELLO, and F. BASSANI. Hole subbands in strained GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum wells: Exact solution of the effective-mass equation. *Physical Review B*, 36(11), october 1987.
- [10] S.L. CHUANG. *Physics of optoelectronic devices*. Wiley series in Pure and Applied optics, New-York, 1995.
- [11] G. BASTARD and J.A. BRUM. Electronic states in semiconductor heterostructures. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 22(9), september 1986.
- [12] C.S. CHANG and S.L. CHUANG. Modeling of strained quantum-well lasers with spin-orbit coupling. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 1(2), june 1995.
- [13] F. SEITZ. *Théorie moderne des solides*. Masson, Paris, 1949.
- [14] C. KITTEL. *Quantum Theory of Solids*. J. Wiley & Sons Inc., New-York, 1963.

-
- [15] J.R. CHELIKOWSKY and M.L. COHEN. Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors. *Physical Review B*, 14:556–582, 1976.
- [16] E. O. KANE. Band Structure of Indium Antimonide. *Journal of Physical and Chemical of Solids*, 1:249–261, 1957.
- [17] J.M. LUTTINGER and W. KOHN. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields. *Physical Review*, 97(4):869–883, february 1955.
- [18] G.L. BIR and G.E. PIKUS. *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*. Wiley, New-York, 1974.
- [19] C.Y. CHAO and S.L. CHUANG. Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells. *Physical Review B*, 46(7):4110–4122, august 1992.
- [20] L. EULER. *Institutiones Calculi Integralis*. St Petersburg, 1768. *Leonhardi Euleri Opera Omnia*, série I, volume XI, page 424, Teubner Verlag, Leipzig, 1913.
- [21] AMES. *Numerical methods for partial differential equations*. Academic Press, New-York, 1977.
- [22] S.L. CHUANG. Efficient band-structure calculations of strained quantum wells. *Physical Review B*, 43(12), april 1991.
- [23] D. GERSHONI, C.H. HENRY, and G.A. BARAFF. Calculating the Optical Properties of Multidimensional Heterostructures : Application to the Modeling of Quaternary Quantum Well Lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 29(9):2433–2450, september 1993.
- [24] C.A.J. FLETCHER. *Computational Galerkin Methods*. Springer-Verlag, 1984.
- [25] G. DEBAISIEUX, G. HERVE-GRUYER, M. FILOCHE, S. BOUCHOULE, and J.F. PALMIER. Self-consistent 1-D solution of multiquantum-well laser equations. *Optical and Electronics*, 29, april 1997.
- [26] N. TRENADO and J.F. PALMIER. An efficient and accurate method for gain spectrum calculation in non-identical multi-quantum-well. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 38(5):495–499, may 2002.
- [27] L. LANDAU et E. LIFCHITZ. *Mécanique quantique*. Éditions MIR, Moscou, 1966.
- [28] M.J. ADAMS, J.V. COLLINS, and I.D. HENNING. Analysis of semiconductor laser optical amplifiers. In *IEE Proceedings Part J*, volume 132, pages 58–63, 1985.
- [29] P.G. ELISSEV. Line shape function for semiconductor laser modelling. *Electronics letters*, 33(24):2046–2048, november 1997.
- [30] Y.C. CHANG and R.B. JAMES. Saturation of intersubband transitions in p-type semiconductor quantum wells. *Physical Review B*, 39(17):12672–12681, june 1989.
- [31] T. CHO, H. KIM, Y. KWON, and S. HONG. Theoretical study on intervalence band absorption in inp-based quantum well laser structures. *Applied Physics Letters*, 68(16):2183–2185, april 1996.
- [32] C. COHEN-TANNOUJJI, B. DIU, et F. LALOË. *Mécanique quantique*, volume 1. Hermann, Paris, seconde edition, 1977.
-

