



*République Algérienne Démocratique et Populaire*

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



## **Université Ziane Achour – Djelfa**

Faculté des Sciences et de la Technologie

Département des Sciences de la Matière

**MSIL** *Materials Science and Informatics Laboratory*

N° d'Ordre :

# **Modélisation des paramètres physiques d'un laser à puits quantique contraint GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As**

*Mémoire présenté par*

**Mohamed ABDELLAOUI**

*Pour l'obtention du grade de*

**Master**

*En : Physique des Matériaux*

*Soutenu le : ..... devant la commission d'examen :*

Dr Djamal Rahou                      Président                      Université de Djelfa

Dr Ahmed Gueddim                      Encadreur                      Université de Djelfa

Mr Mohamed Lahoual                      Co-encadreur                      Université de Djelfa

Dr Abdelkrim Naas                      Examineur                      Université de Djelfa

Dr Lakhdar Gacem                      Examineur                      Université de Djelfa

---

---

---

---

---

---

# Dédicace

Je dédie ce travail :

*À mes chers **parents** qui ont tout sacrifié pour moi, C'est Grâce à vous que je suis là, et que j'irai loin. Vous resterez toujours dans mon cœur.*

*À mon frère **Mohsine** et mon ami **Messaoud** que Dieu les garde et les protège. Je leurs souhaite tout le bonheur du monde , et je leurs dit : « Merci pour tous les beaux moments que J'ai partagé avec vous ».*

*À la mémoire de mes **grands-parents** que Dieu ait pitié d'eux.*

*À Tous ceux et celles qui m'ont aidé et encouragé de près comme de loin ( **Omar, Abderrazak , Mohamed , Mostafa ...** ).*

*Mohamed*

## *Remerciements*

*Ce travail a été réalisé au **Matériels Science and Informatics laboratory (MSIL)** de l'Université de Djelfa .*

*À cet effet, je voudrais remercier **Mr.A.Gueddim** Directeur du **MSIL** qui a bien voulu **M'**accueillir dans sa laboratoire, et me confier le sujet de ce mémoire.*

*Je me saurais ne pas remercier **Mr.M.Lahoual** membre de l'équipe **Matériels Informatiques** qui a bien voulu Co-encadré ce travail.*

*Je remercie **Mr.L.Gacem** qui a bien voulu accepte de présider le jury de ce mémoire.*

*Mes remerciements vont également à **Mr.A.Naas** et **A.Bouraiou** pour avoir accepté d'examiner ce travail.*

*Je n'oublie pas d'adresser mes remerciements à mon ami, **M. Zenzane**, pour toute l'aide morale qu'il m'a accordée durant la préparation de ce travail.*

*Enfin, j'adresse mes remerciements les plus sincères à ma chère mère et mes frères.*

## Tableau de figures

|                    |  |        |
|--------------------|--|--------|
| <b>Figure 1.1</b>  | Cavité résonante.  | (1.4)  |
| <b>Figure 1.2</b>  | Les niveaux quantifiés dans un puits quantique.  | (1.6)  |
| <b>Figure 1.3</b>  | Mécanismes d'émission.   | (1.7)  |
| <b>Figure 2.1</b>  | Alignement des bandes de conduction et valence dans une hétéro-structure de type I et de Type II.  | (2.12) |
| <b>Figure 2.2</b>  | Puits carré de potentiel.  | (2.13) |
| <b>Figure 2.3</b>  | Fonctions d'onde et niveaux d'énergie d'une particule dans un puits de potentiel.  | (2.15) |
| <b>Figure 2.4</b>  | Fonctions d'onde et niveaux d'énergie d'une particule dans un puits de potentiel.  | (2.17) |
| <b>Figure 2.5</b>  | Représentation de l'adaptation du paramètre de maille du couche épitaxie sur un substrat .   | (2.20) |
| <b>Figure 2.6</b>  | Structure de bande pour un semi-conducteur cubique autour de $K = 0$ ,<br>a) compression bi axiale. b) non contraint. c) tension bi axiale.                | (2.22) |
| <b>Figure 2.7</b>  | La variation de la structure énergétique du puits suivant la concentration $X$ .   | (2.25) |
| <b>Figure 2.8</b>  | Puits quantique GaAs / $Al_xGa_{1-x}As$ avec $X = 0.1$ , $L_p = 10$ nm et $N = 2 \times 10^{18} cm^{-3}$   | (2.27) |
| <b>Figure 2.9</b>  | Puits quantique GaAs / $Al_xGa_{1-x}As$ avec $X = 0.1$ , $L_p = 20$ nm et $N = 2 \times 10^{18} cm^{-3}$ .   | (2.28) |
| <b>Figure 2.10</b> | Puits quantique GaAs / $Al_xGa_{1-x}As$ avec $X = 0.1$ , $L_p = 30$ nm et $N = 2 \times 10^{18} cm^{-3}$ .   | (2.28) |
| <b>Figure 3.1</b>  | Fonction de distribution de Fermi-Dirac pour différentes températures.   | (3.31) |
| <b>Figure 3.2</b>  | Volume occupé par un état dans l'espace des k.   | (3.32) |
| <b>Figure 3.3</b>  | Variation de la densité d'état en fonction de l'énergie.   | (3.34) |
| <b>Figure 3.4</b>  | Transition verticales dans l'espace de vecteur $\vec{k}$ de la bande conduction vers la bande de Valence.  | (3.35) |
| <b>Figure 3.5</b>  | La densité d'états du puits quantique GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ pour $X = 0.1$ et (a) $L_p = 10$ nm et (b) $L_p = 20$ nm en fonction de l'énergie.            | (3.37) |
| <b>Figure 3.6</b>  | La densité d'états du puits quantique GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ pour $L_p = 10$ nm et (a) $X = 0.1$ et (b) $X = 0.2$ en fonction de l'énergie.                | (3.38) |
| <b>Figure 4.1</b>  | Transition entre les sous-bandes de conduction et les sous-bandes de valence d'un puits quantique.   | (4.42) |
| <b>Figure 4.2</b>  | Spectre de gain pour différentes densité de porteurs à épaisseurs de puits quantiques a) $L_p = 8$ nm b) $L_p = 10$ nm à température ambiante $T = 300$ K. | (4.45) |
| <b>Figure 4.3</b>  | Gain optique pour TM et TE mode.   | (4.46) |

# Table des Matières

|  |    |
|--|----|
| <b>Introduction Générale</b> .....   | 1  |
| <br><b>Chapitre I : Les principes de base du laser</b>                             |    |
| I.1. Introduction.....   | 3  |
| I.2. Les principes de base du laser.....   | 3  |
| I.2.1 Le milieu amplificateur.....   | 3  |
| I.2.2 Le pompage.....  | 4  |
| I.2.3 La cavité.....   | 4  |
| I.2.4 Laser à semi-conducteur.....   | 5  |
| I.2.5 Laser a puits quantique.....   | 5  |
| I.3. Phénomène d'émission .....  | 7  |
| I.3.1 Expressions générales des coefficients d'émission et d'absorption .....      | 7  |
| I.4. Conclusion .....  | 11 |
| <br><b>Chapitre II : Puits quantique</b>   |    |
| II.1. Introduction .....   | 12 |
| II.2. Puits Quantique .....  | 12 |
| II.2.1. Puits de potentiel fini .....  | 13 |
| II.2.2. Puits de Potentiel infini .....  | 15 |
| II.2.2.1. Niveaux d'énergie et fonctions d'onde .....                              | 15 |
| II.2.2.2. Etat fondamental .....   | 17 |
| II.3. Notion de contrainte.....  | 18 |
| II.3.1. Déformations et contraintes .....  | 19 |
| II.3.2. Energie de déformation .....   | 21 |
| II.3.3. Calcul du décalage de bande du puits quantique $GaAs/Al_{1-x}Ga_xAs$ ..... | 22 |
| II.4. Calcul numérique du puits quantique $GaAs / Al_{(x)}Ga_{(1-x)}As$ .....      | 26 |
| II.5. Conclusion.....  | 28 |

**Chapitre III: calcul de la densité d'état**

|                |   |    |
|----------------|---|----|
| <b>III.1.</b>  | Introduction.....   | 28 |
| <b>III.2.</b>  | La fonction de distribution.....  | 28 |
| <b>III.2.1</b> | Fonction de distribution des électrons et des trous.....  | 29 |
| <b>III.3.</b>  | Densité d'états.....  | 31 |
| <b>III.3.1</b> | Densité réduite .....   | 33 |
| <b>III.4.</b>  | Calcul numérique de la densité d'état du système GaAs /Al <sub>(x)</sub> Ga <sub>(1-x)</sub> As ..... | 36 |
| <b>III.5.</b>  | Conclusion.....   | 37 |

**Chapitre IV : gain -optique**

|                 |   |    |
|-----------------|---|----|
| <b>IV.1.</b>    | Introduction.....   | 38 |
| <b>IV.2.</b>    | Gain optique .....  | 38 |
| <b>IV.2.1.</b>  | Gain optique dans les puits quantiques.....                 | 40 |
| <b>IV.2.1.1</b> | Expression du gain sans conservation du vecteur d'onde..... | 40 |
| <b>IV.2.1.2</b> | Expression du gain avec conservation du vecteur d'onde..... | 41 |
| <b>IV.2.2</b>   | Spectre de gain .....                                       | 43 |
| <b>IV.3</b>     | Conclusion.....   | 45 |

|                                  |    |
|----------------------------------|----|
| <b>Conclusion Générale</b> ..... | 46 |
|----------------------------------|----|

---

## Introduction générale

Inventés dans les années 1960, les lasers à semi-conducteurs ont eu un impact considérable tant dans les domaines industriels et commerciaux que militaires [1, 2, 3]. La maîtrise de l'élaboration des semi-conducteurs en couches minces permet aujourd'hui de réaliser des diodes à jonction p-n couvrant des longueurs d'ondes d'émission allant du bleu, pour les futurs lecteurs - enregistreurs DVD à haute résolution jusqu'au proche infrarouge (1,5  $\mu\text{m}$ ) pour les communications optiques longues distances [4].

Le principal avantage lié à l'utilisation d'une longueur d'onde courte provient de la possibilité de réduire le diamètre de focalisation du faisceau laser et ainsi de pouvoir le confiner dans un petit guide d'onde. Il en résulte une réduction en taille et un accroissement en densité de stockage des systèmes optiques [5].

Depuis longtemps les sources lumineuses sont utilisées parce qu'elles ne sont pas très coûteuses mais elles présentent pas mal d'inconvénients puisqu'elles ne sont pas très intenses même en utilisant une lentille ou n'importe quel autre système optique convergent. Elles ne sont pas monochromatiques et sont incohérentes [6].

Ce travail est une étude de la diode laser à puits quantique contraint GaAs/Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As qui permet une émission à 445 nm dans la région du bleu dans le spectre électromagnétique.

Nous avons utilisé le matériau ternaire GaAs comme une zone active dans la diode laser à puits quantique contraint sur un substrat Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As. Nous avons calculé le gain optique en fonction de la fraction molaire, longueur d'onde, la largeur de la zone active et la concentration des porteurs de charge ainsi que les valeurs optimales de la largeur de puits, la concentration des porteurs de charge et la fraction molaire ont été faites afin d'obtenir un gain optique maximale pour une émission dans le bleu. Le spectre optique du gain est calculé en utilisant la méthode de Luttinger-Kohn en considérant le modèle parabolique de la bande de conduction et le couplage des sous bandes entre les trous lourds et les trous légers de la bande de conduction [7]. L'influence de la contrainte sur les propriétés structurales et optiques, les énergies de quantification et de transition ont été calculées.

---

Le plan de ce mémoire est composé de trois chapitres :

On présente dans le premier chapitre le principe physique de l'effet laser, ainsi que les états électroniques dans les semiconducteurs et notamment dans les structures à puits quantiques.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons le calcul du puits quantique fini et infini, nous verrons la contrainte. nous ferons la simulation du système GaAs /  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  avec différentes largeurs du puits quantique.

Enfin, le troisième chapitre contient le calcul du gain optique d'un laser GaAs/ $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  à puits quantiques contraints d'une émission à 445 nm pour les applications qui nécessitent une longueur d'onde au-delà du visible. La concentration en gallium est ajustée de façon à obtenir une longueur d'onde de 445 nm.

# Chapitre I

## I.1. Introduction

Nous rappellerons tout d'abord dans ce chapitre l'essentiel des principes de base du laser ainsi que les expressions générales des coefficients d'émission et d'absorption, ainsi que la formulation de la probabilité de transition. Les hypothèses et les relations ainsi établies nous permettront de déterminer le gain optique dans un puits quantique.

## I.2. Les principes de base du laser

Le mot laser est un acronyme qui signifie (*Light Amplification by Stimulated Emission Radiation*), c'est-à-dire l'amplification de la lumière par émission stimulée du rayonnement. Ce sont des oscillateurs optiques basés sur l'amplification d'un signal lumineux, réalisée par l'émission stimulée de l'atome du milieu actif. Le laser est capable de créer la lumière en micro onde, en infrarouge, dans l'ultraviolet et même dans les rayons X [8].

Le Fonctionnement d'un laser nécessite la coexistence de trois éléments essentiels [9]:

1. Un milieu amplificateur qui est formé d'électrons, d'atomes, molécules, ions ou cristaux de semi- conducteurs...
2. Le processus de pompage pour exciter ces électrons (atomes molécules, etc...).
3. Une cavité optique ou résonateur qui permet le passage du faisceau lumineux plusieurs fois par le milieu amplificateur.

### I.2.1 Le milieu amplificateur

Le milieu amplificateur est considéré comme le cœur du laser. C'est un système actif qui est un siège du gain optique qui compense les pertes par absorption, diffusion, réflexion, diffraction,..., il peut être constitué d'atomes, de molécules, d'ions et d'électrons. Ce milieu possède une structure appropriée de niveaux d'énergie discrets ayant la capacité de stocker l'énergie reçue de l'extérieur.

## I.2.2 Le pompage

Pour qu'il y ait émission stimulée, il faut le niveau excité soit plus peuplé que le niveau fondamental, on dit qu'on a une inversion de population. Cette inversion de population est réalisée par l'opération de pompage.

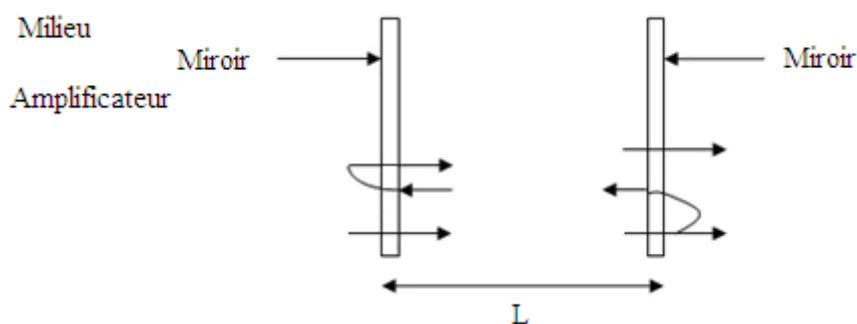
Pour les diodes laser à semi-conducteurs, cette opération est réalisée par l'injection d'un courant électrique direct.

