



Université Mohamed Khider de Biskra
Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie
Département des Sciences de la Matière

MÉMOIRE DE MASTER

Domaine Sciences de la Matière

Physique

Spécialité : Physique Energétique et Energies Renouvelables

Réf. : Entrez la référence du document

Présenté et soutenu par :

ZEBAIDI Samiha

Le :16-6-2025

Modélisation et optimisation des lasers à puits quantiques à base de AlGaAs/GaAs

Jury :

MEFTAH	Amjad	Professeur	Université Mohamed Khider de Biskra	Présidente
LAZNEK	Samira	MCA	Université Mohamed Khider de Biskra	Encadreur
ATTAFI	Djemaa	MCB	Université Mohamed Khider de Biskra	Examinatrice

Année universitaire 2024/2025

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à exprimer ma profonde gratitude à **Dr. Laznek Samira** pour avoir accepté de m'encadrer dans le cadre de cette étude. Je la remercie sincèrement pour son implication, son accompagnement bienveillant, ainsi que pour son soutien constant et ses encouragements tout au long de ce travail.

Mes remerciements s'adressent également à **Professeur Meftah Amjad** et à **Dr. ATTAFI Djemaa**, pour avoir accepté d'évaluer mon mémoire et de faire partie du jury de soutenance.

Enfin, je souhaite remercier chaleureusement tous mes collègues pour leur aide, leurs échanges constructifs et leur soutien, qui ont largement contribué à la réussite de ce travail.

DEDICACE

بسم الله الرحمن الرحيم
اللهم لك الحمد كما ينبغي لجلال وجهك وعظيم سلطانك،
لك الحمد أن وفقتني لإتمام هذا العمل،
ولك الحمد على نعمك التي لا تعد ولا تحصى،
...أسألك يا رب أن تجعله خالصاً لوجهك، وسبباً للخير والتوفيق في حياتي

إلى من كانا بعد الله سبب وجودي،
إلى من غرسا في نفسي حب العلم والعمل،
إلى نبض قلبي وسند حياتي،
إلى أبي وأمي الحبيبين، تاج رأسي ونور دربي،
...أهديكما ثمرة هذا الجهد، عرفانا لجميلكما الذي لا يرد

وإلى من كانت لي أستاذة وموجهة وملهمة،
إلى من لم تبخل بعلمها ونصحها وتشجيعها،
أستاذتي الفاضلة لزنك سميرة،
...لك مني كل التقدير والعرفان، فكنت من أجمل من قابلت في مسيرتي العلمية

إلى إخوتي وأخواتي الأعزاء الذين كانوا السند والرفقة الطيبة
حمزة، رشيد، عبد الرحمان، مرباحة، فتيحة، نعيمة، ونبيلة،
...شكراً لكم على كل لحظة دعم ومحبة، وعلى وجودكم الثمين في حياتي

وإلى من لا أراه مجرد ابن أخت، بل أخاً بكل ما تحمله الكلمة من معنى،
إلى رفيق درب في كل المواقف،

أنور برباص،
لك مني كل المحبة والامتنان، فأنت من أقرب الناس إلى قلبي،
...أهديك جزءاً كبيراً من هذا الإنجاز، فلك فيه بصمة لا تنسى

وإلى بنات أختي العزيزات، زهرات قلبي
حنان، آمال، سعاد، وبسمة،
...أهديكن دعائي بالمستقبل الزاهر، والفرح الدائم

وإلى أولاد إخوتي الأحباء، نور العائلة وبهجتها
زكريا، أيوب، أسامة، أمير، أصيل، سولاف، سما، وميار،
...أسأل الله أن يحفظكم ويسدد خطاكم، وأن يرزقكم السعادة والنجاح

وإلى صديقاتي الغاليات، رفيقات درب والمواقف الصادقة
ياسمين، عفاف، فاطمة الزهراء، ولبنى،
...شكراً لقلوبكن النقية، وأرواحكن الدافئة، ورفقتكن التي لا تنسى

...إلى كل من ساندني بكلمة، بدعاء، بابتسامة
...أهدي هذا العمل المتواضع، عربون حب ووفاء وامتنان

Abstract

This work presents the modeling and analysis of a multiple quantum well (MQW) laser based on AlGaAs/GaAs structures, focusing on the impact of barrier depth, quantum well thickness, and the introduction of a GeSn layer in the active region. The simulated structure includes thin sequential layers composed of electrical contacts, SiO₂ insulation layers, doped AlGaAs layers, and an active region containing GaAs quantum wells. Simulations performed using SILVACO show that reducing the aluminum mole fraction in the barriers enhances optical gain and spontaneous emission. Additionally, varying the quantum well thickness significantly affects optical properties: thinner wells improve carrier confinement, while thicker wells lead to spectral redshifts and slight gain enhancements. Finally, the insertion of a GeSn intermediate layer in the active region improves energy level alignment and optical confinement, as illustrated by light intensity profile, indicating an overall improvement in the simulated device performance.

Keys words: AlGaAs/GaAs, GeSn, MQW, laser, optical gain, spontaneous emission.

Résumé

Ce travail présente la modélisation et l'analyse d'un laser à puits quantiques multiples (MQW) basé sur des structures AlGaAs/GaAs, en mettant l'accent sur l'influence de la profondeur des barrières, de l'épaisseur des puits quantiques et de l'introduction d'une couche de GeSn dans la région active. La structure simulée se compose de couches minces successives comprenant des contacts électriques, des couches d'isolation en SiO₂, des couches d'AlGaAs dopées, ainsi qu'une région active contenant des puits quantiques en GaAs. Les simulations effectuées à l'aide du logiciel SILVACO montrent que la réduction de la fraction molaire d'aluminium dans les barrières améliore le gain optique et l'émission spontanée. De plus, la variation de l'épaisseur des puits quantiques influence de manière significative les propriétés optiques : des puits plus fins améliorent le confinement des porteurs, tandis que des puits plus épais entraînent des décalages spectraux vers le rouge et une légère augmentation du gain. Enfin, l'insertion d'une couche intermédiaire de GeSn dans la région active améliore l'alignement des niveaux d'énergie et le confinement optique, comme l'illustre le profil d'intensité lumineuse, ce qui indique une amélioration globale des performances du dispositif simulé.

Mots clés : AlGaAs/GaAs, GeSn, MQW, laser, gain optique, émission spontanée.

Liste des figures

Figure I.1	Formation des bandes d'énergie pour les électrons d'atomes de Si arrangés en mailles cristallines de type diamant.	05
Figure I.2	Représentation des bandes d'énergie.	06
Figure I.3	Jonction PN à l'équilibre thermodynamique	07
Figure I.4	Structure énergétique d'un semi-conducteur à gap direct	10
Figure I.5	Mailles cristallographiques d'une structure Zinc Blende.	12
Figure I.6	Première zone Brillouin d'un cristal Zinc Blende.	12
Figure I.7	Energie de bande interdite des principaux binaires et ternaies III-V en fonction de leur paramètre de maille [10,11].	14
Figure I.8	Structure de bande d'énergie pour le GaAs et le AlAs à 300K.	15
Figure I.9	Energie de différentes vallées de la bande de conduction par rapport au point Γ de la bande de valence en fonction du taux d'aluminium [15].	16
Figure I.10	Discontinuité de la structure de bande de conduction entre AlGaAs/GaAs.	18
Figure I.11	Schéma montrant l'évolution de la structure de bande par incorporation d'étain dans la maille cristalline de germanium.	21
Figure I.12	Représentation schématique de l'alignement de bande entre deux semi-conducteurs [27].	22
Figure I.13	a/ Schéma de la croissance de couches GeSn par épitaxie (RP-CVD), b/ Empilement avec Ge _{0.85} Sn _{0.15} épitaxié selon un gradient de concentration en étain sur wafer de Si de 200 mm de diamètre (effet miroir), c/ Coupe TEM du même empilement [30].	23
Figure I.14	Alignement des bandes de valence et de conduction dans l'hétérojonction greffée monocristalline Al _{0.3} Ga _{0.7} As / Ge _{0.853} Sn _{0.147} de type p-i-n, déterminé par spectroscopie de photoélectrons X (XPS) et photoluminescence [31].	24
Figure II.1	Oscillateur laser 3D	30
Figure II.2	Différents types d'interaction rayonnement-matière	31
Figure II.3	Schémas énergétiques, ne retenant que les deux niveaux E1 et E2 de la transition laser [1].	32
Figure II.4	Transitions d'énergie d'un atome : a) absorption, b) émission spontanée, c) émission stimulée.	32
Figure II.5	Modèle d'Einstein pour le processus radiatif d'absorption	33
Figure II.6	Modèle d'Einstein pour le processus émission spontanée.	34
Figure II.7	Modèle d'Einstein pour le processus émission stimulée.	35
Figure II.8	Illustration et aperçu des paramètres introduits pour décrire les transitions atomiques à plusieurs niveaux d'énergies.	36
Figure II.9	a) Population normale : il y a plus d'atomes dans les niveaux inférieurs. b) Inversion de population : il y a plus d'atomes dans les niveaux supérieurs.	38
Figure II.10	Schéma d'un laser au dioxyde de carbone CO ₂ [14].	41

Figure II.11	Structure interne d'une diode laser. [15]	42
Figure II.12	Schéma générique d'une diode laser à cavité Fabry-Pérot [19].	43
Figure II.13	Schéma générique d'une diode laser à double hétérojonction [21].	44
Figure II.14	Structure d'un laser à homojonction PN [22].	45
Figure II.15	Schéma structurel d'une diode laser à cavité verticale émettant par la surface VCSEL [23].	46
Figure III.1	Description des entrées et des sorties dans ATLAS [2].	50
Figure III.2	Architecture générale d'un programme de simulation des dispositifs optoélectroniques dans ATLAS.	51
Figure III.3	Principe de simulation des dispositifs optoélectroniques dans ATLAS.	52
Figure III.4	Schéma de la structure laser simulée avec puits quantiques multiples (MQWs) dans la région active : (a) AlGaAs–GaAs–AlGaAs, et (b) AlGaAs–GaAs–GeSn–GaAs–AlGaAs.	58
Figure III.5	Diagramme énergétique de la structure laser simulée.	59
Figure III.6	Le maillage de la structure.	60
Figure III.7	La distribution de l'intensité lumineuse le long du laser simulée.	60
Figure III.8	Caractéristiques de l'émission spontanée en polarisation transverse électrique (TE) et transverse magnétique (TM), en fonction de la longueur d'onde, pour différentes fractions molaires d'aluminium dans les barrières AlGaAs : (a) $x = 0.3$, (b) $x = 0.4$, (c) $x = 0.5$.	62
Figure III.9	Comparaison entre les Caractéristiques de l'émission spontanée en polarisation transverse électrique (TE) a) et transverse magnétique (TM) b) en fonction de la longueur d'onde, pour différentes fractions molaires d'aluminium dans les barrières AlGaAs : $x = 0.3$, $x = 0.4$, $x = 0.5$.	63
Figure III.10	Caractéristiques courant-tension (I–V) pour différentes fractions molaires d'aluminium dans les barrières de la structure laser simulée.	64
Figure III.11	Gain optique pour différentes fractions molaires d'aluminium dans les barrières de la structure laser simulée.	65
Figure III.12	Distribution de l'intensité lumineuse le long du laser à puits quantiques multiples (MQW) pour une largeur de puits $L_w=1\text{nm}$.	66
Figure III.13	Distribution de l'intensité lumineuse le long du laser à puits quantiques multiples (MQW) pour une largeur de puits $L_w=2\text{nm}$.	67
Figure III.14	Distribution de l'intensité lumineuse le long du laser à puits quantiques multiples (MQW) pour une largeur de puits $L_w=3\text{nm}$.	67
Figure III.15	Émission spontanée en fonction de la longueur d'onde pour différentes épaisseurs des puits quantiques dans la structure laser MQW AlGaAs/GaAs.	68
Figure III.16	Gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes épaisseurs des puits quantiques dans la structure laser MQW AlGaAs/GaAs.	69
Figure III.17	Caractéristiques I–V pour différentes épaisseurs des puits quantiques dans la structure laser MQW AlGaAs/GaAs.	70

Figure III.18	Diagramme schématique de la structure laser simulée comportant deux puits quantiques (2-QWs) dans la région active, pour une configuration à double hétérojonction de type AlGaAs/GaAs/GeSn/GaAs/AlGaAs.	71
Figure III.19	Diagramme énergétique de la structure laser simulée comportant deux puits quantiques (2-QWs) dans la région active, pour une configuration à double hétérojonction de type AlGaAs/GaAs/GeSn/GaAs/AlGaAs.	72
Figure III.20	Distribution de l'intensité lumineuse le long du laser MQWs AlGaAs/GaAs/GeSn/GaAs/AlGaAs.	73
Figure III.21	Effet d'introduction d'une couche de GeSn dans la structure laser MQWs AlGaAs/GaAs sur le gain optique.	74
Figure III.22	Effet de l'introduction d'une couche de GeSn la structure laser simulée sur le gain optique.	75
Figure III.23	Effet d'introduction d'une couche de GeSn dans la structure laser simulée sur l'émission spontanée.	76

Liste des tableaux

Tableau I.1	Points et directions de la première zone Brillouin d'un cristal Zinc Blende.	13
Tableau I.2	Propriétés physiques du AlAs et GaAs à T=300K.	17
Tableau I.3	Propriétés cristallines et électroniques de l'Al _x Ga _{1-x} As déduites à partir de celles du GaAs.	18
Tableau III.1	Les modèles physiques et les paramètres laser utilisés dans la simulation [7].	53
Tableau III.2	Les modèles physiques utilisés dans la simulation [8 ,9].	54
Tableau III.3	Discretisation spatiale et composition des matériaux de la structure laser MQW simulée dans SILVACO.	57
Tableau III.4	Propriétés électroniques comparées de GaAs, Al _{0.3} Ga _{0.7} As et Ge _{1-x} Sn _x (x = 0.08–0.10).[10]	58
Tableau III.5	Émission spontanée en fonction de la longueur d'onde pour différentes épaisseurs des puits quantiques dans la structure laser MQW AlGaAs/GaAs.	68

TABLE DES MATIERES

REMERCIEMENTS.....	I
DEDICACE.....	II
Abstract.....	III
Résumé	III
Liste des figures	IV
Liste des tableaux	VI
Introduction générale.....	1
Bibliographie.....	3
CHAPITRE I Généralités sur les semi-conducteurs	
I.1. Introduction.....	4
I.2. Physique des semi-conducteurs	4
I.2.1. Structure cristalline et bandes d'énergie :.....	4
I.2.2. Isolant, semi-conducteur, conducteur	5
I.2.3. La jonction PN	6
I.2.4. Emission spontanée dans un semi-conducteur à gap direct :	9
I.2.5. Recombinaison Auger	10
I.2.6. Recombination Shockley Read Hall- SRH-	11
I.3. Matériaux utilisés.....	11
I.3.1. Propriétés du composé GaAs et de l'alliage AlGaAs.....	11
I.3.1.1. Structure cristallographique.....	11
I.3.1.2. Propriétés électroniques.....	13
I.4. Matériau GeSn	19
I.4.1. L'alliage GeSn : L'alliage GeSn : un matériau à gap accordable	19
I.4.2. Structure et fabrication des composants GeSn.....	21
I.5. Processus de fabrication de l'hétérostructure $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As} / \text{Ge}_{0.87}\text{Sn}_{0.1}$	23
I.6. Bibliographie	25
CHAPITRE II Les Lasers	
II.1. Introduction	27
II.1.1. Un bref historique sur les lasers à semi-conducteurs	27
II.2. Définition du laser	28

II.3. Les composants d'un laser.....	29
II.3.1. Milieu actif (ou milieu amplificateur)	29
II.3.2. Source de pompage (ou pompe énergétique)	29
II.3.3. Cavit� optique (ou r�sonateur)	29
II.4. Th�orie des lasers � semi-conducteurs	30
II.4. 1. Interaction rayonnement-mati�re.....	30
II.4. 2. Conditions d'inversion de population.....	36
II.4. 3. Th�orie du courant de seuil.....	38
II.5. Les diff�rents types de lasers :	40
II.5.1 Laser � gaz	40
II.5.2. Laser � colorant.....	41
II.5.3. Lasers � semi-conducteurs	42
II.6. Application des lasers	46
II.7. Bibliographie	46
CHAPITRE III R�sultats et Discussions	
III.1. Introduction	49
III.2. Le logiciel.....	49
III.2. 1. Le mod�le k�p.....	51
III.2. 2. Sp�cification des mat�riaux et des mod�les.....	52
III.2. 2.1. Sp�cification des propri�t�s des mat�riaux	52
III.2. 3. La sp�cification Mesh.....	55
III.3. Repr�sentation de structure simul�e.....	56
III.4. Mod�lisation de la structure laser simul�e	61
III.4.1. �tude de l'influence de la fraction molaire d'aluminium dans les barri�res sur les propri�t�s optiques et �lectriques de la structure laser simul�e.....	61
III.4.1.1. Effet de la fraction molaire d'aluminium dans les barri�res sur l'�mission spontan�e de la structure laser simul�e.....	61
III.4.1.2. Effet de la fraction molaire d'aluminium des barri�res sur les caract�ristiques I-V de la structure laser simul�e.....	64
III.4.1.3. Impact de la fraction molaire d'aluminium dans les barri�res sur le gain optique de la structure laser simul�e.....	64
III.4.2. Influence de l'�paisseur des puits quantiques sur les propri�t�s optiques et �lectriques de la structure laser simul�e.....	66

III.4.2.1. Influence de l'épaisseur des puits quantiques sur les propriétés optiques et électriques de la structure laser simulée.....	66
III.4.2.2. Effet de la variation d'épaisseur des puits quantiques sur l'émission spontanée de la structure laser simulée.....	67
III.4.2.3. Effet de la variation d'épaisseur des puits quantiques sur le gain optique de la structure laser simulée.....	69
III.4.3. Étude de l'impact de l'intégration d'une couche de $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ dans la zone active de la structure laser simulée sur ses propriétés optiques et électriques.....	71
III.4.3.1. Effet d'introduction d'une couche de $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ dans la structure laser simulée sur les caractéristiques courant-tension.....	73
III.4.3.2. Effet d'introduction d'une couche de $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ dans la structure laser simulée sur le gain optique.....	74
III.4.3.3. Effet de l'introduction d'une couche de $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ dans la structure laser simulée sur l'émission spontanée.....	75
III.5. Conclusion	76
III .6. Bibliographie	77
Conclusion Générale	78

Introduction générale

Introduction générale

Au cours des dernières décennies, les progrès rapides dans le domaine de l'optoélectronique ont ouvert la voie à une multitude d'applications reposant sur la conversion efficace de l'énergie électrique en rayonnement lumineux cohérent. Parmi les dispositifs clés dans ce domaine figurent les lasers à semi-conducteurs, qui sont devenus indispensables dans des secteurs variés tels que les télécommunications à haut débit, le stockage optique, les systèmes de détection, les imageries médicales, ou encore les capteurs environnementaux [3].

Parmi les architectures les plus performantes de ces lasers, les lasers à puits quantiques (Quantum Well Lasers) se distinguent par leur capacité à exploiter les effets de confinement quantique des porteurs de charge. En réduisant la dimensionnalité du système dans la direction de croissance, les puits quantiques permettent une densité d'état électronique modifiée, une réduction du courant seuil, une efficacité différentielle accrue et une meilleure stabilité thermique [2]. Ces propriétés sont particulièrement bénéfiques dans les applications exigeant des performances stables et élevées à des températures variables.

Parmi les matériaux les plus utilisés pour la fabrication de lasers à puits quantiques figurent le GaAs (Arséniure de Gallium) et ses alliages, notamment l'AlGaAs (Arséniure d'Aluminium et de Gallium). Cette combinaison présente plusieurs avantages majeurs. D'abord, le système AlGaAs/GaAs est parfaitement adapté à l'ingénierie de bandes, grâce à leur compatibilité structurale (quasi-identité des constantes de réseau), leur faible densité de défauts et une maîtrise industrielle éprouvée dans les procédés de croissance, comme l'épitaxie par faisceaux moléculaires (MBE) ou la croissance en phase vapeur organométallique (MOVPE) [4,5]. En particulier, GaAs joue le rôle de puits, tandis que AlGaAs, dont la bande interdite est plus large, forme les barrières, assurant un bon confinement à la fois des électrons et des trous.

La modélisation de ces dispositifs repose sur la compréhension fine des phénomènes physiques qui les régissent. Il est crucial d'intégrer les effets quantiques, tels que la quantification des niveaux d'énergie, mais aussi les interactions entre porteurs, les effets thermiques, la recombinaison stimulée et spontanée, ainsi que la propagation du champ électromagnétique dans la cavité laser. Les outils de simulation, comme ceux proposés par les plateformes de type

SILVACO permette aujourd'hui d'approcher de manière réaliste le comportement de ces structures complexes [1].

Cette thèse s'articule autour de l'étude et de la modélisation des lasers à puits quantiques multiples (MQW), en trois chapitres complémentaires.

Le premier chapitre présente les bases des semi-conducteurs : leur structure cristalline, les types de bandes interdites, la jonction PN, les mécanismes de recombinaison, ainsi que l'ingénierie des hétérostructures et des puits quantiques, éléments clés des dispositifs optoélectroniques modernes.

Le deuxième chapitre est consacré aux lasers, en exposant les principes physiques de l'émission stimulée, les composants essentiels (milieu actif, pompage, cavité optique), et une classification des différents types de lasers selon leurs applications.

Le dernier chapitre met en application les concepts précédents à travers la simulation d'un laser MQW AlGaAs/GaAs à l'aide du logiciel SILVACO TCAD, basé sur une méthode $k \cdot p$ à six bandes. L'analyse porte sur le gain optique et les caractéristiques courant–tension, en fonction de la fraction molaire d'aluminium et de la largeur des puits. L'effet de l'introduction d'une couche de GeSn formant une double hétérojonction est également étudié afin d'évaluer son impact sur les performances du dispositif.

Bibliographie

1. Choquette, K. D., & Chuang, S. L. (1994). Modeling of strained quantum-well lasers. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 30(2), 431–440. <https://doi.org/10.1109/3.272481>
2. Chuang, S. L. (2009). *Physics of photonic devices* (2nd ed.). Hoboken: Wiley.
3. Coldren, L. A., & Corzine, S. W. (1995). *Diode lasers and photonic integrated circuits*. New York: Wiley.
4. Sugimoto, Y., Takayanagi, H., & Ishikawa, H. (2000). AlGaAs/GaAs quantum well lasers and their application in high-speed optical communication. *Japanese Journal of Applied Physics*, 39, 1223–1228. <https://doi.org/10.1143/JJAP.39.1223>
5. Wang, Y., Chuang, S. L., & Lau, K. M. (2005). Analysis of thermal effects on quantum well laser performance. *Journal of Applied Physics*, 98(3), 033103. <https://doi.org/10.1063/1.1992671>

CHAPITRE I

Généralités sur les semi-conducteurs

I.1. Introduction

Dans ce premier chapitre, nous rappelons des notions générales sur les semi-conducteurs, à savoir : leurs définitions, les types de semi-conducteurs, La compréhension de la structure cristalline, Caractérisation par leur structure cristalline ordonnée où les atomes sont disposés de manière régulière, les types de gaps et la jonction PN, Cette jonction cruciale pour le fonctionnement des diodes. Des bandes d'énergie et des différents mécanismes de recombinaison, ainsi que l'ingénierie des hétérostructures et des puits quantiques, sont cruciales pour le développement de dispositifs électroniques et optoélectroniques avancés. Nous décrirons après le processus d'absorption lumineuse et d'émission

I.2. Physique des semi-conducteurs

I.2.1. Structure cristalline et bandes d'énergie :

Considérons un atome de silicium Si isolé, les niveaux énergétiques de ses électrons sont discrets (voir le modèle de Bohr pour l'hydrogène). Lorsque l'on rapproche de ce dernier un atome identique, les niveaux énergétiques discrets de ses électrons se fractionnent en deux sous l'interaction réciproque des deux atomes. Plus généralement, lorsque l'on approche N atomes, les niveaux énergétiques se scindent en N niveaux. Ces N niveaux sont très proches les uns des autres et si la valeur de N est grande, ce qui le cas pour un cristal, ils forment une bande d'énergie continue. La notion de rapprochement des atomes est donnée par la distance interatomique.

A présent considérons des atomes de silicium Si arrangés aux nœuds d'un réseau périodique, mais avec une maille très grande de telle manière que les atomes puissent être considérés comme isolés. Les deux niveaux les plus énergétiques sont repérés par E_1 et E_2 . Rapprochons homothétiquement les atomes les uns des autres, les états énergétiques électronique se scindent et forment deux bandes continues appelées bande de conduction (BC) et bande de valence (BV). La figure I.1 montre la formation de ces bandes en fonction de la distance interatomique. Pour les électrons d'un cristal de silicium ($d_0 = 2.35A^0$), on constate qu'il existe deux bandes continues d'énergie (BC et BV) et que ces bandes sont séparées par une bande interdite car d'énergie inaccessible aux électrons. Cette région interdite est appelée « gap » et sa largeur E_g est caractéristique du matériau. Notons que l'énergie du bas de la bande de conduction est notée E_c et que celle du haut de la bande valence est notée E_v ainsi nous

avons l'égalité $E_g = E_c - E_v$. Précisons que les bandes continues d'énergie BC et BV ne sont qu'une représentation des énergies accessibles par les électrons, ceci ne présage en rien de l'occupation effective de ces bandes par ces derniers.

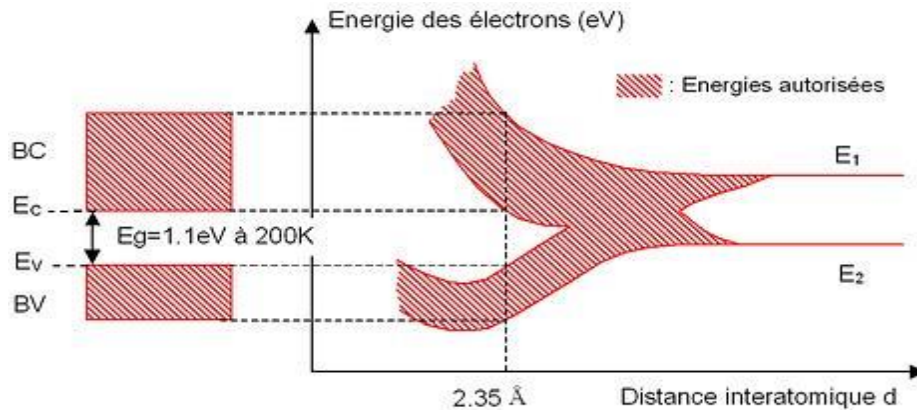


Figure I.1. Formation des bandes d'énergie pour les électrons d'atomes de Si arrangés en mailles cristallines de type diamant.

I.2.2. Isolant, semi-conducteur, conducteur

Les matériaux solides peuvent être classés en trois groupes que sont les isolants, les semi-conducteurs et les conducteurs. On considère comme isolants les matériaux de conductivité $\sigma < 10^{-8} (S/cm)$ (diamant $10^{-14} (S/cm)$), comme semi-conducteurs les matériaux tels que $10^{-8} < \sigma < 10^3 (S/cm)$ (silicium $10^5 (S/cm)$ à $10^3 (S/cm)$) et comme conducteurs les matériaux tels que $\sigma > 10^3 (S/cm)$ (argent $10^6 (S/cm)$)

Les propriétés électriques d'un matériau sont fonction des populations électroniques des différentes bandes permises (Figure I.2). La conduction électrique résulte du déplacement des électrons à l'intérieur d chaque bande. Sous l'action du champ électrique appliqué au matériau l'électron acquiert une énergie cinétique dans le sens opposé au champ électrique. Considérons à présent une bande d'énergie vide, il est évident de par le fait qu'elle ne contient pas d'électrons, elle ne participe pas à la formation d'un courant électrique. Il en est de même pour une bande pleine. En effet, un électron ne peut se déplacer que s'il existe une place libre (un trou) dans sa bande d'énergie. Ainsi, un matériau dont les bandes d'énergie sont vides ou pleines est un **isolant**. Une telle configuration est obtenue pour des énergies de gap supérieures à $\sim 9eV$, car pour de telles énergies, l'agitation thermique à 300K, ne peut pas faire passer les électrons de la bande de valence à celle de conduction par cassure de liaisons électronique. Les bandes d'énergie sont ainsi toutes vides ou toutes pleines.