-
- [33] L. LANDAU et E. LIFCHITZ. *Électrodynamique des milieux continus*, volume 7. Éditions MIR, Moscou, 1969.
- [34] C.H. HENRY. Theory of spontaneous emission noise in open resonators and its application to lasers and optical amplifiers. *IEEE Journal of Lightwave Technology*, 4:229–288, march 1986.
- [35] TAMIR. *Guided-wave optoelectronics*. Springer Verlag, Heidelberg, Germany, 1988.
- [36] C. VASSALLO. *Électromagnétisme classique dans la matière*. Dunod, Paris, 1980.
- [37] P. BROSSON. Analytical Model of a Semiconductor Optical Amplifier. *IEEE Journal of Lightwave Technology*, 12(1):49–54, 1994.
- [38] J.F. PALMIER, P. BROSSON, B. DAGENS, and J.Y. EMERY. A self-consistent numerical modeling of gain and amplified spontaneous emission in semiconductor optical amplifiers. In *Proceedings ECIO'01*, pages 395–398, Paderborn, Germany, april 2001.
- [39] M. BERNARD and G. DURAFFOURG. Laser conditions in semiconductors. *Physica Status Solidi*, 1961.
- [40] M. ASADA. *Handbook of Semiconductor lasers*, chapter 5. Suematsu and Adams Chapman & Hall, London, 1992.
- [41] M. ASADA, A.R. ADAMS, K. STUBKJAER, Y. SUEMATSU, Y. ITAYA, and S. ARAI. The Temperature Dependency of the Threshold Current of GaInAsP/InP DH Lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, QE-17(5):611–619, may 1981.
- [42] J.F. PALMIER. *Notice de BCBV*. ENSTA, Enseignement thématique EPT12, Paris, 1997.
- [43] B. STROUSTRUP. *The C++ Programming Language*. Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, USA, 2nd edition, 1974.
- [44] BORLAND-INPRISE. *Guide du développeur*. Inprise Corporation, 5ème edition, 2000.
- [45] S. ADACHI. Material parameters of $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ and related binaries. *Journal of Applied Physics*, 53(12):8775–8792, december 1982.
- [46] J.C. BOULEY, J. CHARIL, and G. CHAMINANT. 1.55 μm n strip buried schottky laser. In *9th IEEE International Semiconductor Laser Conference*, pages 54–55, Rio de Janeiro, Brasil, 1984.
- [47] Y. SUZAKI and al. High-Coupling Efficiency of a 1.3- μm Spot-Size Converter Integrated Laser Diode with pn-Buried Heterostructure for High-Temperature Operation. *IEEE Journal of Lightwave Technology*, 15(8):1602–1607, 1997.
- [48] B.W. HAKKI and T.L. PAOLI. CW degradation at 300°K of GaAs double-heterostructure junction lasers. II. electronic gain. *Journal of Applied Physics*, 44(9):4113–4119, september 1973.
- [49] H. KRESSEL and J.K. BUTLER. *Semiconductor Lasers and Heterojunction LEDs*. Academic Press, New-York, 1977.
- [50] M. FILOCHE and G. HERVÉ-GRUYER. *ALCOR v2.4 users' guide*. France Telecom CNET.

Notations

Pour alléger les écritures de ce document, nous avons choisi de noter les vecteurs en **gras** plutôt que de les marquer avec une flèche. Par exemple, le vecteur dont les composantes sont désignées par r_x , r_y et r_z sera noté **\mathbf{r}** au lieu de \vec{r} .

Constantes physiques

Voici les principales constantes physiques utilisées :

$e = 1,60218.10^{-19}$ C, charge élémentaire d'un électron

$c = 2,99792458.10^{+8}$ m.s⁻¹, vitesse de la lumière dans le vide

$h = 6,62618.10^{-34}$ J.s, constante de Plank

$\hbar = 1,054589.10^{-34}$ J.s, constante de Plank divisée par 2π

$m_0 = 9,10953.10^{-31}$ Kg, masse de l'électron dans le vide

$\epsilon_0 = 8,8542.10^{-12}$ F.m⁻¹, permittivité du vide

$\mu_0 = 4\pi.10^{-7}$ H.m⁻¹, perméabilité du vide

$k_B = 1,38066.10^{-23}$ J.K⁻¹, constante de Boltzmann

$\hbar\omega = hc/\lambda = 1.2398/\lambda$ est exprimée en eV si λ est en μm , c'est l'énergie d'un photon

Lexique

- MQW (Multi Quantum Wells) : multipuits quantiques;
- SOA (Semiconductor Optical Amplifier) : amplificateur optique à semiconducteur;
- DFB (Distributed Feed Back) : laser à contre réaction distribuée;
- BRS (Burried Ridge Structure) : laser à zone active enterrée;
- pn-BH (pn-Buried Heterostructure) : laser à zone active enterrée mais dont les courants de fuite sont limités par deux régions dopées n;
- IVBA (Inter Valence Band Absorption) : absorption intra-bande de valence ou inter-sous-bandes de valence;
- ASE (Amplified Spontaneous Emission) : émission spontanée amplifiée.

Annexes

Annexe A

Équation de Schrödinger discrétisée

Dans cette annexe, nous détaillons les calculs qui ont permis d'aboutir à une expression analytique de l'équation séculaire permettant de trouver les niveaux d'énergie de deux puits couplés avec la méthode des différences finies .

