

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

CALCUL DE GAIN OPTIQUE DE STRUCTURES À Puits QUANTIQUES SOUS  
CONTRAINTES

PHILIPPE MERCURE  
DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE  
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION  
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES  
(GÉNIE PHYSIQUE)  
NOVEMBRE 2006

© Philippe Mercure, 2006



Library and  
Archives Canada

Bibliothèque et  
Archives Canada

Published Heritage  
Branch

Direction du  
Patrimoine de l'édition

395 Wellington Street  
Ottawa ON K1A 0N4  
Canada

395, rue Wellington  
Ottawa ON K1A 0N4  
Canada

*Your file* *Votre référence*  
*ISBN: 978-0-494-25560-5*  
*Our file* *Notre référence*  
*ISBN: 978-0-494-25560-5*

**NOTICE:**

The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

**AVIS:**

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

---

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

  
**Canada**

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

CALCUL DE GAIN OPTIQUE DE STRUCTURES À PUIITS QUANTIQUES SOUS  
CONTRAINTES

présenté par: MERCURE Philippe

en vue de l'obtention du diplôme de: Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. DESJARDINS Patrick, Ph.D., président

M. MACIEJKO Romain, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. FRANCOEUR Sébastien, Ph.D., membre

## REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier mon directeur de recherche, M. Romain Maciejko, de m'avoir accueilli dans son équipe. Il a su guider mon travail et ses conseils ont été précieux. Je le remercie aussi pour l'aide financière qu'il m'a accordée.

Merci aux membres du jury, Patrick Desjardins et Sébastien Francoeur, pour s'être penché sur le travail. Un énorme merci à Michel Lestrade pour sa générosité et sa disponibilité. Beaucoup plus qu'une aide, il m'a apporté sa collaboration à chacune des étapes de ce travail. La même chose est vraie d'Alain Champagne, qui a toujours été disponible pour répondre aux questions et solutionner les problèmes de toutes sortes.

Merci à Rodica Matei pour sa collaboration exceptionnelle. Sa rigueur et sa motivation m'ont servi d'exemple. Les discussions que nous avons eues ont été extrêmement riches, même (ou surtout?) lorsqu'elles dépassaient le cadre de la physique. Merci à Lucian Bojor pour les conseils et la bonne compagnie. Merci à tous les autres membres du Laboratoire d'Optoélectronique. Merci à Nikolay Shtinkov, Guy Faucher et Clément Frappier d'avoir éclairé ma lanterne sur des points bien précis.

Merci finalement à ma famille (Yolande, Marcel et Évelyne) et à ma copine Julia pour leur support jusqu'à la fin.

## RÉSUMÉ

L'utilisation de puits quantiques sous contraintes a permis d'apporter une flexibilité supplémentaire dans la conception de composants optoélectroniques comme les lasers et les amplificateurs optiques à semi-conducteurs. Le Laboratoire d'optoélectronique de l'École Polytechnique de Montréal a par exemple conçu des amplificateurs optiques à semi-conducteurs insensibles à la polarisation de la lumière en utilisant une alternance de puits en tension et de puits en compression.

Ces configurations ont amené de nouveaux défis au niveau de la modélisation du gain optique. Jusqu'à maintenant, les outils de modélisation du laboratoire obtenaient le gain optique à partir d'un calcul de bandes basé sur l'approximation parabolique. Or, des travaux menés ici ainsi que d'autres provenant de la littérature ont montré que cette approximation est discutable dans le cas des puits quantiques sous contraintes. Les contraintes déforment les bandes du semi-conducteur, et il faut alors prendre en compte le mélange de bandes, soit l'influence des bandes les unes sur les autres.

Ce mémoire répond donc au besoin d'implanter un nouveau modèle qui permette de calculer le gain optique d'un puits quantique sous contraintes. À chaque étape du calcul (calcul de bandes, choix d'une fonction d'élargissement, traitement des effets coulombiens entre les porteurs), une liste de toutes les stratégies de calcul envisageables est présentée. Afin de comparer les modèles entre eux, des comparaisons avec des résultats expérimentaux sont établies.