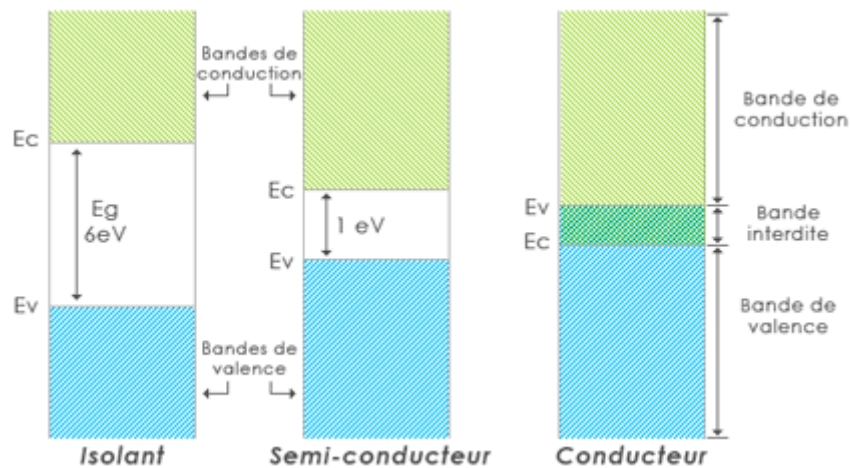


Figure I.2. Représentation des bandes d'énergie.

Un semi-conducteur est un isolant pour une température de 0K. Cependant ce type de matériau ayant une énergie de gap plus faible que l'isolant ($\sim 1\text{eV}$), aura de par l'agitation thermique ($T=300\text{K}$), une bande de conduction légèrement peuplée d'électrons et une bande de valence légèrement dépeuplée. Sachant que la conduction est proportionnelle au nombre d'électrons pour une bande d'énergie presque vide et qu'elle est proportionnelle au nombre de trous pour une bande presque pleine, on déduit que la conduction d'un semi-conducteur peut être qualifiée de « mauvaise ».

Pour un conducteur, l'interpénétration des bandes de valence et de conduction implique qu'il n'existe pas d'énergie de gap. La bande de conduction est alors partiellement pleine (même aux basses températures) et ainsi la conduction du matériau est « élevée ».

I.2.3. La jonction PN

Le dopage consiste à implanter des atomes (ou impuretés) à l'intérieur d'un semi-conducteur afin d'en modifier les propriétés électriques. Le semiconducteur est alors dit extrinsèque. Un dopage de type P est obtenu en augmentant la densité des trous (par ajout d'accepteurs), et un dopage de type N en augmentant la densité d'électrons (par ajout de donneurs). On appelle N_d l'excédent de donneurs dans la région N et N_a l'excédent d'accepteurs dans la région P. Dans la pratique N_a et N_d sont toujours très supérieurs à n_i de sorte que les densités d'électrons et trous s'écrivent :

- Dans un semi-conducteur de type N

$$n \cong (N_d - N_a) \text{ et } p \cong \frac{n_i^2}{(N_d - N_a)} \quad (\text{I.1})$$

- Dans un semi-conducteur de type P

$$p \cong (N_a - N_d) \text{ et } n \cong \frac{n_i^2}{(N_a - N_d)} \quad (\text{I.2})$$

Dans chaque type de semi-conducteur, le niveau de Fermi se rapproche d'autant plus de la bande de porteurs majoritaires que le dopage est important. On exprime alors E_{Fn} et E_{Fp} les quasi-niveaux de Fermi dans les semi-conducteurs extrinsèques types N et P par les relations :

$$E_{Fn} = E_c - kT \cdot \ln\left(\frac{N_c}{N_d - N_a}\right) \quad (\text{I.3})$$

$$E_{Fp} = E_v - kT \cdot \ln\left(\frac{N_v}{N_a - N_d}\right) \quad (\text{I.4})$$

Une jonction PN est la juxtaposition de ces deux régions d'un même semi-conducteur. La mise en contact de ces deux types de semi-conducteur en x_0 (Figure I.3) entraîne la diffusion des électrons et des trous. Cette diffusion fait apparaître une zone de charge d'espace (ZCE) d'épaisseur W . Nous notons x_p et x_n les limites de la ZCE dans les zones P et N.

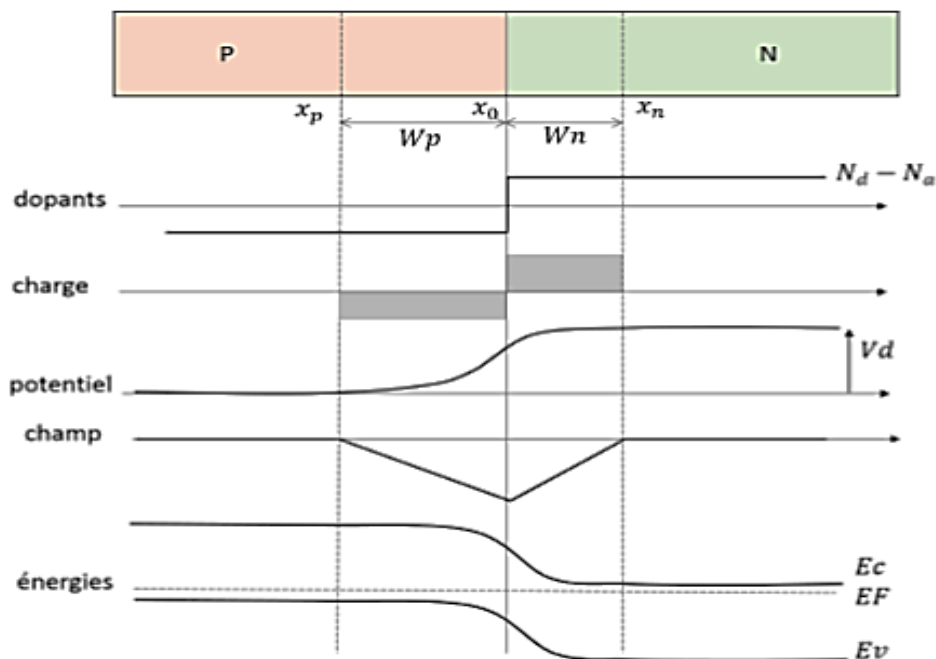


Figure I.3. Jonction PN à l'équilibre thermodynamique [1]

La charge d'espace est positive côté N et négative coté P, car elle résulte de la présence de donneurs ionisés N_d et des accepteurs ionisés N_a . En dehors de la ZCE, le semiconducteur est neutre et la densité de charge est nulle. On peut ainsi résumer la densité de charge ρ dans les différentes régions :

$$\rho(x) = 0 \quad \text{pour } x < x_p \text{ et } > x_n \quad (\text{I.5})$$

$$\rho(x) = -q \cdot N_a \quad \text{pour } x_p < x < x_0 \quad (\text{I.6})$$

$$\rho(x) = q \cdot N_d \quad \text{pour } x_0 < x < x_n \quad (\text{I.7})$$

La zone de charge d'espace s'étend dans les régions P et N (W_n et W_p) en satisfaisant l'équation :

$$N_a W_p = N_d W_n \quad (\text{I.8})$$

Cette équation traduit que la zone de charge d'espace s'étend principalement dans la région la moins dopée.

La présence de cette zone de charge d'espace entraîne l'existence d'un champ électrique et d'une variation de potentiel. La tension associée, appelée tension de diffusion, est donnée par la relation :

$$V_d = \left(\frac{k.T}{q} \right) \cdot \ln \left(\frac{N_a - N_d}{n_i^2} \right) \quad (\text{I.9})$$

Le champ électrique dans la structure peut s'exprimer sous la forme :

$$E = -\frac{q \cdot N_a}{\epsilon} (x - x_p), \quad \text{pour } x_p < x < x_0 \quad (\text{I.10})$$

$$E = \frac{q \cdot N_d}{\epsilon} (x - x_n), \quad \text{pour } x_0 < x < x_n \quad (\text{I.11})$$

Enfin, l'évolution des bandes de valence et de conduction est représentée (Figure I.3). Elle résulte de l'alignement du niveau de Fermi dans toute la structure avons étudié jusqu'à présent la jonction PN à l'équilibre thermodynamique. Lorsqu'une polarisation est appliquée, la barrière de potentiel est modifiée et par conséquence une diffusion des porteurs apparait d'une

région vers l'autre. La tension appliquée, notée V , s'ajoute à la tension de diffusion V_d . Lorsque la tension appliquée est négative, la différence de potentiel aux bornes de la ZCE augmente. La diffusion des porteurs majoritaire est impossible, seuls les porteurs minoritaires, propulsés par le champ électrique, passent dans la région opposée. C'est le courant de conduction. A l'inverse, lorsque la polarisation appliquée est positive, la barrière de potentiel n'est plus suffisante pour empêcher la diffusion des porteurs. Les électrons diffusent de la région N vers la région P, et les trous de la région P vers la région N. Le courant circulant dans la jonction s'exprime alors sous la forme :

$$I = I_s \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (\text{I.12})$$

Où I_s est le courant de saturation.

I.2.4. Emission spontanée dans un semi-conducteur à gap direct :

Au zéro absolu, un semi-conducteur est isolant, avec une bande de valence pleine et une bande de conduction vide. Cependant, les électrons peuvent être excités (thermiquement, électriquement ou optiquement) de la bande de valence vers la bande de conduction. Ils laissent alors dans la bande de valence une lacune, pseudo-particule appelée trou. Une fois l'électron dans la bande de conduction, il peut se désexciter vers la bande de valence, remplissant ainsi le trou. Cette recombinaison électron-trou peut être accompagnée par l'émission d'un photon. C'est l'émission spontanée à la base du fonctionnement des Lasers [2].

Cette émission est caractérisée par la conservation de l'énergie et du moment. L'énergie du photon, dont dépend sa longueur d'onde (λ), est celle du gap du semi-conducteur (E_g).

$$E_g = \frac{hc}{\lambda} = h\nu \quad (\text{I.13})$$

h est la constante de Planck et c la vitesse de la lumière dans le vide. La lumière émise par un semi-conducteur est donc intrinsèquement quasi-monochromatique et dépend du gap du matériau semi-conducteur utilisé (Figure I.4).

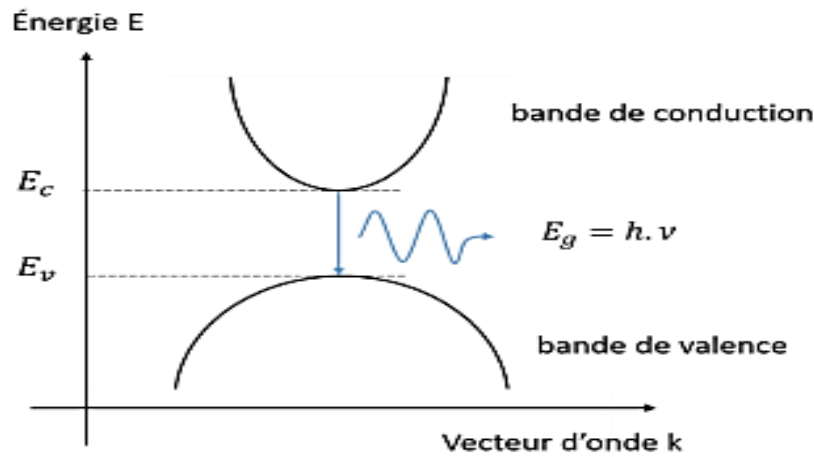


Figure I.4. Structure énergétique d'un semi-conducteur à gap direct [2].

La jonction PN présentée auparavant a pour but d'injecter les électrons vers la région P et les trous vers la région N, créant ainsi les conditions de l'émission spontanée. En effet, la probabilité qu'un électron se recombine avec un trou est proportionnelle au produit de la concentration d'électrons et de trous. On définit alors le taux de recombinaison radiative par :

$$R_{rad} = B.n.p \quad (I.14)$$

B est appelé coefficient de recombinaison biomoléculaire. Il possède des valeurs typiques de l'ordre de 10^{-11} à $10^{-9} \text{ cm}^3 . \text{s}^{-1}$ pour les semi-conducteurs III-V à gap direct [3].

I.2.5. Recombinaison Auger

La recombinaison Auger est une recombinaison faisant intervenir trois particules. Lorsqu'un électron (ou un trou) quitte la bande de conduction (ou de valence) pour se recombiner avec un trou (ou un électron) de la bande de valence (ou de conduction), l'énergie est transférée à un tiers porteur (électron ou trou) qui se thermalise ensuite par l'intermédiaire d'un phonon[4]. Ce type de recombinaison se produit surtout dans les régions fortement dopées. Le taux de recombinaison est alors donné par :

$$R_{Auger} = (A_n n + A_p p)(np - n_i^2) \quad (I -15)$$

A_n et A_p sont les coefficients Auger pour les électrons et les trous.

I.2.6. Recombination Shockley Read Hall- SRH-

Dans ce mécanisme, la recombinaison ne se fait pas par transition directe d'un électron de la bande de conduction vers la bande de valence mais par l'intermédiaire d'un centre de recombinaison dont le niveau d'énergie est situé dans la bande interdite. Nous le décrirons ici avec un seul centre de recombinaison monovalent c'est-à-dire un défaut ne pouvant avoir que deux états de charge [5]. On écrit alors le taux de recombinaison SRH :

$$R_{SRH} = \frac{C_n C_p N_R (np - n_i^2)}{C_n (n + n_i e^{-(E_i - E_R)/kT}) + C_p (p + n_i e^{(E_i - E_R)/kT})} \quad (I-16)$$

N_R est la concentration des centres recombinants d'énergie E_R ; E_i est le niveau d'énergie intrinsèque ; C_n et C_p sont les probabilités de capture des électrons et des trous. La durée de vie SRH des porteurs est donnée par la relation :

$$\tau_{SRH} = \frac{\tau_{n_0} (p_0 + p_1 + \Delta n) + \tau_{p_0} (n_0 + n_1 + \Delta n)}{n_0 + p_0 + \Delta n} \quad (I-17)$$

Où, n_0 et p_0 sont respectivement, les concentrations d'électrons et de trous à l'équilibre,

I.3. Matériaux utilisés

I.3.1. Propriétés du composé GaAs et de l'alliage AlGaAs

I.3.1.1. Structure cristallographique

Le composé arséniure de gallium (GaAs) ainsi que l'alliage ternaire arséniure de gallium-aluminium (AlGaAs) appartiennent à la famille des semi-conducteurs des groupes III-V. Ces matériaux cristallisent dans la structure Zinc-Blende, qui est similaire à celle du diamant (C). Cette structure est formée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées (C.F.C.) identiques : l'un composé d'atomes du groupe III et l'autre d'atomes du groupe V. Ces deux sous-réseaux s'interpénètrent et sont décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la grande diagonale du cube, le long de celle-ci.

Chaque atome est lié à quatre voisins selon une géométrie tétraédrique, les liaisons étant orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier, comme illustré sur

la figure I.5. La figure I.6 présente la première zone de Brillouin d'un cristal de type Zinc-Blende, dont les caractéristiques principales sont résumées dans le tableau I.1 [6,7].

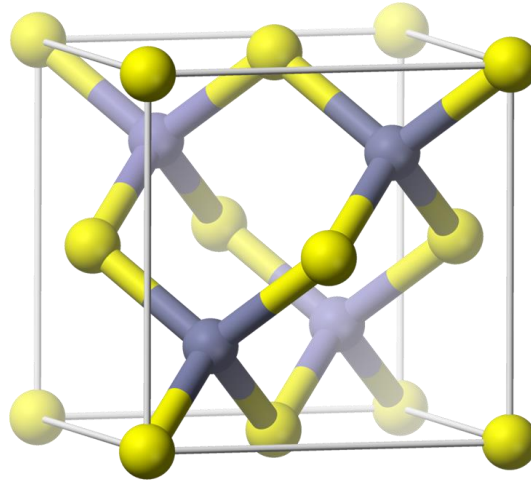


Figure I.5. Mailles cristallographiques d'une structure Zinc Blende.

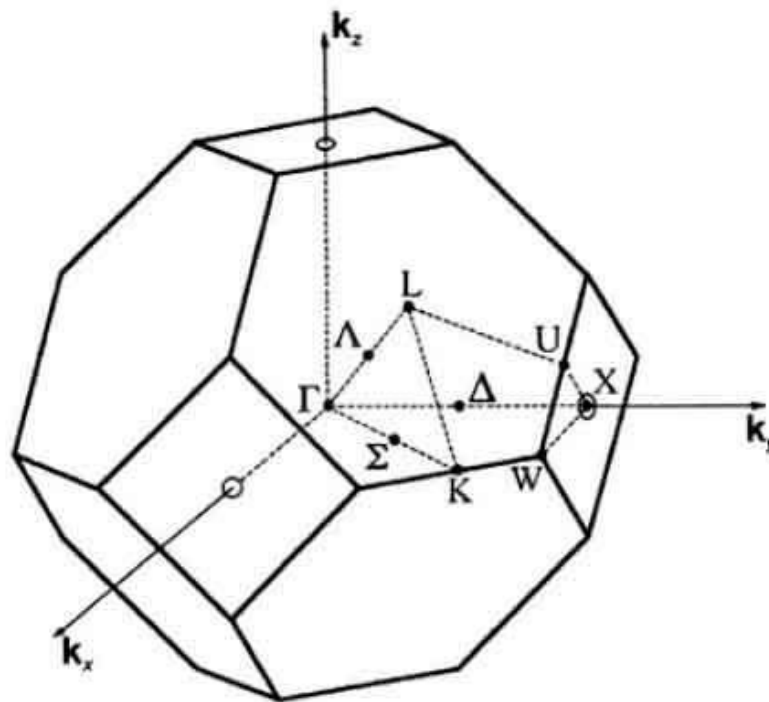


Figure I. 6. Première zone Brillouin d'un cristal Zinc Blende.

Tableau I.1. Points et directions de la première zone Brillouin d'un cristal Zinc Blende.

Points		Directions	
Γ	Centre de zone (0, 0,0)		
X	Bord de zone dans la direction 100 et les directions équivalentes ($2\pi/a, 0, 0$)	Δ	100 et les directions équivalentes
L	Bord de zone dans la direction 111 et les directions équivalentes ($\pi/a, \pi/a, \pi/a$)	Λ	111 et les directions équivalentes
K	Bord de zone dans la direction 110 et les directions équivalentes ($3\pi/2a, 3\pi/2a, 0$)	Σ	110 et les directions équivalentes

I.3.1.2. Propriétés électroniques

L'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ est formé à partir des deux composés binaires GaAs et AlAs, qui partagent une structure cristalline identique de type Zinc-Blende. Ces matériaux présentent des paramètres physiques très proches, convergeant à une température d'environ 900 °C. Dans cet alliage, la concentration relative en aluminium peut varier de $x = 0$ (GaAs pur) à $x = 1$ (AlAs pur), les atomes de gallium et d'aluminium occupant des sites cristallographiques équivalents.

Bien que le paramètre de maille de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ varié linéairement avec la fraction molaire x , le mismatch de maille entre GaAs et AlAs demeure très faible, de l'ordre de **0,15 %**, ce qui permet la croissance d'alliages de haute qualité cristalline. Cette compatibilité structurale constitue l'une des principales raisons du succès technologique du système AlGaAs/GaAs dans de nombreuses applications électroniques et optoélectroniques.

En ajustant la concentration d'aluminium (x), il est possible de moduler les propriétés électriques et optiques de l'alliage. En particulier, la largeur de la bande interdite varie de 1,46 eV pour GaAs à 2,16 eV pour AlAs (voir figure I.7), ce qui influence directement les phénomènes d'absorption optique dans l'alliage.

Les propriétés physiques de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ peuvent être estimées par interpolation linéaire à partir de celles de GaAs et AlAs. C'est notamment le cas pour le paramètre de maille, qui obéit à la loi de Végard [3].

$$a(Al_xGa_{1-x}As) = x \cdot a(AlAs) + (1 - x) \cdot a(GaAs) \quad (I-18)$$

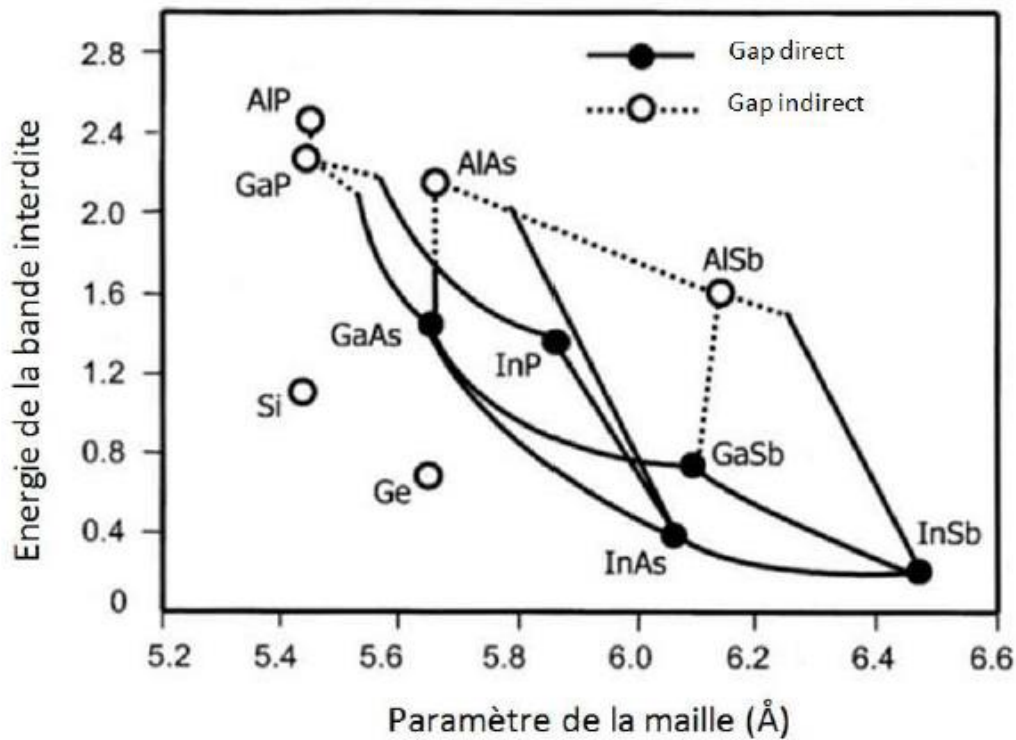


Figure I.7. Energie de bande interdite des principaux binaires et ternaires III-V en fonction de leur paramètre de maille [10,11].

L'énergie de bande interdite est une mesure de la quantité d'énergie nécessaire à un électron pour passer de la bande de valence à la bande de conduction sous l'impulsion d'une excitation thermique ou autre. Cette quantité est un facteur de la capacité du matériau à supporter une forte température ; elle définit la température maximale de fonctionnement des composants électriques. Donc, plus la largeur de bande est importante, plus le composant électrique peut fonctionner à haute température.

Le matériau sera appelé semiconducteur à petit gap (notée E_g), si la distance énergétique entre le bas de la bande de conduction et le sommet de la bande de valence, est inférieur à 2 eV. C'est le cas des matériaux GaAs, Ge, Si, InP. Le matériau est considéré comme un semiconducteur à grand gap pour des valeurs supérieures à 2 eV [13].

La figure (I. 8) présente le diagramme des bandes d'énergies de GaAs et AlAs. On remarque que le GaAs présente un gap direct alors qu'AlAs est à gap indirect [12].

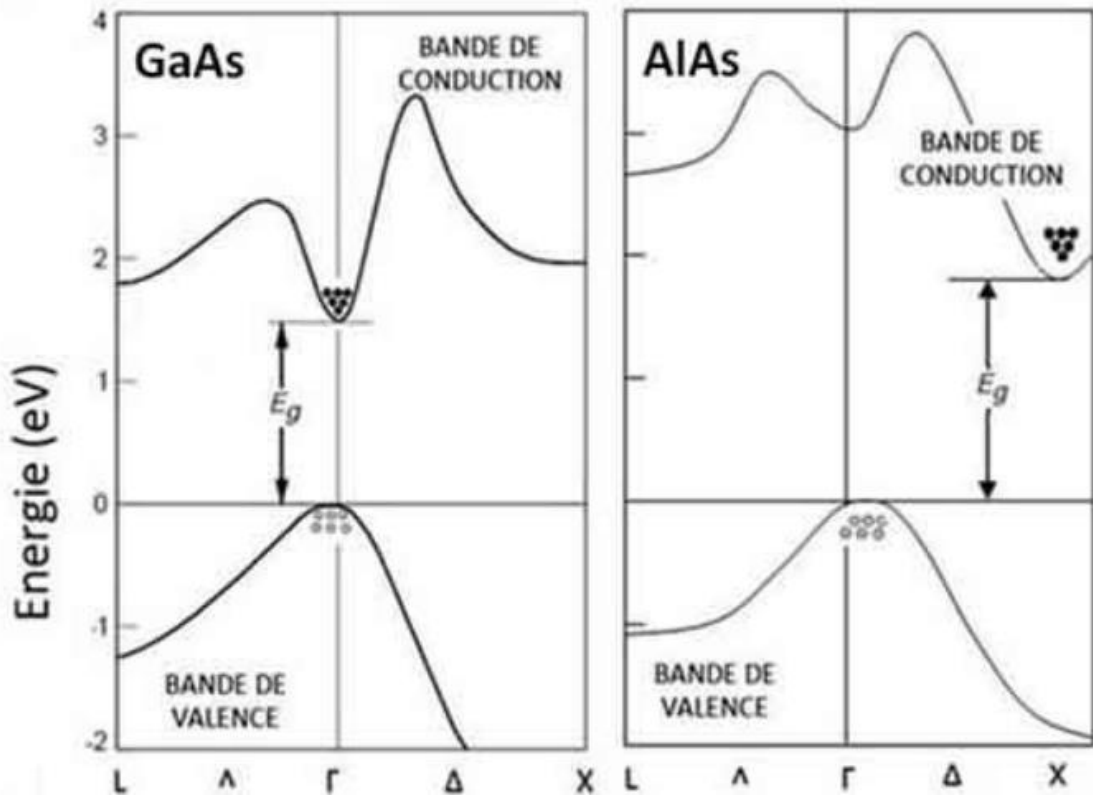


Figure I.8. Structure de bande d'énergie pour le GaAs et le AlAs à 300K. [12]

A température ambiante ($T = 300\text{K}$), le gap de GaAs (E_g) est 1,424 eV ($x = 0$) alors que celui d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dépend de la composition x en aluminium [13] :

$$E_g(x) = \begin{cases} 1.424 + 1.247x & 0 < x < 0.45 \\ 1.9 + 0.125x + 0.143x^2 & 0.45 < x < 1 \end{cases} \quad (\text{I-19})$$

L'énergie entre les différentes vallées (Γ , X et L) de la bande de conduction et le haut de la vallée Γ de la bande de valence sont données en (eV) par les équations suivantes [14 ,15] :

$$\begin{aligned} E_{\Gamma-\Gamma} &= 1.519 + 1.155x + 0.37x^2 \\ E_{X-\Gamma} &= 1.900 + 0.125x + 0.143x^2 \\ E_{L-\Gamma} &= 1.708 + 0.642x^2 \end{aligned} \quad (\text{I-20})$$

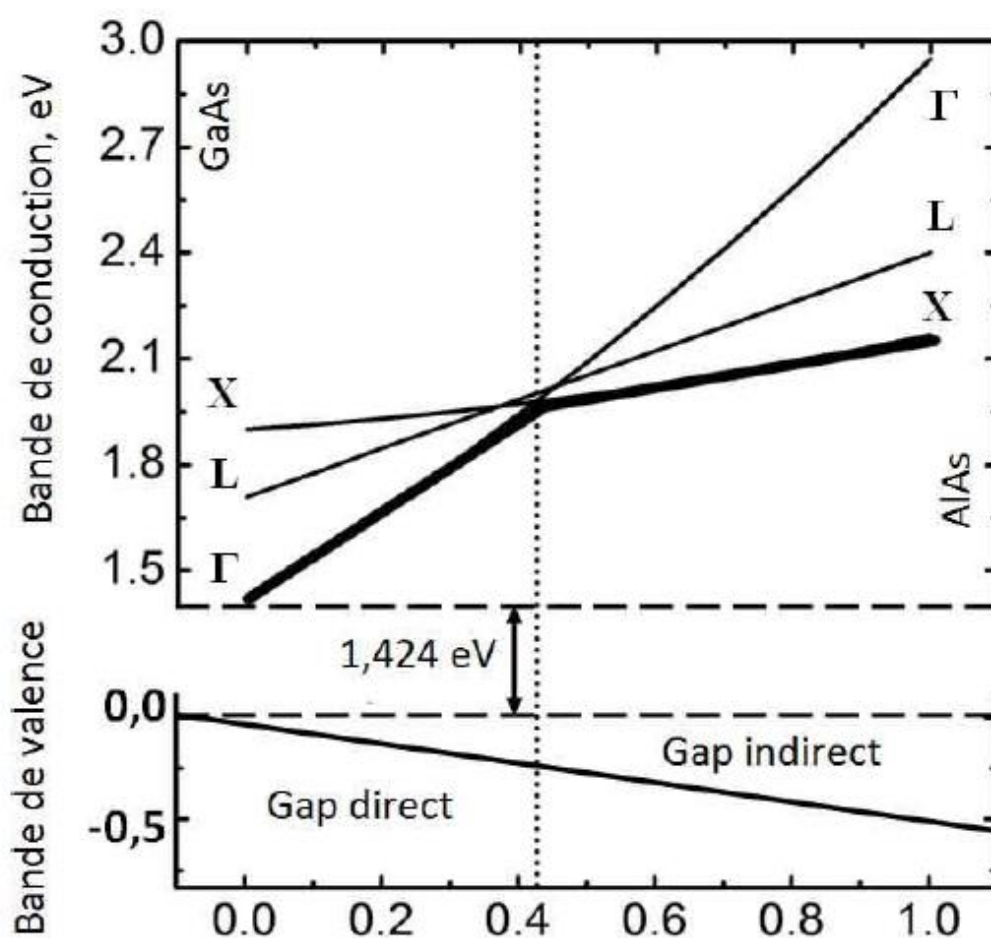


Figure I.9. Energie de différentes vallées de la bande de conduction par rapport au point Γ de la bande de valence en fonction du taux d'aluminium [15].