Il existe trois types de pompage couramment utilisés dans un laser à semi-conducteurs [10]:

1. Pompage optique.
2. Pompage par injection électrique : c'est une technique standard utilisée dans les solides lasers.
3. Pompage électrique dont la technique est basée sur le même principe que la Cathodoluminescence.

## I.2.3 La cavité

La cavité laser est un oscillateur formé de surfaces semi-réfléchissantes parallèles, limitant un milieu amplificateur pour former une cavité Fabry-Perot. La cavité entre en oscillation lorsque le gain optique de la cavité compense les pertes de la cavité (absorption du milieu et transmission des miroirs) [11].



**Figure 1.1.** Cavité résonante.

Le gain au seuil est donné par la relation suivant:

$$g_s = \alpha_i + \frac{1}{2L} \ln \left( \frac{1}{R_1 R_2} \right) \quad (1.1)$$

$\alpha_i$ : Coefficient d'absorption du milieu

$R_1$  et  $R_2$ : réflectivités de faces.

D'autre part, pour qu'il y ait des interférences constructives, il faut que la longueur de la cavité soit égale à un nombre entier de demi-longueur d'onde de la lumière

On a donc

$$L = m \cdot \frac{\lambda}{2n}$$

$m$  : l'ordre des modes qui peuvent exister dans la cavité

$n$  : indice de réfraction

$p$  : puissance lumineuse

### **1.2.4 Laser à semi-conducteur**

Dans le laser à semi-conducteur [12]

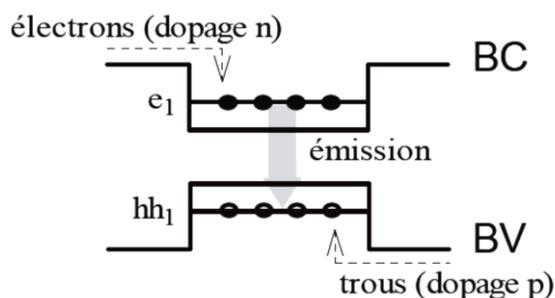
1. Le pompage est assuré par l'injection des porteurs à travers une jonction PN polarisée en direct.
2. Le milieu amplificateur est le semi-conducteur ou on a réalisé une inversion de population.
3. La cavité résonante est formée par les faces clivées (plans cristallins) qui limitent la zone active.

### **1.2.5 Laser à puits quantique**

Une diode laser à puits quantique contraint GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As est constituée d'un empilement de couches sur substrat. La structure du composant comporte :

1. Une couche active constituée par un ou plusieurs puits quantiques contraints de quelques dizaines d'Angströms d'épaisseur.
2. Un guide optique constitué de deux couches barrières de quelques centaines d'Angströms entourées de deux couches de confinement de 1  $\mu m$  environ.

La couche active est constituée d'un matériau de bande interdite inférieure à celle des couches adjacentes et constitue un puits quantique de potentiel pour les porteurs.



**Figure 1.2.** Les niveaux quantifiés dans un puits quantique.

Ces derniers, compte tenu de la largeur du puits ( $L_p = 07 \rightarrow 50 \text{ nm}$ ), sont soumis à la quantification de leur mouvement qui prend alors un caractère bidimensionnel. Les états d'énergies des particules correspondent donc à des niveaux quantifiés [13].

De plus, compte tenu de l'épitaxie du matériau de la couche active sur le matériau de paramètre de maille initialement différent, le puits quantique est contraint, ce qui modifie également les énergies des particules et conféré au puits des propriétés électroniques particulières.

Par ailleurs, un des problèmes fondamentaux du laser à puits quantique contraint ou non contraint est que l'interaction entre l'onde optique et les porteurs est faible en raison de la largeur du puits. Aussi, pour remédier à cet inconvénient, on utilise l'effet de confinement séparé qui consiste à améliorer le confinement de photon en ajoutant de part et d'autre de la zone active un guide d'onde. Ce dernier peut être réalisé [14]

1. Soit grâce au matériau barrière de composition constante épitaxie sur la couche de confinement.
2. Soit grâce au matériau barrière de composition graduelle épitaxie sur couche de confinement.

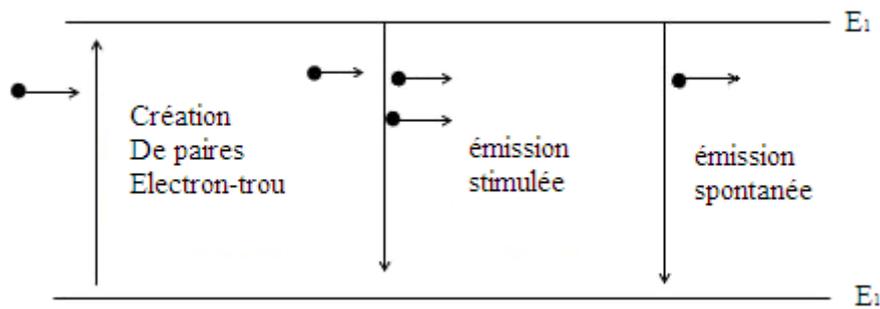
### I.3. Phénomène d'émission

#### I.3.1 Expressions générales des coefficients d'émission et d'absorption

Nous supposons que la zone active d'une diode laser à hétéro structures peut être considérée comme un milieu homogène du point de vue de la densité des porteurs.

Cette zone active est, vis-à-vis des photons, le siège de trois phénomènes (figure 3.1)

1. Création de paires électron-trou par absorption de photon,
2. Création de photons par émission spontanée,
3. Création de photons par émission stimulée,



**Figure 1.3.** Mécanismes d'émission.

Si on considère une transition mettant en jeu un rayonnement électromagnétique entre un seul état  $E_1$  dans la bande de valence, et un seul état  $E_2$  dans la bande de conduction, trois situations peuvent se produire [15]:

1. Un photon d'énergie  $\Delta E = E_2 - E_1 = \hbar\omega$  est absorbé.
2. Un électron dans l'état  $E_2$  retourne de façon spontanée dans l'état  $E_1$ . Cette transition produit un photon d'énergie  $E_2 - E_1$ .
3. Un photon d'énergie  $\Delta E = E_2 - E_1$  stimule l'émission d'un photon similaire par la transition d'un électron de  $E_2$  à  $E_1$ .
4. Ces processus dépendent des facteurs suivants :
  - a. Probabilité que la transition ait lieu  $B_{12}$  et  $B_{21}$ .
  - b. Probabilité que l'état  $E_1$  contienne un électron  $f_1$ .
  - c. Probabilité que l'état  $E_2$  soit vide  $1 - f_2$ .
  - d. Densité de photons d'énergie  $E_{12}$   $P(E_{12})$ .

La probabilité d'occupation de l'état d'énergie  $E_n$  est donnée par la statistique de Fermi-dirac :

$$f_n = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_n - E_F}{k_b T}\right)} \quad (1.2)$$

Où  $E_F$  est le pseudo-niveau de Fermi pour le niveau considéré et  $k_b$  la constante de Boltzmann.

La densité de photon est donnée par :

$$P(E) = \frac{8\pi n^2 E^2}{h^3 c^3} \left[ 1 + \frac{E}{n} \left( \frac{dn}{dE} \right) \right] \left( \exp \left( \frac{E}{k_b T} \right) - 1 \right)^{-1} \quad (1.3)$$

Ou  $n$  est l'indice de réfraction,  $c$  la vitesse de la lumière,  $T$  la température absolue.

Les taux régissant les transitions sont donc

1. Le taux de recombinaison stimulée

$$r_{21} = B_{21} \cdot f_2 (1 - f_1) P(E_{21}) \quad (1.4)$$

2. Le taux de création de paires électrons-trous

$$r_{12} = B_{12} \cdot f_2 (1 - f_2) P(E_{21}) \quad (1.5)$$

3. Le taux d'émission spontanée

$$r_{21}(sp) = A_{21} \cdot f_2 (1 - f_1) \quad (1.6)$$

Ou  $A_{21}$  est la probabilité pour que l'électron de  $E_2$  retourne spontanément à l'état  $E_1$ .

A l'équilibre thermodynamique

$$r_{12} = r_{21} + r_{21}(sp) \quad (1.7)$$

Ce qui conduit aux relations d'Einstein

$$\frac{B_{21}}{A_{21}} = \frac{8\pi n^3 E^2_{21}}{h^3 c^3} \quad (1.8)$$

et  $B_{21} = B_{12}$

Les quantités les plus fréquemment utilisées sont

4. Le taux d'émission stimulée défini par

$$r_{st}(E_{21}) = A_{21}(f_2 - f_1) \quad (1.9)$$

5. Le coefficient d'absorption défini par la relation suivante

$$\alpha(E_{21}) = \frac{B_{12}(f_1 - f_2)}{v_g} \quad (1.10)$$

Ou

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{2\pi}{h} \frac{dE}{dk} \quad (1.11)$$

La vitesse de groupe s'écrit donc

$$v_g = \frac{c}{n} \left[ 1 + \frac{E}{n} \frac{dn}{dE} \right]^{-1} \quad (1.12)$$

Ou le terme de dispersion  $\left[ 1 + \frac{E}{n} \frac{dn}{dE} \right]$  de la vitesse de groupe tend vers l'unité.

Alors l'expression du coefficient d'absorption s'écrit comme

$$\alpha(E_{21}) = \frac{n}{c} B_{12} \cdot (f_1 - f_2) \quad (1.13)$$

Ce coefficient est alors relié au taux d'émission stimulée  $r_{st}(E_{21})$  par

$$\alpha(E_{21}) = -\frac{c^2 \hbar^3 \pi^2}{n^2 E_{21}^2} r_{st}(E_{21}) \quad (1.14)$$

Dans ces expressions, la probabilité de transition  $B_{12}$  dépend de diverses propriétés du système qui relie l'interaction de l'électron et du rayonnement électromagnétique et sa détermination nécessite un traitement par la mécanique quantique [16].

Le taux d'émission spontanée tel que défini par l'expression 3-5 s'exprime en fonction du coefficient

$$r_{sp} = \frac{n^2 E_{21}^2}{\pi^2 \hbar^3 c^2} \alpha(E_{21}) \left[ \exp\left(\frac{E_{21} - (E_{F2} - E_{F1})}{k_T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (1.15)$$

Dans un semi-conducteur, matériau massif ou puits quantique, les bandes ou les sous-bandes de valence et de conduction forment un continuum d'états caractérisé par des densités d'état  $\rho(k)$  et  $\rho_v(E)$ . Les coefficients d'absorption et d'émission doivent donc être la somme des coefficients respectifs sur tous les niveaux d'énergie séparés par l'énergie  $E$  du photon [17]. Les coefficients s'expriment donc ainsi

### 1. Le taux d'émission stimulée

$$r_{st}(E) = A_0 \int_{-\infty}^{+\infty} B_{tr}(E) \cdot \rho_c(E') \rho_v(E'') \{f_c(E') - f_v(E' - E)\} dE' \quad (1.16)$$

$$A_0 = \frac{n^3 E^2}{\hbar^3 c^2}$$

$$E'' = E' - E$$

$B_{tr}(E)$  étant la probabilité pour que la transition d'énergie  $E$  ait lieu

### 2. Le coefficient d'absorption

$$\alpha(E) = \frac{n}{c} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} B_{tr}(E) \cdot \rho_c(E') \rho_v(E'') \{f_v(E' - E) - f_v(E')\} dE' \quad (1.17)$$

### 3. Le taux d'émission spontanée

$$r_{sp}(E) = A_0 \int_{-\infty}^{+\infty} B_{tr}(E) \cdot \rho_c(E') \rho_v(E'') f_c(E') \{1 - f_c(E')\} dE' \quad (1.18)$$

Les taux d'émission stimulée et spontanée et le coefficient d'absorption sont reliés entre eux et la connaissance de l'un entraîne la détermination des deux autres.

Le milieu devient amplificateur de photon a plus de chance de créer une recombinaison par émission stimulée que de créer une paire électron-trou. Cela signifie que le terme  $r_{st}(E)$  devient positif. Ceci est vérifié lorsque

$$E_{Fc} - E_{Fv} > E \quad (1.19)$$

Qu'est la condition de Bernard et Durrafourg.

## I.4. Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous avons présenté les principes de bases du laser et les phénomènes d'émission et d'absorption en détaillant les expressions générales des coefficients d'émission et d'absorption qui sont nécessaires dans le développement des formules du gain optique.

## Chapitre II

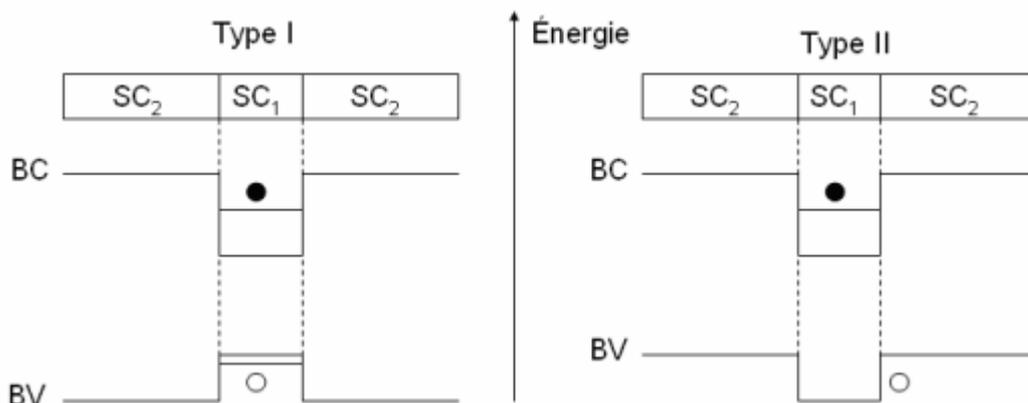
### II.1. Introduction

Depuis de nombreuses années, la physique des hétéro-structures à base de semi-conducteurs s'est développée parallèlement à celle des semi-conducteurs massifs. Si bien qu'il est désormais possible de réaliser, par épitaxie sous jets moléculaires, des empilements de couches minces (d'épaisseur typiquement inférieure à  $30 \text{ nm}$ ) de deux semi-conducteurs de bande interdite différente [18].