Ce travail a d'abord permis de mettre au point une nouvelle méthode de comparaison entre des spectres d'émission spontanée expérimentaux et théoriques. En ayant recours à un outil déjà développé par notre laboratoire (le simulateur de lasers à semi-conducteurs LAS2D), il a été possible d'estimer la densité de porteurs générés par photoluminescence dans une structure complexe formée de six puits sous contraintes. Cette estimation permet de réduire le nombre de paramètres ajustables utilisés dans la comparaison, et constitue donc, à notre connaissance, une amélioration par rapport à toutes les méthodes de comparaison présentées dans la littérature.

Le travail montre ensuite qu'un modèle utilisant un calcul de bande 6x6 avec un temps de relaxation intrabande constant et une fonction d'élargissement gaussienne incluant les effets à N corps permet de bien modéliser les résultats expérimentaux. Cette comparaison réussie montre que le modèle pourra servir autant pour l'étude théorique des lasers que des amplificateurs optiques à semi-conducteurs. Il permettra de tester différentes conceptions de composants complexes sur ordinateur, conduisant à des économies de temps et d'argent.

## ABSTRACT

Strained quantum wells brought new flexibility in the design of optoelectronic components such as semiconductor lasers and semiconductor optical amplifiers. For example, the optoelectronic laboratory of École Polytechnique de Montréal built polarization insensitive semiconductor optical amplifiers using alternate tension and compression quantum wells.

These designs led to new challenges concerning the optical gain modeling of the components. Up to now, our laboratory was using an optical gain calculation based on the parabolic approximation. However, some studies conducted here and other published showed that this approximation is not fully valid in the case of strained quantum wells. In that case, a calculation that takes into account band-mixing is needed.

This work is an answer to the need of developing a new computer model to calculate the optical gain of a strained quantum well. At every step of the calculation (energy band calculation, choice of a linewidth function, methods of calculating the Coulomb interactions between charge carriers), a list of all the possible strategies is presented. In order to determine which models give the best results, a comparison with experimental results is established.

The first achievement of this work is to present a new comparison method between experimental and theoretical spontaneous emission spectra. Using a tool already

developed in our laboratory (the two dimensional semiconductor laser simulator LAS2D), we show that it's possible to estimate the charge carrier density generated by photoluminescence in a complex structure consisting of six strained quantum wells. This reduces the number of fitting parameters used in the calculation and is therefore an improvement compared to the comparison methods published previously.

The work then shows that a model using a 6x6 band calculation with a constant intraband relaxation time and a Gaussian linewidth function including many-body effects gives good agreement with experimental results. From this successful comparison, we can now say that the Optoelectronic Laboratory has a reliable tool for the calculation of the optical gain of strained quantum wells. This tool will be useful in the study of semiconductor lasers as well as semiconductor optical amplifiers. It will allow to test different designs on computer, resulting in a save of time and money.



## TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS.....	iv
RÉSUMÉ.....	v
ABSTRACT.....	vii
TABLE DES MATIÈRES .....	ix
LISTE DES FIGURES .....	xiii
LISTE DES TABLEAUX.....	xix
LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES .....	xx
LISTE DES ANNEXES.....	xxiv
INTRODUCTION .....	1
CHAPITRE 1 Théorie des puits quantiques et des puits quantiques sous contraintes .....	4
1.1 L'hétérostructure.....	5
1.2 Les puits quantiques.....	5
1.2.1 Densité d'états électroniques .....	5
1.2.2 Facteur de confinement.....	9
1.3 Structure de bandes .....	10
1.4 Puits quantiques sous contraintes.....	11

CHAPITRE 2	Calcul de bandes.....	17
2.1	Aperçu.....	18
2.2	Approximation des bandes paraboliques .....	20
2.3	Approximation des bandes paraboliques incluant les contraintes .....	23
2.4	La méthode $k \cdot p$ .....	26
2.5	Hamiltonien de Kohn-Luttinger.....	27
2.5.1	Description de l'hamiltonien .....	27
2.5.2	Paramètres de Luttinger .....	31
2.5.3	Vecteur d'onde dans le plan non-confiné .....	32
2.5.4	Approximation axiale .....	33
2.5.5	Hamiltonien de Kohn-Luttinger incluant les contraintes.....	34
2.5.6	Hamiltonien découplé $6 \times 6$ .....	36
2.5.7	Paramètres utilisés .....	37
2.6	Résolution numérique .....	38
2.6.1	Dérivée première .....	39
2.6.2	Dérivée seconde.....	40
2.6.3	Résolution de l'équation aux valeurs propres.....	41
2.6.4	Conditions limites.....	42
2.6.5	Opérateurs discrétisés .....	42
2.7	Validation des résultats .....	48
2.8	Discussion .....	51