La nature de la transition énergétique de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ change selon le taux d'aluminium x ($0 < x < 1$) (figure I.9). Pour une fraction d'aluminium $x \leq 0,43$ [14], la transition de l'alliage est identique à celle du GaAs caractérisée par une transition directe (le bas de la bande de conduction est la vallée Γ). Quand le taux d'aluminium devient supérieur à $\sim 0,45$ la transition devient indirecte comme celle de l'AlAs (le bas de la bande de conduction se déplace vers la vallée X). Donc, l'augmentation de la fraction molaire x d'aluminium a pour conséquence l'augmentation de la bande interdite de la couche d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ qui module la profondeur de l'hétérojonction, et l'épaisseur de la couche d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ influe aussi sur la forme du puits quantique.

La largeur de la bande interdite des énergies $E_{\Gamma-\Gamma}$, $E_{X-\Gamma}$, $E_{L-\Gamma}$ décroît avec la température, et ces variations peuvent être décrites approximativement par la formule empirique de Varshni [16,17] pour des températures supérieures à 300 K :

$$\begin{aligned} E_{\Gamma-\Gamma}(T) &= E_{\Gamma-\Gamma}(0) - 5.41 \times 10^{-4} \times \frac{T^2}{T + 204} \\ E_{X-\Gamma}(T) &= E_{X-\Gamma}(0) - 4.6 \times 10^{-4} \times \frac{T^2}{T + 204} \\ E_{L-\Gamma}(T) &= E_{L-\Gamma}(0) - 6.05 \times 10^{-4} \times \frac{T^2}{T + 204} \end{aligned} \quad (\text{I-20})$$

D'où les valeurs des énergies $E_{\Gamma-\Gamma}(0)$, $E_{X-\Gamma}(0)$, $E_{L-\Gamma}(0)$ à la température zéro degré Kelvin sont données par les équations (II-4).

On peut résumer les propriétés physiques du AlAs et GaAs [54] dans le tableau suivant [12,18-20] :

Tableau I. 2 : Propriétés physiques du AlAs et GaAs à T=300K.

	Symbole	AlAs	GaAs
Structure		Zinc-blend	Zinc-blend
Gap		Indirect	Direct
Paramètre de maille	a_0 [Å]	5.6611	5.6533
Energie interdite (de gap)	E_g [eV]	2,36 à 300K 2,23 à 0K	1,42 à 300K 1,52 à 0K
Concentration intrinsèque des porteurs	n_i [cm ⁻³]	10	2×10^6
Densité	d [g.cm ⁻³]	3.76	5.318
Mobilité des électrons	μ_n [cm ² .V ⁻¹ s ⁻¹]	280	8500
Mobilité des trous	μ_p [cm ² .V ⁻¹ s ⁻¹]	-	400
Champ de claquage	E_B [V.cm ⁻¹]	-	4.10^5
Vitesse de saturation	v_{sat} (10 ⁷ cm.s ⁻¹)	-	2
Affinité d'électron	χ [V]	3.5	4.07
Masse effective des électrons	m_n^* [kg]	$0.146m_0$	$0.067m_0$
Masse effective des trous lourds	m_p^* [kg]	$0.76m_0$	$0.45m_0$

Lors de la mise en contact d'une couche d'AlGaAs et d'une couche de GaAs, la différence en énergies ΔE_g des gaps est répartie d'une façon différente entre la bande de conduction (ΔE_c) et la bande de valence (ΔE_v) [13]. La détermination exacte des affinités électronique est difficile, la mécanique quantique permet d'écrire pour l'hétérostructure AlGaAs/GaAs :

$$\begin{aligned}\Delta E_c &= (0.85 \pm 0.03) \times \Delta E_g \\ \Delta E_v &= (0.15 \pm 0.03) \times \Delta E_g\end{aligned}\quad (\text{II-5})$$

$\Delta E_g = \Delta E_{g1} - \Delta E_{g2}$: La discontinuité de la bande de conduction correspond à la différence des affinités électroniques des deux matériaux (Figure I.10) :

$$\Delta E_c = \chi_{\text{GaAs}} - \chi_{\text{AlGaAs}} \quad (\text{II-6})$$

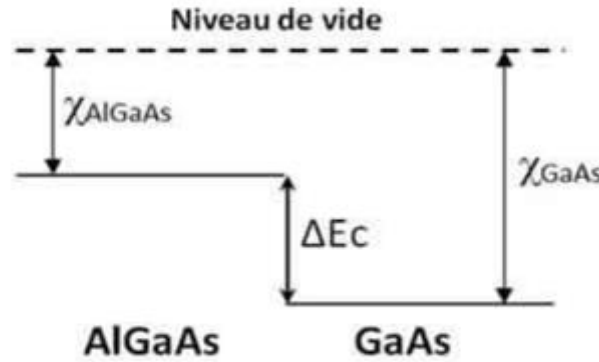


Figure I.10 : Discontinuité de la structure de bande de conduction entre AlGaAs/GaAs.

Quelques propriétés des électrons et des trous de GaAs et $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sont présentées dans le tableau ci-dessous :

Tableau I.3 : Propriétés cristallines et électroniques de l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ déduites à partir de celles du GaAs.

Paramètre	GaAs	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$
Constante de maille ($\text{\AA}$)	5.6533	$5.6533 + 0.0078x$
Constante diélectrique ϵ_r (A.s/V.m)	13.18	$13.18 - 3.12x$
L'affinité électronique $\chi(\text{eV})$	4.07	$4.07 - 1.1x \quad 0 \leq x \leq 0.45$ $3.64 - 0.14x \quad 0.45 \leq x \leq 1$
Mass effective des électrons $m_e(m_0)$ (kg)	0.067	$0.067 + 0.083x \quad 0 \leq x \leq 0.45$ $0.85 - 0.14x \quad 0.45 \leq x \leq 1$
Mass effective des trous $m_h(m_0)$ (kg)	0.62	$0.62 + 0.14x$

I.4. Matériau GeSn

Le GeSn (germanium-étain) est un alliage semi-conducteur possédant une structure cristalline de type diamant, identique à celle du germanium pur, et peut être épitaxié sur des substrats de silicium ou de germanium à l'aide de techniques comme la CVD (Chemical Vapor Deposition). L'incorporation d'étain dans le réseau cristallin est toutefois limitée à des concentrations généralement inférieures à 15 %, en raison de la faible solubilité du Sn dans le Ge. Sur le plan électronique, le germanium est un semi-conducteur à bande interdite indirecte, ce qui réduit son efficacité optique. Cependant, l'ajout de Sn permet de diminuer la largeur de la bande interdite, et au-delà d'une concentration critique (environ 6 à 10 %), le GeSn devient un matériau à bande directe, ouvrant la voie à des applications optoélectroniques telles que les lasers et les diodes électroluminescentes (LED) compatibles avec les technologies CMOS. Du point de vue optique, la fraction molaire d'étain permet d'ajuster l'énergie de la bande interdite, ce qui rend possible l'émission ou la détection dans la région de l'infrarouge moyen (1,55 à 3 μm) [19]. Cette flexibilité spectrale positionne le GeSn comme un matériau particulièrement prometteur pour les dispositifs photoniques intégrés. Dans ce contexte, la fabrication d'hétérostructures complexes, telles que AlGaAs/GaAs/GeSn/GaAs/AlGaAs, en vue de réaliser des puits quantiques ou d'autres structures optoélectroniques avancées, nécessite une maîtrise rigoureuse des interfaces, des contraintes de réseau et des procédés de croissance afin d'assurer des performances optimales [20].

I.4.1. L'alliage GeSn : L'alliage GeSn : un matériau à gap accordable

Dans le cas des semi-conducteurs à gap direct, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont atteints pour le même vecteur d'onde $\vec{k}$ ($k = 0$) ce qui n'est pas le cas des semiconducteurs à gap indirect où le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction correspondent chacun à des vecteurs d'onde différents. C'est dans ce dernier cas de figure (I.11) que se situent le germanium et le silicium, dont les valeurs de bande interdite à 300 K sont respectivement 1,11 eV et 0,66 eV [21]. Or, les interactions électron-trou doivent se faire en respectant la conservation de l'énergie et du quasi-moment (quantité de mouvement associée au vecteur d'onde $\vec{k}$) donc avec la conservation du vecteur $\vec{k}$ pour permettre une émission de lumière efficace. Pour un gap direct, l'électron initialement issu de la bande de conduction peut se recombiner avec le trou de la bande de valence à $\vec{k}$ constant, la transition énergétique s'accompagne alors de l'émission d'un photon.

Lorsque le gap est indirect, la conservation du vecteur d'onde n'est plus respectée. Une recombinaison radiative n'est possible que s'il y a absorption d'un phonon de moment égal à la différence de moment entre l'électron et le trou. Ainsi, la probabilité qu'une recombinaison radiative ait lieu est beaucoup plus faible dans ce type de matériau à gap indirect [22]. Le germanium pur et relaxé est donc très peu efficace pour l'émission de lumière. Il est donc essentiel de modifier la structure de bande du matériau pour passer du gap indirect au gap direct, ce qui représente un défi majeur. Le maximum de la bande de valence du germanium se situe au point Γ et le minimum de la bande de conduction au point L éloigné seulement de 140 meV par rapport à la vallée Γ contre près de 2,3 eV pour le Si [23].

Cependant, plusieurs stratégies ont été explorées pour modifier la structure de bande du Ge comme la mise en tension mécanique du matériau. En fonction de la direction cristalline de la contrainte, la diminution du gap indirect est plus rapide et il devient ainsi possible d'obtenir un matériau à gap direct. Cela peut être fait par un système externe de mise en tension (qui se trouve être difficilement applicable sur puce) ou par déformation induite par couche tenseur (typiquement avec une couche de nitrure de silicium [24]) ou par redistribution de contraintes résiduelles (structures micro-ponts en jouant sur la différence de coefficient de dilatation thermique des différentes couches [25,26]). Une autre piste envisagée a été l'incorporation d'un semi-métal du groupe IV : l'étain dans la maille cristalline du germanium. L'incorporation de Sn (à gap nul en Γ) dans la matrice de Ge induit un décalage vers le bas en énergie de la bande de conduction. La différence en énergie des bandes de conduction pour Ge et Sn au point Γ étant plus grande qu'au point L ($E_{\Gamma,Ge} - E_{\Gamma,Sn} > E_{L,Ge} - E_{L,Sn}$), la vallée Γ descend plus vite en énergie que la vallée L lorsque le Sn est incorporé. Ainsi, plus la concentration de Sn augmente, plus la vallée Γ de la bande de conduction s'aligne avec le maximum de la bande de valence. Le matériau passe donc progressivement d'un gap indirect à un gap direct.

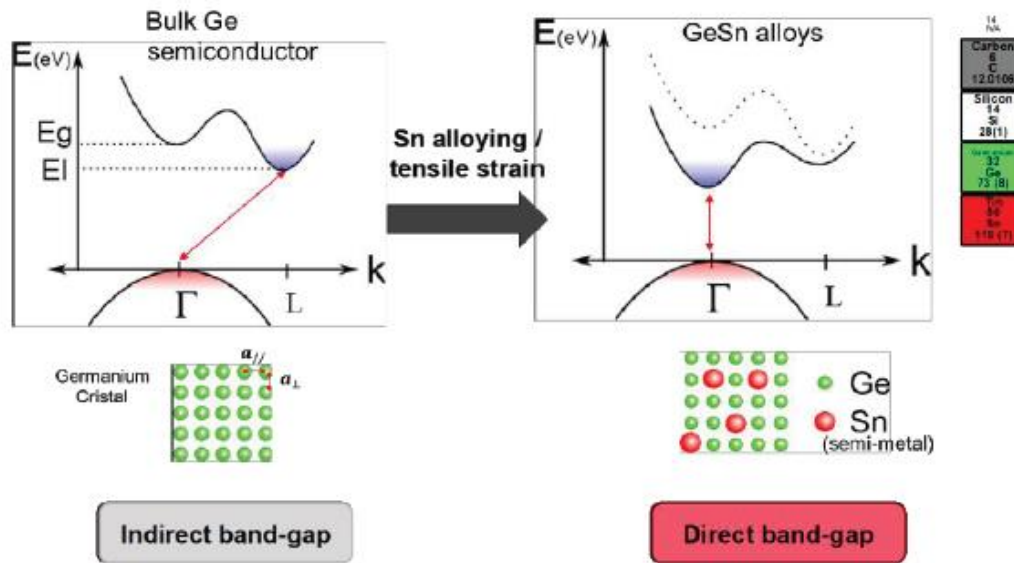


Figure 1.11. Schéma montrant l'évolution de la structure de bande par incorporation d'étain dans la maille cristalline de germanium.

1.4.2. Structure et fabrication des composants GeSn

1.4.2.1. Modélisation de l'alignement de bande

L'alignement de bande dans l'empilement constitué est une donnée importante afin de guider le choix dans la composition et l'enchaînement des couches constitutives de l'hétérostructure. Cette modélisation permet ainsi de situer la position de la jonction et de prédire l'énergie de la bande interdite. Pour l'émission de lumière, un bon confinement des porteurs injectés dans la couche active est indispensable. L'alignement de bande permet aussi d'évaluer l'efficacité de la structure sur le confinement des porteurs. Dans une hétérojonction, l'alignement de bande entre un semi-conducteur A et un semi-conducteur B peut s'établir selon trois configurations (**Figure 1.12**) :

Dans le cas le plus favorable, l'alignement est dit de type I lorsque la bande de valence du matériau B est plus haute en énergie que celle de matériau A et que sa bande de conduction est plus basse que A. Dans ce cas-là, il y a à la fois confinement des trous et des électrons dans le semi-conducteur B. Il s'agit donc de la configuration recherchée dans la conception des composants émissifs GeSn. Dans un alignement de type II, la bande de conduction et la bande de valence du semi-conducteur B sont toutes les deux soit plus hautes ou plus basses en énergie par rapport à celles du matériau A. Cette configuration n'assure le confinement que d'un type de porteur dans le semi-conducteur B. Enfin, pour une hétérostructure de type III, le gap est dit

« cassé ». La bande de valence de B est plus haute en énergie que la bande de conduction de A (ou la bande de conduction de B plus basse que la bande de valence de A).

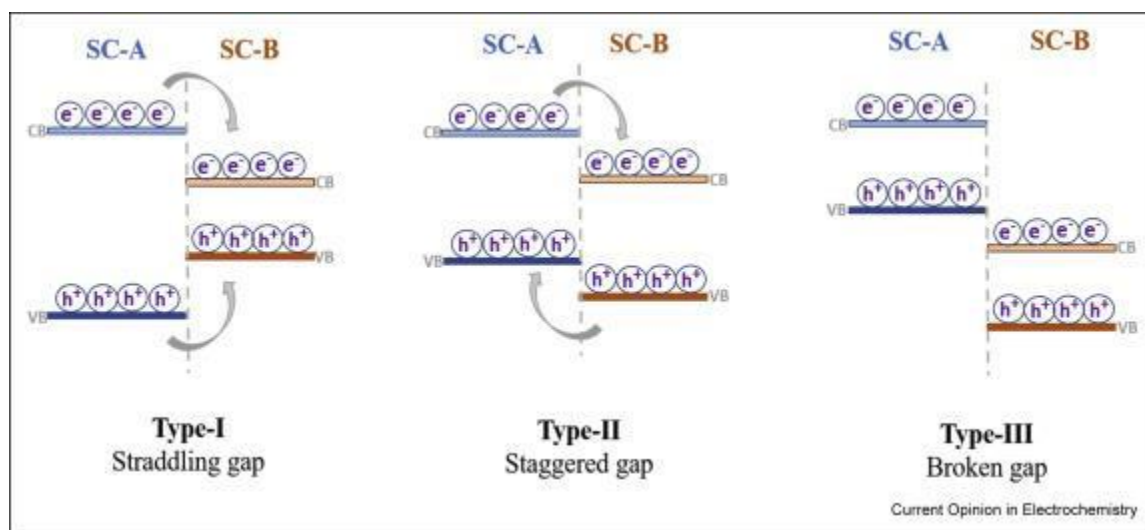


Figure 1.12. Représentation schématisée de l'alignement de bande entre deux semi-conducteurs [27].

1.4.2.2. Structure et croissance des couches GeSn

Les couches de GeSn sont élaborées par épitaxie chimique en phase vapeur à basse pression (LP-CVD) sur des substrats en silicium de 200 mm de diamètre. Le processus débute par la croissance d'une couche tampon relaxée de germanium (Ge SRB) d'une épaisseur de 1,5 μm , jouant le rôle de substrat virtuel afin de compenser la contrainte induite par la différence de paramètre de maille entre le Si et le Ge. Cette étape est suivie par le dépôt d'une couche de type p, dopée au bore par un procédé de dopage in situ utilisant le diborane (B_2H_6) comme précurseur. La croissance du GeSn est rendue particulièrement délicate en raison de la forte différence de maille entre le Ge et le Sn, ainsi que de la faible solubilité de ce dernier dans la matrice de Ge à l'équilibre thermodynamique (1,12 % à 390 °C). Pour surmonter ces limitations, l'incorporation de l'étain est réalisée dans des conditions hors équilibre, à basse température et à des vitesses de croissance élevées, permettant ainsi de dépasser la solubilité limite tout en évitant la formation de phases secondaires (voir figure I.13) [28].

Le dépôt des couches de GeSn est effectué à l'aide du digermane (Ge_2H_6) comme source de Ge et du tétrachlorure d'étain (SnCl_4) comme source de Sn, sous des températures comprises entre 301 et 349 °C et des pressions allant de 100 à 400 Torr, en fonction de la concentration en Sn souhaitée. Pour atteindre des teneurs élevées en Sn (jusqu'à 16 %), une approche par

croissance en paliers de concentration (step-graded) est mise en œuvre. Cette méthode permet non seulement d'éviter la formation de clusters de Sn en surface, mais aussi de limiter la propagation des dislocations en les piégeant aux interfaces successives, ce qui améliore significativement la qualité cristalline des couches riches en Sn.

Par ailleurs, des couches minces de l'alliage ternaire $\text{Si}_y\text{Ge}_{1-x-y}\text{Sn}_x$ peuvent être intégrées de part et d'autre de l'empilement GeSn afin d'assurer le confinement des porteurs dans la zone active. Enfin, une couche d'injection de type n, en Ge ou GeSn, est déposée par dopage in situ à l'aide de la phosphine (PH_3), complétant ainsi la structure épitaxiale [29].

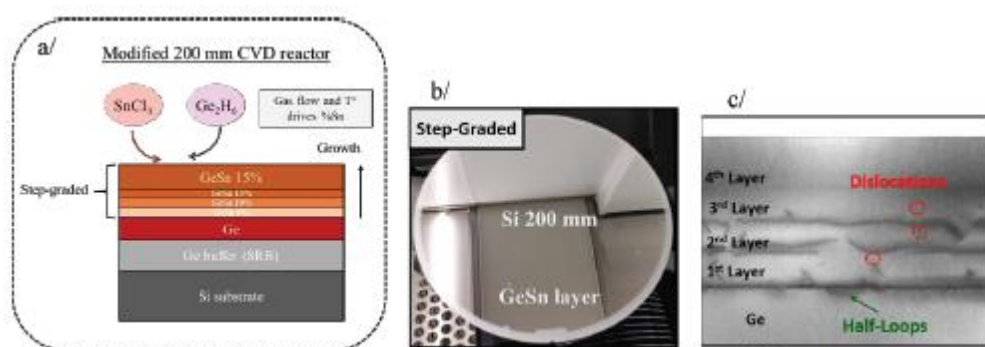


Figure 1.13 : a/ Schéma de la croissance de couches GeSn par épitaxie (RP-CVD), b/ Empilement avec $\text{Ge}_{0.85}\text{Sn}_{0.15}$ épitaxié selon un gradient de concentration en étain sur wafer de Si de 200 mm de diamètre (effet miroir), c/ Coupe TEM du même empilement [30].

I.5. Processus de fabrication de l'hétérostructure $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As} / \text{Ge}_{0.87}\text{Sn}_{0.1}$

La fabrication de l'hétérostructure $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As} / \text{Ge}_{0.87}\text{Sn}_{0.1}$ commence par la préparation d'un substrat virtuel monocristallin de Ge ou de GeSn, généralement déposé sur un substrat de silicium (Si (100)) à l'aide de techniques telles que la dépôt chimique en phase vapeur à basse pression (RPCVD) ou l'épitaxie par faisceau moléculaire (MBE) (voir figure I.14). La couche active de $\text{Ge}_{0.87}\text{Sn}_{0.1}$ est ensuite déposée de manière épitaxiale à basse température (environ 350 à 450 °C) afin d'éviter la ségrégation de l'étain (Sn) et de garantir une qualité cristalline élevée.

Une couche tampon fine (telle que du Ge ou du GaP) peut être intercalée afin de réduire le décalage de maille et d'améliorer la qualité de l'interface [Grafted AlGaAs/GeSn Optical Pumping Laser Operating up to 130 K [31].

Une fois la couche de GeSn stabilisée et caractérisée (par HRXRD, AFM, ou TEM), la croissance de la couche de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ est réalisée par MBE ou MOVPE, en contrôlant soigneusement la température (environ 500 à 600 °C) pour éviter toute dégradation thermique de la couche inférieure.

Durant tout le processus, des techniques de surveillance in situ, telles que le RHEED, sont utilisées pour assurer la qualité cristalline et l'homogénéité des interfaces. Un recuit post-croissance peut être appliqué à température modérée pour soulager les contraintes résiduelles et améliorer la netteté de l'interface [31].

L'hétérostructure obtenue peut ensuite être exploitée dans la fabrication de dispositifs optoélectroniques tels que les lasers à injection ou les photodétecteurs, en passant par les étapes classiques de gravure, métallisation et passivation.

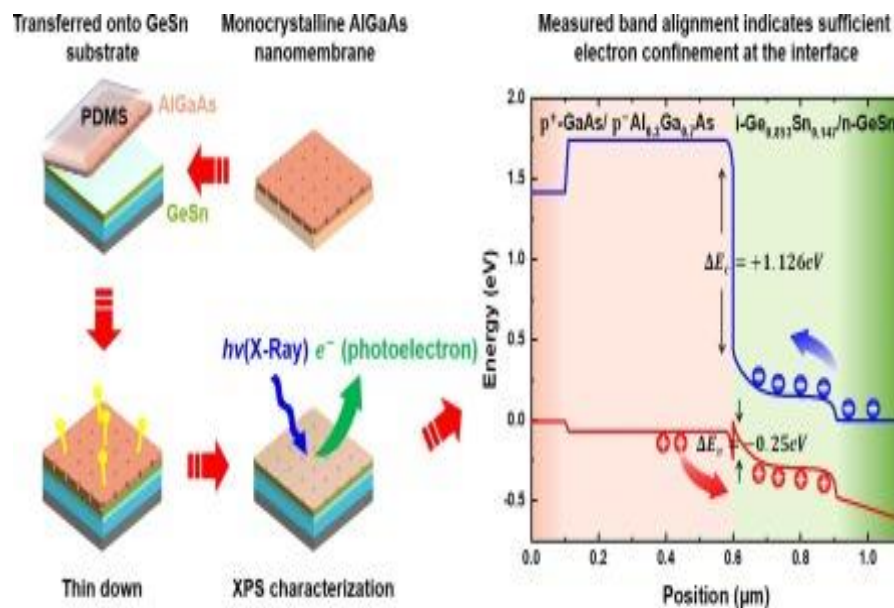


Figure I.14. Alignement des bandes de valence et de conduction dans l'hétérojonction greffée monocristalline $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ / $\text{Ge}_{0.853}\text{Sn}_{0.147}$ de type p-i-n, déterminé par spectroscopie de photoélectrons X (XPS) et photoluminescence [31].

I.6. Bibliographie

1. Sze, S. M., & Ng, K. K. (2007). *Physics of semiconductor devices* (3rd ed.). Hoboken: Wiley-Interscience.
2. Chuang, S. L. (1995). *Physics of optoelectronic devices*. New York: Wiley-Interscience.
3. Vurgaftman, I., Meyer, J. R., & Ram-Mohan, L. R. (2001). Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, 89(11), 5815–5875. <https://doi.org/10.1063/1.1368156>
4. Richter, A., Basu, P. K., & Würfel, P. (1981). Auger recombination in semiconductors. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 17(6), 1154–1160. <https://doi.org/10.1109/JQE.1981.1070890>
5. Shockley, W., & Read, W. T. (1952). Statistics of the recombinations of holes and electrons. *Physical Review*, 87(5), 835–842. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.87.835>
6. Yu, P. Y., & Cardona, M. (2010). *Fundamentals of semiconductors: Physics and materials properties* (4th ed.). Berlin: Springer.
7. Madelung, O. (2004). *Semiconductors: Data handbook* (3rd ed.). Berlin: Springer.
8. Ashcroft, N. W., & Mermin, N. D. (1976). *Solid state physics*. Philadelphia: Saunders College.
9. Adachi, S. (2005). *Properties of semiconductor alloys: Group-IV, III–V and II–VI semiconductors*. West Sussex: John Wiley & Sons.
10. Levinstein, M. E., Rumyantsev, S. L., & Shur, M. S. (Eds.). (2001). *Handbook series on semiconductor parameters* (Vol. 1). Singapore: World Scientific.
11. Dupont, J. (2018). *Physique des semi-conducteurs* (2e éd.). Paris : Éditions Techniques.
12. Martin, C., & Leroy, P. (2020). Étude des matériaux semi-conducteurs à grand gap. *Revue Française de Physique*, 12(3), 45–52.
13. Leroy, P. (2019). *Physique des semi-conducteurs avancée* (3e éd.). Lyon : Presses Universitaires.
14. Dubois, M., & Martin, J. (2021). Modélisation des bandes d'énergie dans les semi-conducteurs. *Journal Français de Physique Appliquée*, 15(2), 123–130.
15. Varshni, Y. P. (1967). Temperature dependence of the energy gap in semiconductors. *Physica*, 34(1), 149–154.
16. Varshni, Y. P. (1969). Temperature effects on the band structure of semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 40(2), 1147–1150.
17. Martin, C. (2017). *Caractéristiques électroniques des matériaux III-V*. Lyon : Presses Universitaires.
18. Dubois, M. (2021). *Propriétés physiques des matériaux semiconducteurs AlAs et GaAs*. Grenoble : Institut National des Sciences.
19. Wirths, S., Geiger, R., von den Driesch, N., Mussler, G., Stoica, T., Mantl, S., ... & Buca, D. (2015). Lasing in direct-bandgap GeSn alloy grown on Si. *Nature Photonics*, 9(2), 88–92. <https://doi.org/10.1038/nphoton.2014.321>
20. El-Kareh, B., & El-Kareh, L. (2014). *Silicon–Germanium (SiGe) Nanostructures: Production, Properties and Applications*. New York: Springer.
21. Kittel, C. (2005). *Introduction to solid state physics* (8th ed.). Hoboken, NJ: Wiley.
22. Schubert, E. F. (2018). *Light-Emitting Diodes* (3rd ed.).
23. Chelikowsky, J. R., & Cohen, M. L. (1976). Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors. *Physical Review B*, 14(2), 556–582. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.14.556>
24. Ghrib, A., et al. (2012). Control of tensile strain in germanium waveguides through silicon nitride layers. *Applied Physics Letters*, 100(20), 201104. <https://doi.org/10.1063/1.4718525>

25. Guilloy, K., et al. (2016). Germanium under high tensile stress: Nonlinear dependence of direct band gap vs strain. *ACS Photonics*, 3(10), 1907–1911. <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.6b00429>
26. Gassenq, A., et al. (2016). Accurate strain measurements in highly strained Ge microbridges. *Applied Physics Letters*, 108(24), 241902. <https://doi.org/10.1063/1.4953788>
27. ScienceDirect Topics. (2024). Band Gap Alignment – an overview. Consulté le 22 octobre 2024, sur <https://www.sciencedirect.com/topics/engineering/band-gap-alignment>
28. Reboud, V., et al. (2021). Lasing in Group-IV materials. In D. J. Lockwood & L. Pavesi (Eds.), *Silicon Photonics IV: Innovative Frontiers* (pp. 105–195). Cham: Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-030-68222-4_3
29. Aubin, J., et al. (2017). Growth and structural properties of step-graded, high Sn content GeSn layers on Ge. *Semiconductor Science and Technology*, 32(9), 094006. <https://doi.org/10.1088/1361-6641/aa8084>
30. Aubin, J., Hartmann, J. M., Barnes, J. P., Pin, J. B., & Bauer, M. (2016). Very low temperature epitaxy of heavily in situ phosphorous doped Ge layers and high Sn content GeSn layers. *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, 6(1), P21. <https://doi.org/10.1149/2.0091701jss>
31. Zhou, J., Vincent, D., Acharya, S., Ojo, S., Abrand, A., Liu, Y., ... Yu, S.-Q. (année). Grafted AlGaAs/GeSn optical pumping laser operating up to 130 K. [*Nom de la revue*], volume(numéro), pages. <https://doi.org/xxxxxxx>

CHAPITRE II

Les Lasers

II.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous abordons de manière détaillée l'univers des **lasers**, une technologie optoélectronique fondée sur un principe quantique fondamental : l'amplification de la lumière par émission stimulée de rayonnement. Le laser, depuis sa première démonstration en 1960, s'est imposé comme un outil indispensable dans de nombreux domaines scientifiques, industriels, médicaux et technologiques. Nous explorerons dans un premier temps le principe de fonctionnement du laser, en mettant en évidence les mécanismes physiques qui permettent la génération d'un faisceau lumineux cohérent, directionnel et monochromatique. Ensuite, nous analyserons les différents composants essentiels à la construction d'un laser, tels que le milieu actif, le système de pompage, la cavité optique, ainsi que les dispositifs associés. Enfin, une classification des différents types de lasers sera présentée, incluant les lasers à gaz, à solides, à semi-conducteurs et à fibres optiques, chacun ayant des caractéristiques spécifiques adaptées à des applications particulières. Ce chapitre vise ainsi à fournir une compréhension globale et structurée de la physique du laser et de sa diversité technologique.