Déterminant d'une matrice tridiagonale

La discrétisation de l'équation de Schrödinger simplifiée (4.1), appliquée au cas d'un puits de potentiel infini, conduit au déterminant de dimension $N + 1$ dont il faut trouver les racines :

$$N \begin{vmatrix} 2a - E & -a & 0 & \cdots & 0 \\ -a & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -a \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & -a & 2a - E \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{A.1})$$

Le calcul de ce déterminant peut se faire de façon analytique. En effet, on peut établir une relation de récurrence entre les déterminants Δ_n , Δ_{n-1} et Δ_{n-2} des rangs n , $n-1$ et $n-2$:

$$\Delta_n = (-2a - E) \Delta_{n-1} - a^2 \Delta_{n-2} \quad (\text{A.2})$$

L'équation caractéristique associée est donc :

$$r^2 - (2a - E)r + a^2 = 0 \quad (\text{A.3})$$

dont les solutions sont :

$$\begin{aligned} r_{1,2} &= \frac{2a - E \pm \sqrt{E(E - 2a)}}{2} & \text{si } E < 0 \\ r_{1,2} &= \frac{2a - E \pm i\sqrt{E(E - 2a)}}{2} & \text{si } 0 \leq E \leq 2a \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

On peut alors en déduire le déterminant total :

$$\Delta_N = \frac{r_1^{N+1} - r_2^{N+1}}{r_1 - r_2} \quad (\text{A.5})$$

avec $r_1 \neq r_2$. Le fait que le déterminant soit nul permet d'écrire :

$$\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^{N+1} = 1 \quad (\text{A.6})$$

On peut donc écrire les solutions sous la forme :

$$\frac{r_1}{r_2} = e^{i\varphi_n} \quad \text{avec } n \text{ entier} \quad (\text{A.7})$$

où $\varphi_n = (2n\pi)/(N+1)$.

$$\frac{r_1}{r_2} = \frac{r_1^2}{r_1 r_2} = \frac{r_1^2}{a^2} = e^{i\varphi_n} \rightarrow \frac{r_1}{a} = e^{i\frac{\varphi_n}{2}} \quad (\text{A.8})$$

$$\frac{r_1}{r_2} = \frac{r_1 r_2}{r_2^2} = \frac{a^2}{r_2^2} = e^{i\varphi_n} \rightarrow \frac{r_2}{a} = e^{-i\frac{\varphi_n}{2}} \quad (\text{A.9})$$

on a alors : $(r_1 + r_2)/a = \exp(i\varphi_n/2) + \exp(-i\varphi_n/2) = 2 \cos(\varphi_n/2)$.

Or on sait que $r_1 + r_2 = 2a - E$, on peut donc exprimer E en fonction de φ_n :

$$E_n = 2a \left(1 - \cos\left(\frac{\varphi_n}{2}\right)\right) \quad (\text{A.10})$$

Cas d'un puits semi-infini

Prenons maintenant le cas d'un puits de potentiel semi-infini comme celui représenté sur la figure A.1. Le déterminant est alors de la forme :

$$\Delta = \begin{vmatrix} 2a - E & -a & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ -a & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & & & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \vdots & & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -a & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -a & 2a - E & -a & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -a & W + 2a - E & -a & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & -a & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & & & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & & & & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -a \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 & -a & W + 2a - E \end{vmatrix} \quad (\text{A.11})$$

Nous notons $\Delta_{N_1}^{(1)}$, le déterminant relatif à la zone 1 sur N_1 points de maillage et $\Delta_{N_2}^{(2)}$, celui relatif à la zone 2 sur N_2 points de maillage :

$$\Delta_{N_1}^{(1)} = \begin{vmatrix} 2a - E & -a & 0 & \cdots & 0 \\ -a & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -a \\ 0 & \cdots & 0 & -a & 2a - E \end{vmatrix} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ N_1 \\ \downarrow \end{array} \quad (\text{A.12})$$

$$\Delta_{N_2}^{(2)} = \begin{vmatrix} W + 2a - E & -a & 0 & \cdots & 0 \\ -a & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -a \\ 0 & \cdots & 0 & -a & W + 2a - E \end{vmatrix} \quad \begin{array}{c} \uparrow \\ N_2 \\ \downarrow \end{array}$$

$r_1^{(1)}$ et $r_2^{(1)}$ sont les solutions caractéristiques de la zone 1; $r_1^{(2)}$ et $r_2^{(2)}$ sont celles de la zone 2. Nous