Dans ce deuxième chapitre, nous détaillerons le calcul d'un puits quantique fini et infini, nous verrons la contrainte et nous ferons la simulation du puits quantique  $\text{GaAs} / \text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  avec différentes largeurs des puits .

### II.2. Puits Quantique

La définition du puits quantique implique l'existence de deux types de puits. Les hétéro-structures de type I dans lesquelles les extrema des bandes de valence et de conduction sont situés dans le même matériau. Les électrons et les trous sont alors confinés dans le même semi-conducteur. Dans les hétéro-structures de type II, les électrons et les trous sont spatialement séparés. En ce qui concerne les puits quantiques de type I, les porteurs sont confinés dans la direction de croissance, mais leur mouvement dans le plan des couches reste libre. On parle alors de structure bidimensionnelle. La faible épaisseur du puits entraîne une discrétisation des énergies de confinement des porteurs le long de l'axe de croissance [19]



**Figure 2.1.** Alignement des bandes de conduction et de valence Dans une hétéro-structure de type I et de type II.

### II.2.1. Puits de potentiel fini

Il est représenté sur la Figure II-2. La particule est en mouvement dans un potentiel  $V(x)$  tel que  $V(x)$  est nul sur le segment  $]-a, a[$  et  $V(x) = V_0$  en dehors de ce segment. En mécanique classique, lorsque  $V_0$  est inférieur à l'énergie  $E$  de la particule ; celle-ci venant des  $x$  négatifs subit une accélération au passage de la discontinuité du potentiel en  $x = -a$  et reprend sa vitesse au passage de la discontinuité du potentiel en  $x = a$  pour aller se perdre à l'infini. Lorsque  $V_0$  est supérieur à  $E$ , tout mouvement de la particule est interdit en dehors du segment  $]-a, a[$ . La particule est donc astreinte à se mouvoir sur le segment de droite de longueur  $2a$  ou elle est confinée [20].

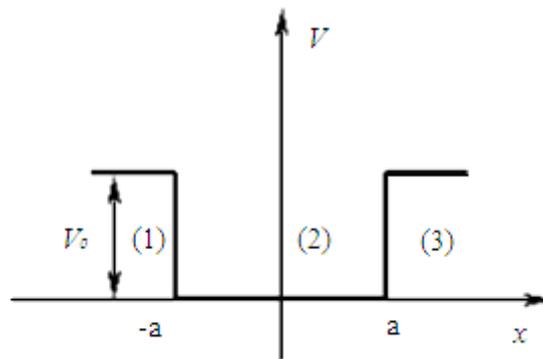


Figure 2.2. Puits carré de potentiel.

C'est à ce confinement qu'on va s'intéresser en mécanique quantique en écrivant l'équation de Schrödinger dans les trois régions (1), (2) et (3) où agit le potentiel :

- A l'extérieur du puits :  $|x| > a$

L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} - \rho^2\varphi = 0 \quad (2.1)$$

Avec

$$\rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) \quad (2.2)$$

Et ses solutions sont :

$$\varphi_{1(x)} = B_1 e^{\rho x} + B'_1 e^{-\rho x} \quad (2.3)$$

$$\varphi_{3(x)} = B_2 e^{\rho x} + B'_2 e^{-\rho x} \quad (2.4)$$

Comme  $\phi(x)$  doit être bornée dans les régions (1) et (3), on a nécessairement :

$$B_1 = B_2 = 0.$$

- A l'intérieur du puits :  $|x| < a$

L'équation de Schrödinger est :

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} + k^2 \varphi = 0 \text{ avec } k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad (2.5)$$

La solution générale de cette équation est donc de la forme :

$$\varphi_2(x) = A_1 e^{ikx} + A'_1 e^{-ikx} \quad (2.6)$$

Comme le potentiel est pair, les fonctions d'onde à l'intérieur du puits sont soit paires soit impaires c'est à dire qu'on a :

$$\varphi_2^p(x) = A \cos kx \quad \text{et} \quad \varphi_2^l(x) = B \sin kx$$

En conclusion le problème admet deux ensembles de solutions :

$$\begin{cases} \varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x} \\ \varphi_2^p(x) = A \cos kx \\ \varphi_3(x) = B'_2 e^{-\rho x} \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} \varphi_1(x) = B_1 e^{\rho x} \\ \varphi_2^l(x) = B \sin kx \\ \varphi_3(x) = B'_2 e^{-\rho x} \end{cases} \quad (2.7)$$

$$\text{Avec } B'_2 = B_1$$

Les conditions de raccordement imposées à la fonction d'onde et à sa dérivée aux points  $x = -a$  et  $x = +a$  conduisent pour les deux ensembles de solutions aux deux conditions de quantification suivantes :

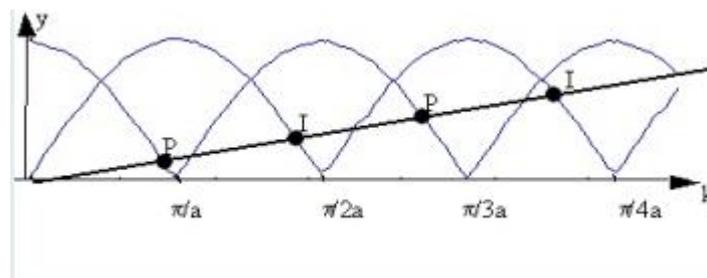
$$\operatorname{tg}(ka) = \frac{\rho}{k} \quad \text{et} \quad \operatorname{cotg}(ka) = -\frac{\rho}{k} \quad (2.8)$$

Il est possible de résoudre graphiquement ces équations implicites en  $E$ , mais il est plus simple de les ramener aux deux systèmes d'équations équivalentes suivantes :

$$\begin{cases} |\cos ka| = \frac{k}{k_0} \\ \operatorname{tg}(ka) > 0 \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} |\sin ka| = \frac{k}{k_0} \\ \operatorname{tg}(ka) < 0 \end{cases} \quad (2.9)$$

Où  $k_0$  est tel que :  $k_0^2 = k^2 + \rho^2 = \frac{2m}{\hbar^2} V_0$

Les niveaux d'énergie sont déterminés par l'intersection d'une droite de pente  $1/k_0$  avec des arcs de sinus (fig. II-3). Ces niveaux sont intercalés en niveaux pairs et impairs correspondant à des fonctions d'onde paires et impaires représentant les états liés de la particule [21].



**Figure 2.3.** Détermination graphique des énergies des états liés  
D'une particule dans un puits carré de potentiel.

L'analogie optique de ce système est une lame d'air emprisonnée entre deux blocs métalliques ( $n_1$  et  $n_3$  sont imaginaires et  $n_2$  réel) : C'est le principe d'une cavité. L'onde

Électromagnétique se confine dans la région centrale et il s'établit un système d'ondes stationnaires [22].

## II.2.2. Puits de Potentiel infini

### II.2.2.1. Niveaux d'énergie et fonctions d'onde

Si l'énergie potentielle  $V_0$  caractérisant la profondeur du puits devient infiniment grande devant l'énergie  $E$  de la particule, on obtient un puits de potentiel infini (fig.2.4) Classiquement la particule ne peut qu'osciller entre les deux parois du puits [23].

Qu'antiquement la fonction d'onde de la particule doit être nulle à l'extérieur du puits ( $\phi_I = \phi_3 = 0$ ) et continue en  $x = \pm a$ .

A l'intérieur du puits, et en raison de la parité du potentiel les solutions de l'équation de Schrödinger sont soit paires soit impaires. Les fonctions d'onde de la particule sont donc :

$$\varphi^p(x) = A \cos kx \quad \text{et} \quad \varphi^I(x) = B \sin kx \quad (2.10)$$

Les conditions de continuité en  $x = -a$  et en  $x = a$  donnent :

- Pour les fonctions paires

$$\cos kx = 0 \text{ soit } ka = (2n + 1) \frac{\pi}{2} \text{ et } E_p = (2n + 1)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (2.11)$$

- Pour les fonctions impaires

$$\sin kx = 0 \text{ soit } ka = n\pi \text{ et } E_I = (2n)^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (2.12)$$

Les deux expressions de l'énergie  $E_p$  et  $E_I$  peuvent être regroupées en une seule relation :

$$E_N = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \text{ avec } N = 1, 2, 3, \dots \quad (2.13)$$

Ce résultat qui peut être obtenu à partir de l'étude du puits fini, en faisant tendre  $V_0$  vers l'infini dans les relations de quantification (2-6) et (2-7), montre que le spectre d'énergie est constitué de niveaux discrets, éloignés les uns des autres comme le carré des nombres entiers successifs.

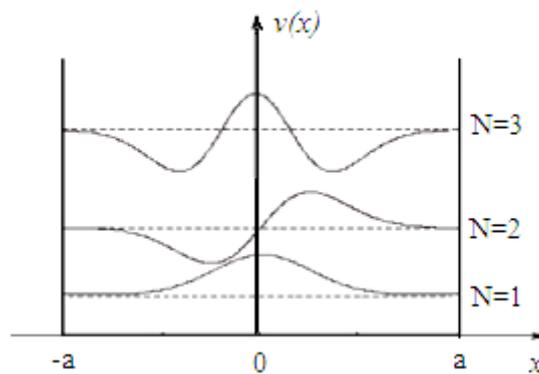
Les constantes  $A$  et  $B$  se calculent facilement en normalisant les fonctions d'onde c'est à dire en écrivant :

$$\int_{-a}^{+a} |\varphi(x)|^2 dx = 1 \quad (2.14)$$

On obtient :  $A = B = \frac{1}{\sqrt{a}}$  ce qui donne pour les fonctions d'onde :

$$\varphi^p(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \left[ \frac{(2n+1)}{2a} \pi x \right] : \text{Fonction paires ou symétriques}$$

$$\varphi^l(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \left[ \frac{n}{a} \pi x \right] : \text{Fonction impaires anti symétriques}$$



**Figure 2.4.** Fonctions d'onde et niveaux d'énergie d'une Particule dans un puits de potentiel.

Nous avons représenté sur la figure 2.4 les positions des niveaux d'énergie et dessiné l'allure des fonctions d'onde pour l'état fondamental ( $N = 1$ ) et les deux premiers états excités ( $N = 2, N = 3$ ).

### II.2.2.2. Etat fondamental

Alors que l'état fondamental de la particule classique est caractérisé par une énergie nulle, l'état fondamental ( $N = 1$ ) de la particule quantique est tel que :

$$E_1 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \neq 0 \quad (2.15)$$

Ce résultat est une conséquence du principe d'incertitude de Heisenberg, en effet :

$$\Delta x \approx 2a \text{ et } \Delta p \approx p - (-p) = 2p \quad (2.16)$$

Ce qui donne :

$$\Delta x \Delta p \approx 4ap \geq h \text{ et } p \geq \frac{h}{4a} \quad (2.17)$$

La particule étant libre à l'intérieur du puits on a :

$$E = \frac{p^2}{2m} \text{ soit } E \geq \frac{1}{2m} \left( \frac{h}{4a} \right)^2 \quad (2.18)$$

Donc :

$$E \geq \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (2.19)$$

On aura alors toujours  $E \geq E_1$

A l'intérieur du puits la particule est dans des états stationnaires. On peut donc faire une analogie avec la corde vibrante en prenant pour longueur d'onde associée à la particule la longueur d'onde de De Broglie. On sait que lorsque la corde de longueur  $L$  est le siège d'ondes stationnaires de longueur d'onde  $\lambda$ , on a :

$$L = N \frac{\lambda}{2}$$

Dans le cas du puits de potentiel on a :

$$L = 2a \text{ et } \lambda = \lambda_{DB} = \frac{h}{p}$$

On aura donc :

$$2a = \frac{N\hbar}{2p} \text{ soit } : p = N \frac{\hbar}{4a} \quad (2.20)$$

Et l'énergie  $E$  est telle que :

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} N^2 \left(\frac{\hbar}{4a}\right)^2 = \frac{1}{2m} N^2 \left(\frac{2\pi\hbar}{4a}\right)^2 \quad (2.21)$$

Soit

$$E = N^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} \quad (2.22)$$

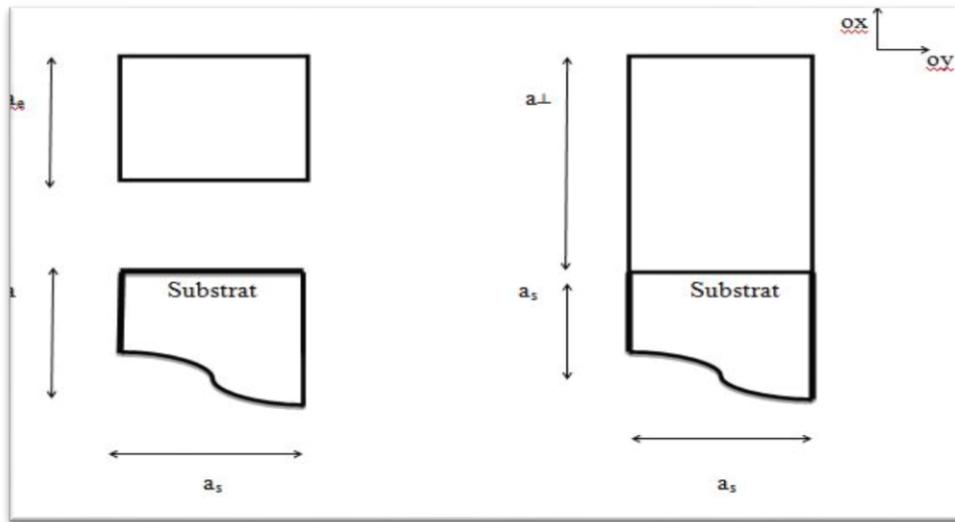
### II.3. Notion de contrainte

La succession des couches formant la structure des diodes lasers a puits quantique GaAs/Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As impose l'épitaxie de deux matériaux de paramètre de mailles différents GaAs et Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As constituant respectivement le puits et les barrières. Deux cas peuvent se présenter :

1. Si l'épaisseur de la couche active est supérieure à une certaine épaisseur appelée épaisseur critique, les déformations induites par le désaccord de maille sont telles que la génération de dislocations au sein de la couche GaAs devient énergiquement favorable, autorisant ainsi la relaxation de la contrainte. Cette situation est catastrophique quant aux propriétés électroniques du matériau.
2. Si l'épaisseur de la couche active reste inférieure critique, le paramètre de maille du matériau GaAs peut s'adapter à celui du Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As dans le plan de croissance comme le représente la figure II.8 grâce à une déformation élastique tétragonale de sa maille cristalline. La couche Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As, plus épaisse, reste non déformée.

De l'adaptation du paramètre de maille du Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As à celui de GaAs résulte une contrainte biaxiale dans le plan de l'interface de composantes  $\sigma_{yy}$  et  $\sigma_{zz}$ .