II.1.1. Un bref historique sur les lasers à semi-conducteurs

Les lasers à semi-conducteurs [1-2] comportent une zone (généralement appelée la couche active) qui présente un gain lorsqu'elle est suffisamment excitée et qui chevauche un champ optique. Le terme « L.A.S.E.R » est un acronyme de l'expression anglaise « *light amplification by stimulated emission of radiation* » (amplification de la lumière par émission stimulée de rayonnement). L'amplification repose sur l'émission stimulée, prédite théoriquement par Einstein en 1917. Le concept de laser a d'abord été exploré dans la région des micro-ondes [1-2]. Le premier laser optique fut le laser au rubis, développé en 1960 par Th. Maiman [3].

Les lasers se distinguent des autres sources lumineuses par leur cohérence. La cohérence spatiale se traduit généralement par un faisceau étroit, limité par la diffraction. Les faisceaux laser peuvent être focalisés en des points extrêmement petits, atteignant ainsi une irradiance très élevée, ou bien ils peuvent avoir une très faible divergence afin de concentrer leur puissance à grande distance. La cohérence temporelle (ou longitudinale) implique une onde polarisée à une seule fréquence, dont la phase est corrélée sur une distance relativement grande (appelée longueur de cohérence) le long du faisceau.

Un faisceau produit par une source lumineuse thermique ou incohérente présente une amplitude et une phase instantanées qui varient de manière aléatoire dans le temps et l'espace, ce qui se traduit par une faible longueur de cohérence.

Les lasers sont caractérisés selon leur longueur d'onde dans le vide. La plupart des lasers dits « mono-longueur d'onde » produisent en réalité un rayonnement en plusieurs modes avec des longueurs d'onde légèrement différentes. Bien que la cohérence temporelle implique une certaine monochromaticité, certains lasers émettent un spectre lumineux large ou plusieurs longueurs d'onde simultanément. Certains lasers ne fonctionnent pas en mode spatial unique et produisent des faisceaux qui divergent davantage que ce que limite la diffraction. Tous ces dispositifs sont classés comme des « lasers » en raison de leur méthode de production de lumière, c'est-à-dire l'émission stimulée. Les lasers sont utilisés lorsque la lumière avec la cohérence spatiale ou temporelle requise ne peut être produite par des technologies plus simples.

II.2. Définition du laser

Le laser (voir figure I.1) est un dispositif optoélectronique capable de générer un faisceau lumineux cohérent par amplification de photons via un processus d'émission stimulée. Il est composé de trois éléments essentiels :

- Un milieu actif (ou milieu de gain),
- Un système de pompage fournissant l'énergie nécessaire à l'excitation des atomes ou des molécules,
- Une cavité optique, généralement formée de miroirs, assurant la résonance et l'amplification du rayonnement [4].

La lumière émise par un laser possède une longueur d'onde bien définie, une faible divergence angulaire, ainsi qu'une cohérence temporelle et spatiale élevée. Ces caractéristiques en font une source idéale pour les traitements de haute précision, qu'il s'agisse de microchirurgie ou de découpe industrielle [5].

II.3. Les composants d'un laser

Un laser se compose de plusieurs éléments essentiels qui travaillent ensemble pour produire une lumière cohérente par émission stimulée. Ces composants varient légèrement selon le type de laser, mais les éléments fondamentaux sont les suivants :

II.3.1. Milieu actif (ou milieu amplificateur)

Le milieu actif est le cœur du laser. Il peut être gazeux, liquide ou solide, et c'est dans ce milieu que se produit l'amplification de la lumière grâce au phénomène d'émission stimulée des photons [1].

Par exemple, dans un laser à semi-conducteurs tel que l'AlGaAs/GaAs, le milieu actif est constitué d'une jonction p-n dopée de manière spécifique pour favoriser la recombinaison des porteurs de charge, ce qui génère un rayonnement cohérent.

II.3.2. Source de pompage (ou pompe énergétique)

La source de pompage joue un rôle essentiel dans le fonctionnement d'un laser, car elle fournit l'énergie nécessaire pour exciter les atomes ou les électrons du milieu actif vers des niveaux d'énergie supérieurs, condition indispensable à l'obtention de l'inversion de population. Cette excitation peut être assurée par différents types de pompage : optique, à l'aide d'une lampe flash ou d'une diode laser ; électrique, par injection de courant direct — méthode courante dans les lasers à semi-conducteurs ; ou encore chimique, utilisée dans certains lasers à haute énergie. Dans le cas particulier des lasers à semi-conducteurs, le pompage est généralement réalisé par injection directe de courant à travers la jonction p-n, favorisant la recombinaison des porteurs de charge dans le milieu actif [6].

II.3.3. Cavité optique (ou résonateur)

La cavité optique constitue un élément fondamental du laser, car elle permet la résonance et l'amplification du rayonnement lumineux. Elle est généralement composée de deux miroirs positionnés de part et d'autre du milieu actif : l'un est totalement réfléchissant, tandis que l'autre est partiellement transparent, permettant à une fraction du rayonnement amplifié de s'échapper sous forme de faisceau laser. Grâce à cette configuration, les photons effectuent de nombreux

allers-retours à travers le milieu actif, où ils sont amplifiés à chaque passage par émission stimulée, renforçant ainsi la cohérence, la directionnalisation et l'intensité du faisceau final [7].

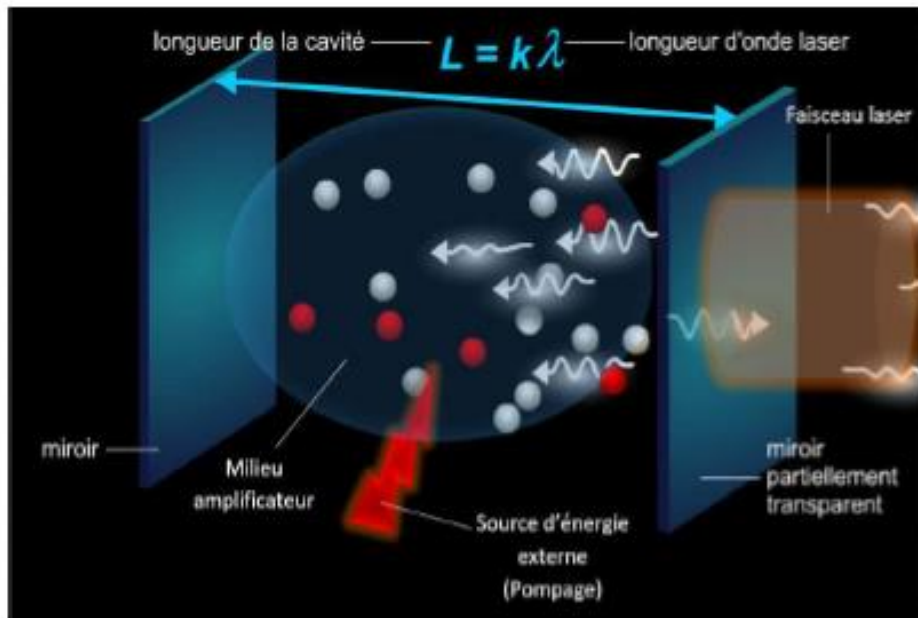


Figure II.1. Oscillateur laser 3D. [8]

II.4. Théorie des lasers à semi-conducteurs

II.4. 1. Interaction rayonnement-matière

Les interactions rayonnement-matière décrivent les effets du rayonnement, pris dans son sens quantique, sur un atome. Le terme « rayonnement » englobe à la fois :

- ✓ Rayonnement électromagnétique (lumière, rayons X, rayons gamma)
- ✓ Particules (électron, neutron, rayonnement alpha).

Ces rayonnements sont utilisés pour analyser la matière. En effet, les atomes sont trop petits pour être visibles ou palpables, on ne peut donc les connaître que de manière indirecte ; on observe la façon dont ils perturbent le rayonnement incident. Cela a donné naissance à deux types de méthodes d'analyse :

- Méthodes de diffraction : lorsque les atomes sont organisés de manière ordonnée (cristal), le rayonnement sera diffusé uniquement dans certaines directions de l'espace ; l'étude de cette distribution spatiale de l'intensité diffusée permet de caractériser l'organisation de la matière ;

• Méthodes spectrométriques : les atomes absorbent une partie du rayonnement incident et en réémettent une autre ; le spectre d'absorption et de réémission est caractéristique des énergies de liaison de la matière, et donc de sa nature chimique (voir figure II.2)[9-11].

Le rayonnement incident peut interagir avec l'atome de plusieurs manières : Il peut être diffusé, c'est-à-dire qu'il « rebondit » sur l'atome :

- Diffusion élastique : le rayonnement rebondit sans perdre d'énergie ; si le rayonnement incident est électromagnétique (lumière, rayons X), on parle de diffusion Rayleigh, s'il s'agit d'un électron, on parle de rétrodiffusion ;
- Diffusion inélastique : le rayonnement provoque l'éjection d'un électron faiblement lié, il perd donc de l'énergie, c'est la diffusion Compton ;
- Il peut être absorbé, provoquant une transition électronique :
- Si l'énergie incidente est faible, elle provoque simplement le changement d'orbite d'un électron ;
- Si l'énergie est suffisante, elle provoque une ionisation ; si le rayonnement incident est électromagnétique, on parle d'effet photoélectrique et l'électron éjecté est un photoélectron ; si le rayonnement incident est un faisceau d'électrons, les électrons éjectés sont des électrons secondaires.

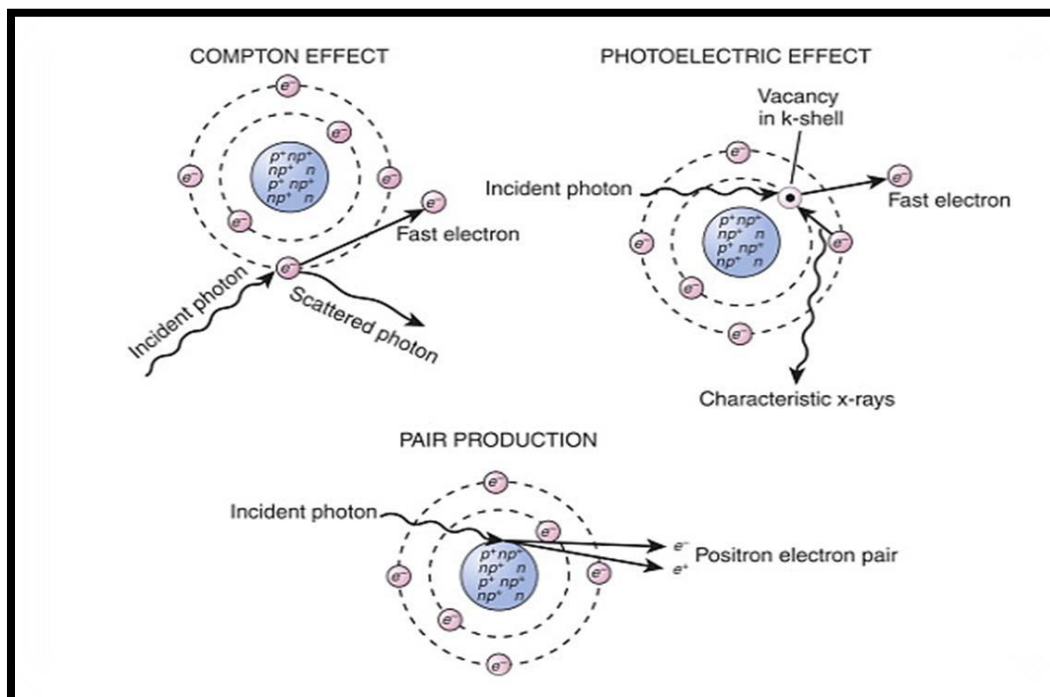


Figure II.2. Différents types d'interaction rayonnement-matière [11].

II.4.2. Modèle d'Einstein de l'interaction lumière-atome

Einstein a considéré deux états d'énergie d'un atome [1] et a postulé trois types de transitions atomiques illustrées à la Figure II.3, à savoir : l'absorption, l'émission spontanée et l'émission stimulée.

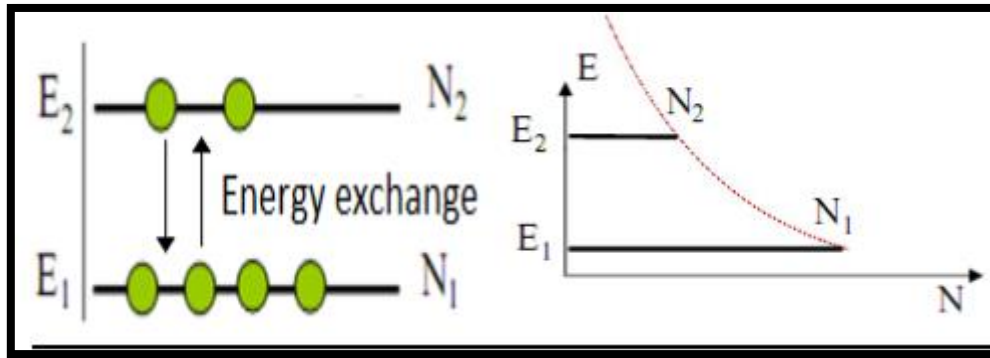


Figure II.3. Schémas énergétiques, ne retenant que les deux niveaux E_1 et E_2 de la transition laser [1].

Pour chaque processus, Albert Einstein a introduit un coefficient spécifique qui caractérise le taux de transition correspondant (nombre d'événements de transition par unité de temps).

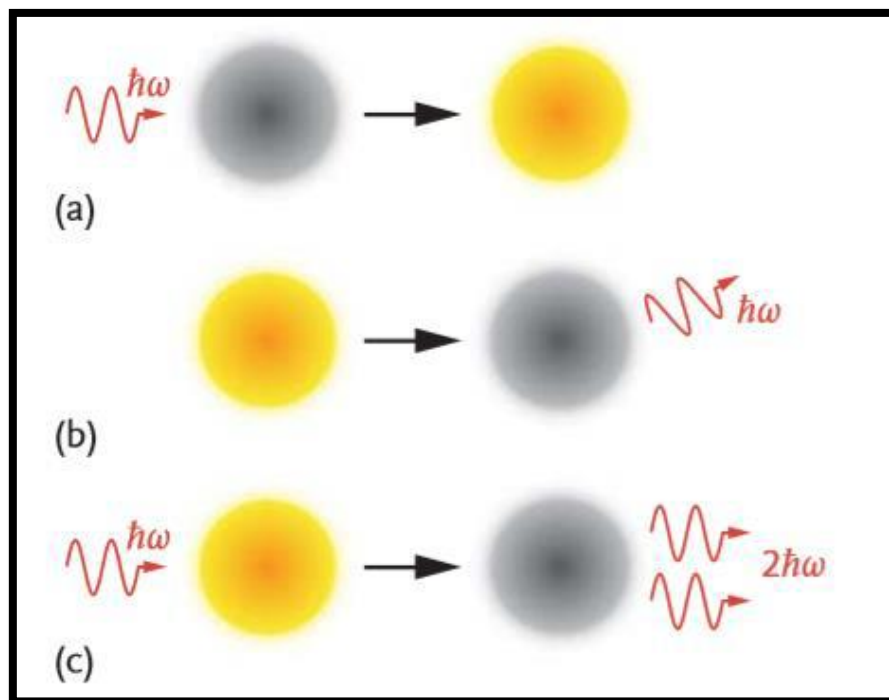


Figure II.4. Transitions d'énergie d'un atome : a) absorption, b) émission spontanée, c) émission stimulée.

a-Absorption

Un atome à l'état d'énergie inférieur (1) est excité vers un état supérieur (2) par l'absorption d'un photon d'énergie $E_2 - E_1 = \hbar\omega_{21}$ (Figure II.5-II.4. a). Par conséquent, le photon est annihilé, son énergie totale étant transférée à l'atome. La vitesse de variation du nombre d'atomes à l'état inférieur N_1 est donnée par :

$$\frac{dN_1}{dt} = -B_{12}N_1\rho(\omega) \quad (\text{II.1})$$

où B_{12} est le coefficient d'Einstein pour l'absorption et $\rho(\omega)$ la densité spectrale d'énergie de la lumière (énergie par unité de volume et par intervalle de fréquence), avec $[\rho] = \text{Js}/\text{m}^3$. L'indice « 12 » du coefficient d'Einstein indique que la transition commence au niveau d'énergie (1) et se termine au niveau (2).

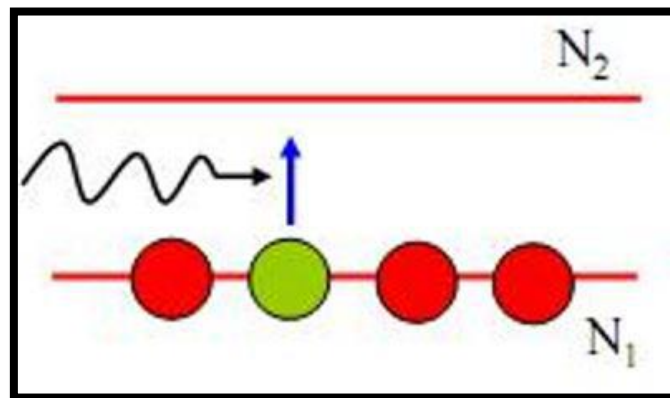


Figure II.5. Modèle d'Einstein pour le processus radiatif d'absorption

b- Émission spontanée

Un atome excité retourne spontanément à l'état inférieur après une durée de vie moyenne τ_{21} . À ce moment-là, un photon d'énergie $\hbar\omega_{21}$ est émis et se propage dans une direction aléatoire (Figure II.6- II.4.b). L'émission spontanée est un processus statistique qui résulte de la tendance naturelle de l'atome à perdre son énergie excédentaire. Le taux de variation dans le temps de la population d'atomes excités N_2 est donné par :

$$\frac{dN_2}{dt} = \frac{N_2}{\tau_{21}} = -A_{21}N_2 \quad (\text{II.2})$$

$A_{21} = 1/\tau_{21}$ est le coefficient d'Einstein pour l'émission spontanée. Si la durée de vie τ_{21} d'un atome dans l'état excité est de l'ordre de quelques nanosecondes ($10^{-8}s$), l'émission de photons est alors appelée fluorescence. Les atomes restent pratiquement indéfiniment dans l'état fondamental, car il s'agit du seul état d'énergie stable.

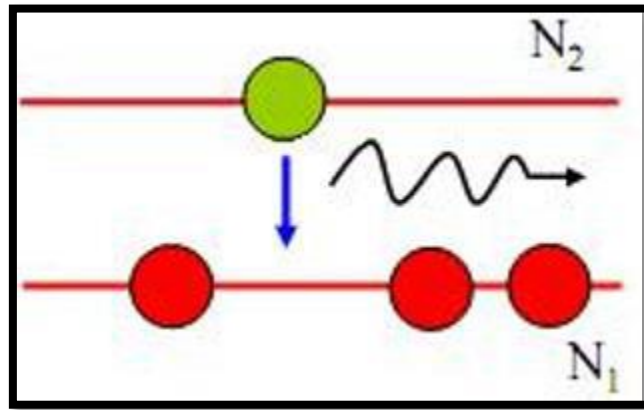


Figure II.6. Modèle d'Einstein pour le processus émission spontanée.

c- Émission stimulée

Dans le cas de l'émission stimulée, un photon incident d'énergie $\hbar\omega_{21}$ provoque la transition d'un atome excité vers un état inférieur en générant un second photon (**Figure II.7 -II.4.c**). Fait remarquable, ce second photon est un « clone » du photon incident : il possède la même fréquence, la même polarisation et se propage dans la même direction. Les deux photons émis sont donc dits cohérents. De manière analogue aux équations (II.1) et (II.2), le taux de transition de l'émission stimulée est donné par :

$$\frac{dN_2}{dt} = -B_{21}N_2\rho(\omega) \quad (\text{II.3})$$

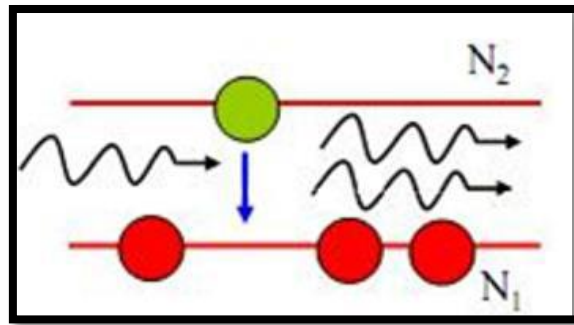


Figure II.7. Modèle d'Einstein pour le processus émission stimulée.

Bien que les coefficients d'Einstein A_{21} , B_{12} et B_{21} soient associés à des processus de transition différents, ils sont tous directement liés les uns aux autres. Si l'on connaît l'un d'entre eux, il est possible de déterminer les autres. Considérons des atomes ne s'influençant pas mutuellement à l'intérieur d'une boîte isolée. En régime stationnaire, en présence de lumière, les taux d'excitation et de désexcitation des atomes sont exactement équilibrés, c'est-à-dire :

$$\underbrace{B_{12}N_1\rho(\omega)}_{\text{absorption}} = \underbrace{A_{21}N_2 + B_{21}N_1\rho(\omega)}_{\text{émission}} \quad (\text{II.4})$$

À partir de cette équation fondamentale, Einstein a déduit les relations suivantes :

$$B_{12} = B_{21} \quad (\text{II.5})$$

$$A_{12} = \alpha\omega^3 B_{21} \quad (\text{II.6})$$

Comparée à l'émission stimulée et à l'absorption, la contribution de l'émission spontanée devient plus significative lorsque la fréquence de la lumière augmente. C'est pourquoi il est généralement plus difficile de concevoir un laser fonctionnant à des fréquences élevées (ou à des longueurs d'onde courtes). De plus, les transitions présentant une forte probabilité d'absorption tendent également à avoir un taux élevé d'émission, tant pour les processus spontanés que stimulés.

II.4. 2. Conditions d'inversion de population

Considérons les atomes exposés à la lumière polychromatique donnée par la situation illustrée à la figure II.8 comme un schéma de niveaux d'énergie. Les états énergétiques du système atomique sont représentés par des barres horizontales. Les états (1) et (2) sont appelés respectivement niveaux laser inférieur et supérieur. Les flèches verticales correspondent aux processus de transition possibles. Par absorption de photons, les atomes sont excités vers le niveau laser supérieur (2) à une vitesse P_2 par seconde et par volume. Après une durée de vie τ_{21} , ils retournent à (1) par émission spontanée. L'état (1) n'est pas nécessairement l'état fondamental des atomes. Un autre niveau (0) pourrait exister, situé sous le niveau laser inférieur (1). Pour cette raison, un atome excité peut également transiter spontanément vers l'état fondamental (0) après une durée de vie τ_{20} . Le taux d'appauvrissement total par émission spontanée de l'état excité (2) est alors donné par $1/\tau_2 = 1/\tau_{21} + 1/\tau_{20}$. Le taux de pompage P_1 et la durée de vie τ_1 du niveau laser inférieur sont définis de manière analogue, tandis que P_1 n'inclut pas l'émission spontanée de (2) à (1).

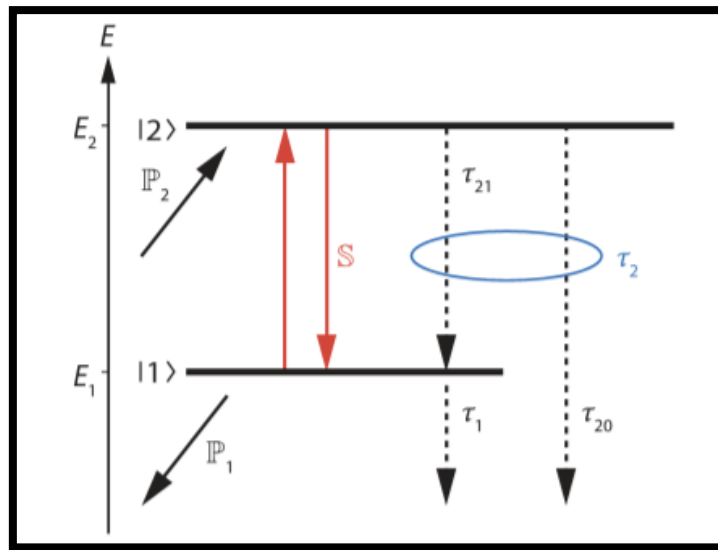


Figure II.8. Illustration et aperçu des paramètres introduits pour décrire les transitions atomiques à plusieurs niveaux d'énergies.

Pour comprendre la dynamique d'un système laser, supposons d'abord une faible intensité de pompage. Dans ce cas, seules les contributions de la source de pompage et de l'émission spontanée sont prises en compte, de sorte que la population d'atomes dans les états (1) et (2) évolue dans le temps selon :

$$\frac{dN_1}{dt} = -P_1 + \frac{N_2}{\tau_1} - \frac{N_1}{\tau_1} \quad (\text{II.7})$$

$$\frac{dN_2}{dt} = +P_2 - \frac{N_2}{\tau_2} \quad (\text{II.8})$$

Respectivement. Les relations (II.7) et (II.8) constituent les équations de taux d'un système non amplificateur. Si le pompage et la désexcitation sont exactement équilibrés, la population des états reste constante malgré les processus dynamiques. Dans cet état stationnaire ($dN_1/dt = dN_2/dt = 0$), la différence de population $N_2 - N_1$ entre les niveaux laser supérieur et inférieur peut être calculée à partir des équations (II.7) et (II.8) comme suit [12] :

$$\Delta N_S = N_2 - N_1 = P_2 \tau_2 \left(1 - \frac{\tau_1}{\tau_{21}}\right) + P_1 \tau_1 \quad (\text{II.9})$$

Si le facteur $\left(1 - \frac{\tau_1}{\tau_{21}}\right)$ est positif, on peut en déduire les conditions nécessaires suivantes pour obtenir une inversion de population :

1. Les taux de pompage P_1 et P_2 sont élevés.
2. Le taux de désexcitation $1/\tau_2$ à partir de l'état excité est faible. Cela signifie que, en moyenne, les atomes restent longtemps dans l'état (2).
3. La durée de vie dans le niveau laser inférieur est courte. Cela signifie que les atomes ne restent qu'un court instant dans l'état (1), de sorte que ce niveau est rapidement vidé.