CHAPITRE 3 Calcul de gain.....	52
3.1 Le modèle d'Asada .....	52
3.1.1 La densité d'état réduite.....	53
3.1.2 Élément de matrice de transition optique .....	54
3.1.3 Les fonctions d'occupation de Fermi .....	58
3.1.4 La fonction d'élargissement .....	58
3.2 Modèle de gain avec mélange de bandes.....	59
3.3 Modélisation de l'élargissement .....	64
3.4 Validation des résultats.....	66
3.4.1 Comparaison des forces de transition.....	67
3.4.2 Comparaison du gain modal .....	70
3.4.3 Discussion des résultats .....	73
CHAPITRE 4 Effets à N corps .....	77
4.1 Origine physique des effets.....	77
4.2 Modèle retenu .....	79
4.2.1 Modèle pour la renormalisation de la bande interdite .....	84
CHAPITRE 5 Application aux amplificateurs optiques à semi-conducteurs.....	86
5.1 Définition d'un amplificateur optique à semi-conducteurs .....	86
5.1.1 L'amplificateur à onde progressive (ou de simple passage).....	87
5.1.2 L'amplificateur Fabry-Pérot (ou multi passages).....	87
5.2 Sensibilité à la polarisation .....	88

5.3	Structure étudiée .....	92
5.4	Procédure de comparaison .....	94
5.4.1	Procédure expérimentale .....	95
5.4.2	Méthode de calcul théorique.....	97
5.5	Résultats.....	100
5.5.1	Comparaison avec le modèle à porteurs libres, fonction d'élargissement lorentzienne.....	100
5.5.2	Comparaison avec le modèle à porteurs libres, fonction d'élargissement gaussienne.....	103
5.5.3	Comparaison avec le modèle incluant les effets à N corps.....	105
5.6	Discussion.....	107
5.6.1	Écart-type.....	107
5.6.2	Comparaison des fonctions d'élargissement gaussienne et lorentzienne	108
5.6.3	Transitions .....	109
5.6.4	Effets à N corps .....	114
5.6.5	Autres éléments de discussions .....	121
	CONCLUSION.....	123
	BIBLIOGRAPHIE.....	127
	ANNEXE.....	133

## LISTE DES FIGURES

Figure 1.1: Densité d'états en fonction de l'énergie pour un matériau massif (3D) et pour un puits quantique (2D). .....	8
Figure 1.2 : Bandes d'énergie paraboliques d'un semi-conducteur a) massif, b) puits quantique. ....	10
Figure 1.3 : Définition des axes x, y et z pour l'hétérostructure.....	12
Figure 1.4 : Contrainte de tension biaxiale formée par une couche mince de paramètre de maille inférieur à celui du substrat. ....	13
Figure 1.5 : Contrainte de compression biaxiale formée par une couche mince de paramètre de maille supérieur à celui du substrat. ....	13
Figure 1.6: Représentation schématique de l'effet des contraintes sur la structure de bandes d'un semi-conducteur massif [1]. ....	15
Figure 2.1 : Schéma de la structure de bandes typique d'un semi-conducteur [3]. ....	18
Figure 2.2 : Alignement de bandes d'une hétérostructure .....	22
Figure 2.3 : Définition du vecteur d'onde dans le plan non confiné.....	33
Figure 2.4 : Maillage selon l'axe z utilisé pour les différences finies .....	38
Figure 2.5 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour un puits en compression .....	49
Figure 2.6 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour un puits sans contraintes. ....	50

Figure 2.7 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour un puits en tension. ....	50
Figure 3.1 : Schéma des 4 transitions possibles entre une bande de conduction et une bande de valence dégénérées en énergie. ....	57
Figure 3.2 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour la force de transition C1-HH1 d'un puits quantique en compression.....	67
Figure 3.3 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour la force de transition C1-LH1 d'un puits quantique en compression.....	68
Figure 3.4 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés[1] (traits pointillés) pour la force de transition C1-HH1 d'un puits quantique sans contraintes. ....	68
Figure 3.5 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés[1] (traits pointillés) pour la force de transition C1-LH1 d'un puits quantique sans contraintes. ....	69
Figure 3.6 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés[1] (traits pointillés) pour la force de transition C1-HH1 d'un puits quantique en tension. ....	69
Figure 3.7 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés[1] (traits pointillés) pour la force de transition C1-LH1 d'un puits quantique en tension. ....	70