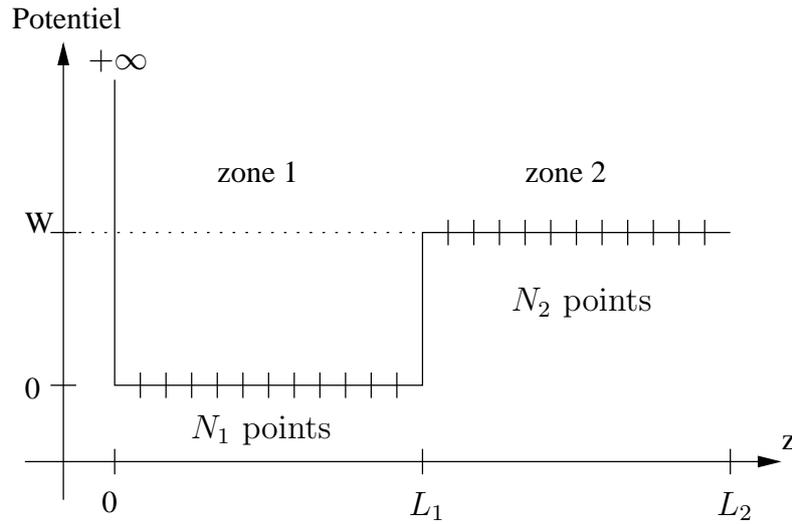


FIG. A.1 – Puits de potentiel semi-infini

pouvons écrire les relations de récurrence :

$$\Delta_{N_1+1}^{(2)} = (W + 2a - E) \Delta_{N_1}^{(1)} - a^2 \Delta_{N_1-1}^{(1)} \quad (\text{A.13})$$

$$\Delta_{N_1+2}^{(2)} = (W + 2a - E) \Delta_{N_1+1}^{(2)} - a^2 \Delta_{N_1}^{(1)} \quad (\text{A.14})$$

La solution se développe à partir de l'équation caractéristique suivante :

$$\rho^2 - (W + 2a - E)\rho + a^2 = 0 \quad (\text{A.15})$$

$$\Delta_{N_1+0}^{(2)} = C_1 + C_2 = \Delta_{N_1}^{(1)} \quad (\text{A.16})$$

$$\Delta_{N_1+1}^{(2)} = C_1 \rho_1^{(2)} + C_2 \rho_2^{(2)} \quad (\text{A.17})$$

On a alors :

$$\begin{aligned} \Delta_{N_1+N_2}^{(1,2)} &= \frac{(r_1^1)^{N_1+1} - (r_2^1)^{N_1+1}}{r_1^1 - r_2^1} \frac{(r_1^2)^{N_2+1} - (r_2^2)^{N_2+1}}{r_1^2 - r_2^2} - a^2 \frac{(r_1^1)^{N_1} - (r_2^1)^{N_1}}{r_1^1 - r_2^1} \frac{(r_1^2)^{N_2} - (r_2^2)^{N_2}}{r_1^2 - r_2^2} \\ \Delta_{N_1} &= \frac{r_1^{N_1+1} - r_2^{N_1+1}}{r_1 - r_2} = r_1^{N_1} \frac{1 - u^{N_1+1}}{1 - u} \\ \Delta_{N_1}^{(1)} &= \frac{(r_1^1)^{N_1+1} - (r_2^1)^{N_1+1}}{r_1^1 - r_2^1} = (r_1^1)^{N_1} \frac{1 - (u^1)^{N_1+1}}{1 - u^1} \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Pour la notation, nous avons choisi la convention suivante : l'indice du haut fait référence au domaine et celui du bas à la solution 1 ou 2 de l'équation caractéristique.

On peut également écrire :

$$\frac{1 - u^{N+1}}{1 - u} = 1 + \dots + u^N = \frac{1 - u^N}{1 - u} + u^N \quad (\text{A.19})$$

$$\sum_N = \sum_{N-1} + u^N \text{ avec } \sum_N = \frac{1 - u^{N+1}}{1 - u} = \sum_0^N u^p \quad (\text{A.20})$$

$$\frac{\sum_N}{\sum_{N-1}} = \frac{1 - u^{N+1}}{1 - u^N} \text{ et } \sum_{N-1} = \frac{1 - u^N}{1 - u} = \frac{1 - (\sum_N - \sum_{N-1})}{1 - u} \quad (\text{A.21})$$

donc :

$$\sum_N = 1 + u \sum_{N-1} \quad (\text{A.22})$$

$$(r_1^1)^{N_1} (r_1^2)^{N_2} \sum_{N_1}^1 \sum_{N_2}^2 = a^2 (r_1^1)^{N_1-1} (r_1^2)^{N_2-1} \sum_{N_1-1}^1 \sum_{N_2-1}^2 \quad (\text{A.23})$$

$$\frac{r_1^1 r_1^2}{a^2} \left[1 + u^1 \sum_{N_1-1}^1 \right] \left[1 + u^2 \sum_{N_2-1}^2 \right] = \sum_{N_1-1}^1 \sum_{N_2-1}^2 \quad (\text{A.24})$$

Vient de la relation entre $\sum_{N_1-1}^1$ et $\sum_{N_2-1}^2$.