À l'étape suivante, nous augmentons l'intensité du faisceau de pompage. En conséquence, l'amplification de l'intensité par les transitions stimulées (flèches rouges dans la Figure II.9) doit être prise en compte. À cet effet, nous introduirons un taux de transition supplémentaire S (avec $S \propto B_{21}(\omega)$) et nous étendrons les équations de taux (II.7) et (II.8) de la manière suivante :

$$\frac{dN_1}{dt} = -P_1 + \frac{N_2}{\tau_1} + \underbrace{\frac{N_2 S - N_1 S}{\text{Stimulated transitions}}}_{\text{Stimulated transitions}} \quad (\text{II.10})$$

$$\frac{dN_2}{dt} = +P_2 - \frac{N_2}{\tau_2} - \underbrace{\frac{N_2 S + N_1 S}{\text{Stimulated transitions}}}_{\text{Stimulated transitions}} \quad (\text{II.11})$$

L'équation (II.11) montre que la population du niveau laser supérieur est réduite par l'émission stimulée. Cependant, puisque l'émission stimulée augmente la population de l'état (1), le nombre d'événements d'absorption augmente également (voir le quatrième terme de l'équation (II.11)). En régime stationnaire, la différence de population en présence d'émission stimulée est donnée par :

$$\Delta N_s = N_2 - N_1 = \frac{\Delta N_s}{1 + S(\tau_2 + \tau_1 - (\tau_1 \tau_2 / \tau_{21}))} \quad (\text{II.12})$$

Où nous avons utilisé l'équation (II.9). Comme attendu pour un laser, le nombre d'atomes dans l'état excité, et par conséquent le degré d'inversion de population, est réduit par le taux de transition stimulée S et augmenté par le taux de pompage P_2

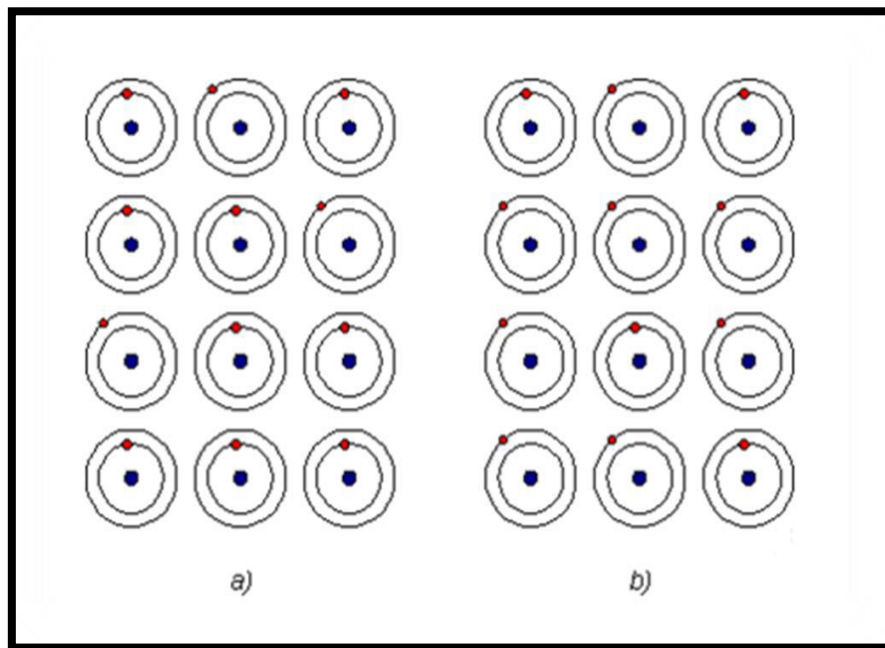


Figure II.9. a) Population normale : il y a plus d'atomes dans les niveaux inférieurs. b) Inversion de population : il y a plus d'atomes dans les niveaux supérieurs.

II.4. 3. Théorie du courant de seuil

Le courant de seuil I_{th} est le courant minimal à injecter dans un laser pour que l'émission stimulée l'emporte sur la luminescence spontanée, marquant ainsi le passage au régime laser.

II.4.3.1. Facteurs influençant le courant de seuil

a. Gain optique vs pertes

L'émission laser débute lorsque le gain optique G compense les pertes totales α_{TOT} du système [12]:

$$G = \alpha_{TOT} = \alpha_I + \frac{1}{2L} \ln \left(\frac{1}{R_1 R_2} \right) \quad (\text{II.13})$$

où :

- α_I : pertes internes (absorption, diffusion),
- L : longueur de la cavité,
- R_1, R_2 : réflectivités des miroirs aux extrémités de la cavité.

b. Inversion de population

L'inversion de population est atteinte lorsque la densité de porteurs (électrons et trous) dans la zone active est suffisante pour permettre un gain optique positif. Cette condition est essentielle pour déclencher l'émission stimulée.

c. Température

La température influence significativement le courant de seuil :

- À température élevée, la recombinaison non radiative augmente,
- Le gain diminue en raison de la répartition thermique des porteurs.

Ainsi, le courant de seuil croît avec la température.

II.4. 3. 2. Gain optique du laser

Le gain optique G représente l'amplification du signal optique à l'intérieur de la région active du laser. Il dépend :

- De la densité de porteurs injectés,
- Des propriétés optoélectroniques du matériau.

a. Expression du gain dans un laser à puits quantiques (MQW)

Dans les lasers à puits quantiques (comme AlGaAs ou GeSn MQW), le gain optique peut s'exprimer de manière simplifiée par [13]:

$$G(n) = g_0 \ln \left(\frac{n}{n_{tr}} \right) \quad (\text{II.14})$$

où :

- g_0 : coefficient de gain différentiel,
- n : densité de porteurs injectée,
- n_{tr} : densité de transparence, seuil à partir duquel le gain devient positif.

b. Avantages des puits quantiques

Les puits quantiques permettent :

- Une quantification des états électroniques,
- Une densité d'états favorable à l'émission stimulée.

Cela se traduit par :

- Un gain optique plus élevé,
- Un courant de seuil plus bas.

II.5. Les différents types de lasers :

Les différents types de laser peuvent être classés en fonction de la nature du milieu amplificateur : gazeux, liquide (colorant) ou solide. Le but de cette partie est de faire un tour d'horizon rapide des principales familles de lasers dans une perspective d'utilisation.

II.5.1 Laser à gaz

Les lasers à gaz ont pour point commun de partager la même source de pompage : l'électricité. Les espèces gazeuses sont portées dans l'état excité de façon directe par collision avec des électrons ou de façon indirecte par collision avec d'autres gaz, eux-mêmes excités

électriquement [14]. Les lasers à gaz couvrent tout le spectre optique, depuis l'ultraviolet jusqu'à l'infrarouge lointain. Cependant, le spectre n'est pas couvert en continue : les lasers à gaz émettent des raies très fines spectralement. Parmi les lasers à gaz les plus courants, on trouve (de l'UV à l'IR lointain) :

- Les excimères (ArF : 193 nm, KrF : 249 nm, XeCl : 308 nm)
- Laser à argon ionisé (raies dans le bleu et le vert)
- Laser hélium néon (c'est le néon qui est utilisé pour l'effet laser) 632,8 nm, 543,3 nm, 1,15 μm , 3,39 μm .
- Laser CO₂ : très nombreuses raies autour de 9,6 μm et 10,6 μm

Les lasers à CO₂ sont les seuls à être vraiment efficaces (rendement de 15% à 20%). Ils sont utilisés dans l'industrie pour le traitement des matériaux. Quant aux autres, le rendement est largement inférieur à 1%. Les lasers à gaz sont souvent des lasers encombrants et nécessitant un refroidissement par eau important (quasiment toute l'énergie apportée par le pompage part en chaleur). Même si les lasers à gaz dans le visible (Argon, Hélium Néon) tendent à être remplacés par des lasers à solides, les lasers à excimères et les lasers CO₂ restent très utilisés (traitement des matériaux au sens large) (**Figure II.10**).

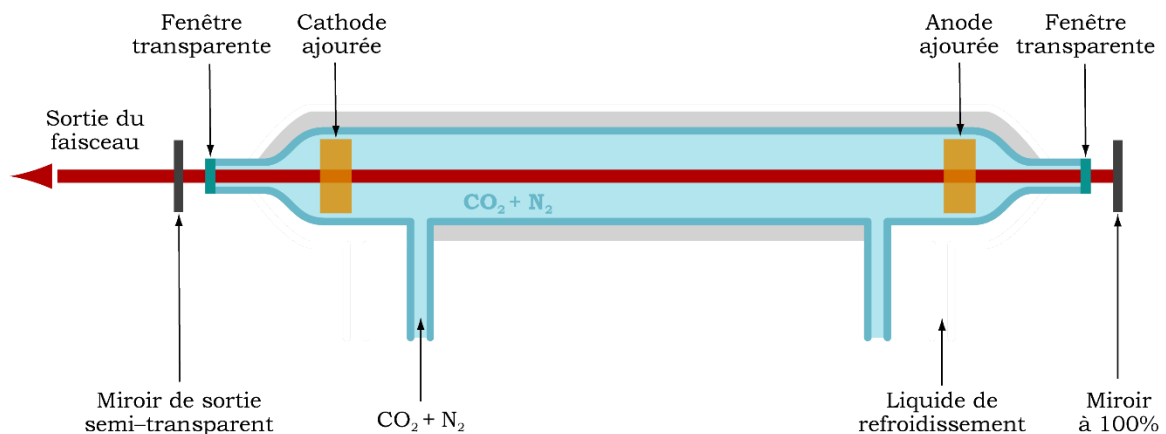


Figure II.10. Schéma d'un laser au dioxyde de carbone CO₂ [15].

II.5.2. Laser à colorant

Les lasers à colorant utilisent des molécules organiques émettant en général dans le visible (d'où leur nom de colorant) (**Figure II.11**). Ces molécules sont diluées dans un solvant (en général

alcoolique, comme l'éthylène glycol ou le méthanol). Le pompage des lasers à colorant est optique : soit par des lampes à arc, soit, dans la majorité des cas par d'autres lasers (lasers à gaz ou laser à solide). Le spectre couvert est l'intégralité du visible. En effet, les colorants sont des molécules organiques complexes qui possèdent une multitude de niveaux d'énergie. Les niveaux sont tellement serrés qu'on parle plutôt de bande d'énergie. Une molécule de colorant couvre en général en continue une région du visible de l'ordre d'une cinquantaine de nanomètres. Les lasers à colorant sont les seuls lasers à couvrir entièrement le spectre visible. Malgré ces propriétés intéressantes, les lasers à colorant sont peu utilisés car leur mise en œuvre est lourde : pour éviter de détruire les molécules à cause du pompage, le colorant circule dans la zone de pompage à partir d'un réservoir. De plus, le mélange colorant + solvant se dégrade dans le temps et doit être changé régulièrement [16].

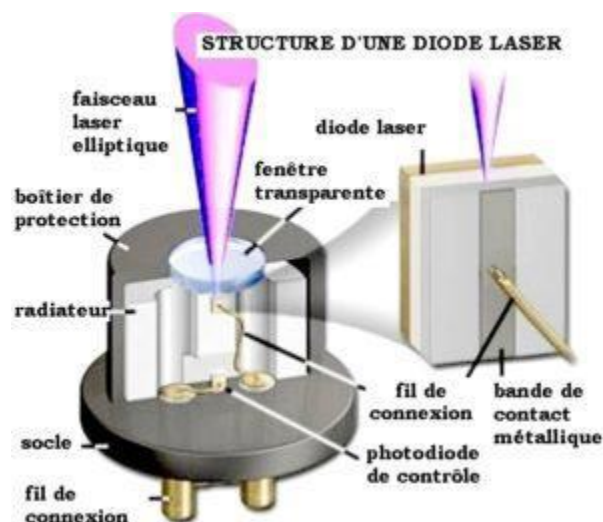


Figure II.11. Structure interne d'une diode laser [16].

II.5.3. Lasers à semi-conducteurs

Les diodes lasers, ou lasers à semi-conducteurs, sont généralement classées en deux grandes catégories : les lasers à émission latérale (EEL – *Edge Emitting Laser*) et les lasers à émission verticale par la surface (VCSEL – *Vertical Cavity Surface Emitting Laser*)[17,18,19]. La différence essentielle entre ces deux types réside dans l'orientation de la cavité optique. Dans un EEL, la cavité est orientée horizontalement et la rétroaction est assurée par des miroirs formés par les facettes clivées du composant, entraînant une émission par la tranche. En

revanche, dans un VCSEL, la cavité est orientée verticalement ; la rétroaction est obtenue à l'aide de miroirs de Bragg constitués de multicouches alternées, la zone active étant prise en sandwich entre deux miroirs DBR dopés respectivement N et P. Dans les deux cas, l'amplification lumineuse repose sur la transition des électrons de la bande de conduction vers la bande de valence au sein d'un matériau semi-conducteur, un processus qui génère l'émission de photons.

II.5.3.1. Laser Fabry-Pérot (FP)

Le laser Fabry-Pérot (FP) est constitué de deux miroirs semi-réfléchissants parallèles (R_1 et R_2) présentant un fort coefficient de réflexion. À l'intérieur de la cavité optique (voir Figure II.12), la lumière se propage en effectuant des allers-retours entre les deux miroirs ; à chaque réflexion, une partie du rayonnement s'échappe, générant des figures d'interférence caractéristiques, observables à l'infini sous forme d'anneaux. Le principe de fonctionnement repose sur une contre-réaction résonante, ne permettant l'amplification que d'un nombre fini de longueurs d'onde, correspondant aux modes résonants de la cavité. Ces modes sont alors amplifiés par le milieu actif du laser, assurant l'émission cohérente [20].

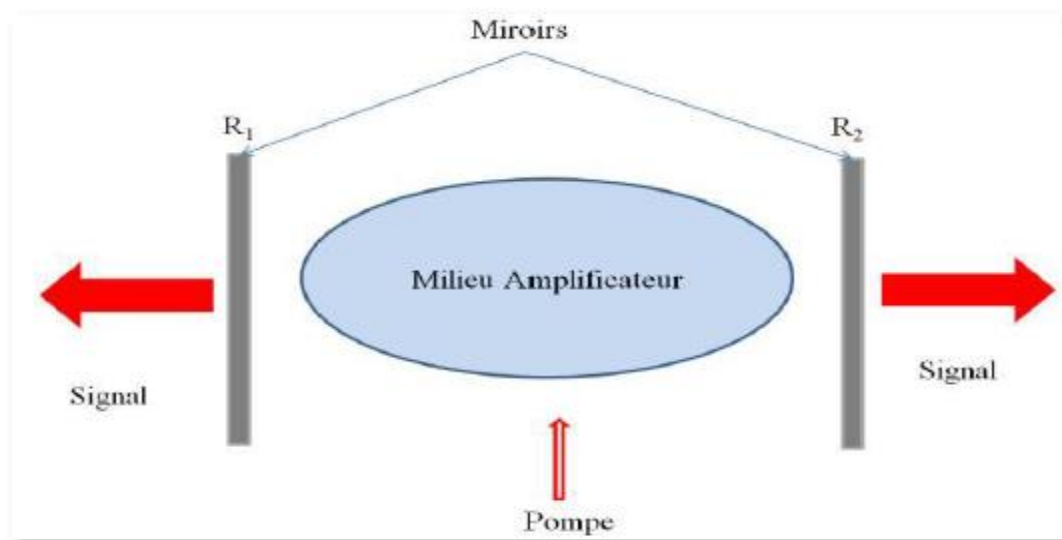


Figure II.12. Schéma générique d'une diode laser à cavité Fabry-Pérot [20].

II.5.3.2. Diode laser à double hétérojonction (DH)

Le laser à Double Hétérojonction présente particulièrement un intérêt pour la réalisation des sources lasers à semi-conducteurs, créant une barrière double pour les porteurs injectés [21]. La réalisation de cette structure de type DH permet l'obtention d'un gain élevé donc une densité de courant élevée avec des faibles valeurs de courant. La structure est schématisée par la figure ci-dessous :

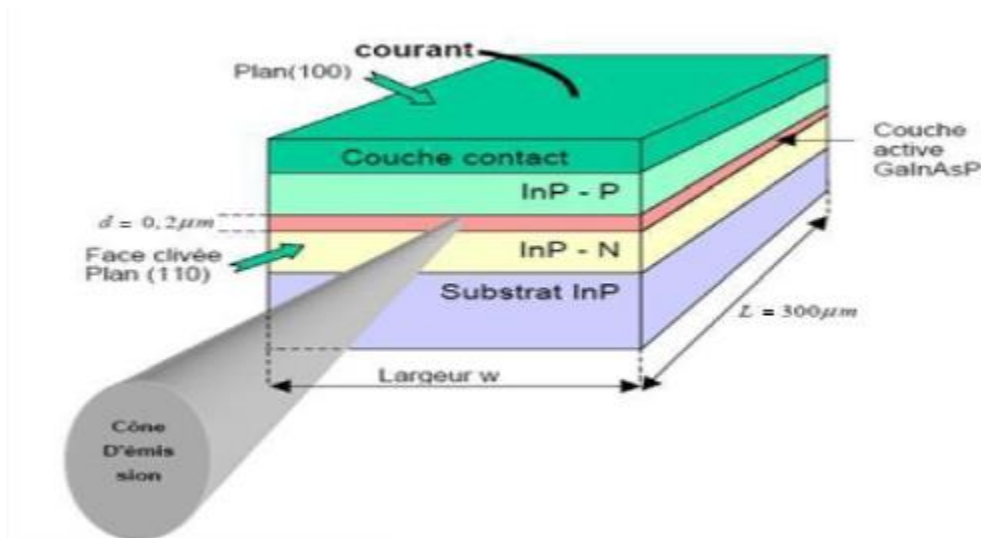


Figure II.13. Schéma générique d'une diode laser à double hétérojonction [22].

II.5.3.3. Diode laser homojonction PN

Dans ce type des lasers, l'effet laser se produit par application de différence de potentiel aux bornes de la jonction P et N, entre les états du bas de la bande de conduction et les états du sommet de la bande de valence. Les électrons injectés dans la bande de conduction et les trous focalisés dans la bande de valence vont migrer vers la zone intermédiaire. La source de la lumière dans ce type de laser est constituée par la création des photons lors de la combinaison électrons/trous comme montré dans la figure II.14 suivantes :

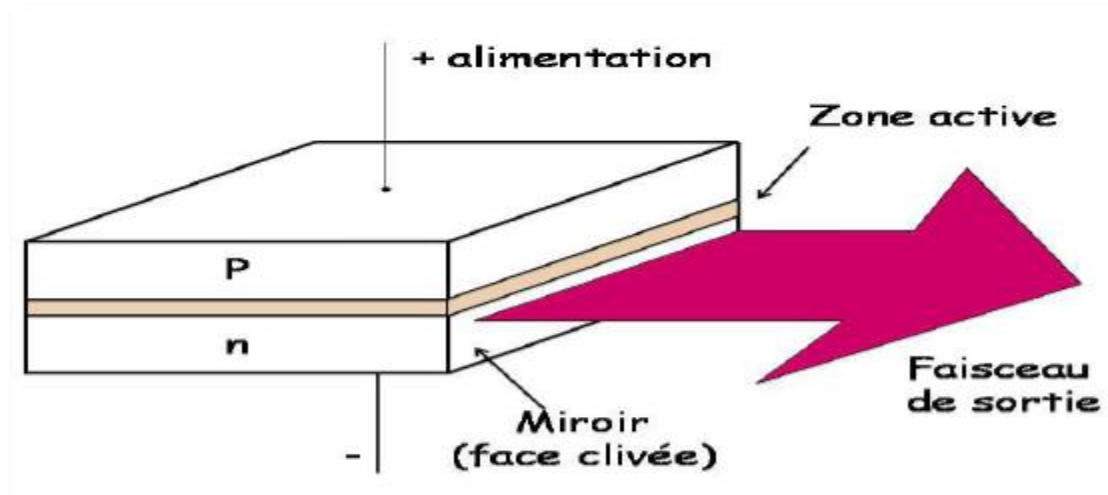


Figure II.14. Structure d'un laser à homojonction PN [23].

II.5.3.5. Diode laser à cavité verticale émettant par la surface VCSEL

Une diode laser à cavité verticale émettant par la surface, ou VCSEL (Vertical Cavity Surface Emitting Laser) est un type de diode laser à semi-conducteur III-V qui émet un rayon laser perpendiculairement à la surface. Un VCSEL comprend une zone active prise en sandwich par deux miroirs réfléchissants dont la zone active constituée d'un ou plusieurs puits quantiques séparés par des barrières ou couche d'espacement. La structure des miroirs est un DBR à semi-conducteur. Les miroirs sont composés de couches d'alternance de haut et de bas avec un indice de réfraction élevé et généralement le faisceau laser est émet à travers le miroir supérieur dopé P qui est moins de réflectivité à celui dopé N qui est le miroir inférieur. La structure de diode laser à cavité verticale émettant par la surface est représentée dans la **Figure II.15** suivantes :

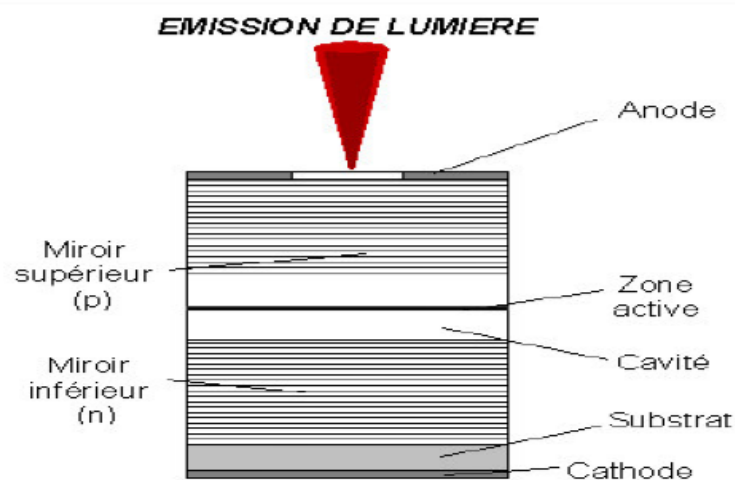


Figure II.15: Schéma structurel d'une diode laser à cavité verticale émettant par la surface VCSEL [24].

II.6. Application des lasers

Les particularités de la lumière laser sont aujourd'hui mises à profit dans des applications extrêmement variées. Par exemple, dans le domaine industriel, les lasers sont utilisés pour leur puissance et leur précision dans des opérations de marquage, soudage, découpage, perçage ou décapage. Contrairement aux outils classiques, ils présentent l'avantage de ne pas s'user [25].

Ultrapuissants et ultrarapides, les lasers sont également employés par les chercheurs pour étudier la physique à très haute densité d'énergie ou les phénomènes liés aux intensités extrêmes.

En informatique et dans le domaine audiovisuel, les diodes laser permettent la lecture et l'enregistrement de données sur des supports optiques numériques tels que les CD et les DVD.

Les lasers trouvent aussi des applications essentielles dans le domaine des télécommunications, notamment grâce aux réseaux de fibre optique, ainsi qu'en imprimerie.

Enfin, en médecine, les lasers sont largement utilisés : en ophtalmologie (pour le traitement de la myopie ou de la cataracte), en dermatologie, en dentisterie (soins des gencives, traitement des caries) ou encore en phlébologie (traitement des varices). Cette technique est généralement bien moins traumatisante que les interventions chirurgicales classiques [26].

II.7. Bibliographie

1. Einstein, A. (1917). Zur Quantentheorie der Strahlung. *Physikalische Zeitschrift*, 18, 121–128.
2. Maiman, T. H. (1960). Stimulated optical radiation in ruby. *Nature*, 187(4736), 493–494. <https://doi.org/10.1038/187493a0>
3. Schawlow, A. L., & Townes, C. H. (1960). *Infrared and optical masers* (U.S. Patent No. 2,929,922). United States Patent and Trademark Office. <https://patents.google.com/patent/US2929922A>
4. Svelto, O. (2010). *Principles of lasers* (5th ed.). Springer. <https://doi.org/10.1007/978-1-4419-1302-9>
5. Silfvast, W. T. (2004). *Laser fundamentals* (2nd ed.). Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511814524>
6. Siegman, A. E. (1986). *Lasers*. University Science Books.
7. Saleh, B. E. A., & Teich, M. C. (2007). *Fundamentals of photonics* (2nd ed.). Wiley.
8. Schiavo, D. (2012, 1er juin). *Modeling radiation effects on a triple junction solar cell using Silvaco ATLAS* [Mémoire, École Supérieure Navale Montrey CA]. DTIC. <https://apps.dtic.mil/sti/citations/ADA563655>
9. Attwood, D. (2000). *Soft X-rays and extreme ultraviolet radiation: Principles and applications*. Cambridge University Press.
10. Klein, M. V., & Furtak, T. E. (1986). *Optics* (2nd ed.). Wiley.
11. Knoll, G. F. (2010). *Radiation detection and measurement* (4th ed.). Wiley.
12. Beiser, A. (2003). *Concepts of modern physics* (6th ed.). McGraw-Hill.
13. Ben Bakir, B. (2008). *Étude et réalisation de lasers à cavité verticale émettant par la surface (VCSELs) à base d'InP pour applications en télécommunications* [Thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Rennes]. <https://theses.hal.science/tel-00349281> Semiconductor laser. (1993). Kluwer Academic (2nd ed.).
14. Wikipédia. (n.d.). *Laser au dioxyde de carbone*. https://fr.wikipedia.org/wiki/Laser_au_dioxyde_de_carbone
15. Dangoisse, D., Hennequin, D., & Zehnle-Dhaoui, V. (1998). *Les lasers*. Édition Masson.
16. Drahoume, Y. B., & Fezoui, A. (2022). *Analyse et conception d'une diode laser VCSEL exploitée dans la troisième fenêtre des transmissions optiques* [Mémoire de master, Université Abderrahmane Mira de Bejaia].
17. (Manquant dans votre liste — voulez-vous en ajouter un ?)
18. Margarita, G. (2008). *Étude et réalisation d'un oscillateur opto-microonde à base de VCSEL pour la génération harmonique de signaux microondes* [Thèse, Université de Toulouse].
19. Rissons, A. (2003). *Caractérisation et modélisation optoélectronique des diodes laser à cavité verticale émettant par la surface* [Thèse, Université de Toulouse].
20. Rzaigui, H. (2016, 31 mars). *Systèmes hybrides opto/sans fil pour les réseaux multigigabits aux fréquences millimétriques* [Doctorat, Université Grenoble Alpes]. HAL. <https://theses.hal.science/tel-01295704/>
21. Cayron, C. (2011, 1er décembre). *Étude théorique et expérimentale de diodes lasers, pour horloges Rubidium et Césium, refroidissement d'atomes et capteurs inertiels* [Doctorat, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI]. HAL. <https://theses.hal.science/tel-00984686/>
22. Benatmane, K. (2011, 14 décembre). *Étude des lasers à base des semiconducteurs III-V* [Mémoire de maîtrise inédit]. Université El Hadj Lakhder - Batna.

23. Maurin, I. (2002, 3 septembre). *Étude du bruit quantique dans les lasers à semiconducteurs (VCSELS et diodes laser)* [Doctorat, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI]. HAL. <https://theses.hal.science/tel-00001605/>
24. Silfvast, W. T. (2004). *Laser fundamentals* (2nd ed.). Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/CBO9780511814524>
25. Svelto, O. (2010). *Principles of lasers* (5th ed.). Springer. <https://doi.org/10.1007/978-1-4419-1302-9>

CHAPITRE III

Résultats et Discussions

III.1. Introduction

Ce chapitre illustre l'application des considérations théoriques présentées dans les chapitres précédents à une structure laser à puits quantiques multiples (MQW) en $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Nous y présentons les résultats obtenus pour un laser MQW AlGaAs/GaAs , simulé à l'aide du logiciel SILVACO. Le simulateur SILVACO/TCAD repose sur une méthode $k \cdot p$ à six bandes auto-cohérente, permettant une modélisation précise des propriétés optoélectroniques. L'analyse se concentre principalement sur le gain optique ainsi que sur les caractéristiques courant-tension. Une étude comparative est menée sur deux paramètres essentiels : la fraction molaire aluminium (Al) et la largeur des puits quantiques. Par ailleurs, l'introduction d'une couche de GeSn visant à former une double hétérojonction est également examinée, afin d'évaluer son impact sur les performances optiques et électriques des lasers.

III.2. Le logiciel

Le logiciel utilisé pour les simulations de Laser est ATLAS, développé par la société SILVACO (Silicon Valley Corporation). SILVACO est une société américaine basée à Santa Clara en Californie. Fondée en 1984, elle est aujourd'hui le principal fournisseur de logiciels de simulation par éléments finis et de conception assistée par ordinateur pour les technologies de l'électronique TCAD (Technology Computer Aided Design) [1]. ATLAS est spécialement conçu pour la modélisation 2D et 3D de composants basés sur la physique des semiconducteurs. En utilisant la méthode des éléments finis, le logiciel crée un maillage couvrant toute la structure étudiée et résout numériquement les équations de base des semi-conducteurs par itération en chaque point de ce maillage. En incluant les propriétés électriques, optiques et thermiques des matériaux constitutifs, nous pouvons alors déterminer les caractéristiques optoélectroniques des structures à la fois internes (concentration des porteurs, diagramme de bande) et externes (émission spontanée, courbes $I(V)$, gain optique...).