Dans les paragraphes qui suivent, il sera tout d'abord calculé la déformation de la couche GaAs épitaxie sur Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As. Il sera ensuite analysé l'influence de cette déformation sur les bandes de valence et de conduction de ce matériau et enfin l'énergie de la bande interdite du GaAs contraint sera déterminée [24].



**Figure 2.5.** Représentation de l'adaptation du paramètre de maille Du couche épitaxie sur un substrat

### II.3.1. Déformations et contraintes.

Comme nous l'avons évoqué auparavant, la croissance épitaxiale de couches de matériaux ayant des paramètres de maille différents induit une contrainte biaxiale dans le plan  $xoy$ .

Dans le plan de la couche active :

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_s - a_c}{a_c} \quad (2.23)$$

Dans la direction de croissance :

$$\varepsilon_{zz} = \frac{c_{\perp} - c_c}{c_c} \quad (2.24)$$

Où  $a_s$  désigné le paramètre de maille dans le plan du substrat,  $a_c$  celui du matériau. Si  $a_c > a_s$ , alors la couche épitaxie est en compression. Dans le cas contraire, la couche est en tension. Si  $a_c = a_s$ , la couche est en accord de maille. Si les déformations sont faibles, les composantes du tenseur de contraintes sont liées à celles du tenseur des déformations par la loi de Hooke [25].

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \end{bmatrix}$$

Si la surface est libre de contrainte, l'équilibre statique entraîne l'annulation du terme  $\sigma_{zz}$ , et :

$$\sigma_{zz} = 2c_{13}\varepsilon_{xx} + c_{33}\varepsilon_{zz} = 0 \quad (2.25)$$

On peut alors écrire la déformation suivant l'axe de croissance en fonction de la déformation dans le plan :

$$\varepsilon_{zz} = \frac{-2c_{13}}{c_{33}} \varepsilon_{xx} \quad (2.26)$$

Pour une contrainte biaxiale, la combinaison de relations et permet d'écrire les composantes

non nulles du tenseur des contraintes comme suit:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \left( c_{11} + c_{12} - \frac{2c_{13}^2}{c_{11}} \right) \varepsilon_{xx} \quad (2.27)$$

La nullité des  $\varepsilon_{ij}$  pour  $i \neq j$  entraîne :  $\sigma_{xy} = \sigma_{yz} = \sigma_{zx} = 0$ .

### II.3.2. Energie de déformation

L'énergie élastique stockée dans la couche contrainte par unité de volume est :

$$W = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} = \left( c_{11} + c_{12} - 2 \frac{c_{13}^2}{c_{11}} \right) \varepsilon_{//}^2 \quad (2.28)$$

Si l'épaisseur de la couche déposée est notée  $L$ , l'énergie de déformation élastique par unité de surface s'écrit :

$$E_{st} = WL = \left( C_{11} + C_{12} - 2 \frac{C_{12}^2}{C_{11}} \right) \varepsilon_{//}^2 \cdot L \quad (2.29)$$

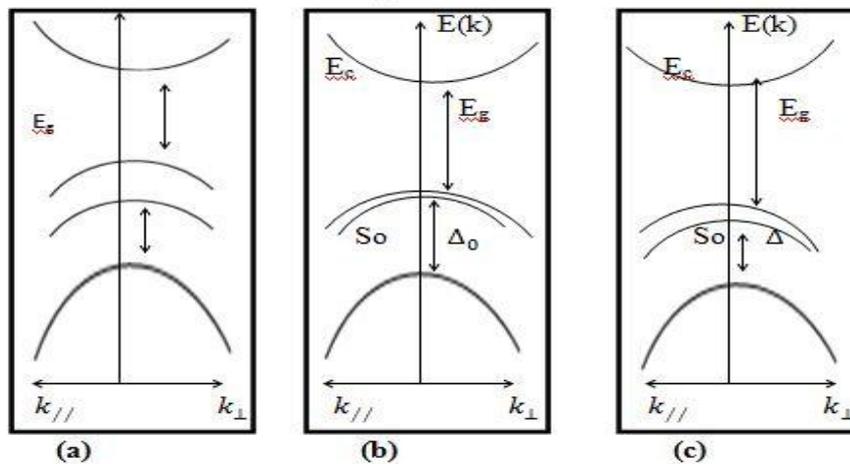
Cette quantité est une fonction linéaire croissant de l'épaisseur et elle est proportionnelle au carré de la déformation planaire  $\varepsilon_{//}$

### II.3.3. Calcul du décalage de bande du puits quantique $GaAs/Al_{1-x}Ga_xAs$

L'effet des contraintes sur la structure de la bande de  $Al_{1-x}Ga_xAs$  au voisinage du centre de la première zone de Brillouin pour un semi-conducteur III-V cubique est qualitativement illustré par la figure II-6 . Les directions sont définies comme suit

$k_{\perp}$  direction de croissance

$k_{//}$  plan de croissance .



**Figure 2.6.** Structure de bande pour un semi-conducteur cubique autour de  $K = 0$ , **a)** compression bi axiale **b)** non contraint **c)** tension bi axiale.

L'effet des contraintes sur les extrémités des bandes a été calculé suivant le modèle décrit par T.Y Wang et String. La moyenne pondérée des trois sous bandes trous lourds, trous légers et spin orbite est choisie comme référence des niveaux d'énergie  $E_{moy}$ . Les décalages d'énergies

des bandes  $E_{moy}$  et la bande de conduction  $E_c$  induits la composante hydrostatique de la contrainte sont donnés respectivement par :

$$\Delta E_{moy} = a_v \frac{\Delta V}{V} \quad (2.30)$$

$$\Delta E_c = a_c \frac{\Delta V}{V} \quad (2.31)$$

Où  $a_v$  et  $a_c$  sont les potentiels de déformation hydrostatique des bandes de conduction et de valence et  $\frac{\Delta V}{V}$  le volume fractionnel qui, pour des faibles contraintes dans la direction [100] est donnée par :

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} \quad (2.32)$$

La composante de cisaillement provoque la levée de dégénérescence au centre de la première zone de Brillouin, il en résulte un décalage d'énergie des sous bandes et des trous légers et trous lourds par rapport à l'énergie moyenne  $E_{moy}$ . Ce décalage d'énergie est donné par les relations suivantes :

$$\Delta E_{v2} = \left( \frac{\Delta_0}{3} - \frac{\delta E_{100}}{2} \right) \quad (2.33)$$

$$\Delta E_{v2} = -\frac{\Delta_0}{6} + \frac{\delta E_{100}}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \cdot \delta E_{100} + \frac{9}{4} (\delta E_{100})^2} \quad (2.34)$$

Où  $\Delta_0$  est le décalage d'énergie entre la bande de valence et la bande spin-orbite dans le matériau  $Al_{1-x}Ga_xAs$  non contraint [25].

Avec :

$$\delta E_{100} = 2b(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz}) \quad (2.35)$$

$b$  étant le potentiel de déformation de cisaillement pour une contrainte de symétrie tétragonale. Pour le cas non contraint, alors les expressions s'écrivent :

$$\Delta E_{v1} = \Delta E_{v2} = \frac{\Delta_0}{3} \quad (2.36)$$

Pour  $Al_{1-x}Ga_xAs$  tétragonal :

$$E_{vi} = E_{moy} + a_v \frac{\Delta V}{V} + \Delta E_{vi} \quad (2.37)$$

$$E_c = E_{moy} + \frac{\Delta_0}{3} + a_c \frac{\Delta V}{V} + E_{g0} \quad (2.38)$$

$E_{g0}$  est le gap non contraint est déterminé par :

$$E_{g0}(x) = 1.846 + 0.659x + 0.387x^2 \quad (2.39)$$

Pour la structure cubique :

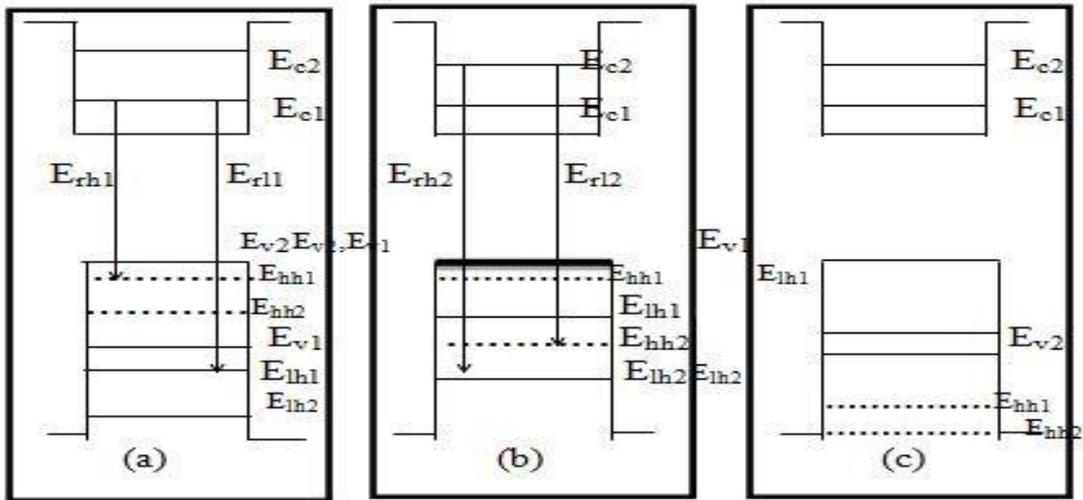
$$E_c = E_v + E_g \quad (2.40)$$

$$E_v = E_{moy} + \frac{\Delta_0}{3} \quad (2.41)$$

Donc le décalage d'énergie s'écrit :

$$\Delta E_{vi} = E_{vi} - E_v(InP) \quad (2.42)$$

$$\Delta E_c = E_c(InP) - E_c \quad (2.43)$$



**Figure 2.7.** La variation de la structure énergétique du puits suivant la concentration  $x$

La figure 2.7 montre La variation de la structure énergétique du puits suivant la concentration  $X$  avec :

1.  $E_{v1}$  = sommet de la bande des trous légers
1.  $E_{v2}$  = sommet de la bande des trous lourds
2.  $E_{hh1}$  = première niveau de quantification pour les trous lourds
3.  $E_{hh2}$  = deuxième niveau de quantification pour les trous lourds
4.  $E_{lh1}$  = première niveau de quantification pour les trous légers
5.  $E_{lh2}$  = deuxième niveau de quantification pour les trous légers
6.  $E_{c1}$  = première niveau de quantification pour les électrons
7.  $E_{c2}$  = deuxième niveau de quantification pour les électrons
8.  $E_{rhn}$  = énergie de recombinaison (électrons – trous lourds)
9.  $E_{rln}$  = énergie de recombinaison (électrons – trous légers)

## II.4. Calcul numérique du puits quantique GaAs / Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As

Les paramètres utilisés dans ce travail sont résumés dans le tableau II [26]

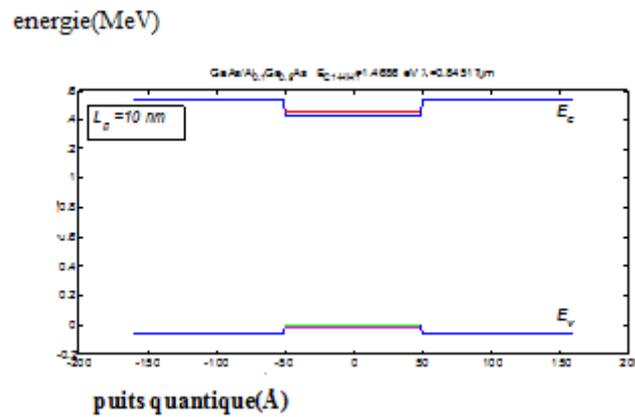
| Paramètre                      | GaAs                                    | AlAs   |
|--------------------------------|---|--------|
| $a_{1c}(\text{Å})$             | $5.6611 + 2.90 \times 10^{-5}(T - 300)$ |        |
| $E_g^\Gamma(\text{eV})$        | 1.519                                   | 3.099  |
| $\alpha(\Gamma)(\text{meV/K})$ | 0.5405                                  | 0.885  |
| $\beta(\Gamma)(\text{K})$      | 204                                     | 530    |
| $E_g^X(\text{eV})$             | 1.981                                   | 2.24   |
| $\alpha(X)(\text{meV/K})$      | 0.460                                   | 0.70   |
| $\beta(X)(\text{K})$           | 204                                     | 530    |
| $E_g^L(\text{eV})$             | 1.815                                   | 2.46   |
| $\alpha(L)(\text{meV/K})$      | 0.605                                   | 0.605  |
| $\beta(L)(\text{K})$           | 204                                     | 204    |
| $\Delta_{SO}(\text{eV})$       | 0.341                                   | 0.28   |
| $m_e^*(\Gamma)$                | 0.067                                   | 0.15   |
| $m_l^*(L)$                     | 1.9                                     | 1.32   |
| $m_t^*(L)$                     | 0.0754                                  | 0.15   |
| $m_{DOS}^*(L)$                 | 0.56                                    | 0.97   |
| $m_l^*(X)$                     | 1.3                                     | 0.22   |
| $m_t^*(X)$                     | 0.23                                    | 3.76   |
| $m_{DOS}^*(X)$                 | 0.85                                    | 0.82   |
| $\gamma_1$                     | 6.98                                    | 1.42   |
| $\gamma_2$                     | 2.06                                    | 0.28   |
| $\gamma_3$                     | 2.93                                    | 21.1   |
| $m_{SO}^*$                     | 0.172                                   | - 0.48 |
| $E_P(\text{eV})$               | 28.8                                    | - 1.33 |
| $F$                            | - 1.94                                  | - 5.64 |
| $VBO(\text{eV})$               | - 0.80                                  | - 2.47 |
| $a_c(\text{eV})$               | - 7.17                                  | - 2.3  |
| $a_v(\text{eV})$               | - 1.16                                  | - 3.4  |
| $b(\text{eV})$                 | - 2.0                                   | 1250   |
| $d(\text{eV})$                 | 4.8 -                                   | 534    |
| $c_{11}(\text{GPa})$           | 1221                                    | 542    |
| $c_{12}(\text{GPa})$           | 566                                     |        |
| $c_{44}(\text{GPa})$           | 600                                     |        |

La figure 2.8 représente le résultat de la simulation du puits quantique GaAs /  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  avec la fraction molaire  $X = 0.1$ , la largeur du puits  $L_p = 10 \text{ nm}$  et une concentration des porteurs de charge  $N = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

La figure 2.9 représente le résultat de la simulation du puits quantique GaAs /  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  avec la fraction molaire  $X = 0.1$ , la largeur du puits  $L_p = 20 \text{ nm}$  et une concentration des porteurs de charge  $N = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

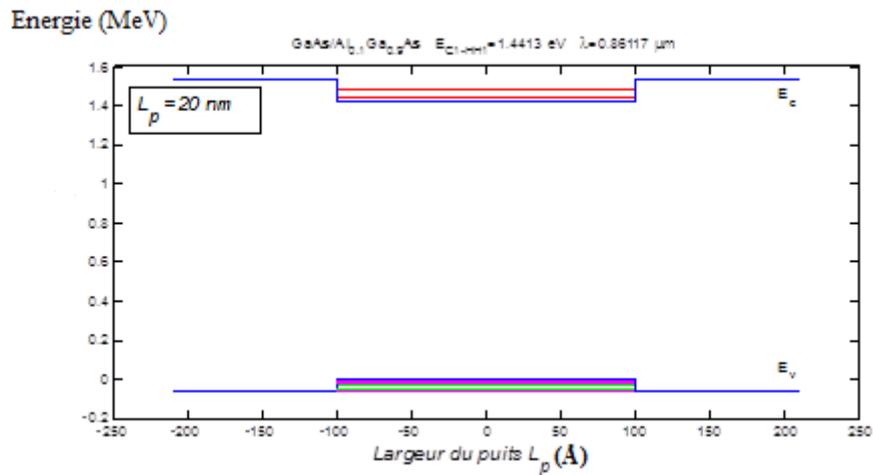
La figure 2.10 représente le résultat de la simulation du puits quantique GaAs /  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  avec la fraction molaire  $X = 0.1$ , la largeur du puits  $L_p = 30 \text{ nm}$  et une concentration des porteurs de charge  $N = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

Nous remarquons que lorsque la largeur du puits quantique augmente, les états quantiques dans le puits augmentent également.