On peut approcher les solutions de l'équation de dispersion en s'inspirant des solutions exactes.

$$E_n = 2a \left[1 - \cos \left(\frac{n\pi}{N_1+1} \right) \right] \quad (\text{A.25})$$

$$r_{1,2}^1 = a e^{\pm i\varphi_n} \quad \varphi_n = \frac{2(n\pi + \delta_n)}{2(N_1+1)} \frac{n\pi + \delta_n}{N_1+1} \quad (\text{A.26})$$

Pour l'autre équation caractéristique ($\delta_n = 0$ pour $W = \infty$) :

$$r_{1,2}^2 = a e^{\pm i\chi_n} \quad \chi_n = \text{argch} \left(1 + \frac{W - E_n}{2a} \right) \quad (\text{A.27})$$

D'où l'équation de dispersion qui relie δ_n et χ_n :

$$\frac{(r_1^1)^{N_1+1} - (r_2^1)^{N_1+1}}{(r_1^1)^{N_1} - (r_2^1)^{N_1}} = a^2 \frac{(r_1^2)^{N_2} - (r_2^2)^{N_2}}{(r_1^2)^{N_2+1} - (r_2^2)^{N_2+1}} \quad (\text{A.28})$$

$$\frac{e^{i(n\pi+\delta_n)} - e^{-i(n\pi+\delta_n)}}{e^{i(n\pi+\delta_n)\frac{N_1}{N_1+1}} - e^{-i(n\pi+\delta_n)\frac{N_1}{N_1+1}}} = a^2 \frac{e^{N_2\chi_n} - e^{-N_2\chi_n}}{e^{(N_2+1)\chi_n} - e^{-(N_2+1)\chi_n}} \quad (\text{A.29})$$

On a ainsi :

$$\frac{\sin(n\pi + \delta_n)}{\sin\left((n\pi + \delta_n)\frac{N_1}{N_1+1}\right)} = \frac{\sinh(\chi_n N_2)}{\sinh(\chi_n (N_2 + 1))} \quad (\text{A.30})$$

Nous allons ensuite étendre le calcul au cas de deux puits semi-infinis et couplés.

Cas de deux puits semi-infinis couplés

Couplons maintenant deux puits semi-infinis comme cela est représenté sur la figure A.2.

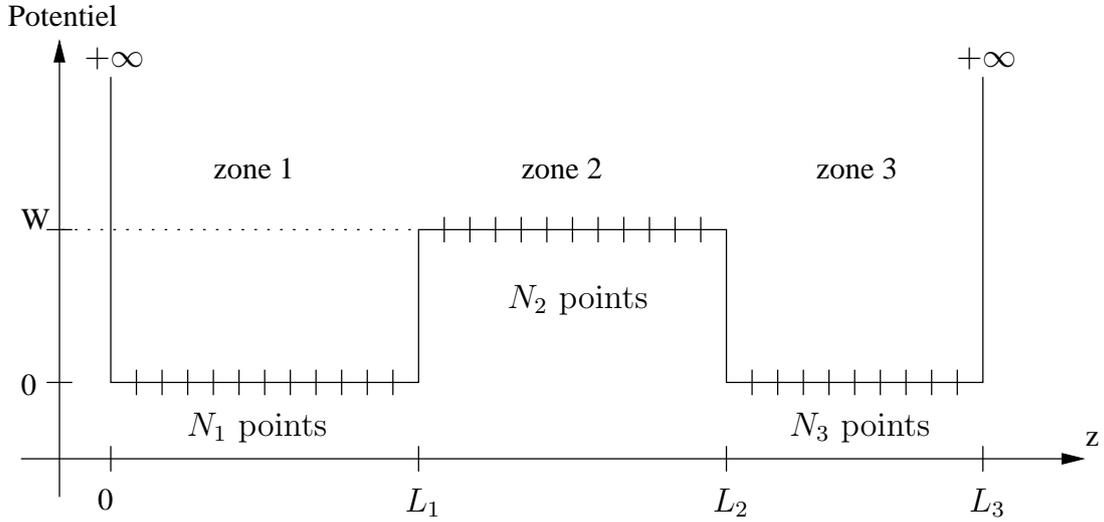


FIG. A.2 – Deux puits de potentiel semi-infinis couplés

$$\Delta_{N_1+N_2}^{(1,2)} = \Delta_{N_1}^{(1)} \Delta_{N_2}^{(2)} - a^2 \Delta_{N_1-1}^{(1)} \Delta_{N_2-1}^{(2)} \quad (\text{A.31})$$