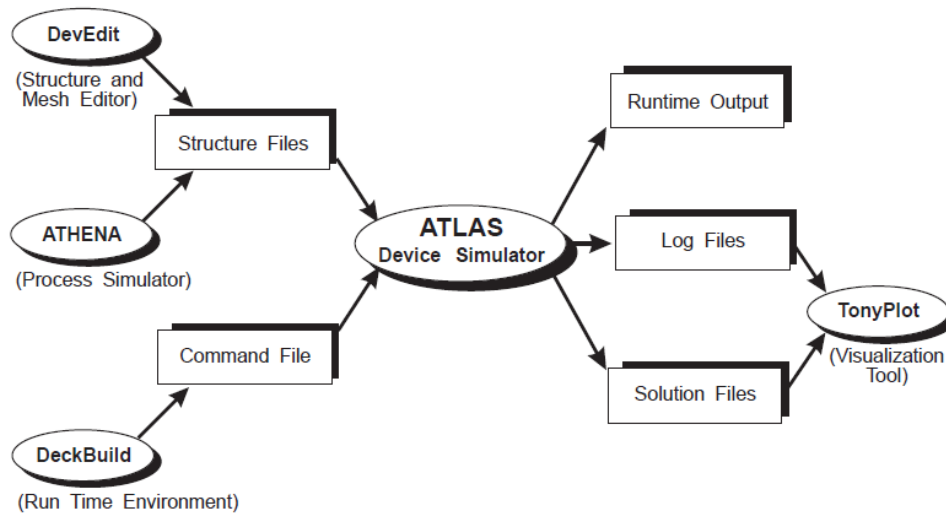


Figure III.1. Description des entrées et des sorties dans ATLAS [2].

Le schéma III.1 décrit les entrées et les sorties du logiciel pour la simulation de Lasers. Les fichiers d'entrée contiennent la structure à simuler. Dans la plupart des cas, il y a deux entrées distinctes : la première entrée est un fichier .tex contenant les commandes à exécuter (DeckBuild) et la seconde est un fichier structure contenant la structure à simuler (DevEdit et ATHENA). Dans le cas des LED epitaxiées 2D (sans process), la structure est simple à décrire et il est possible de la créer directement dans l'environnement DeckBuild. Il n'y a donc qu'un seul fichier d'entrée.

ATLAS produit trois sorties distinctes :

- **Runtime Output**, donne la progression de la simulation ainsi que les messages d'erreur potentiels
- **Fichiers Log**, qui contiennent les courants et les tensions relatifs à la structure
- **Solutions files**, qui contiennent les différentes données 2D et 3D calculées lors de la simulation pour une tension donnée.

Les parties principales du programme dans Deckbuild sont représentées sur la figure III.2, l'ordre de chaque déclaration ayant son importance. La première étape consiste en la spécification de la structure simulée. Nous fixons le maillage, l'épaisseur et le dopage des différentes couches. Les électrodes sont également spécifiées (matériaux, position, résistivité). La deuxième étape consiste à définir les matériaux constituant chaque couche. ATLAS possède une bibliothèque regroupant des matériaux prédéfinis mais il permet aussi à l'utilisateur d'en créer de nouveaux si besoin. Il est ensuite nécessaire de définir les modèles utilisés pour la description des phénomènes physiques présents dans les Lasers. A ce stade nous pouvons

également définir les comportements aux interfaces (effet tunnel, recombinaisons de surface,...). Il faut ensuite spécifier la méthode de résolution de la structure qui comprend entre autres la résolution par itération de l'équation de Schrödinger-Poisson dans les puits quantiques. La dernière étape consiste à appliquer une tension à la structure et à étudier sa réponse en courant. Il est ensuite possible de calculer les valeurs prises par différents paramètres et les afficher dans le logiciel de tracés Tonyplot.

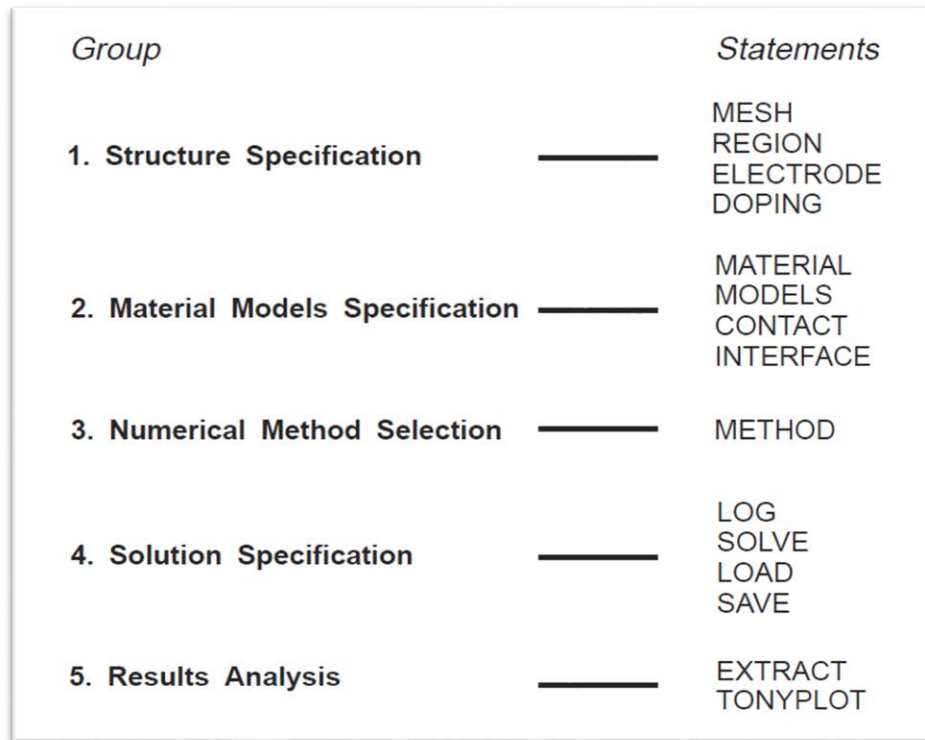


Figure III.2. Architecture générale d'un programme de simulation des dispositifs optoélectroniques dans ATLAS

III.2. 1. Le modèle $k \cdot p$

Afin de déterminer les états d'énergie liés des puits quantiques nous introduisons le modèle du puits quantique parabolique. La résolution de l'équation de Schrödinger donne une description quantique des états d'énergie liés dans le puits quantique. Les masses effectives et les paramètres de bandes découlent alors du modèle $k \cdot p$ 6 bandes pour les matériaux de type Wurtzite contraints, initialement développé par Chuang et Chang [3-6], et incrémenté dans le code de simulation

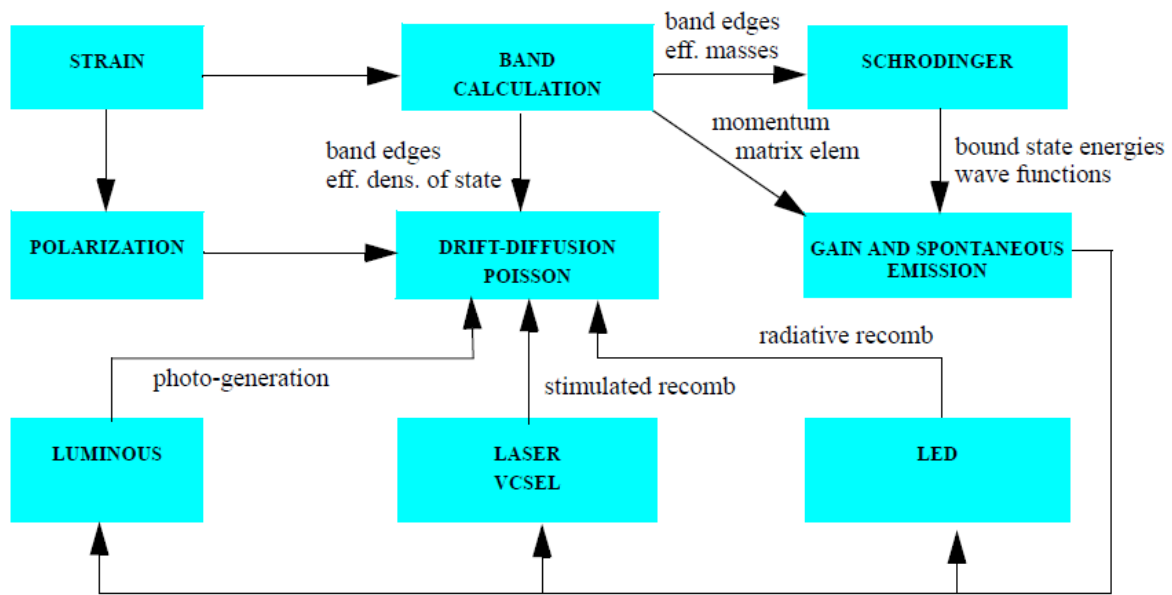


Figure III.3. Principe de simulation des dispositifs optoélectroniques dans ATLAS.

III.2. 2. Spécification des matériaux et des modèles

Après avoir défini la structure, les matériaux et les électrodes, une autre étape importante consiste à spécifier les paramètres des matériaux et les modèles physiques utilisés lors du processus de simulation du dispositif. La plupart des modèles physiques sont définis dans l'instruction model, à l'exception de certains qui peuvent être spécifiés dans la section structure du code (comme l'ionisation par impact ou certains modèles de mobilité). Il existe également des modèles qui peuvent être définis soit dans l'instruction model, soit dans la section matériel.

III.2. 2.1. Spécification des propriétés des matériaux

Tous les matériaux sont répartis en trois catégories : semi-conducteurs, isolants et conducteurs. Chaque catégorie nécessite la spécification d'un ensemble distinct de paramètres. Pour les semi-conducteurs, ces propriétés incluent notamment l'affinité électronique, la largeur de bande interdite, la densité des états électroniques, la vitesse de saturation, le temps de vie des porteurs, etc. Bien que des paramètres par défaut soient disponibles pour de nombreux matériaux dans les simulations de dispositifs, il est généralement préférable que l'utilisateur introduise ces paramètres manuellement. La syntaxe de l'instruction MATERIAL s'écrit comme suit :

MATERIAL <localization> <material_definition>

Les propriétés des matériaux AlGaAs et GaAs utilisées dans le code sont illustrées dans le tableau III.1.

Tableau III.1. Les modèles physiques et les paramètres laser utilisés dans la simulation [7].

Paramètre matériel	Définition
Taun, Taup	Spécifiez la durée de vie des électrons et des trous respectivement.
N_{C,F}, N_{V,F}	Spécifier les densités des bandes de conduction et de valence de l'état en fonction de la température.
Eg₁₃₀₀, Eg₂₃₀₀	Spécifiez l'écart énergétique à 300 K pour les barrières et les régions de puits quantiques.
Eg_{12bow}	Spécifiez le paramètre de courbure du modèle de bande interdite ternaire général.
Egalpha, Egbeta	Spécifiez les coefficients alpha et bêta pour la dépendance à la température de la bande interdite.
Augn, Augp	Spécifiez les coefficients Auger pour les électrons et les trous respectivement.
Affinity	Spécifie l'affinité électronique.
Copt	Spécifie le taux de recombinaison optique du matériau.
helm.tm	Dans le solveur scalaire de Helmholtz, il autorise ou bloque une solution pour les modes transversaux TE, TM.
Nmodes	Nombre total de modes. Ce paramètre diffère de NMODES.TRANS uniquement en 3D ou sur des dispositifs couplés. Actuellement, les deux paramètres ont le même effet.
prt.eval	Imprime les valeurs propres (constantes de propagation ou fréquences propres) de l'équation de Helmholtz à l'écran.
photon.energy	Spécifie l'énergie des photons dans l'équation de Helmholtz vectorielle 2D.
index.model	Spécifie si le modèle d'indice de réfraction simple (INDEX.MODEL=0) ou l'indice de réfraction dépendant du gain plus complexe (INDEX.MODEL=1) est utilisé.
Gainmod	Spécifie le modèle de gain optique local à utiliser.

Itmax	Définit le nombre maximal d'itérations du VCSEL externe pendant le calcul de la densité photonique. La valeur par défaut est 30.
Las.rf	Spécifie la réflectivité du miroir avant en pourcentage.
Las.rr	Spécifie la réflectivité du miroir arrière en pourcentage.
Fcarrier	Active le modèle de perte de porteuse libre dans Laser.
Las.absorption	Active le modèle de perte d'absorption dans Laser.
las.loss	Spécifie les pertes totales.

III.2. 2. 2. Spécification des modèles physiques

Les modèles physiques sont spécifiés à l'aide de l'instruction MODELS, à l'exception de l'ionisation par impact qui est définie à l'aide de l'instruction IMPACT. Les paramètres associés à ces modèles apparaissent dans plusieurs instructions, notamment : MODELS, IMPACT, MOBILITY et MATERIAL [8 ,9].

Les modèles physiques peuvent être regroupés en cinq catégories : la mobilité, la recombinaison, les statistiques des porteurs, l'ionisation par impact et le tunnel quantique. Par défaut, Atlas active certains modèles physiques tels que le modèle de mobilité en champ faible ou la dépendance en température de la densité des états, en utilisant les paramètres matériaux par défaut. Cependant, lorsque l'utilisateur définit manuellement ces paramètres, Atlas utilise ceux-ci à la place des valeurs par défaut, ce qui permet de calculer les modèles physiques avec des approches mathématiques plus précises et d'obtenir des résultats plus fiables. Les modèles physiques spécifiés dans notre code sont présentés dans le tableau **III.2**.

Tableau III.2. Les modèles physiques utilisés dans la simulation [8 ,9].

Model	Définition
FERMI	Active les statistiques de Fermi-Dirac
SRH	Active la recombinaison Schokcley-Read-Hall.
AUGER	Active la recombinaison Auger.
NCOMPLET	Active l'ionisation incomplète des impuretés.
ANALYTIC	Modèle de Caughey-Thomas pour la dépendance de la mobilité de concentration et de temperature.

OPTR	Recombinaison optique bande-bande, pour matériaux directs uniquement.
PRINT	Liste les résultats d'exécution, les modèles et les paramètres qui seront utilisés pendant la simulation. Cela permet de vérifier les modèles et les paramètres des matériaux.
SPONTANEOUS	Calcule le taux de recombinaison radiative totale et l'inclut dans les équations de dérive-diffusion.
WZ.THREE	Paramètre de Wurtzite pour le modèle k.p multibande
K.P	Permet d'utiliser les masses effectives du modèle k*p et les énergies de bord de bande pour la simulation de diffusion de dérive.
WELL.CNBS, WELL.VNBS	Spécifiez le nombre d'états liés conservés pour le calcul de la recombinaison radiative ou du gain si la région est traitée comme un puits quantique comme spécifié par le paramètre QWELL.

Les modèles utilisés dans notre code de simulation comprennent les mécanismes physiques suivants :

models fermi srh optr auger

models name=well qwell zb.three spontaneous gainmod=5

output con.band val.band u.rad u.srh u.aug flowlines las.loss las.refr

method itlimit=100

laser v.helm absorption fcarrier nmodes=5 cavity_length=300 \

toler=1.0e-2 itmax=60 maxch=10 photon.energy=1.00 gainmod=5

III.2. 3. La spécification Mesh

La première instruction du code et de la section structure est l'instruction mesh. Cette instruction permet de spécifier les types de structures (rectangulaire, circulaire et cylindrique). Chacun de ces types de structures peut être défini en 2 ou 3 dimensions. Nous allons voir ici comment définir une structure triangulaire 2D.

La première instruction utilisée est :

MESH WIDTH

Qui spécifie un facteur d'échelle pour représenter la dimension non simulée pour les simulations 2D et où le facteur d'échelle est appliqué à toutes les sorties d'exécution log file outputs.

Ceci est suivi d'une série des instructions X.MESH and Y.MESH.

X.MESH LOCATION = <VALUE> SPACING = <VALUE>

Y.MESH LOCATION= <VALUE> SPACING = <VALUE>

Les instructions X.MESH et Y.MESH sont utilisées pour spécifier les positions (en microns) des lignes verticales et horizontales, respectivement, ainsi que l'espacement vertical ou horizontal associé à chaque ligne. Ces instructions doivent être listées dans l'ordre croissant des valeurs de x et y. Les valeurs positives et négatives de x et y sont autorisées.

ATLAS impose certaines limites sur le nombre maximal de nœuds de maillage pouvant être utilisés. Toutefois, cela ne doit pas être considéré comme un obstacle à l'obtention de résultats de simulation. Dans la version par défaut, les simulations 2D avec ATLAS ont une limite maximale de 100 000 nœuds.

La raison pour laquelle nous avons utilisé un maillage rectangulaire est que notre dispositif (le laser) n'utilise que ce type de maillage, qui est automatiquement pris en compte comme valeur par défaut lorsque le maillage ATLAS est rectangulaire. (Autrement, il nous serait conseillé de définir un maillage laser séparé à l'aide des instructions LX.MESH et LY.MESH.). Par défaut, Le domaine de solution couvre l'ensemble du **laser**, comme défini ci-dessous :

mesh width=300

x.mesh l=-2.0 s=0.5

x.mesh l=-0.5 s=0.1

x.mesh l=0.5 s=0.1

x.mesh l=2.0 s=0.5

y.mesh l=1.0 s=0.1

y.mesh l=1.5 s=0.01

y.mesh l=1.62 s=0.0005

y.mesh l=1.63 s=0.0005

y.mesh l=1.64 s=0.0005

y.mesh l=1.65 s=0.0005

y.mesh l=1.66 s=0.0005

y.mesh l=1.67 s=0.0005

y.mesh l=2.0 s=0.1

y.mesh l=3.0 s=0.5

III.3. Représentation de structure simulée

La structure représentée dans la figure III.4.a correspond à un laser à puits quantiques multiples (MQW) basé sur le système matériau AlGaAs/GaAs. Elle est constituée de couches semi-conductrices minces **successives**, conçues pour assurer le confinement optique, le confinement

électrique, ainsi que l'injection efficace de porteurs dans la région active. Le dispositif est simulé à l'aide du logiciel SILVACO TCAD.

Les différentes parties de la structure sont les suivantes :

- **Électrodes** : Deux électrodes sont placées aux extrémités du dispositif pour l'application de la tension.
- **Couches isolantes en SiO₂** : Utilisées pour l'isolation électrique ou comme passivation de surface.
- **Couches dopées p** : Deux couches successives d'Al_xGa_{1-x}As dopées de type p (concentration : $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) facilitent l'injection de trous et participent au confinement des porteurs.
- **Région active MQW** : Trois puits quantiques en GaAs (épaisseur $\approx 1 \text{ nm}$ chacun) sont insérés entre des barrières en Al_xGa_{1-x}As ($x = 0.3$ et 0.5), assurant un fort confinement quantique.
- **Couche dopée n** : Une couche d'Al_xGa_{1-x}As dopée de type n ($1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) est placée sous la région active pour l'injection d'électrons.

La structure est discrétisée selon les coordonnées spatiales (x, y) et la composition des matériaux comme suit :

Tableau III.3. Discrétisation spatiale et composition des matériaux de la structure laser MQW simulée dans SILVACO.

Région	Matériau	x (μm)	y (μm)	Remarque
1	SiO ₂	—	—	Couche isolante
2	Al _{0.3} Ga _{0.7} As	-0.5 à 0.5	1.0 à 1.5	Première barrière dopée p
2	Al _{0.5} Ga _{0.5} As	-2.0 à 2.0	1.5 à 1.62	Barrière de confinement
3	GaAs (well)	-2.0 à 2.0	1.62 à 1.63	1er puits quantique
4	Al _{0.3} Ga _{0.7} As	-2.0 à 2.0	1.63 à 1.64	Barrière intermédiaire
5	GaAs (well)	-2.0 à 2.0	1.64 à 1.65	2e puits quantique
6	Al _{0.3} Ga _{0.7} As	-2.0 à 2.0	1.65 à 1.66	Barrière intermédiaire
7	GaAs (well)	-2.0 à 2.0	1.66 à 1.67	3e puits quantique
8	Al _{0.5} Ga _{0.5} As	-2.0 à 2.0	1.67 à 2.0	Barrière supérieure
9	Al _{0.5} Ga _{0.5} As	-2.0 à 2.0	2.0 à 3.0	Couche de contact dopée n
—	Électrode (anode)	—	Top	Électrode supérieure (anode)

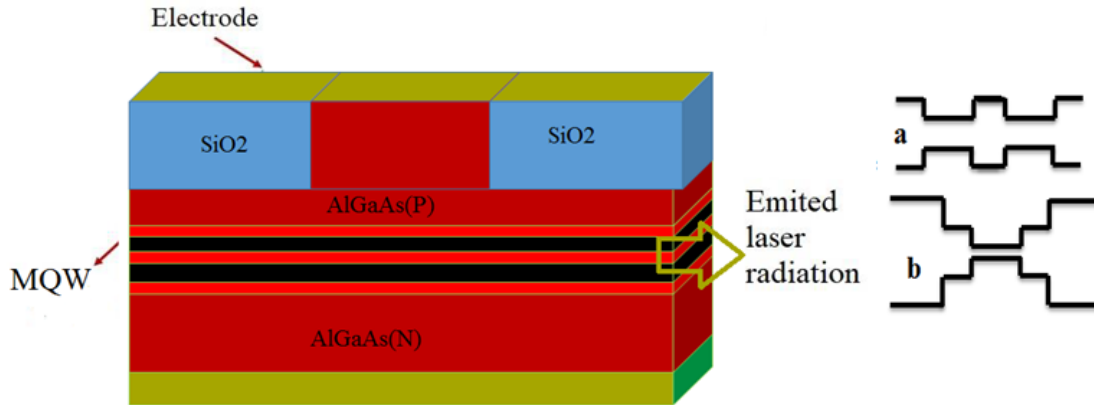


Figure III.4. Schéma de la structure laser simulée avec puits quantiques multiples (MQWs) dans la région active : (a) AlGaAs–GaAs–AlGaAs, et (b) AlGaAs–GaAs–GeSn–GaAs–AlGaAs.

Tableau III.4. Propriétés électroniques comparées de GaAs, $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ et $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ ($x = 0.08\text{--}0.10$).[10]

Propriété	GaAs	$\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$	$\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ ($x = 0.08\text{--}0.10$)
Type de matériau	Semiconducteur III-V	Semiconducteur III-V	Semiconducteur IV-IV
Structure cristalline	Cubique (zinc blende)	Cubique (zinc blende)	Cubique (GeSn : α -Sn ou Ge-like)
Largeur de bande interdite (E_g)	1,42 eV (direct, 300 K)	$\sim 1,8$ eV (direct, 30% Al)	0.55 – 0.65 eV (direct si $x \geq 0.08$)
Type de bande interdite	Directe	Directe $\rightarrow$ indirecte si $\text{Al} > 0.45$	Indirecte $\rightarrow$ directe ($x > 0.07$)
Mobilité des électrons (μ_e)	$\sim 8500 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$	$\sim 2000 - 5000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$	$1000 - 4000 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
Mobilité des trous (μ_h)	$\sim 400 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$	$\sim 100 - 300 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$	$500 - 1500 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
Constante diélectrique (ϵ_r)	~ 13.1	$\sim 12.2 - 13$	$\sim 16 - 18$
Vitesse de saturation des électrons	$\sim 1 \times 10^7 \text{ cm/s}$	$\sim 0.9 \times 10^7 \text{ cm/s}$	$\sim 0.8 - 1 \times 10^7 \text{ cm/s}$
Affinité électronique (χ)	$\sim 4.07 \text{ eV}$	$\sim 3.9 - 4.0 \text{ eV}$	$\sim 4.1 - 4.2 \text{ eV}$
Masse effective des électrons (m_e^*)	$\sim 0.067 m_0$	$\sim 0.09 m_0$	$\sim 0.04 - 0.08 m_0$

Cette structure est typique des lasers à puits quantiques (QW), où les électrons et les trous sont confinés dans la région active à cause des différences de bande interdite entre les matériaux

utilisés (GaAs pour les puits quantiques et AlGaAs pour les barrières). Le dopage de type p et n permet de créer les niveaux d'injection nécessaires pour la recombinaison radiative et l'émission lumineuse. Le diagramme d'énergie correspondant à cette structure est illustré à la **Figure III.5**.

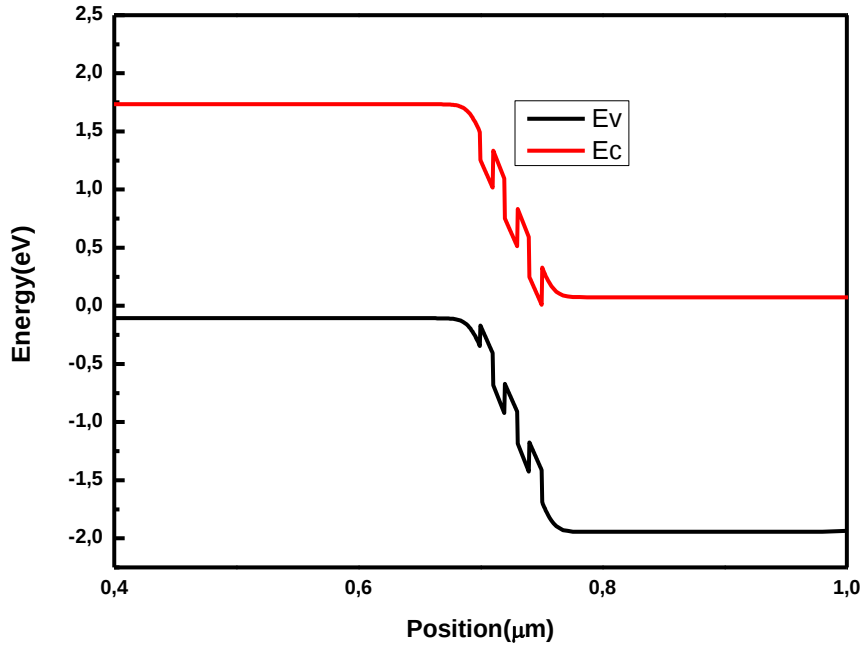


Figure III.5. Diagramme énergétique de la structure laser simulée.

La définition d'un maillage adapté est une étape cruciale dans la simulation des dispositifs. Elle repose sur un équilibre entre la précision des résultats et l'efficacité numérique. Une maille fine permet de représenter fidèlement les propriétés physiques et géométriques du composant, en particulier dans les zones à fortes variations de potentiel, de concentration de porteurs ou de champ optique. Cependant, un maillage plus grossier réduit le nombre de points de calcul, ce qui améliore l'efficacité et diminue les temps de simulation. Les zones nécessitant un maillage fin varient selon la technologie du dispositif et les phénomènes de transport impliqués. Dans notre cas, c'est la région active qui contient des puits quantique — la zone active du laser — qui doit être finement maillée, afin d'assurer une modélisation précise du confinement des porteurs, des recombinaisons et du gain optique, comme illustré à la **Figure III. 6**.

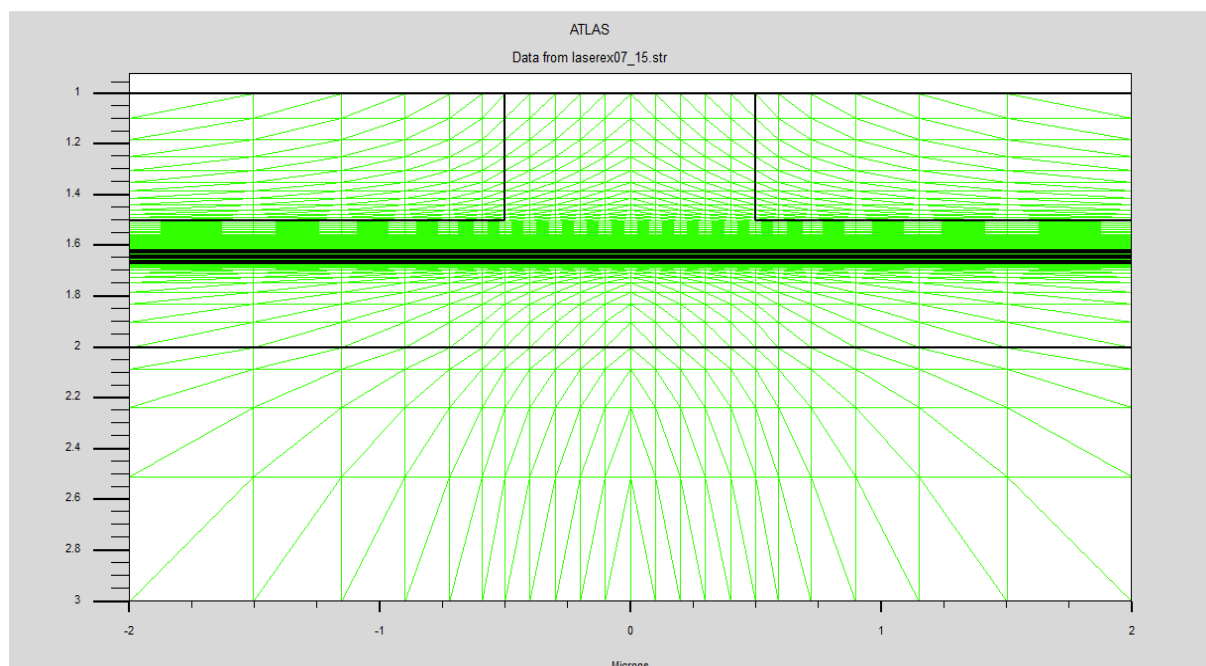


Figure III.6. Le maillage de la structure

La figure **III.7** illustre la distribution de l'intensité lumineuse le long de la structure, montrant une forte intensité lumineuse autour de la région active, qui comprend la région des puits quantique GaAs ($L_w = 10 \text{ \AA}$), région où la recombinaison optique (électrons-trous) est la plus importante.