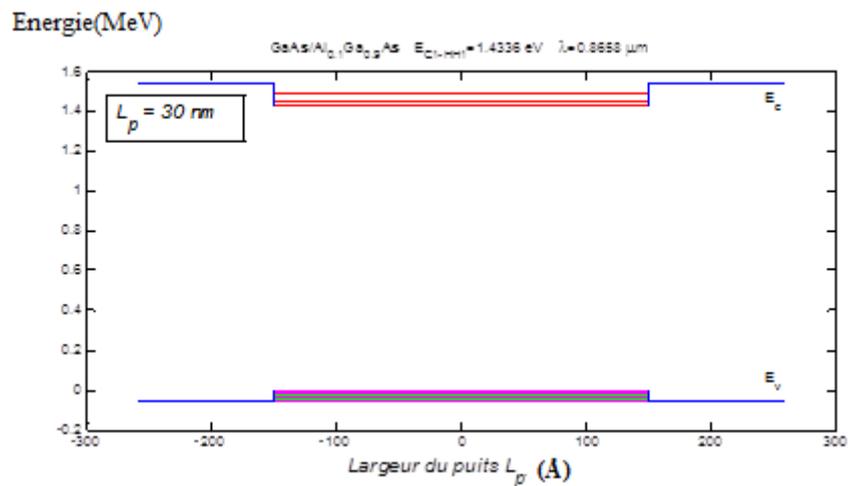


**Figure 2.8** .Puits quantique GaAs /  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  avec  $X = 0.1$ ,  $L_p = 10 \text{ nm}$  et  $N = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

puits quantique(Å)



**Figure 2.9.** Puits quantique GaAs /  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  avec  $X = 0.1$ ,  $L_p = 20 \text{ nm}$  et  $N = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$



**Figure 2.10.** Puits quantique GaAs /  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  avec  $X = 0.1$ ,  $L_p = 30 \text{ nm}$  et  $N = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

## II.5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons développé le calcul théorique et numérique indispensable du puits quantique GaAs/  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  pour différentes largeurs du puits et son influence sur les niveaux quantifiés, ainsi que la notion de la contrainte qui fait augmenter le gain optique comme nous allons le voir dans le quatrième chapitre.

## Chapitre III

### III.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous détaillerons le calcul analytique nécessaire des fonctions de distribution des électrons et des trous ainsi que la densité d'état à deux dimensions 2D qui sont d'une importance majeure dans le développement de la formule du gain optique du puits quantique en fonction de la longueur d'onde. Nous ferons également les calculs numériques de la densité d'état pour différentes largeurs du puits et fractions molaires pour le système GaAs/ Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

### III.2. La fonction de distribution

La mécanique statistique se propose d'expliquer les grandeurs macroscopiques (thermodynamiques) d'un système en partant de l'étude des lois de la mécanique appliquées aux particules composant ce système. La connaissance de l'état d'un système composé d'un très grand nombre de particules (de l'ordre de  $10^{23}$ ) nécessite la connaissance des coordonnées généralisées  $q_i$  et des quantités de mouvement (moments conjugués)  $p_i$  de chaque particule  $i$ . Or, la connaissance d'un aussi grand nombre de coordonnées et la résolution d'autant d'équations de mouvement est impossible. D'où, comme son nom l'indique, la mécanique statistique à recours à des moyens statistiques (probabilité, moyenne, écart quadratique...) pour calculer les propriétés du système. Pour un système se trouvant à l'équilibre à la température  $T$  (température absolue), la probabilité de trouver une particule ayant une énergie  $E$  est donnée par une fonction  $f(E)$  appelée fonction de distribution [27].

Dans la statistique classique : Toutes les particules sont considérées comme discernables, c'est-à-dire qu'on peut les différencier les unes des autres (on peut les numéroter en quelque sorte) et le nombre d'états d'énergie pouvant être occupés par les particules est très grand. En plus, chaque état d'énergie peut être occupé par un nombre important de particules.

Ce type de particules est décrit par la fonction de distribution de Boltzmann.

$$f_B(E) = e^{-\frac{E-\mu}{k_B T}} \quad (3.1)$$

Où  $k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$  est la constante de Boltzmann et  $\mu$  est une constante (à température donnée) appelée potentiel chimique elle dépend du nombre de particules.

Dans le cas de la mécanique quantique, les particules sont indiscernables et nous pouvons distinguer deux types de particules. On parle alors de statistiques quantiques.

Les bosons : Se sont des particules ayant un spin entier (0, 1, 2...), comme les photons par exemple, et on peut trouver plusieurs de ces particules dans le même état quantique.

Les bosons obéissent à la fonction de distribution de Bose-Einstein.

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} - 1} \quad (3.2)$$

Les fermions : Se sont des particules de spin demi-entier ( $\pm 1/2, \pm 3/2 \dots$ ), comme les électrons.

Dans le cas des fermions, on ne peut trouver qu'une particule par état quantique (principe d'exclusion de Pauli). Les fermions sont régis par la fonction de distribution de Fermi-Dirac.

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1} \quad (3.3)$$

Puisque nous intéressons au cas des électrons dans les semi-conducteurs, alors c'est cette fonction de distribution que nous allons utiliser.

Dans le domaine d'énergie où  $E - \mu \gg k_B T$  les distributions de Bose-Einstein et de Fermi-Dirac se ramènent à la distribution de Boltzmann.

C'est le cas des systèmes dits « dilués » où le nombre d'états quantiques de même énergie  $E$  est très grand par rapport au nombre de particules, dans ce cas, le principe d'exclusion de Pauli est négligeable [28].

### III.2. Fonction de distribution des électrons et des trous

Dans les chapitres qui suivront, nous utiliserons pour les électrons la fonction de distribution de Fermi-Dirac ou fonction de distribution des électrons, que nous noterons :

$$f_e(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1} \quad (3.4)$$

Au zéro absolu ( $T = 0 \text{ K}$ ) :

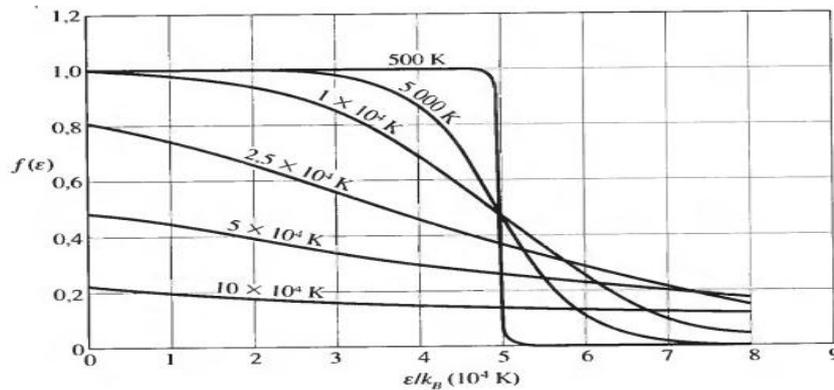
La probabilité que l'état d'énergie  $E > \mu$  soit occupé par un électron est nulle  $f(E > \mu) = 0$ .

La probabilité que l'état d'énergie  $E < \mu$  soit occupé par un électron est égale à  $f(E < \mu) = 1$ .

Ceci veut dire que tous les états d'énergie inférieure à  $\mu$  sont occupés à  $T = 0 \text{ K}$ . Donc, le potentiel chimique au zéro absolu est égal au niveau de Fermi.

$$\mu(0\text{K}) = E_F$$

La fonction de distribution des électrons est représentée dans figure 2.1.



**Figure 3.1.** Fonction de distribution de Fermi-Dirac pour différentes températures.

On remarque que pour des températures allant jusqu'à 10000 K le potentiel chimique diffère très peu de sa valeur au zéro absolu ( $\mu$  est constant) [29]. Dans ce domaine de température on peut poser

$$\mu = \mu(0) = E_F \text{ Et}$$

$$f_e(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} \quad (3.5)$$

Calculer la probabilité pour qu'un état d'énergie  $E$  soit occupé par un trou revient à calculer la probabilité pour que cet état ne soit pas occupé par un électron. D'où la fonction de distribution des trous :

$$f_p(E) = 1 - f_e(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} \quad (3.6)$$

### III.3.Densité d'états

La plus simple description de l'interaction de la lumière et les électrons libres dans un semi-conducteur est basée sur la relation d'Einstein, qui relie les taux d'absorption, d'émission spontanée comme nous avons vu dans le deuxième chapitre. Bien que les relation d'Einstein étaient à l'origine destinées pour un système atomique dans l'espace libre avec deux niveaux d'énergie, ces relations ont été généralisées à un spectre d'énergie et sont utiles pour les semi-conducteurs avec une distribution d'états dans la bande de valence et dans la bande de conduction [30].

La densité d'état peut être trouvée à partir du nombre d'états dans l'espace des  $k$ , compris entre  $k$  et  $k + dk$ . Donc, pour expliciter cette densité d'état, nous devons d'abord développer une méthode pour compter les états. Pour le cas massif, nous savons que le vecteur  $k_{xyz}$  balaye une sphère de rayon  $k$ . Dans un puits quantique, un vecteur tridimensionnel  $k_{xy}$  balaye une sphère de rayon  $k$  à l'intérieur d'un plan. En général, un vecteur  $mD$  balaye un volume ( $mD$ )  $V_k$  de rayon  $k$ . Pour trouver le nombre total  $N_s$  d'états contenus dans ce volume, nous divisons tout simplement le volume total  $V_k$  par le volume de l'espace  $k$  occupé un vecteur d'état  $\vec{k}$  singulier.

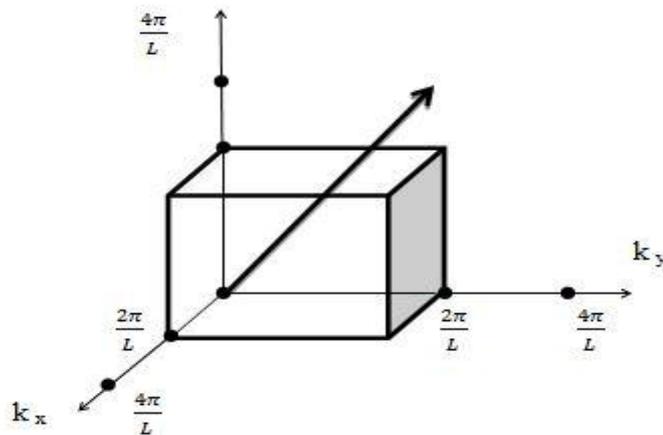


Figure 3.2. Volume occupé par un état dans l'espace des  $k$

Ainsi, dans un matériau massif, un état occupe un cube de volume  $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$  et dans un puits quantique, un état occupe un carré de surface  $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$ . Plus généralement, un état singulier occupe un volume  $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^m$ . Ainsi, l'expression du nombre total d'états  $N_s$  (en négligeant la dégénérescence de spin) est :

$$N_s = \frac{V_k}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^m} \text{ avec } m = 1,2,3 \quad (3.7)$$

L'expression spécifique de  $V_k$  pour chaque valeur de  $m$  est illustrée dans le tableau 3.1 [31].

**Tableau 3.1.** Densité d'état pour – Un matériau massif –Un puits quantique –Une ligne quantique

| M<br>Dimension | $V_k$                | $\frac{dv_k}{dk}$ | $\rho(k)$                                      | $\rho(k)$   |
|----------------|----------------------|-------------------|--|---|
| 1D             | $2k$                 | $2$               | $\frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{l_y l_z}\right)$ | $\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\rho(k)}{2\sqrt{E}}$ |
| 2D             | $\pi k^2$            | $2\pi k$          | $\frac{k}{\pi} \left(\frac{1}{l_p}\right)$     | $\frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \left(\frac{1}{l_p}\right)$                        |
| 3D             | $\frac{4}{3}\pi k^3$ | $4\pi k^2$        | $\frac{k^2}{2\pi^2}$                           | $\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{\sqrt{E}}{4\pi^2}$   |

Si la densité d'états dans l'espace de  $k$  est connue à travers tout l'espace  $k$ , alors nous sommes capables d'obtenir le nombre total d'états  $N_s$  contenu dans le volume  $V_k$  de l'espace  $k$  simplement par l'intégration de cette densité d'état dans ce volume. Mathématiquement, nous pouvons établir que.

$$\int_{V_k} \rho(k) dk = \frac{N_s}{V} \quad (3.8)$$

Où  $\rho(k)$  est défini comme la densité d'état de dimension  $m$ . Le volume du cristal  $V$  apparaît tel que l'intégration de  $\rho(k)$  donne le nombre total d'états par unité de volume. L'équation devient ainsi une définition de la densité d'états. A partir des équations et nous obtenons

$$\rho(k) \equiv \frac{1}{V} \frac{dN_s}{dk} = \frac{L^m}{V} \frac{1}{(2\pi)^m} \frac{dV_k}{dk} \quad (3.9)$$

Le tableau 3.1 montre l'expression spécifique de  $\rho(k)$  pour un matériau massif (3D), un puits quantique (2D) et un matériau quantique linéaire (1D). Il est intéressant de noter que  $\rho(k)$  augmente avec  $k$  comme la surface de la sphère, le périmètre du cercle et le bout de la ligne dans les 3 cas respectivement. Pour éviter une confusion en comparant avec d'autres sources, nous avons inclus un aide-mémoire explicite dans le tableau. Souvent l'énergie de l'électron a un plus grande importance que son vecteur  $\vec{k}$ . Nous pouvons transformer la densité d'état en une fonction de l'énergie [32].

$$\rho(k)dE = \rho(k)dk \rightarrow \rho(E) = \frac{\rho(k)}{dE/dk} \quad (3.10)$$

Les expressions pour  $\rho(E)$  sont incluses dans le tableau 3.1 pour des bandes paraboliques.