$$\Delta_{N_1+N_2+N_3}^{(1,2,3)} = \Delta_{N_1+N_2}^{(1,2)} \Delta_{N_3}^{(3)} - a^2 \Delta_{N_1+(N_2-1)}^{(1,2)} \Delta_{N_3-1}^{(3)} \quad (\text{A.32})$$

$$\Delta_{N_1+(N_2-1)}^{(1,2)} = \Delta_{N_1}^{(1)} \Delta_{N_2-1}^{(2)} - a^2 \Delta_{N_1-1}^{(1)} \Delta_{N_2-2}^{(2)} \quad (\text{A.33})$$

On a donc le déterminant général suivant :

$$\begin{aligned} \Delta &= \left(\Delta_{N_1}^{(1)} \Delta_{N_2}^{(2)} - a^2 \Delta_{N_1-1}^{(1)} \Delta_{N_2-1}^{(2)} \right) \Delta_{N_3}^{(3)} - a^2 \left(\Delta_{N_1}^{(1)} \Delta_{N_2-1}^{(2)} - a^2 \Delta_{N_1-1}^{(1)} \Delta_{N_2-2}^{(2)} \right) \Delta_{N_3-1}^{(3)} \\ &= \Delta_{N_1}^{(1)} \Delta_{N_2}^{(2)} \Delta_{N_3}^{(3)} - a^2 \left(\Delta_{N_1-1}^{(1)} \Delta_{N_2-1}^{(2)} \Delta_{N_3}^{(3)} + \Delta_{N_1}^{(1)} \Delta_{N_2-1}^{(2)} \Delta_{N_3-1}^{(3)} \right) + a^4 \Delta_{N_1-1}^{(1)} \Delta_{N_2-2}^{(2)} \Delta_{N_3-1}^{(3)} \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

$$\Delta = \Delta_{N_1}^{(1)} \Delta_{N_2}^{(2)} \Delta_{N_3}^{(3)} - a^2 \Delta_{N_2-1}^{(2)} \left(\Delta_{N_1-1}^{(1)} \Delta_{N_3}^{(3)} + \Delta_{N_1}^{(1)} \Delta_{N_3-1}^{(3)} \right) + a^4 \Delta_{N_1-1}^{(1)} \Delta_{N_2-2}^{(2)} \Delta_{N_3-1}^{(3)} \quad (\text{A.35})$$

$$\Delta_{N_i}^{(i)} = \frac{(r_1^i)^{N_i+1} - (r_2^i)^{N_i+1}}{r_1^i - r_2^i} \quad r_i^2 - (V_i + 2a - E)r_i + a^2 = 0$$

Si $E > V_i$ alors $r_i = a \exp(\pm i \varphi)$

Si $E < V_i$ alors $r_i = a \exp(\pm \chi)$

Dans le cas particulier où $N_1 = N_3$, $V_1 = V_3 = 0$ et $V_2 = W$ alors :

$$\Delta_1^{N_1} = a^{N_1} \frac{\sin((N_1 + 1)\varphi)}{\sin(\varphi)} \quad \Delta_1^{N_1-1} = a^{N_1-1} \frac{\sin(N_1 \varphi)}{\sin(\varphi)} \quad (\text{A.36})$$

$$\Delta_2^{N_2} = a^{N_2} \frac{\sinh((N_2 + 1)\chi)}{\sinh(\chi)} \quad \Delta_2^{N_2-1} = a^{N_2-1} \frac{\sinh(N_2 \chi)}{\sinh(\chi)} \quad \Delta_2^{N_2-2} = a^{N_2-2} \frac{\sinh((N_2 - 1)\chi)}{\sinh(\chi)} \quad (\text{A.37})$$

$$\Delta_3^{N_3} = \Delta_1^{N_1} \quad \Delta_3^{N_3-1} = \Delta_1^{N_1-1} \quad (\text{A.38})$$