Figure 3.8 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour le gain modal d'un puits en compression .....	71
Figure 3.9 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour le gain modal d'un puits sans contraintes. ....	72
Figure 3.10 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour le gain modal d'un puits en tension. ....	72
Figure 3.11 : Composante LH de la fonction enveloppe de la première bande de valence d'un puits en tension, courbe calculée et courbe publiée [1] .....	74
Figure 3.12 : Force de transition C1-HH1 (TM) pour un puits sans contraintes avec un domaine de calcul de 3000 Å (trait pointillé) et de 200 Å (trait plein). ....	75
Figure 5.1 : Configurations à base d'AOS permettant d'éliminer la sensibilité à la polarisation [26] .....	90
Figure 5.2 : Exemple de gain TE et TM de puits quantiques sous contraintes pour un puits en compression (a), un puits sans contraintes (b) et un puits en tension (c) [1]. ....	92
Figure 5.3 : Diagramme de bandes de la structure C3T3. ....	94
Figure 5.4 : Montage expérimental utilisé pour la mesure de l'émission spontanée. ....	96
Figure 5.5 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effets à N corps lorentzien (trait pointillé) pour une puissance optique d'excitation de 38 mW .....	101

- Figure 5.6 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effets à N lorentzien (trait pointillé) pour une puissance optique d'excitation de 200 mW ..... 102
- Figure 5.7 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effet à N corps gaussien (trait pointillé) pour une puissance optique d'excitation de 38 mW ..... 103
- Figure 5.8 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effets à N corps gaussien (trait pointillé) pour une puissance optique d'excitation de 88 mW ..... 103
- Figure 5.9 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effets à N corps gaussien (trait pointillé) pour une puissance optique d'excitation de 120 mW ..... 104
- Figure 5.10 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effets à N corps gaussien (trait pointillé) pour une puissance optique d'excitation de 200 mW ..... 104
- Figure 5.11 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique incluant les effets à N corps (trait pointillé) pour une puissance optique d'excitation de 38 mW ..... 105
- Figure 5.12 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique incluant les effets à N corps (trait pointillé) pour une puissance optique d'excitation de 88 mW ..... 106



- Figure 5.13 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique incluant les effets à N corps (trait pointillé) pour une puissance optique d'excitation de 120 mW ..... 106
- Figure 5.14 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique incluant les effets à N corps (trait pointillé) pour une puissance optique d'excitation de 200 mW ..... 107
- Figure 5.15 : Identification des transitions sur la courbe expérimentale obtenue avec une intensité optique d'excitation de 200 mW ..... 113
- Figure 5.16 : Comparaison entre le modèle théorique sans effet à N corps (trait plein) et le modèle théorique avec les effets à N corps (trait pointillé) pour la densité de porteurs calculée à partir d'une puissance d'excitation de 38 mW ..... 114
- Figure 5.17 : Comparaison entre le modèle théorique sans effet à N corps (trait plein) et le modèle théorique avec les effets à N corps (trait pointillé) pour la densité de porteurs calculée à partir d'une puissance d'excitation de 88 mW ..... 115
- Figure 5.18 : Comparaison entre le modèle théorique sans effet à N corps (trait plein) et le modèle théorique avec les effets à N corps (trait pointillé) pour la densité de porteurs calculée à partir d'une puissance d'excitation de 120 mW ... 115
- Figure 5.19 : Comparaison entre le modèle théorique sans effet à N corps (trait plein) et le modèle théorique avec les effets à N corps (trait pointillé) pour la densité de porteurs calculée à partir d'une puissance d'excitation de 200 mW ... 116

Figure 5.20 : Différence entre l'amplitude du sommet de la courbe incluant les effets à N corps et celle du sommet de la courbe sans effet à N corps en fonction de la puissance d'excitation .....	117
Figure 5.21 : Renormalisation utilisée pour ajuster les courbes théoriques aux courbes expérimentales.....	120
Figure I.1 : Exemple d'une courbe de gain vs signal d'entrée pour un AOS .....	137
Figure I.2 : Conversion de longueur d'onde à base de modulation croisée de gain .....	140
Figure I.3 : Conversion de longueur d'onde à base de modulation croisée de phase .....	141
Figure I.4 : Convertisseur de longueur d'onde indépendant de la polarisation basé sur le mélange à quatre ondes .....	143
Figure I.5 : Routeur optique à base d'AOS.....	144
Figure I.6 : Interrupteur optique utilisant un TOAD.....	145
Figure I.7 : AOS à filtre accordable utilisé comme démultiplexeur .....	146
Figure I.8 : Principe du multiplexage dans le domaine temporel .....	148

## LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1.1 : Valeurs utilisées pour le calcul de la densité d'états d'un matériau massif et d'un puits quantique. ....	6
Tableau 2.1 : Paramètres des matériaux binaires utilisés pour le calcul de bandes.....	37
Tableau 2.2 : Caractéristiques des puits étudiés pour la validation du calcul de bandes..	48
Tableau 3.1 : Facteurs de correction $A_j$ pour le calcul des éléments de matrice de transition des puits quantique [2] .....	56
Tableau 3.2 : Paramètres utilisés pour la comparaison avec la littérature .....	71
Tableau 5.1 : Caractéristiques de la région active de la structure utilisée pour faire les comparaisons .....	93
Tableau 5.2 : Densités de porteurs calculés par le simulateur LAS2D pour les quatre puissances optiques d'excitation utilisées en laboratoire .....	100
Tableau 5.3 : Écart-type entre les courbes expérimentale et théorique pour différents modèles étudiés .....	108
Tableau 5.4 : Transitions des puits en compression et des puits en tension à $k_t = 0$ pour la structure C3T3 avec les éléments de matrice optique associés.....	110
Tableau 5.5 : Énergies des transitions principales à $k_t=0$ incluant la renormalisation de la bande interdite .....	112
Tableau I.1 : Comparaison de la performance des AOS et des amplificateurs à fibre [32]. .....	135

## LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES

## Notations

$k$	nombre d'onde ( $m^{-1}$ )
$\Gamma_c$	facteur de confinement
$g_{mat}$	gain matériel ( $cm^{-1}$ )
$g_{mod}$	gain modal ( $cm^{-1}$ )
$a_0$	paramètre de maille ( $\text{Å}$ )
$\varepsilon_{ij}$	composante de la contrainte dans la direction $i,j$
$C_{11}, C_{12}$	constantes d'élasticité ( $10^{11} \text{dyn/cm}^2$ )
$\delta H$	composante hydrostatique de la contrainte
$\delta S$	composante de cisaillement de la contrainte
$a, b$	potentiels de déformation de Bikus-Bir
$E_g$	énergie de la bande interdite (eV)
$E_c$	énergie de bord de bande de l'électron (eV)
$E_v$	énergie de bord de bande du trou (eV)
$m_c$	masse effective de l'électron (kg)
$m_v$	masse effective du trou (kg)
$a_c$	proportion du potentiel de déformation hydrostatique qui s'applique sur la bande de conduction
$a_v$	proportion du potentiel de déformation hydrostatique qui s'applique sur la bande de valence
$L$	épaisseur du puit quantique ( $\text{Å}$ )
$\Delta$	énergie de spin-orbite (eV)
$P_0$	constante de couplage entre la bande de conduction et la bande de valence $\left( \frac{J^3 \cdot s^2}{kg} \right)$

$\gamma'_1, \gamma'_2, \gamma'_3$	paramètres de Luttinger
$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$	paramètres de Luttinger modifiés
$k_i$	vecteur d'onde dans le plan non-confiné ( $m^{-1}$ )
$n_{eff}$	indice effectif
$\omega$	fréquence angulaire du photon (rad/s)
$M_b$	Élément de matrice de transition optique ( $\sqrt{kg \cdot eV}$ )
$\tau_{in}$	temps de relaxation intrabande (s)
$\Delta E_{CH}$	contribution coulomb-trou à la renormalisation de la bande interdite (eV)
$\Delta E_{SX}$	contribution de l'échange écranté à la renormalisation de la bande interdite (eV)
$\lambda_s$	inverse de la longueur d'écrantage ( $m^{-1}$ )
$F_n$	quasi-niveau de Fermi pour les électrons (eV)
$F_p$	quasi-niveau de Fermi pour les trous (eV)
$N$	densité d'électrons ( $cm^{-3}$ )
$P$	densité de trous ( $cm^{-3}$ )
$t_\omega$	temps de corrélation relié au renforcement non-Markovien du gain optique (fs)
$P(\lambda)$	puissance de l'émission spontanée mesurée (W)
$d\lambda$	résolution numérique du spectromètre (nm)