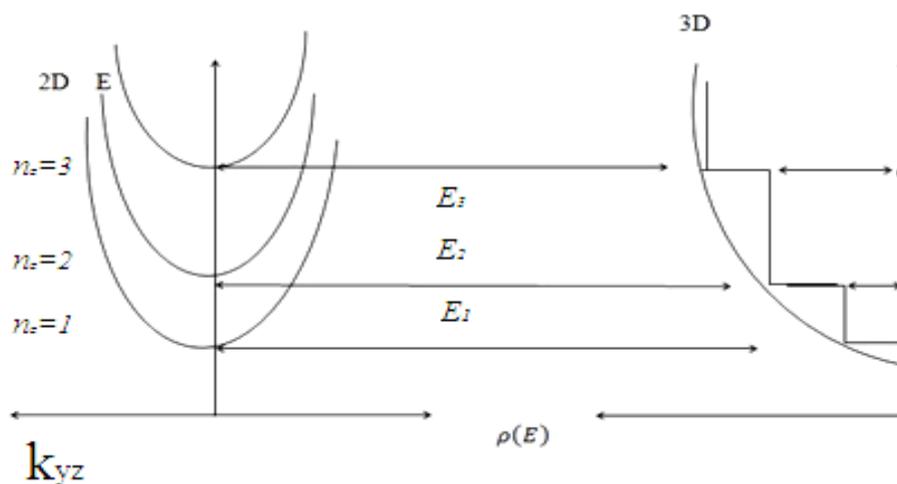


Figure 3.3: Variation de la densité d'état en fonction de l'énergie.

### III.3.1 Densité réduite

La règle d'or de fermi donne le taux de la transition pour une seule paire d'états de la bande de conduction et de la bande de valence. Nous savons que beaucoup d'états  $k$  existent dans les

bandes de conduction et de valence. Pour trouver le taux de la transition totale, nous devons additionner les taux de transition permises sur toutes les paires, c'est-à-dire les transitions verticales dans l'espace  $k$ . Nous pouvons alors additionner sur tous les états électroniques  $N_s$

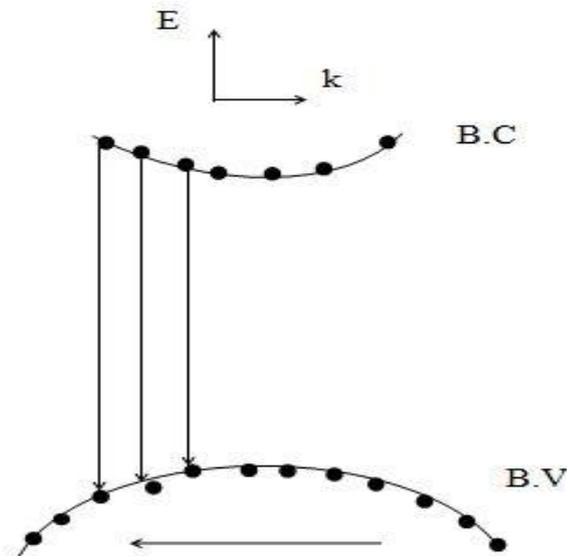
entre les bandes comme l'illustre la figure 3.3. Le taux de la transition totale par unité de volume (une unité  $s^{-1} \text{ cm}^{-1}$ ) est donné par :

$$W_{c \rightarrow v} = \frac{1}{v} \int W_{e \rightarrow h} dN_s = \frac{1}{v} \int W_{e \rightarrow h} \frac{1}{v} \frac{dN_s}{dk} dk \quad (3.11)$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \int |H'_{eh}|^2 \delta(E_{eh} - \hbar\omega) \rho(k) dk$$

Où  $E_{eh} = E_e - E_h$  et  $H'$  est l'Hamiltonien.

Nous avons introduit l'énergie de transition  $E_{eh}$  dans la fonction delta. Nous avons aussi converti à une intégration dans l'espace  $k$  en utilisant la densité d'état additionné sur les  $k$  transition verticales [33].



**Figure 3.4.** Transition verticales dans l'espace de vecteur  $\vec{k}$  de la bande conduction vers la bande de valence

En utilisant le changement de variable dans la fonction delta,  $X = E_{eh} - \hbar\omega$ , l'expression devient :

$$W_{c \rightarrow v} = \frac{2\pi}{\hbar} \int |H'_{eh}|^2 \delta(x) \rho(k) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{eh}|^2 \left[ \frac{\rho(k)}{dE_{eh}/dk} \right]_{E_{eh}=\hbar\omega} \quad (3.12)$$

Le terme entre crochets est défini comme densité d'états réduite. Si nous supposons que les bandes d'énergie sont sous forme paraboliques, alors le terme entre crochets peut être simplifié en utilisant l'équation de l'énergie en fonction du vecteur d'onde  $\vec{k}$  [34].

$$E_e(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k_c^2}{2m_c}, \quad E_h(k) = E_v - \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_v} \quad (3.13)$$

$$E_g = E_c - E_v \quad (3.14)$$

On aura

$$E_{eh} = E_e - E_h = \left[ E_c + \frac{\hbar^2 k_c^2}{2m_c} \right] - \left[ E_v - \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_v} \right] = E_g + \frac{\hbar^2 k_c^2}{2m_c} + \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_v} \quad (3.15)$$

$$\frac{dE_{eh}}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m_r}, \quad \text{ou} \quad \frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_v}$$

L'énergie de gap  $E_g = E_c - E_v$ , est bien définie comme le gap entre deux sous-bandes d'énergie dans le puits quantique et correspond aux bords du matériau massif. Avec l'usage de la masse réduite  $m_r$ , nous pouvons définir la densité d'état réduite par unité d'énergie que s'écrit

$$w_{c \rightarrow v} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{eh}|^2 \rho_{red}(E_{eh} - E'_g), \quad \text{ou} \quad E_{eh} = \hbar\omega \quad (3.16)$$

L'expression de la densité d'états réduite  $\rho_{red}(E)$  est donnée dans le tableau.

Nous remplaçons  $m$  par  $m_r$  et  $E$  par  $E_{eh} - E'_g$  dans le tableau 3.1.

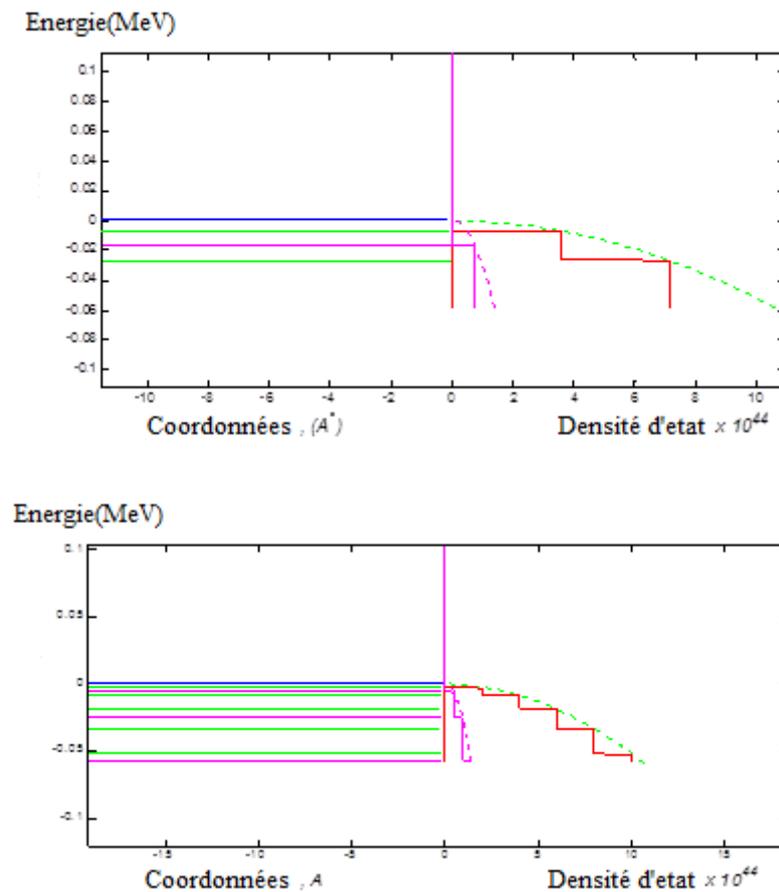
Pour les bandes paraboliques, les énergies individuelles  $E_e$  et  $E_h$  sont reliées avec l'énergie de transition  $E_{eh}$  par :

$$E_e = E_c + \frac{m_r}{m_c} (E_{eh} - E_g) \quad (3.17)$$

$$E_e = E_v - \frac{m_r}{m_c} (E_{eh} - E_g) \quad (3.18)$$

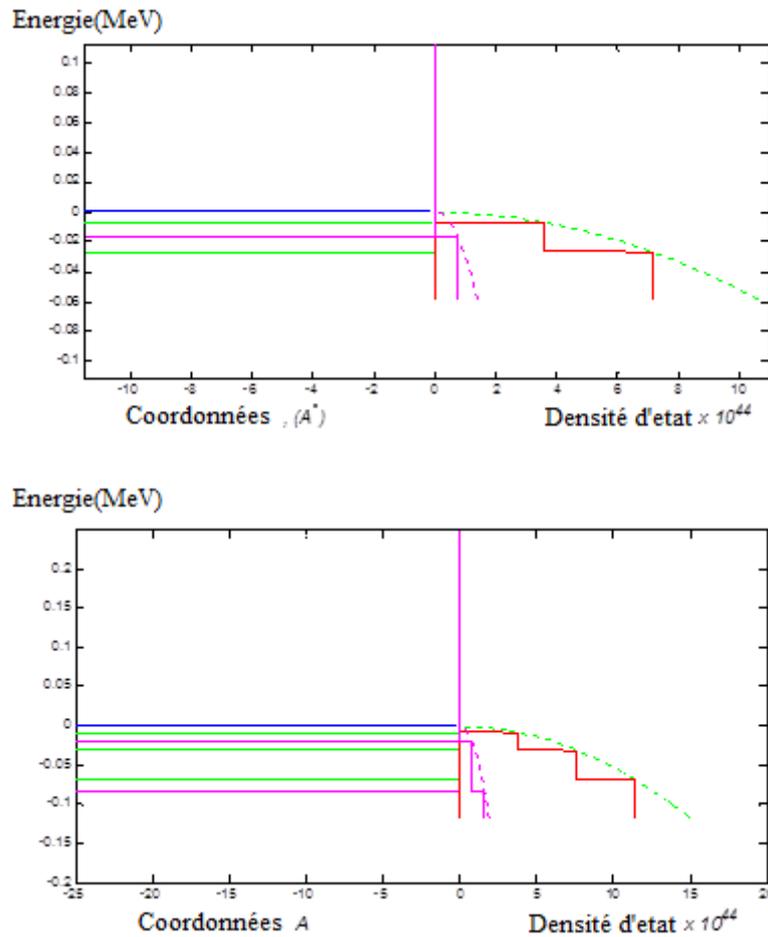
### III.4. Calcul numérique de la densité d'état du système GaAs /Al<sub>(x)</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>As

Notre système est un puits quantique GaAs /Al<sub>(x)</sub>Ga<sub>(1-x)</sub>As de largeur de puits  $L_p = 10 \text{ nm}$ ,  $20 \text{ nm}$  et  $30 \text{ nm}$ , avec une fraction molaire de  $x = 0.1$ . Nous avons voulu voir l'influence de la largeur de puits sur la densité d'états, les résultats comme ils sont illustrés sur la figure III-5 montrent clairement que la densité d'états augmente proportionnellement avec la largeur du puits.



**Figure 3.5.** La densité d'états du puits quantique GaAs/ Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As pour  $X = 0.1$  et (a)  $L_p = 10 \text{ nm}$  et (b)  $L_p = 20 \text{ nm}$  en fonction de l'énergie

Maintenant nous changeons la fraction molaire  $x = 0.1$  à  $0.2$  tout en fixant  $L_p = 0.1$ , les résultats montrent également que la densité d'états augmente avec la fraction molaire figure III.6.



**Figure 3.6.** La densité d'états du puits quantique GaAs/  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  pour  $L_p = 10 \text{ nm}$  et (a)  $X = 0.1$  et (b)  $X = 0.2$  en fonction de l'énergie

### III.5. Conclusion

Nous avons calculé la densité d'état du puits quantique GaAs/  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  pour les largeurs du puits respectivement  $L_p = 10 \text{ nm}$ ,  $L_p = 20 \text{ nm}$  et  $L_p = 30 \text{ nm}$  et les fractions molaires  $X = 0.1$  et  $X = 0.2$  en fonction de l'énergie, les résultats ont montré que la densité d'états augmente avec la fraction molaire et la largeur du puits quantique.

## Chapitre IV

### IV.1. Introduction

Ce chapitre est consacré entièrement à l'étude du gain optique ou nous développons la formule du gain optique à partir des formules des fonctions de distribution de Fermi-Dirac, la densité d'état dans les deux bandes et les transitions optiques déjà trouvés dans les chapitres précédents, la formule sera ensuite utilisée dans les calculs numériques pour plusieurs largeurs du puits quantique afin d'observer son influence sur la variation du gain.

### IV.2. Gain optique

L'équation 4.1 nous permet de quantifier le nombre de transition vers le bas se produisant par seconde et par unité de volume en réponse à un flux de photons incidents dans un mode optique donné. Chaque transition vers le bas génère un nouveau photon, tandis qu'une transition vers le haut en absorbe. Si le nombre de transitions vers le bas par unité de temps excède le nombre des autres transitions, il va y avoir une nette génération de photons et le gain optique peut être réalisé [35].