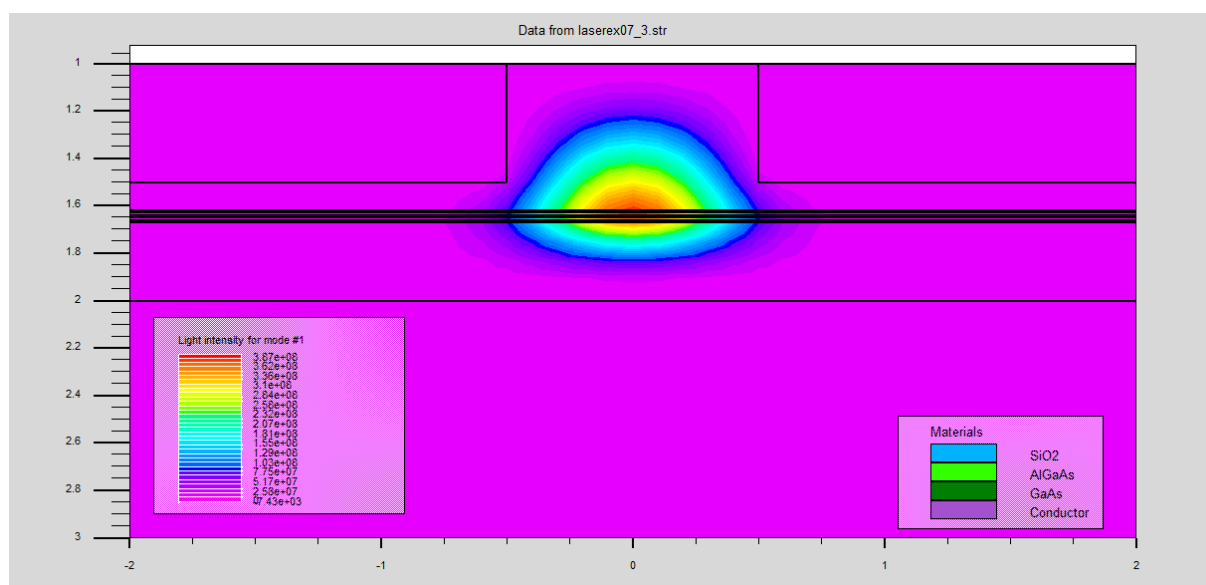


Figure III.7. La distribution de l'intensité lumineuse le long du laser simulée.

III.4. Modélisation de la structure laser simulée.

Dans cette étude, nous modélisons une structure de laser à puits quantiques multiples (MQW) dans le but d'améliorer ses performances optiques et électriques. La simulation porte sur trois axes principaux. Premièrement, nous faisons varier la profondeur des puits quantiques en modifiant la fraction molaire d'aluminium (x) dans les barrières AlGaAs, ce qui influence directement le confinement des porteurs et le décalage de bande interdite. Deuxièmement, nous analysons l'impact de l'épaisseur des puits quantiques sur le gain optique, la recombinaison et la réponse spectrale du dispositif. Enfin, nous explorons l'introduction d'une couche de GeSn au sein de la structure active.

III.4.1. Étude de l'influence de la fraction molaire d'aluminium dans les barrières sur les propriétés optiques et électriques de la structure laser simulée.

III.4.1.1. Effet de la fraction molaire d'aluminium dans les barrières sur l'émission spontanée de la structure laser simulée.

Les résultats de simulation présentés dans la Figure III.8 mettent en évidence une différence d'intensité entre les composantes transverse électrique (TE) et transverse magnétique (TM) de l'émission spontanée. Plus précisément, la composante TE présente une intensité légèrement supérieure à celle du mode TM, ce qui reflète une anisotropie de polarisation liée à la structure électronique du dispositif. Cette différence est principalement influencée par la fraction molaire d'aluminium dans les barrières AlGaAs, qui modifie à la fois le confinement quantique des porteurs et la séparation énergétique entre les sous-bandes de trous lourds et légers. Étant donné que le mode TE est majoritairement issu des transitions impliquant des trous lourds, toute variation de la composition des matériaux ou de la contrainte cristalline a un impact direct sur la distribution relative entre les deux modes de polarisation.

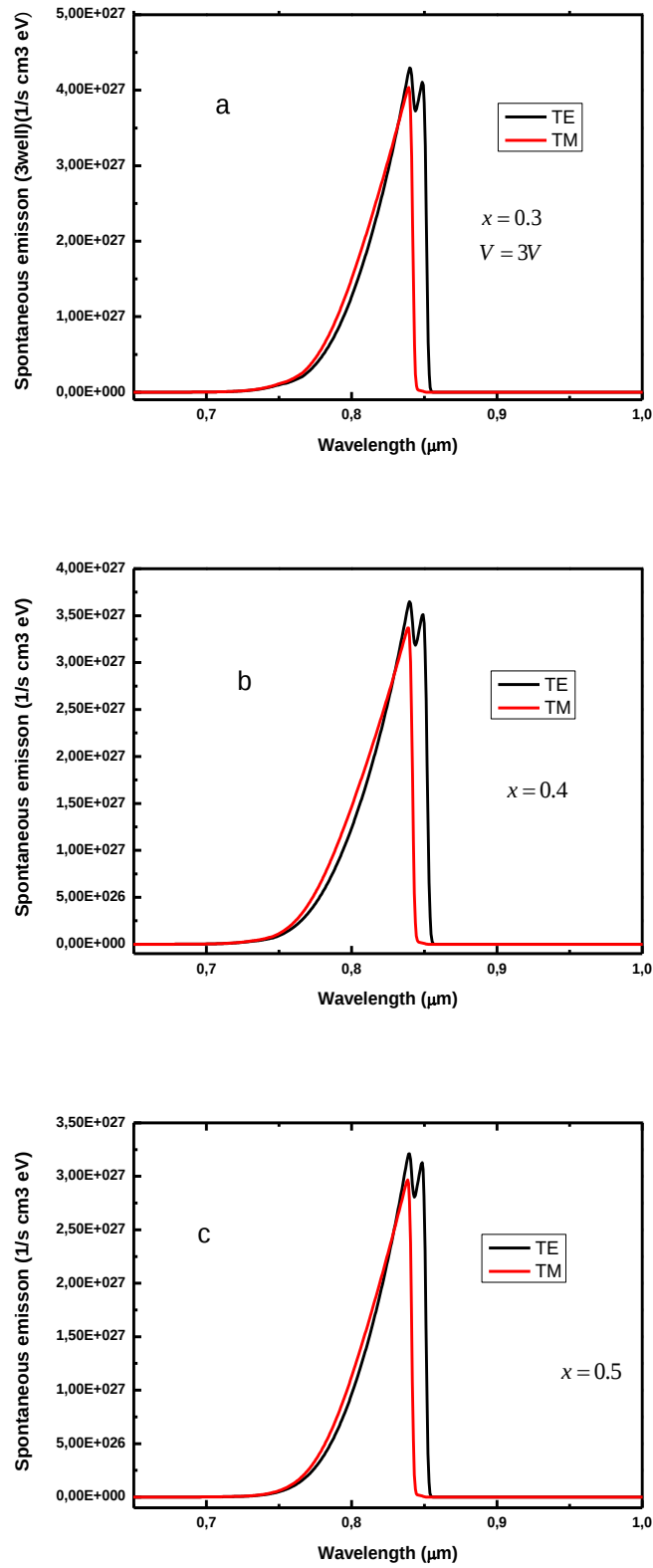


Figure III.8. Caractéristiques de l'émission spontanée en polarisation transverse électrique (TE) et transverse magnétique (TM), en fonction de la longueur d'onde, pour différentes fractions molaires d'aluminium dans les barrières AlGaAs : (a) $x = 0.3$, (b) $x = 0.4$, (c) $x = 0.5$.

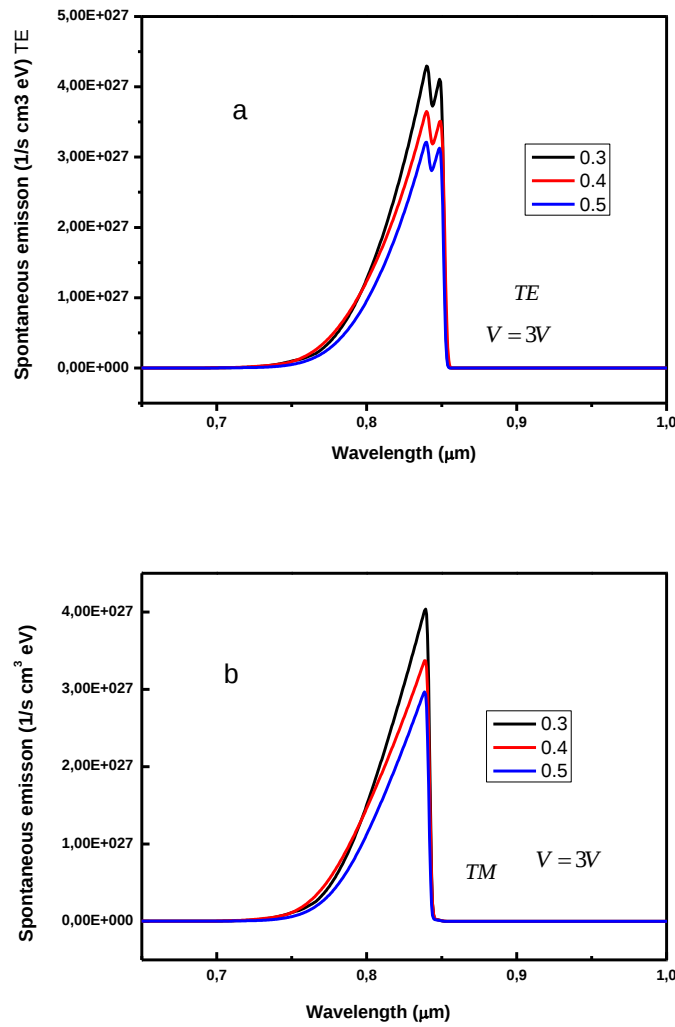


Figure III.9. Comparaison entre les Caractéristiques de l'émission spontanée en polarisation transverse électrique (TE) a) et transverse magnétique (TM) b) en fonction de la longueur d'onde, pour différentes fractions molaires d'aluminium dans les barrières AlGaAs : $x = 0.3$, $x = 0.4$, $x = 0.5$.

Dans les Figures III.9 a, b, une comparaison entre les composantes TE et TM de l'émission spontanée est effectuée pour différentes fractions molaires d'aluminium dans les barrières. Les résultats montrent qu'une réduction de cette fraction entraîne une augmentation significative de la densité d'émission spontanée, la meilleure réponse optique étant obtenue pour la plus faible fraction molaire d'aluminium. Cette observation s'explique par une diminution de la hauteur des barrières, qui favorise un meilleur chevauchement des fonctions d'onde des porteurs dans les puits quantiques et donc une efficacité accrue de recombinaison radiative.

III.4.1.2. Effet de la fraction molaire d'aluminium des barrières sur les caractéristiques I-V de la structure laser simulée.

La figure III.10 présente les caractéristiques courant-tension (I-V) pour différentes fractions molaires d'aluminium dans les barrières de la structure à puits quantiques multiples (MQW) AlGaAs/GaAs. On observe que le courant diminue de manière significative lorsque la profondeur des puits quantiques dans la région active augmente, c'est-à-dire lorsque la fraction molaire d'aluminium dans les deux barrières est plus élevée. Toutefois, cette variation n'affecte pas la valeur de la tension de seuil, qui reste constante à 1,5 V.

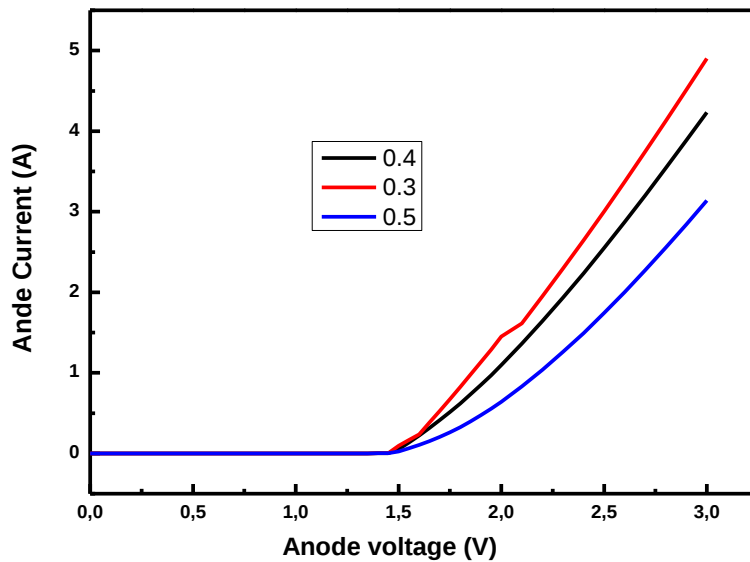


Figure III.10. Caractéristiques courant-tension (I-V) pour différentes fractions molaires d'aluminium dans les barrières de la structure laser simulée.

III.4.1.3. Impact de la fraction molaire d'aluminium dans les barrières sur le gain optique de la structure laser simulée.

Le gain optique est la différence entre l'émission stimulée et l'absorption d'un photon dans un matériau semi-conducteur. Il correspond à l'augmentation du nombre de photons par unité de longueur dans la cavité laser.

Dans cette section, nous comparons le gain optique obtenu pour différentes fractions molaires d'aluminium dans les couches barrières de notre laser à puits quantiques multiples (MQW).

Nos résultats, illustrés dans la figure III.11, montrent que la fraction molaire d'aluminium dans les barrières joue un rôle déterminant dans les propriétés optiques du dispositif, en particulier sur l'amplitude et la largeur spectrale du gain optique.

Plus précisément, la meilleure performance en termes de gain optique est obtenue pour la plus faible fraction molaire d'aluminium. Dans ce cas, on observe non seulement un gain maximal plus élevé, mais également un élargissement du spectre de gain, ce qui est particulièrement avantageux pour des applications à large bande passante ou pour des dispositifs accordables en longueur d'onde.

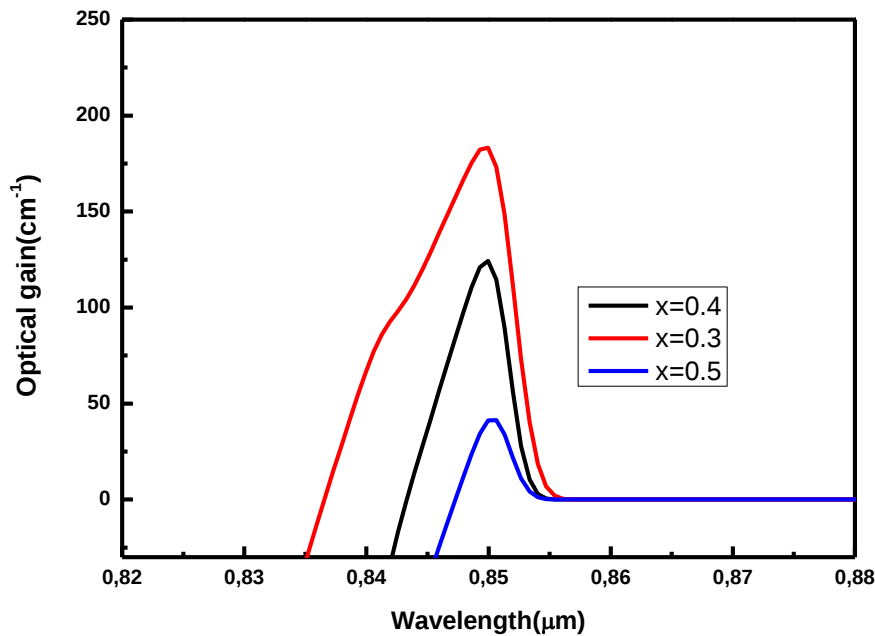


Figure III.11. Gain optique pour différentes fractions molaires d'aluminium dans les barrières de la structure laser simulée.

Cette amélioration peut être attribuée à plusieurs facteurs agissant de manière complémentaire. D'abord, la réduction du désaccord de bande entre le puits quantique et la barrière facilite l'injection efficace des porteurs. Ensuite, une meilleure localisation de ces porteurs dans le puits accroît la probabilité de recombinaison stimulée, essentielle pour le gain optique. Enfin, une contrainte de réseau réduite limite la formation de défauts cristallins, ce qui se traduit par une amélioration notable de la qualité optique globale.

III.4.2. Influence de l'épaisseur des puits quantiques sur les propriétés optiques et électriques de la structure laser simulée.

III.4.2.1. Effet de la variation d'épaisseur des puits quantiques sur l'intensité de l'émission de la structure laser simulée.

Les figures III.12, III.13 et III.14 montrent l'évolution de l'intensité lumineuse en fonction de l'épaisseur des puits quantiques dans notre structure laser à puits quantiques multiples (MQW). On observe que l'intensité de l'émission diminue progressivement à mesure que la largeur des puits augmente. Ce comportement s'explique par la réduction du confinement quantique des porteurs (électrons et trous) lorsque les puits deviennent plus larges. En effet, une plus grande épaisseur conduit à une diminution de la densité d'états quantiques discrets, ce qui réduit le chevauchement des fonctions d'onde des porteurs et donc l'efficacité de la recombinaison radiative.

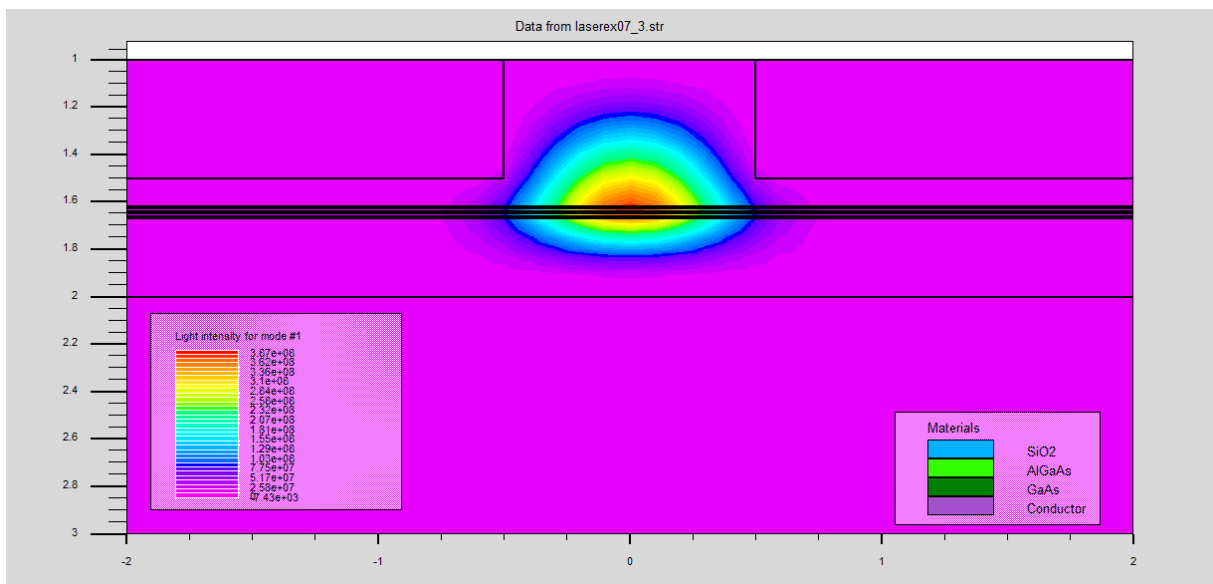


Figure III.12. Distribution de l'intensité lumineuse le long du laser à puits quantiques multiples (MQW) pour une largeur de puits $L_W=1\text{nm}$

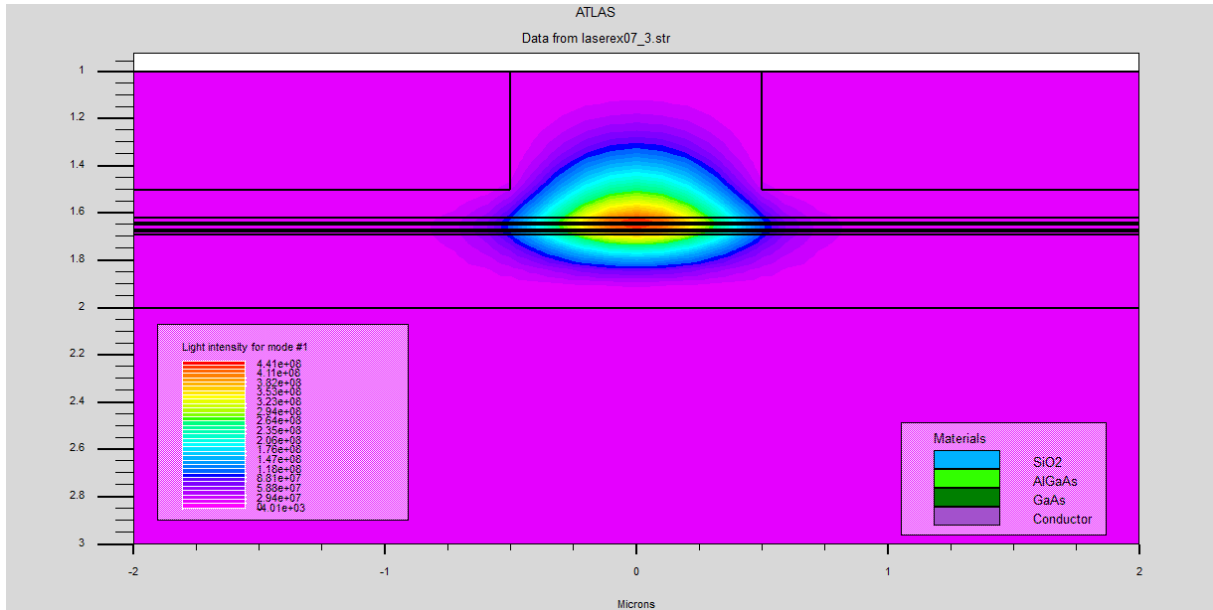


Figure III.13 Distribution de l'intensité lumineuse le long du laser à puits quantiques multiples (MQW) pour une largeur de puits $L_W=2\text{nm}$

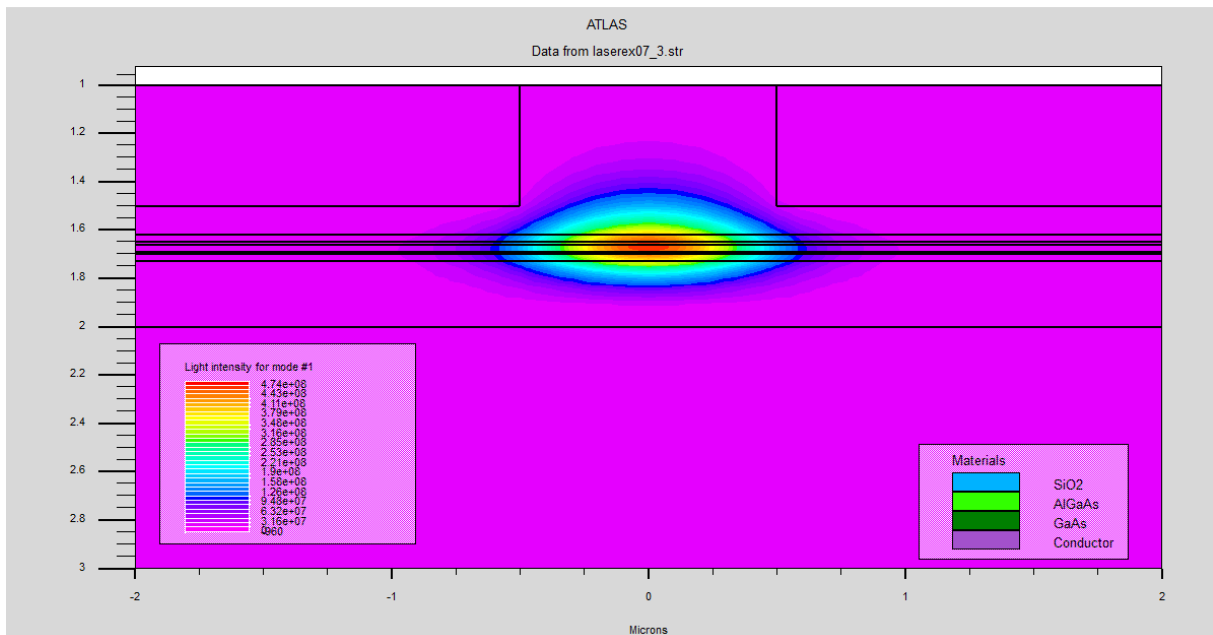


Figure III.14 Distribution de l'intensité lumineuse le long du laser à puits quantiques multiples (MQW) pour une largeur de puits $L_W=3\text{nm}$.

III.4.2.2. Effet de la variation d'épaisseur des puits quantiques sur l'émission spontanée de la structure laser simulée.

La figure III.15 et le tableau III. 4 montrent que l'augmentation de la fraction molaire dans les barrières entraîne une diminution de l'émission spontanée, avec de légères variations des longueurs d'onde d'émission.

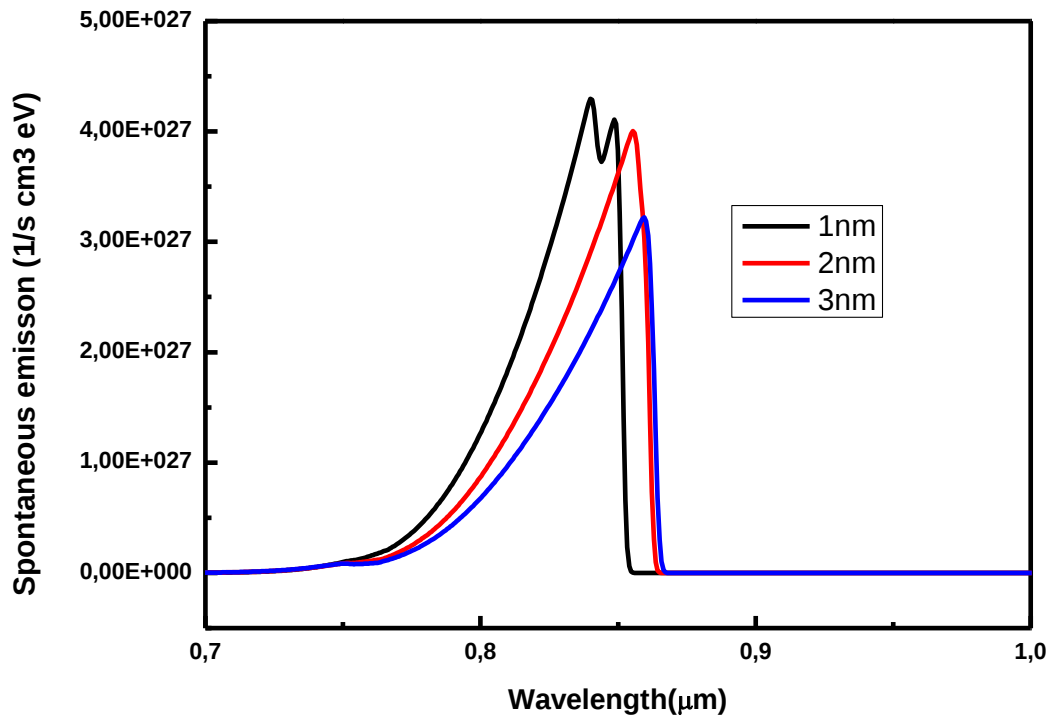


Figure III.15. Émission spontanée en fonction de la longueur d'onde pour différentes épaisseurs des puits quantiques dans la structure laser MQW AlGaAs/GaAs.

Tableau III.5. Émission spontanée en fonction de la longueur d'onde pour différentes épaisseurs des puits quantiques dans la structure laser MQW AlGaAs/GaAs.

Épaisseurs des puits quantiques	Longueur d'onde (μm)	Emission spontané (1/s.cm³.eV)
1nm	840	$4.28 \cdot 10^{27}$
2nm	838	$3.65 \cdot 10^{27}$
3nm	838	$3.2 \cdot 10^{27}$

Le tableau III.3 montre que l'augmentation de l'épaisseur des puits quantiques dans la structure MQW AlGaAs/GaAs entraîne une diminution progressive de l'émission spontanée, passant de $4,28 \times 10^{27}$ à $3,20 \times 10^{27}$ (1/s·cm³·eV) entre 1 nm et 3 nm. Cette baisse est liée à un confinement quantique moins efficace dans les puits plus épais, réduisant le recouvrement des fonctions d'onde des porteurs et la probabilité de recombinaison radiative. En revanche, la longueur d'onde d'émission reste quasiment stable autour de 838–840 nm, indiquant que les transitions électroniques principales ne sont pas significativement affectées dans cette gamme d'épaisseurs.

III.4.2.3. Effet de la variation d'épaisseur des puits quantiques sur le gain optique de la structure laser simulée.