On est alors conduit à l'équation de dispersion suivante :

$$\Delta = \left(\frac{\sin((N_1 + 1)\varphi)}{\sin(\varphi)} \right)^2 \frac{\sinh((N_2 + 1)\chi)}{\sinh(\chi)} - 2 \frac{\sinh(N_2 \chi)}{\sinh(\chi)} \frac{\sin(N_1 \varphi)}{\sin(\varphi)} \frac{\sin((N_1 + 1)\varphi)}{\sin(\varphi)} + \left(\frac{\sin(N_1 \varphi)}{\sin(\varphi)} \right)^2 \frac{\sinh((N_2 - 1)\chi)}{\sinh(\chi)} = 0 \quad (\text{A.39})$$

Annexe B

Forme intégrée de l'équation de Boltzmann

Cette annexe a pour objectif de rappeler le lien entre l'équation de Boltzmann (6.5) et sa forme intégrée (6.6).

L'équation de Boltzmann traduit l'évolution dans le temps des distributions des porteurs f en fonction du champ électrique \mathbf{F} , de la différence de répartition des porteurs dans l'espace $\nabla_r f$ et des collisions $S_{\mathbf{k}}(f) - (f/\tau_{\mathbf{k}})$:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{q}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f + \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_r f = S(f) - \frac{f}{\tau_{\mathbf{k}}} \quad (\text{B.1})$$

L'intégrale sur k de la distribution donne la densité de porteur. Pour les électrons :

$$n = \int_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) d^3k \quad (\text{B.2})$$

La densité de courant \mathbf{J} est donnée par le troisième terme :

$$\int_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_r f d^3k = \frac{1}{q} \text{div} \mathbf{J} \quad (\text{B.3})$$

Si l'on suppose que f est symétrique dans la zone de Brillouin alors :

$$\frac{q F_z}{\hbar} \int \frac{\partial f}{\partial k} d^3k = 0 \quad (\text{B.4})$$

S'il n'y a pas de génération ou de recombinaison de porteurs :

$$\int \left(S(f) - \frac{f}{\tau} \right) d^3k = 0 \quad (\text{B.5})$$

On a alors pour les électrons et les trous :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{q} \text{div} \mathbf{J}_n &= 0 \\ \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{q} \text{div} \mathbf{J}_p &= 0 \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

où q est la valeur algébrique de la charge : pour les électrons $q = -e$ et pour les trous $q = e$.

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{q} \mathbf{F} \right) + \overbrace{\frac{q}{\hbar} \int \mathbf{v}_{\mathbf{k}} (\mathbf{F} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f) d^3k}^{\text{force de dérive}} + \overbrace{\int \mathbf{v}_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_r f) d^3k}^{\text{force de diffusion}} = -\frac{\mathbf{J}}{q\tau} \quad (\text{B.7})$$

Annexe C

Mesure du gain en dessous du seuil

L'intérêt de cette annexe est de détailler la relation entre la puissance émise par le laser et le spectre de gain.

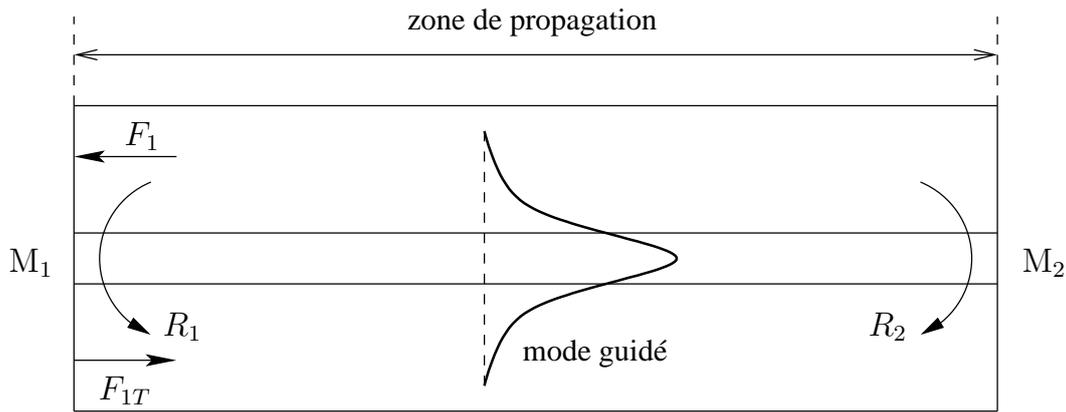


FIG. C.1 – Propagation d'un mode optique dans une cavité laser

Considérons une onde incidente sur le miroir M_1 . L'amplitude de l'onde réfléchie par ce miroir est : $F_{1T} = \sqrt{R_1} F_1$. Elle se propage suivant la constante de propagation $k - j\frac{\alpha}{2}$, où α est la constante d'atténuation. Après de multiples réflexions sur les deux miroirs M_1 et M_2 , le champ du mode incident guidé s'écrit sous la forme :