Si nous considérons une onde électromagnétique se propageant dans la direction  $z$ , alors l'augmentation nette du flux de photons par unité de longueur suivant  $z$  peut être écrite

$$\frac{d\Phi}{dz} = W_{c \rightarrow v} - W_{v \rightarrow c} \quad (4.1)$$

Où  $\Phi$  est le flux de photons (en unités  $s^{-1} \cdot cm^{-2}$ ). Le gain optique du matériau est généralement défini comme l'incrément fractionnaire en photons par unité de longueur, ou simplement.

$$g = \frac{1}{\Phi} \frac{d\Phi}{dz} = \frac{W_{c \rightarrow v} - W_{v \rightarrow c}}{\Phi} \quad (4.2)$$

Le gain est ainsi une fonction de l'énergie des photons. Pour un matériau massif, l'équation 4.2 nous permet d'établir tout ce qui est nécessaire pour estimer le gain spectral (en considérant un matériau non dopé seulement les transitions bande-a-bande sont importantes).

Dans un matériau à puits quantique, la situation est plus complexe à cause du nombre important des niveaux quantifiés à partir desquels se produisent les transitions. Dans ce cas, la relation précédente pour le gain correspond au gain produit dans chaque transition de sous-bandes dans le puits, le gain total pour l'énergie d'un photon particulier est obtenu en sommant sur tous les niveaux :

$$g(\hbar\omega) = \sum_{i=1}^M g_i(\hbar\omega) \quad M = 1, 2, \dots \dots \dots \quad (4.3)$$

La quantité qui nous intéresse particulièrement est appelée gain optique du matériau et est le paramètre qui permettra de définir le seuil laser. L'expression la plus générale du gain est donc

$$g_i(E_{21}) = \frac{r_{21st}}{v_g P(E_{21})} \quad (4.4)$$

Cette expression peut être appliquée :

1. Au semi-conducteur massif

Dans ce cas, les densités d'états sont données par les expressions paraboliques habituelles.

$$\rho_c(E) = \frac{1}{\pi^2} \left[ \frac{2m_c}{\hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} \quad (4.5)$$

$$\rho_v(E) = \frac{1}{\pi^2} \left[ \frac{2m_v}{\hbar^2} \right]^{\frac{3}{2}} \sqrt{E} \quad (4.6)$$

Au puits quantique.

La densité d'états est comme nous l'avons vu une fonction en marche d'escalier et s'exprime en fonction de la largeur  $L_p$  du puits

$$\rho(E) = \frac{m_e}{L_p \pi \hbar^2} \sum_{n=1}^M H(E - E_n) \quad (4.7)$$

Où  $H$  est la fonction de Heaviside

$$H(E - E_n) = \begin{cases} 1 & \text{si } E \geq E_n \\ 0 & \text{si } E < E_n \end{cases} \quad (4.8)$$

### IV.2.1. Gain optique dans les puits quantiques

Nous nous intéressons à présent à la quantité  $g(E) = -\alpha(E)$ . En effet, ce paramètre est la grandeur essentielle du fonctionnement des diodes laser, puisqu'il faudra non seulement qu'il soit positif pour que le milieu soit amplificateur de photons, mais encore qu'il atteigne une valeur telle que les pertes de la cavité soient compensées pour que l'émission laser apparaisse [36].

Plusieurs auteurs ont proposé des méthodes de détermination du gain optique des structures à puits quantique que nous rappellerons ci-dessus (En supposant vérifiée la règle de sélection des  $k$ ). Il existe aussi un autre modèle original de calcul du gain optique des structures à puits quantique sans la règle de sélection des  $k$ .

#### IV.2.1.1 Expression du gain sans conservation du vecteur d'onde

Dans le cas où la règle de conservation des  $k$  n'a plus à être satisfaite par suite de la présence dans le puits quantique d'impuretés ou de défauts, toutes les transitions d'énergie  $E_{tr}$  deviennent permises dans le plan des sous-bandes  $(k_y, k_z)$ , tandis que dans la direction perpendiculaire  $k_x$  (direction de quantification) la règle de sélection  $\Delta n = 0$  doit être appliquée. Compte tenu de cette dernière, le gain total d'une structure à puits quantique s'écrit :

$$g(E_{tr}) = \frac{n}{c} \sum_{n=1}^M \int_{E_{cn}}^{E_{tr} + E_{vn}} B_{tr} \cdot \rho_c \cdot \rho_v \cdot [f_c(E) - f_v(E - E_{tr})] dE \quad (4.9)$$

Où la condition  $E_{tr} > E_{cn} - E_{vn}$  doit être satisfaite.

$$\text{et } \rho_c = \frac{m_c}{\pi \hbar^2 L_p} \quad , \quad \rho_v = \frac{m_v}{\pi \hbar^2 L_p}$$

La probabilité de transition est définie par la relation :

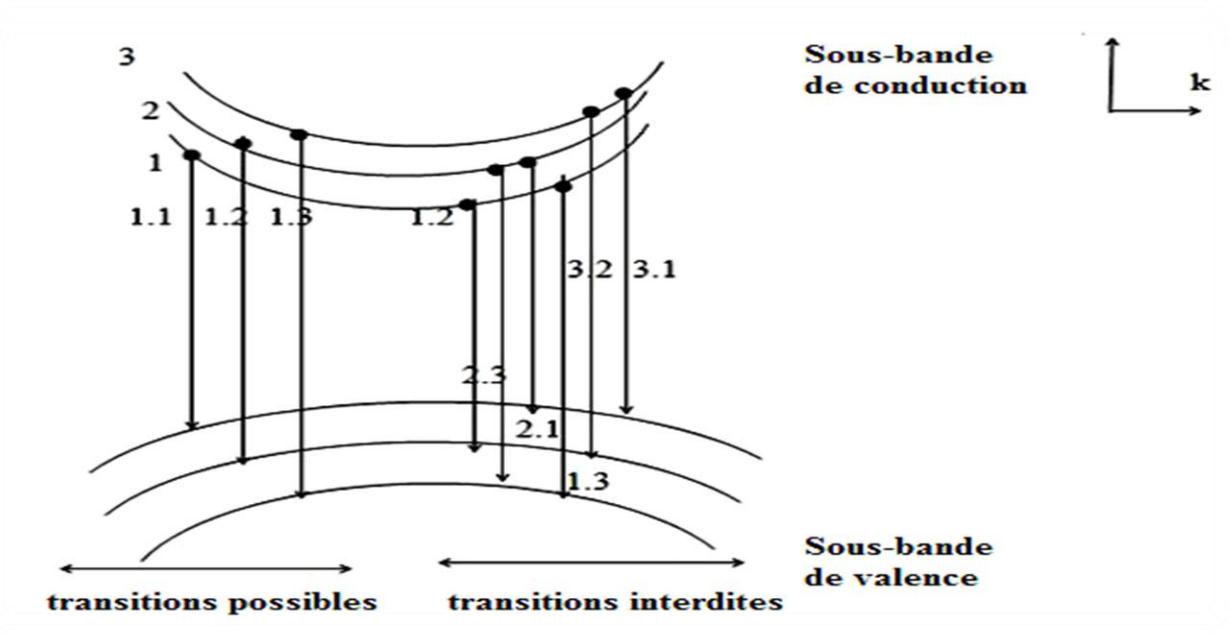
$$B_{if}(\hbar\omega) = \frac{\pi e^2 \hbar}{m_0^2 \varepsilon_0 n^2 (E_f - E_i)} |M_p|^2 \quad (4.10)$$

$|M_p|^2$  est l'élément de matrice optique pour les transitions électrons-trous dans le mode TE.

### IV.2.1.2 Expression du gain avec conservation du vecteur d'onde

Si la règle de sélection est satisfaite, le fait de fixer l'énergie de transition  $E_{tr}$  détermine le niveau initial  $E_c$  et le niveau final  $E_v$ . En effet, le vecteur d'onde doit être conservé, il n'existe qu'une seule paire d'états  $(E_c, E_v)$  qui satisfait à la fois  $E_{tr} = E_c - E_v$  et  $k_c = k_v$ .

Dans ces conditions, il est montré qu'on peut substituer au schéma habituel à deux bandes un schéma à une seule bande caractérisée par une masse réduite  $m_r$ .



**Figure 4.1.** Transition entre les sous-bandes de conduction et les sous-bandes de valence d'un puits quantique

Dans un puits quantique avec  $M$  niveaux quantifiés, la densité d'état s'écrit [37] :

$$\rho_r(E) = \frac{m_r}{\pi \hbar^2 L_p} \sum_{n=1}^M H(E - E_n) \quad (4.11)$$

Le gain s'écrit alors tout simplement

$$g_n(E_{tr}) = \frac{n}{c} B_{tr} \rho_r(E_{tr}) [f_c(E_c) - f_v(E_v)] \quad (4.12)$$

L'expression finale détaillée du gain optique pour un puits quantique s'écrit donc

$$g(\omega) = \frac{\omega}{\pi \hbar^2 L_p} \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon} \frac{m_c m_v}{m_c + m_v}} \sum_{n=1}^M |M_p|^2 \cdot (f_c - f_v) \quad (4.13)$$

Où  $\omega$  est la fréquence angulaire,  $n$  l'indice de réfraction,  $\varepsilon$  la permittivité,  $\mu$  la perméabilité et les fonctions de distribution de Fermi-Dirac pour les bandes de conduction et de valence (voir chapitre III) qui s'écrivent :

$$f_c(E) = \frac{1}{\left[ 1 + \exp\left( \frac{E_{cn} + \frac{m_r}{m_e}(E - E_g) - E_{FC}}{k_b T} \right) \right]} \quad (4.14)$$

$$f_v(E) = \frac{1}{\left[ 1 + \exp\left( \frac{E_{vhn} + \frac{m_r}{m_{hh}}(E - E_g) - E_{FV}}{k_b T} \right) \right]} \quad (4.15)$$

$m_{hh}$  est la masse effective des trous lourds,  $m_e$  la masse effective des électrons et  $m_r$  la masse réduite. L'élément de la matrice optique est donnée par :

$$|M_p|^2 = \frac{3}{4} \left[ 1 + \frac{E_{cn}}{\frac{m_r}{m_c}(E - E_g)} \right] |M|^2 \quad (4.16)$$

Pour les semi-conducteurs III.V :

$$|M|^2 = \frac{m_0 E_g (E_g + \Delta)}{12 m_e (E_g + \frac{2\Delta}{3})} \quad (4.17)$$

Où  $E_g$  est l'énergie de la bande interdite,  $\Delta$  l'énergie de l'interaction spin-orbite,  $m_0$  la masse de l'électron dans le vide et  $m_e$  la masse effective de l'électron.

$$|M|^2 = 1.33 \cdot m_0 \cdot E_g$$

En utilisant l'expression finale détaillée du gain optique précédente, nous avons supposé qu'un électron dans une bande de conduction reste stable dans un état s'il ne rentre pas en interaction avec des photons [38].

En réalité, les interactions probables avec les phonons et d'autres électrons dispersent l'électron. Ainsi, la durée de vie d'un état donné n'est pas infinie. Il est actuellement admis qu'approximativement à chaque  $0.1 \text{ ps}$ , un électron ou un trou saute sur un nouvel état, et par conséquent nous obtenons un étalement d'énergie pour chaque état égal à :

$$\Delta E = \frac{\hbar}{w_{in}} = 0.7 \text{ meV} \text{ de chaque côté de l'énergie.}$$

Ceci signifie qu'un photon incident avec une énergie n'entrera pas en interaction seulement avec des transitions données par  $E_{ev} = \hbar\omega$ , mais aussi avec des transitions à l'intérieur d'un étalement d'énergie  $E_{ev} = \hbar\omega \pm \Delta E$  [39].

Pour inclure l'élargissement spectral de chaque transition, nous convolons l'expression du gain optique avec une certaine fonction  $L(E_{tr})$  donnée par l'expression suivante

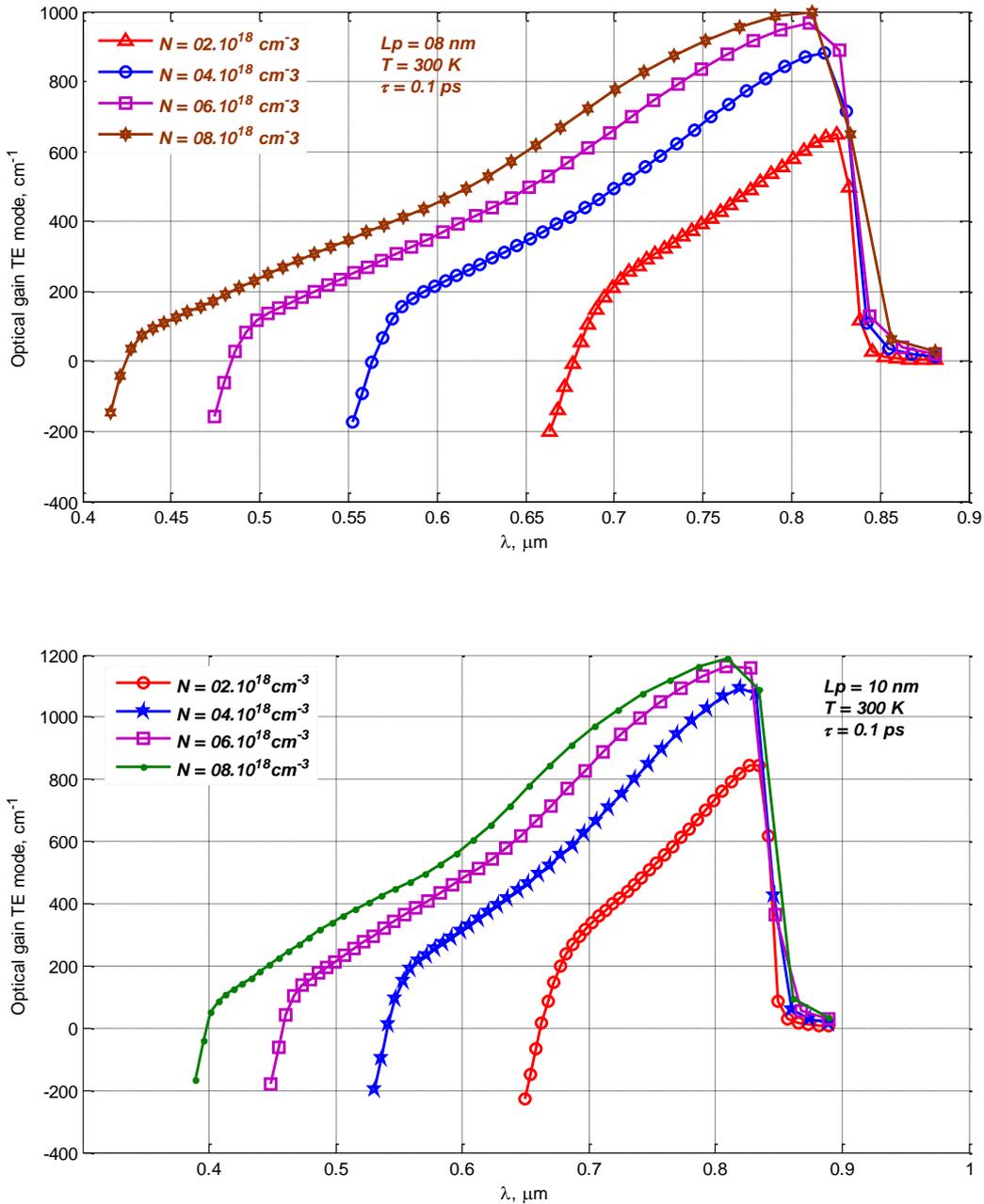
$$L(E_{eh}) = \frac{1}{\pi} \frac{\hbar/w_{in}}{(E_{eh} - \hbar\omega)^2 + (\hbar/w_{in})^2} \quad (4.18)$$

$$G(\hbar\omega) = \int g(\hbar\omega) \cdot L(E_{eh}) dE_{eh} \quad (4.19)$$

Où  $g(\hbar\omega)$  est donné par l'expression 4.19,  $L(E_{eh})$  est une fonction de forme Lorentzienne normalisée et  $\hbar/w_{in}$  est le temps de relaxation intra bande ou simplement la durée de vie de chaque état.  $G(\hbar\omega)$  est maintenant le gain lissé spectralement. L'utilisation de la fonction Lorentzienne est communément utilisée. Plus récemment, cependant, des fonctions plus sophistiquées ont été établies. Plusieurs chercheurs ont suggéré que l'état régresse initialement plus long. La fonction correspondante a été extraite par ces chercheurs et plus tard approximée. Chinn et Asada ont aussi fait une analyse détaillée de la dispersion intrabande dans des puits quantiques, arrivant à une fonction asymétrique qui tend plus vite qu'une Lorentzienne du côté de plus faible énergie de transition [40].