La figure III.16 montre que l'augmentation de l'épaisseur des puits quantiques entraîne un décalage du spectre de gain vers des longueurs d'onde plus longues, accompagné d'un élargissement du spectre. Ce comportement s'explique par une réduction de l'énergie de transition, liée à un confinement quantique moins prononcé lorsque l'épaisseur du puits augmente.

Par ailleurs, le gain optique augmente globalement avec l'épaisseur du puits, bien que les cas correspondant à des épaisseurs de 2 nm et 3 nm présentent des valeurs de gain relativement similaires.

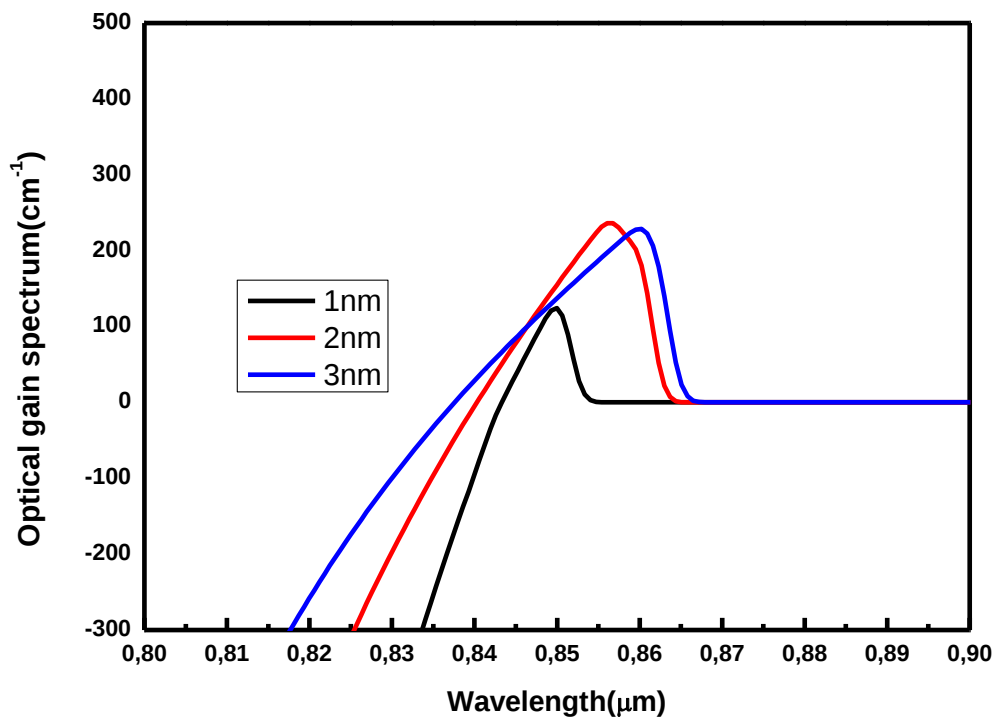


Figure III.16. Gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes épaisseurs des puits quantiques dans la structure laser MQW AlGaAs/GaAs.

III.4.2.4. Effet de la variation de l'épaisseur des puits quantiques sur la caractéristique I-V de la structure laser simulée.

On remarque dans la figure III.17 que les courbes I–V correspondant aux épaisseurs de puits de 2 nm et 3 nm sont similaires, avec une légère amélioration du courant pour l'épaisseur de 3 nm. En revanche, une différence notable apparaît pour une épaisseur de puits de 1 nm, traduisant un comportement électrique distinct.

Il est également important de souligner que la tension de seuil reste constante, autour de 1,5 V, quelle que soit l'épaisseur du puits quantique.

La tension de seuil reste stable autour de 1,5 V car les variations d'épaisseur des puits n'affectent que légèrement les niveaux d'énergie quantifiés, sans modifier significativement les conditions d'injection ni la structure globale de la jonction.

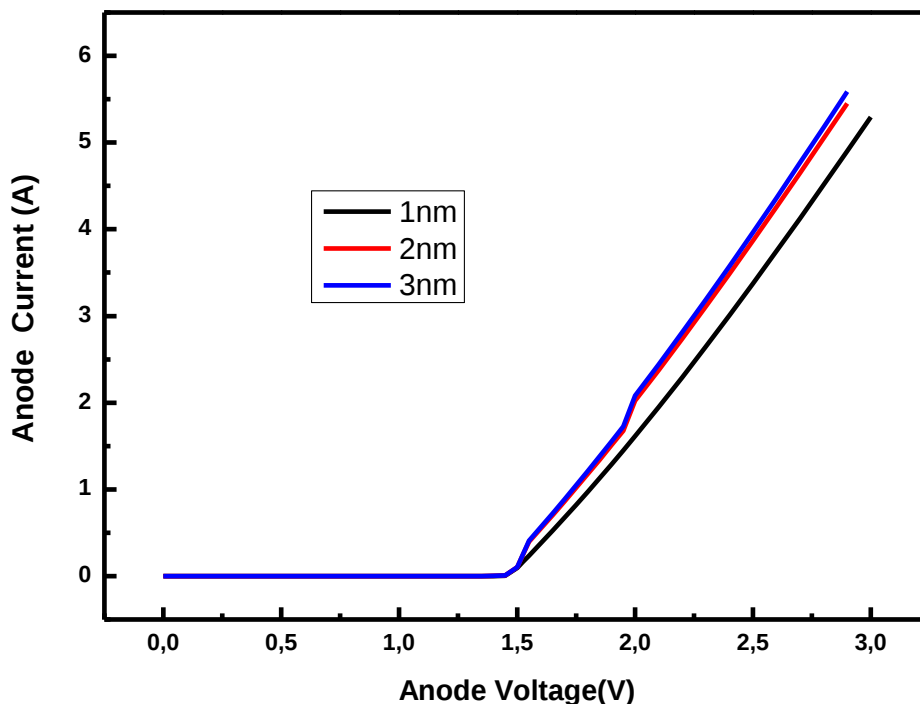


Figure III.17. Caractéristiques I–V pour différentes épaisseurs des puits quantiques dans la structure laser MQW AlGaAs/GaAs.

III.4.3 Étude de l'impact de l'intégration d'une couche de $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ dans la zone active de la structure laser simulée sur ses propriétés optiques et électriques.

L'introduction d'une couche de $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ d'une épaisseur de 1 nm, dans les lasers à puits quantiques multiples (MQW) de type $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ représente formant une double hétérojonction $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs} / \text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08} / \text{GaAs} / \text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$, le $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ permet un meilleur alignement des bandes de conduction et de valence, favorisant ainsi l'injection efficace des porteurs dans la région active.

Le schéma de la structure ainsi que les diagrammes d'énergie correspondants sont présentés aux figures III.18 et III.19.

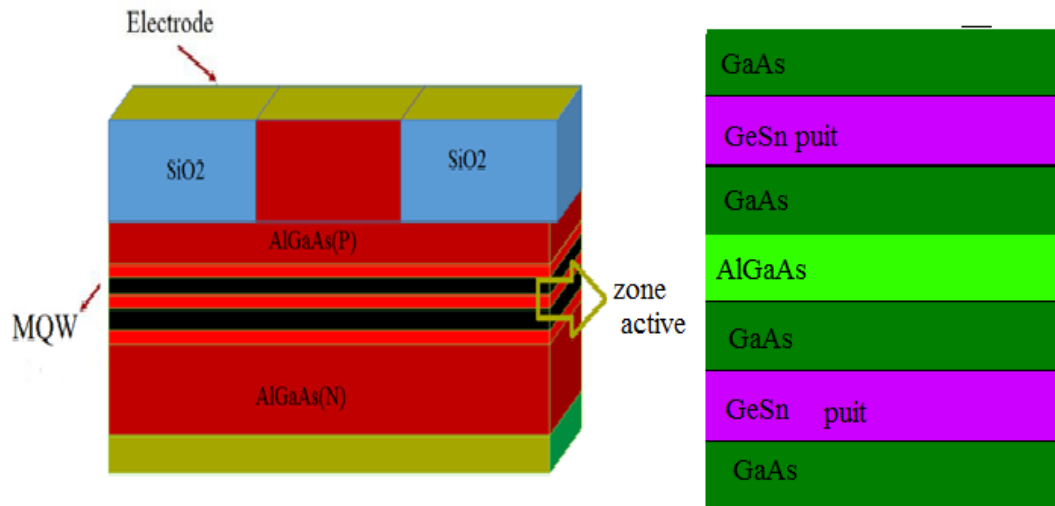


Figure III.18. Diagramme schématique de la structure laser simulée comportant deux puits quantiques (2-QWs) dans la région active, pour une configuration à double hétérojonction de type $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}/\text{GeSn}/\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$.

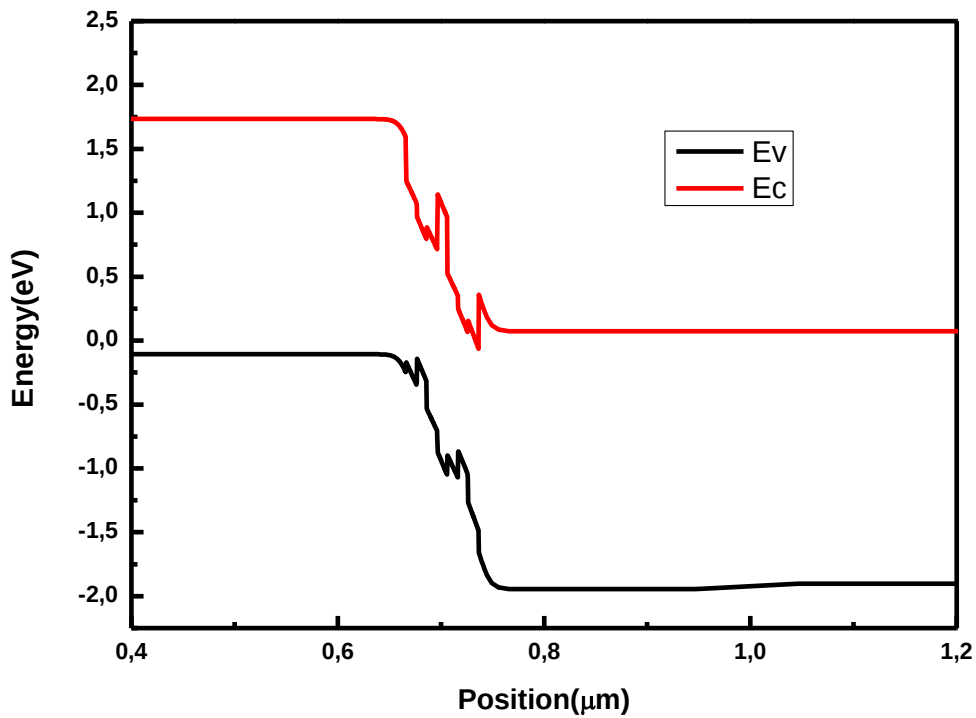


Figure III.19. Diagramme énergétique de la structure laser simulée comportant deux puits quantiques (2-QWs) dans la région active, pour une configuration à double hétérojonction de type AlGaAs/GaAs/GeSn/GaAs/AlGaAs.

La figure III.20 représente la distribution de l'intensité lumineuse le long du laser à puits quantiques multiples (MQW) de type AlGaAs/GaAs/GeSn/GaAs/AlGaAs. On observe que l'intensité est principalement concentrée dans la région active, ce qui indique un bon confinement optique dans cette zone.

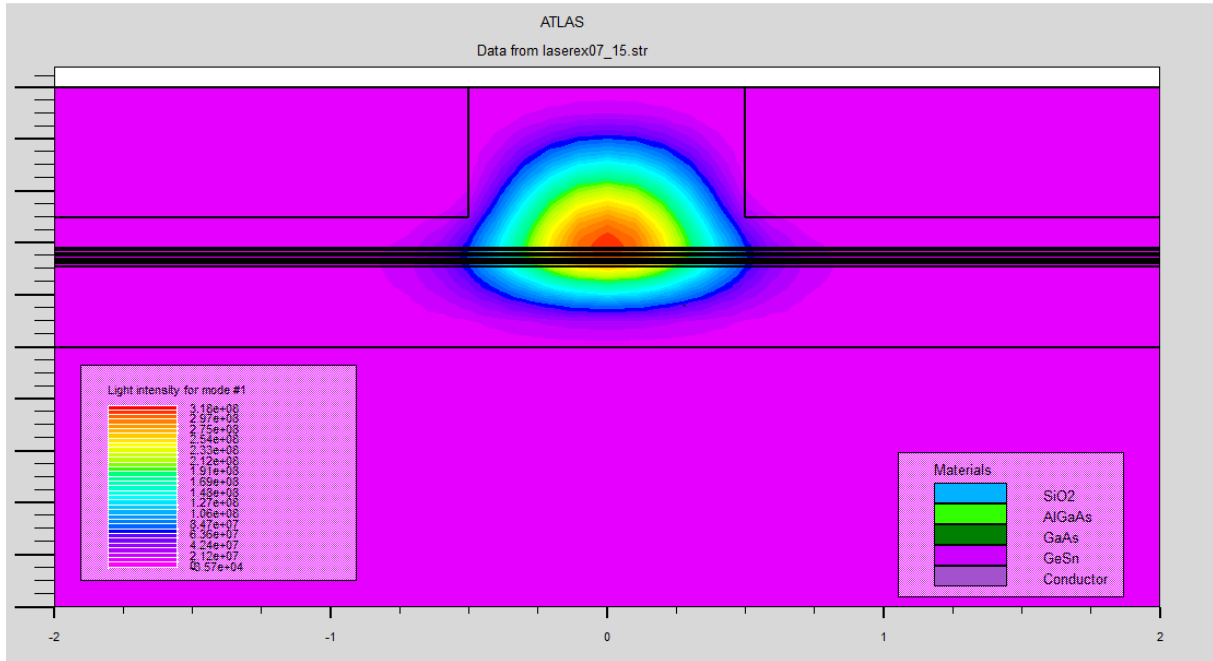


Figure III.20 Distribution de l'intensité lumineuse le long du laser MQWs AlGaAs/GaAs/GeSn/GaAs/AlGaAs.

III.4.3.1. Effet d'introduction d'une couche de $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ dans la structure laser simulée sur les caractéristiques courant-tension

L'ajout de cette couche modifie la structure des hétérojonctions du laser, influençant ainsi la barrière de potentiel entre les différentes couches et affectant le transport des porteurs (électrons et trous) dans la région active. En conséquence, le courant de seuil, c'est-à-dire le courant minimum requis pour que le laser commence à émettre de manière stimulée, peut être réduit. Comme l'illustre la **Figure III.21**, la tension de seuil est de 1,2 V avec l'ajout de la couche $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$, contre 1,5 V dans les lasers MQW $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ précédents. Cette diminution témoigne d'une amélioration notable des performances du dispositif. L'introduction de cette couche permet également de réduire les pertes non radiatives et d'améliorer l'efficacité globale, ce qui se traduit par une réduction du courant nécessaire pour obtenir un rendement optique donné.

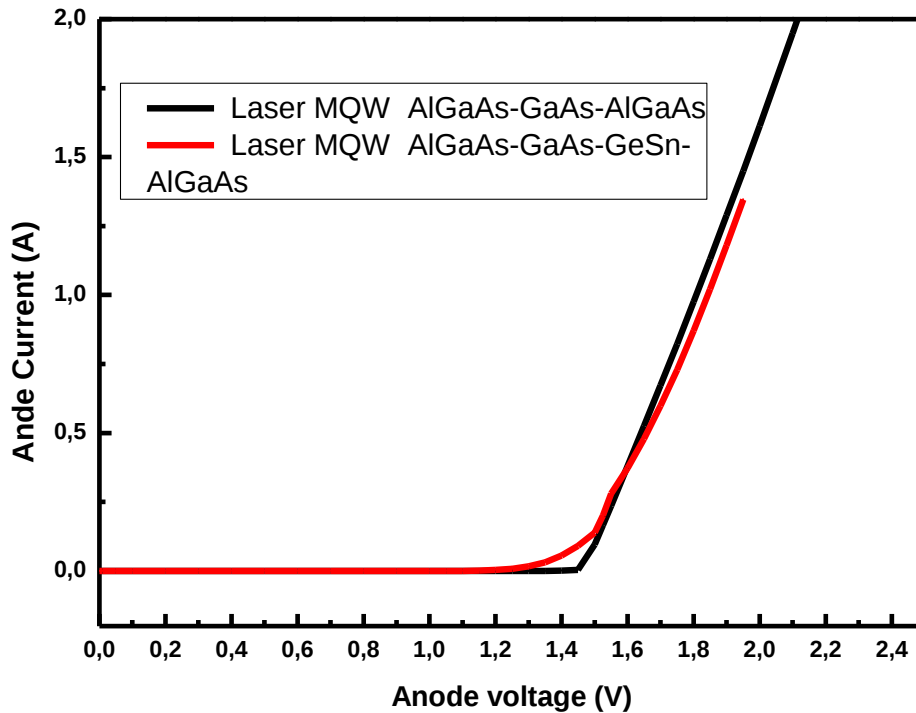


Figure III.21. Effet d'introduction d'une couche de GeSn dans la structure laser MQWs AlGaAs/GaAs sur le gain optique.

III.4.3.2. Effet d'introduction d'une couche de $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ dans la structure laser simulée sur le gain optique.

L'introduction d'une couche de $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ dans les lasers MQW $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ entraîne une modification notable des caractéristiques du gain optique, comme l'illustre la figure III.22. Dans les lasers contenant la couche $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$, le gain optique atteint environ 2000 cm^{-1} et présente deux pics distincts. Par rapport aux lasers sans couche $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$, un déplacement vers des longueurs d'onde plus longues est observé. En effet, le gain optique se déplace de 850 nm à environ 1004 nm avec l'ajout de $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$. Ce décalage vers des longueurs d'onde plus grandes est attribuable à la capacité du $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ à ajuster les bandes de conduction et de valence, favorisant ainsi une recombinaison stimulée plus efficace et un confinement amélioré des porteurs.

À 1000 nm, la lumière n'est plus perçue comme une couleur visible : c'est invisible pour l'œil humain, bien qu'elle soit très utilisée en optoélectronique, en télécommunications et en imagerie infrarouge.

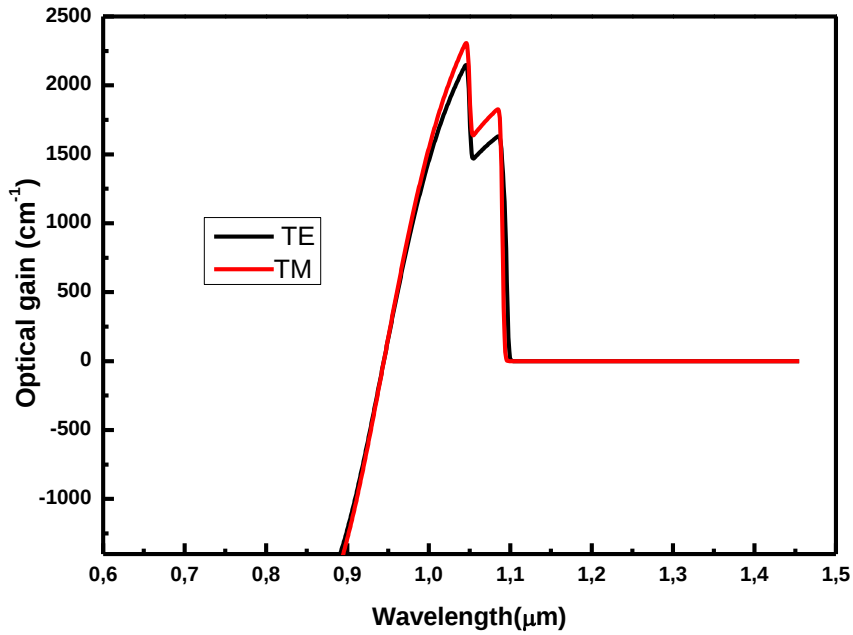


Figure III.22. Effet de l'introduction d'une couche de $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ la structure laser simulée sur le gain optique.

III.4.3.3. Effet de l'introduction d'une couche de $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ dans la structure laser simulée sur l'émission spontanée.

La figure **III.23** montre que l'introduction d'une couche de GeSn dans le laser à puits quantiques multiples (MQW) AlGaAs/GaAs améliore significativement l'émission spontanée, longueur d'onde est $1.04 \mu\text{m}$ et l'émission spontanée $1.5 \cdot 10^{28} \text{ (1/s cm}^3 \text{ eV)}$.

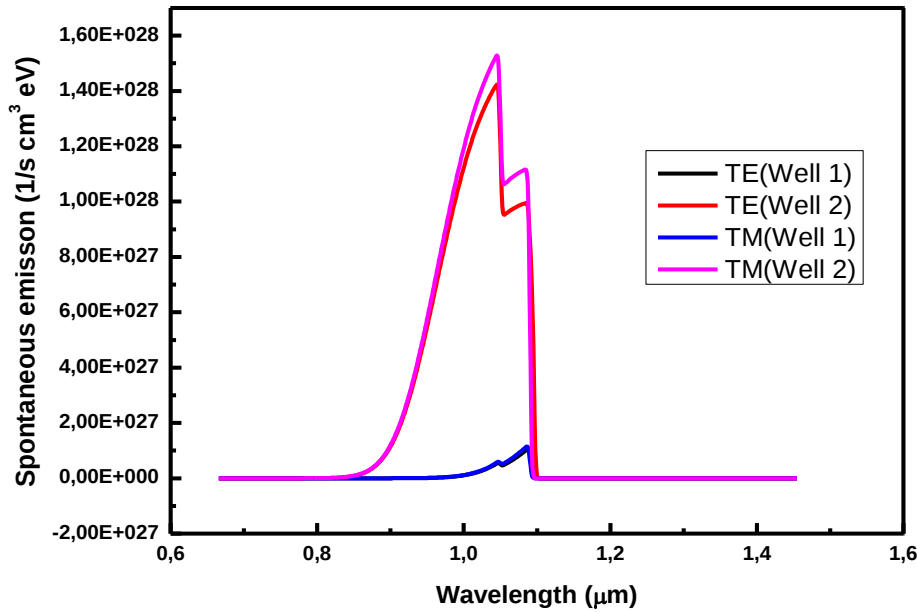


Figure III.23. Effet d'introduction d'une couche de GeSn dans la structure laser simulée sur l'émission spontanée.

III.5. Conclusion

Ce chapitre a examiné l'impact de deux paramètres principaux sur les performances des lasers à puits quantiques multiples (MQW) $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$: la fraction molaire d'aluminium dans les barrières et l'épaisseur des puits quantiques. Nous avons observé que ces paramètres influencent directement le gain optique et les caractéristiques courant-tension des lasers. De plus, l'ajout d'une couche de $\text{Ge}_{0.92}\text{Sn}_{0.08}$ pour former une double hétérojonction a montré des améliorations importantes. Cette modification permet de mieux confiner les porteurs, réduit les pertes non radiatives, et déplace le spectre d'émission vers des longueurs d'onde plus longues, de 850 nm à 1004 nm. En conséquence, le courant de seuil diminue et le gain optique s'améliore. L'introduction de GeSn ouvre de nouvelles possibilités pour des lasers dans la gamme infrarouge, avec des applications potentielles dans les télécommunications et la détection optique.

III .6. Bibliographie

1. Bastard, G. (1988). *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. Les Ulis: Les Éditions de Physique.
2. Chuang, S. L. (1995). *Physics of optoelectronic devices*. New York: Wiley-Interscience.
3. Chuang, S. L., & Chang, C. S. (1996). *k·p* method for strained wurtzite semiconductors. *Physical Review B*, 54(4), 2491–2504. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.2491>
4. Selberherr, S. (1984). *Analysis and simulation of semiconductor devices*. Wien: Springer-Verlag.
5. Silvaco. (n.d.). *ATLAS User's Manual: Device simulation software*. Silvaco Inc. <https://www.silvaco.com>
6. Silvaco International. (2015). *ATLAS User's Manual: Device simulation software*. Santa Clara: Silvaco International.
7. Silvaco. (2020). *TonyPlot User's Manual: Visualization and analysis tool*. Santa Clara: Silvaco Inc.
8. Sze, S. M., & Ng, K. K. (2007). *Physics of semiconductor devices* (3rd ed.). Hoboken: Wiley-Interscience.
9. Vurgaftman, I., Meyer, J. R., & Ram-Mohan, L. R. (2001). Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, 89(11), 5815–5875. <https://doi.org/10.1063/1.1368156>
10. Ghetmiri, S. A., Du, W., Margetis, J., Mosleh, A., Cousar, L., Conley, B. R., Tolle, J., ... & Yu, S. Q. (2014). Direct-bandgap GeSn grown on silicon with 2230 nm photoluminescence. *Applied Physics Letters*, 105(15), 151109. <https://doi.org/10.1063/1.4898375>

Conclusion Générale

Conclusion Générale

Ce travail de recherche a été porté sur l'étude, la modélisation et l'optimisation d'un laser à puits quantiques multiples (MQW) à base de matériaux III-V, en mettant l'accent sur l'influence de plusieurs paramètres physiques et technologiques clés sur ses performances optiques et électriques. À travers une série de simulations numériques réalisées sous l'environnement ATLAS de SILVACO, nous avons analysé de manière systématique l'impact de la fraction molaire d'aluminium dans les barrières AlGaAs, de l'épaisseur des puits quantiques, ainsi que de l'intégration d'une couche GeSn, sur les caractéristiques optiques et électriques du dispositif laser.

Dans un premier temps, nous avons montré que La variation de la fraction molaire d'aluminium dans les barrières AlGaAs influence significativement les performances optiques et électriques d'un laser à puits quantiques multiples. Une concentration modérée optimise le confinement des porteurs sans introduire de contraintes cristallines excessives. Les simulations montrent qu'une faible teneur en aluminium améliore la densité d'émission spontanée, le gain optique (plus élevé et plus large spectralement) et favorise une meilleure efficacité de recombinaison radiative, tout en maintenant une tension de seuil constante. Ces améliorations sont liées à une meilleure injection des porteurs, un bon chevauchement des fonctions d'onde et une réduction des défauts cristallins.

Dans un second temps, l'étude de l'épaisseur des puits quantiques a révélé un compromis crucial à respecter. Une épaisseur trop faible favorise un confinement intense mais peut conduire à une réduction de la section efficace d'interaction, tandis qu'une épaisseur trop importante diminue la densité d'états quantiques et dégrade l'efficacité de recombinaison. Il en résulte une diminution du gain optique, une réduction de l'intensité lumineuse émise et une augmentation de la tension de seuil. Nos résultats mettent en évidence l'existence d'une épaisseur optimale des puits quantiques assurant à la fois un bon confinement et une réponse optique élevée.

Enfin, l'introduction d'une couche de GeSn, malgré les défis liés au désaccord de maille avec les matériaux III-V, a été explorée comme une piste prometteuse pour élargir la bande interdite

Conclusion Générale

et améliorer l'émission dans l'infrarouge. Nos simulations ont montré que, dans certaines configurations, la couche GeSn peut participer au renforcement du gain optique, tout en favorisant une meilleure injection des porteurs dans la région active, sous réserve d'un contrôle précis des contraintes mécaniques et de la qualité cristalline.

L'ensemble de ces études démontre que la conception d'un laser MQW performant nécessite une optimisation fine de la structure quantique, en tenant compte des effets quantiques, des interactions matériaux et des contraintes technologiques. Le recours à des outils de simulation avancés permet d'anticiper le comportement du dispositif, de réduire les coûts expérimentaux et d'orienter efficacement les choix de fabrication.

Ce travail ouvre plusieurs perspectives pour des recherches futures :

- L'exploration de nouveaux matériaux actifs, notamment les alliages à base de nitrides ou de matériaux IV-VI.
- Le développement de structures verticales ou à cavité photonique intégrée, pour améliorer le confinement de la lumière et réduire les pertes optiques.

En conclusion, cette étude a permis de mieux comprendre les phénomènes physiques complexes qui régissent le fonctionnement des lasers à puits multiples, et de proposer des pistes concrètes pour améliorer leurs performances dans le cadre de futures applications en optoélectronique, télécommunications ou détection infrarouge.



Département des Sciences de la matière

قسم : علوم المادة

Filière: Physique

شعبة : الفيزياء

تصريح شرفي

خاص بالالتزام بقواعد النزاهة العلمية لإنجاز بحث

(ملحق القرار 1082 المؤرخ في 2021/12/27)



أنا الممضي أسفله،

السيد(ة):
تخصص:
الحامل(ة) لبطاقة التعريف الوطنية رقم
المسجل بكلية:
قسم: علوم المادة

والمكلف بانجاز أعمال بحث : مذكرة

عنوانها:
.....

أصرح بشرفي أنني ألتزم بمراعاة المعايير العلمية والمنهجية ومعايير الأخلاقيات المهنية والنزاهة
الأكاديمية المطلوبة في انجاز البحث المذكور أعلاه وفق ما ينص عليه القرار رقم 1082 المؤرخ في
2021/12/27 المحدد للقواعد المتعلقة بالوقاية من السرقة العلمية ومكافحتها.

التاريخ: 2025/06/01

إمضاء المعني بالأمر