## Abréviations

HH	Heavy Hole (trou lourd)
LH	Light Hole (trou léger)
SO	Spin-orbite
AOS	Amplificateur Optique à Semi-Conducteurs
TE	Transverse Électrique
TM	Transverse Magnétique
WDM	Wavelength Division Multiplexing

## Constantes physiques

$e = -1,6.10^{-19} \text{ C}$	charge de l'électron
$m = 0,91.10^{-30} \text{ kg}$	masse de l'électron au repos
$h = 6,624.10^{-34} \text{ J.s}$	constante de Plank
$k = 1,38.10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$	constante de Boltzmann
$\epsilon_0 = 8,85.10^{-12} \text{ F/m}$	permittivité du vide

## LISTE DES ANNEXES

ANNEXE 1 APPLICATION DES AMPLIFICATEURS OPTIQUES À SEMI- CONDUCTEURS .....	133
I.1 L'AOS pour l'amplification .....	133
I.1.1 Avantages et inconvénients .....	134
I.2 Le traitement de signal .....	138
I.2.1 Phénomènes non-linéaires .....	138
I.2.2 Conversion de longueur d'onde.....	140
I.2.3 Porte optique (optical gate) .....	143
I.2.4 Démultiplexage.....	146
I.2.5 Régénération 2R .....	147
I.2.6 Régénération 3R et réseaux OTDM .....	147

# Introduction

## Cadre de l'étude

Les réseaux de fibres optiques sont le système nerveux de notre planète. Ils traversent les océans, relient les villes entre elles, connectent les foyers et les entreprises. Ils nous permettent d'échanger de plus en plus d'information, de plus en plus rapidement.

Ces informations voyagent dans les fibres optiques sous forme de lumière. Nos ordinateurs traitent plutôt les données de façon électronique. Le réseau nécessite donc une transformation de l'électricité en lumière, et vice-versa. Les composants qui opèrent cette conversion sont formés de matériaux semi-conducteurs : lasers, amplificateurs optiques, détecteurs.

À la fin des années 1970, l'apparition des puits quantiques a permis d'améliorer les performances des lasers à semi-conducteurs utilisés pour envoyer les signaux dans les fibres optiques. Traditionnellement, le paramètre de maille du cristal semi-conducteur constituant le puits quantique était ajusté sur celui des barrières, de façon à limiter les contraintes mécaniques. Au début des années 1980, on a commencé à examiner l'idée d'introduire de faibles contraintes dans les puits. Ceci permet de modifier les propriétés optiques et électroniques du cristal, ouvrant la voie à de nouvelles possibilités pour la conception de composants.



L'utilisation de puits quantiques sous contraintes dans les lasers et les amplificateurs à semi-conducteurs est aujourd'hui de plus en plus répandue. Mais si on sait les fabriquer, il faut aussi savoir modéliser leur comportement. Ce mémoire présente différents modèles permettant de calculer le gain optique d'un puits quantique sous contraintes et établit des comparaisons entre ces derniers.

### **Organisation du mémoire**

Le mémoire est divisé en cinq chapitres.

Le Chapitre 1 présente la théorie des puits quantiques et des puits quantiques sous contraintes nécessaire à la compréhension de ce travail.

Le Chapitre 2 se penche sur la première étape d'un calcul de gain optique : le calcul de bandes. Il justifie le choix d'un hamiltonien de Luttinger-Kohn 6x6 pour le calcul des bandes et explique comment celui-ci a été réalisé numériquement. Des comparaisons avec des résultats publiés dans la littérature viennent valider la méthode de calcul.

Le Chapitre 3 présente le calcul de gain lui-même. Des comparaisons avec la littérature sont aussi fournies pour vérifier la validité du calcul.

Le Chapitre 4 présente les effets à N corps qui sont nécessaires à la modélisation complète du gain optique.

Le Chapitre 5 utilise le modèle implanté pour calculer le spectre d'émission spontanée d'amplificateurs optiques à semi-conducteurs formés d'une alternance de puits en tension et de puits en compression. Des comparaisons avec des mesures expérimentales réalisées en laboratoire sont effectuées, ce qui permet de comparer différentes options de calcul entre elles.