### IV.2.2 Spectre de gain

Sur la figure IV.2 nous observons l'évolution du gain optique pour différentes concentration des porteurs de charge  $N$  pour des largeurs de puits  $L_p = 08$  nm et  $10$  nm, nous observons que le gain maximum augmente avec l'augmentation de la concentration des porteurs de charge avec toutefois une diminution légère de la longueur d'onde correspondante.

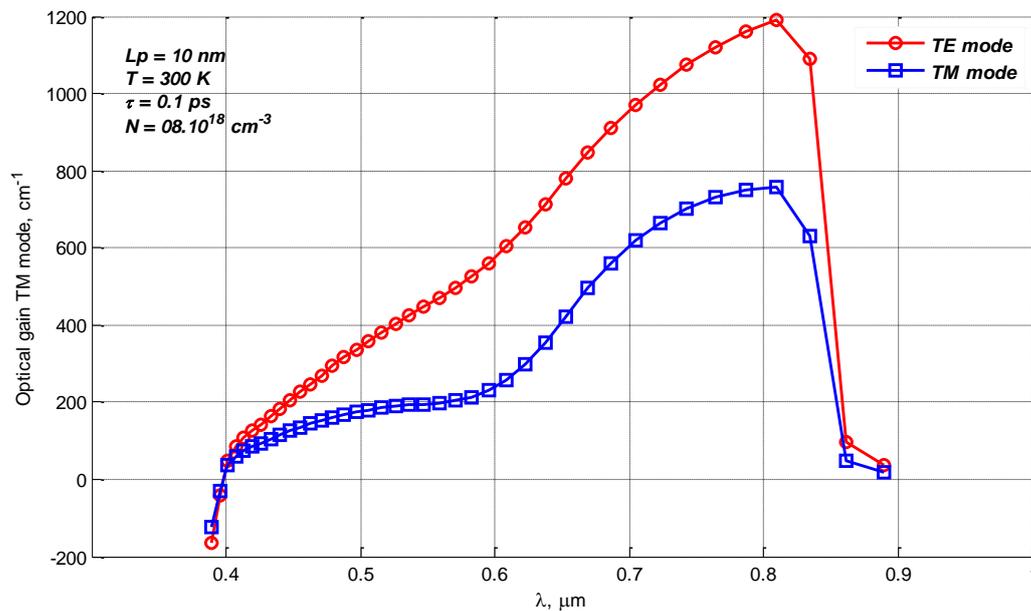


**Figure 4.2.** Spectre de gain pour différentes densité de porteurs à épaisseurs de puits quantiques

a)  $L_p = 8$  nm b)  $L_p = 10$  nm à température ambiante  $T = 300$  K

L'on remarque également que le maximum du gain augmente lorsque la largeur du puits augmente ; des résultats similaires ont été obtenus par d'autres auteurs.

La figure 4.3 montre que le gain optique de la polarisation TE est plus grand que celui de la polarisation TM ce qui signifie que la transition entre les électrons et les trous lourds sont majoritaires par rapport à la transition entre les électrons et les trous légers car la contribution des transitions (e---hh) dans la polarisation TM est négligeable au centre de la zone de Brillouin ( $k=0$ ).



**Figure 4.3.** Gain optique pour TM et TE mode

### IV.3 Conclusion

Dans ce chapitre, une étude du gain optique du puits quantique GaAs/AlGaAs a été faite afin de déterminer sa longueur d'onde de fonctionnement, deux valeurs de la largeur du puits  $L_p=8 \text{ nm}$  et  $10 \text{ nm}$  ont été utilisées pour observer son influence sur le gain, nous avons remarqué que lorsque la largeur du puits augmente le gain croît mais il n'a aucune influence sur sa longueur d'onde, et que le gain maximum augmente avec l'augmentation de la concentration des porteurs de charge avec toutefois une diminution légère de la longueur d'onde correspondante.

## Conclusion Générale

Dans ce travail, nous avons fait une étude des propriétés optiques du puits quantique d'un système de couche mince formé du matériau binaire GaAs comme puits et le matériau ternaire  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  comme barrière dans le but d'une éventuelle utilisation dans la technologie du laser.

Après avoir rappelé les principes de base du laser, les propriétés d'émission dans un puits quantique dont nous nous sommes intéressés plus particulièrement à l'émission stimulée et les expressions générales des coefficients d'émission et d'absorption, ainsi que la formulation de la probabilité de transition.

Nous avons résolu l'équation de Schrödinger numériquement et analytiquement pour le cas d'un puits quantique GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

Par ailleurs, nous avons présenté la fonction de distribution de Fermi-Dirac des électrons et des trous dans la bande de conduction et la bande de valence respectivement ainsi que la densité d'état pour deux dimensions. Et voir l'influence de la largeur du puits et la fraction molaire sur la quantification de l'énergie et la densité d'état dans le puits.

Nous avons étudié par la suite les pseudo-niveaux de Fermi dans les bandes de conduction et de valence afin de déterminer le gain optique en fonction de la longueur d'onde qui valide l'utilisation du puits quantique GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  en tant qu'un laser.

---

## Bibliographie

- [1] S.L. Chuang, *Physics of Optoelectronic Devices*, 2nd ed., Wiley, New York, 2009.
- [2] M.A. Parker, *Physics of Optoelectronics*, CRC Press, New York, 2004.
- [3] K.Y. Lau, N. Bar-Chaim, I. Ury, Ch. Harder, A. Yariv, *Appl. Phys. Lett.* 43 (1983)
- [4] H. Dery, G. Eisenstein, *IEEE J. Quantum Electron.* 40 (2004) 1398.
- [5] J. Lee, R. Oszwaldowski, C. Gothgen, I. Zutic, *Phys. Rev. B* 85 (2012) 045314.
- [6] M. Holub, J. Shin, D. Saha, P. Bhattacharya, *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007) 146603.
- [7] S. Peter, Jr. Zory., "Quantum well lasers", Academic Press. Inc (1993)
- [8] J.Piprek, "Optoelectronic devices advanced simulation and analysis", Springer Science+Business Media, Inc (2005)
- [9] S. Peter, Jr. Zory., "Quantum well lasers", Academic Press. Inc (1993)
- [10] A. Das, J. Heo, M. Jankowski, W. Guo, L. Zhang, H. Deng, P. Bhattacharya, *Phys. Rev. Lett.* 107 (2011) 066405.
- [11] D. Bajoni, P. Senellart, E. Wertz, I. Sagnes, A. Miard, A. Lemaître, J. Bloch, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 047401.
- [12] R. Dändliker, *les lasers, principe et fonctionnement*, Lausanne, Presses, Polytechniques et universitaires ROMANDES, 1996.
- [13] M.S. Vasconcelos, P.W. Mauriz, F.F. de Medeiros, E.L. Albuquerque, *Phys. Rev. B* 76 (2007) 165117.
- [14] H. Deng, G. Weihs, D. Snoke, J. Bloch, Y. Yamamoto, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 100 (2003) 15318.
- [15] D. Saha, D. Basu, P. Bhattacharya, *Phys. Rev. B* 82 (2010) 205309.
- [16] J. Rudolph, S. Dohrmann, D. Hagele, M. Oestreich, W. Stolz, *Appl. Phys. Lett.* 87 (2005) 241117.
- [17] C.H. Li, G. Kioseoglou, O.M.J. van't Erve, M.E. Ware, D. Gammon, R.M. Stroud, B.T. Jonker, R. Mallory, M. Yasar, A. Petrou, *Appl. Phys. Lett.* 86 (2005) 132503.
- [18] L.Dettwiller, *Les lasers et leurs applications*, Paris, ellipses, 1998.
- [19] Z.I. Alferov, *Rev. Mod. Phys.* 73 (2001) 767.
- [20] V.M. Ustinov, A.E. Zhukov, A.Yu. Egorov, N.A. Maleev, *Quantum Dot Lasers*, Oxford University Press, New York, 2003.
- [21] D. Bimberg, M. Grundmann, N.N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*, Wiley, New York, 1999.
- [22] P. Bhattacharya, *Semiconductor Optoelectronic Devices*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1996.
- [23] G. Tandoi, C.N. Ironside, J.H. Marsh, A.C. Bryce, *IEEE J. Quantum Electron.* 48 (2012) 318.
- [24] S.D. Wu, L. Wan, *J. Appl. Phys.* 110 (2011) 123109.
- [25] N. Hossain, S.J. Sweeney, S. Rogowsky, R. Ostendorf, J. Wagner, S. Liebich, M. Zimprich, K. Volz, B. Kunert, W. Stolz, *Electronics Lett.* 47 (2011) 931.
- [26] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan, *journal of applied physics* volume 89, number,2001
- [27] S. Peter, Jr. Zory., "Quantum well lasers", Academic Press. Inc (1993)
- [28] H. Zhao, G. Liu, X.-H. Li, G.S. Huang, J.D. Poplawsky, S.T. Penn, V. Dierolf, N. Tansu, *Appl. Phys. Lett.* 95 (2009) 061104.
- [29] H.P. Zhao, G.Y. Liu, X.H. Li, R.A. Arif, G.S. Huang, J.D. Poplawsky, S. Tafon Penn, V. Dierolf, N. Tansu, *IET Optoelectronics* 3 (2009) 283.
- [30] B. Zhu and K. Huang, *Phys. Rev. B* 36, 8102-8108 (1987).
- [31] [S. Adachi, John Wiley & Sons Ltd (2009)
- [32] H. Zhao, G. Liu, J. Zhang, J.D. Poplawsky, V. Dierolf, N. Tansu, *Optics Express* 19

- 
- (2011) A991.
- [33] H. Zhao, N. Tansu, *J. Appl. Phys.* 107 (2010) 113110.
  - [34] A. Ramirez-Morales, J.C. Martínez-Orozco, I. Rodríguez-Vargas, *J. Appl. Phys.* 110 (2011) 103715.
  - [35] R. Maciejko, *Optoélectronique*, Montréal, Presse internationale Polytechnique, 2002.
  - [36] B.S. Ooi, K. McIlvaney, M.W. Street, A.S. Helmy, S.G. Ayling, A.C. Bryce, J.H. Marsh, J.S. Roberts, *IEEE J. Quantum Electron.* 33 (1997) 1784.
  - [37] N. Tansu, D. Zhou, L.J. Mawst, *IEEE Photon. Technol. Lett.* 12 (2000) 603.
  - [38] E.P. O'Reilly, J.S. Gustavsson, P. Westbergh, A. Haglund, A. Larsson, A. Joel, *IEEE J. Quantum Electron.* 46 (2010) 506.
  - [39] N. Tansu, J.Y. Yeh, L.J. Mawst, *Appl. Phys. Lett.* 82 (2003) 4038.
  - [40] G. Tsvid, J. Kirch, L.J. Mawst, M. Kanskar, J. Cai, R.A. Arif, N. Tansu, P.M. Smowton, P. Blood, *IEEE J. Quantum Electron.* 44 (2008) 732.

## Résumé

Dans ce travail, nous avons fait une étude des propriétés optiques du puits quantique GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As et voir s'il est utilisable dans la technologie du laser.

Nous avons résolu l'équation de Schrödinger numériquement et analytiquement pour ce puits quantique. Par ailleurs, nous avons détaillé la fonction de distribution de Fermi-Dirac des électrons et des trous dans la bande de conduction et la bande de valence respectivement ainsi que la densité d'état. Et voir l'influence de la largeur du puits et la fraction molaire sur la quantification de l'énergie et la densité d'état dans le puits. Nous avons étudié par la suite les pseudo-niveaux de Fermi dans les bandes de conduction et de valence afin de déterminer le gain optique en fonction de la longueur d'onde qui valide l'utilisation du puits quantique GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As en tant que laser.

## Abstract

In this work, we have studied the optical properties of a GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum well for potential use in lasers technology. We have solved analytically and numerically the Schrödinger equation for this quantum well. We have detailed the Fermi-Dirac distribution function of electrons and holes in the conduction and valence bands respectively as well as the density of states. The influence of the width of quantum well and the composition on the energy quantification and the density of states have numerically been investigated. We have also studied the pseudo Fermi levels in both valence and conduction bands for determination of the optical gain as a function of the wavelength.

## ملخص

في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص الضوئية لبئر كموني كمي GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As و التأكد من استعماله في تكنولوجيا الليزر. قمنا

ايضا بحل معادلة شرودينجر تحليليا ورقميا للبئر الكموني الكمي GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

شرحنا الدالة التوزيعية لفرمي ديراك للالكترونات والثقوب في شريطي النقل والتكافؤ وأيضا كثافة الحالة. ورؤية تأثير عرض البئر

الكموني عدد المولات في تكميم الطاقة وكثافة الحالة داخل البئر الكموني.

درسنا اشباه مستويات فرمي في شريطي النقل والتكافؤ لإيجاد الريح الضوئي الذي يشير الى امكانية استعمال البئر الكموني الكمي

GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As كليزر.