$$\begin{aligned}
 F_{1T} &= F_1 \sum_{n=0}^{\infty} \left(\sqrt{R_1 R_2} \right)^n \exp(-2j n k L - n \alpha L) \\
 &= \frac{F_1}{1 - \sqrt{R_1 R_2} \exp(-\alpha L) \exp(-2j k L)}
 \end{aligned} \tag{C.1}$$

L'amplitude maximale correspond à :

$$F_{1T, max} = \frac{F_1}{1 - \sqrt{R_1 R_2} \exp(-\alpha L)} \tag{C.2}$$

L'amplitude minimale correspond à :

$$F_{1T,min} = \frac{F_1}{1 + \sqrt{R_1 R_2} \exp(-\alpha L)} \quad (C.3)$$

Les expressions (C.2) et (C.3) peuvent être reliées

$$\sqrt{\frac{P_{max}}{P_{min}}} = \frac{F_{1T,max}}{F_{1T,min}} = \frac{1 + \sqrt{R_1 R_2} \exp(-\alpha L)}{1 - \sqrt{R_1 R_2} \exp(-\alpha L)} \quad (C.4)$$

Cette relation peut être transformée en :

$$\sqrt{R_1 R_2} \exp(-\alpha L) = \frac{\sqrt{\frac{P_{max}}{P_{min}}} - 1}{\sqrt{\frac{P_{max}}{P_{min}}} + 1} \quad (C.5)$$

Ce qui donne donc la relation entre le gain net et le spectre de la puissance mesurée :

$$\alpha = \frac{1}{2L} \ln(R_1 R_2) + \frac{1}{L} \ln \left(\frac{\sqrt{P_{max}} + \sqrt{P_{min}}}{\sqrt{P_{max}} - \sqrt{P_{min}}} \right) \quad (C.6)$$

MODÉLISATION ET SIMULATION DES COMPOSANTS OPTOÉLECTRONIQUES À PUIITS QUANTIQUES

Ce travail de thèse a pour objet la mise en œuvre d'une méthode de calcul des états liés dans les structures à multipuits quantiques. Il participe ainsi à l'amélioration des outils de simulation permettant d'optimiser les composants avant leur réalisation.

Nous présentons le modèle physique utilisé ainsi que les différentes méthodes couramment employées pour le calcul de ces états. Une comparaison avec le calcul par éléments finis du premier ordre montre un avantage majeur de notre approche dans des cas limites usuels comme le couplage de deux puits identiques ou le calcul des bandes de valence d'un puits quantique large, ainsi qu'en terme de rapidité. La finalité de ce calcul est l'évaluation du gain matériau, élément de base de la simulation des composants.

Ce nouveau module vient compléter le simulateur *BCBV* dont nous rappelons les principaux modèles tels que celui de dérive-diffusion et du couplage électrique-optique en semi-classique. Cependant, la présence de zones quantiques peut nécessiter une approche par la matrice de densité pour rendre compte, de manière plus précise, des phénomènes de transport.

Pour finir, nous tentons de comparer les résultats de la simulation du gain avec des mesures effectuées à partir de lasers de type Fabry-Pérot.

Mots clés

optoélectronique, multipuits quantiques, méthode de Galerkin, gain matériau

MODELISATION AND SIMULATION OF OPTOELECTRONIC DEVICES BASED ON QUANTUM WELLS

The main goal of this work is the implementation of a new method to calculate bound states in multi-quantum well devices. It focuses on the improvement of simulation tools and therefore helps the design of optoelectronic devices prior to their fabrication.

We describe the physical model used as well as the classical methods usually employed for this calculation. Compared to first order finite element approach, our method deals correctly with borderline cases like coupling of identical wells or valence bands calculation of large wells and is also advantageous in terms of computational time. The aim of this calculation is the material gain evaluation that is the basis for device simulation.

Our new module completes the *BCBV* simulator of which we will describe the main models such as that of drift-diffusion and electro-optic coupling in the semi-classical approach. However, the quantum wells can require a density matrix approach to take into account transport phenomena more precisely.

Finally, we try to compare simulation results with experimental measurements taken from Fabry-Perot lasers.

Key words

optoelectronic, multi-quantum wells, Galerkin method, material gain