# CHAPITRE 1

## **Théorie des puits quantiques et des puits quantiques sous contraintes**

Les puits quantiques occupent aujourd'hui une place prépondérante en optoélectronique. Utilisés dans les lasers ou les amplificateurs optiques à semi-conducteurs, ils permettent d'en augmenter la performance à plusieurs égards : plus de gain par porteur injecté que les structures massives, avantage de pouvoir changer la longueur d'onde d'émission en modifiant la largeur du puits quantique, largeur d'émission spectrale plus étroite dans le cas des lasers, etc.

Dans les dernières années, l'apparition des puits quantiques sous contraintes est venue ajouter une flexibilité supplémentaire au design des dispositifs électroniques. Ce chapitre présente les aspects théoriques des puits quantiques et des puits quantiques sous contraintes nécessaires à la compréhension du présent projet.

## 1.1 L'hétérostructure

Les puits quantiques découlent des hétérostructures, qui sont utilisées en optoélectronique depuis la fin des années soixante. Dans un laser ou un amplificateur optique à semi-conducteurs, les recombinaisons radiatives qui provoquent le gain ont lieu dans la région active du dispositif. Dans une hétérostructure, cette région active est formée d'un matériau qui diffère d'au moins une des deux barrières qui l'entourent. En optoélectronique, la configuration optimale consiste à placer la région active entre deux matériaux de bande interdite plus élevée et d'indice de réfraction plus faible. La différence de bande interdite confine les porteurs dans la région active, tandis que la différence d'indice y confine les photons.

## 1.2 Les puits quantiques

Lorsque l'épaisseur de la région active est inférieure à 20 nm, les niveaux d'énergie disponibles pour les porteurs deviennent discrets. Ceci modifie plusieurs propriétés du matériau dont les suivantes :

### 1.2.1 Densité d'états électroniques

La densité d'états électronique, notée  $\rho$ , permet de savoir combien d'électrons peuvent être contenus dans un volume donné par unité d'énergie. Nous calculons d'abord la densité d'électrons dans l'espace réciproque  $k$  (où  $k$  est le vecteur d'onde de l'électron).

Dans le cas d'un matériau massif, nous définissons un cube unitaire dans l'espace  $k$  qui occupe un volume  $V_u = (2\pi/L)^3$ . Le nombre  $N_s$  de ces cubes unitaires pouvant être contenus dans un volume fictif formé d'une sphère de rayon  $k$  est donné par  $N_s = V_k/V_u$ . Dans le cas d'un puits quantique, le confinement nous oblige à transposer ce raisonnement en deux dimensions, si bien que  $V_u$  devient un carré de côté  $2\pi/L$  et  $V_k$  un cercle de rayon  $k$ . On peut donc écrire :

$$N_s = \frac{V_k}{V_u} = \frac{V_k}{(2\pi/L)^m} \quad (1.1)$$

avec :

*Tableau 1.1* : Valeurs utilisées pour le calcul de la densité d'états d'un matériau massif et d'un puits quantique.

	<b>m</b>	<b><math>V_k</math></b>
<b>Matériau massif</b>	3	$4\pi k^3/3$
<b>Puits quantique</b>	2	$\pi k^2$

Si la densité d'états était connue sur l'ensemble de l'espace  $k$ , il serait possible d'obtenir le nombre d'états  $N_s$  contenus dans le volume  $V_k$  en intégrant sur ce volume :

$$\int_{V_k} \rho^{mD}(k) dk = \frac{N_s}{V} \quad (1.2)$$

où  $V$  est le volume total du cristal et  $\rho^{mD}$  est le nombre total d'états par unité de volume.

Il suffit de résoudre l'équation pour obtenir la densité d'états :

$$\rho^{mD}(k) \equiv \frac{1}{V} \frac{dN_s}{dk} = \frac{L^m}{V} \frac{1}{(2\pi)^m} \frac{dV_k}{dk} \quad (1.3)$$

Il est possible d'obtenir la densité d'états en fonction de l'énergie de l'électron plutôt qu'en fonction de son vecteur d'onde si on connaît la relation  $E(k)$ . Considérons des

bandes paraboliques de la forme  $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . Pour un matériau massif, on obtient :

$$\rho^{3D} = \frac{\sqrt{E}}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (1.4)$$

Dans le cas d'un puits quantique selon l'axe  $z$ , les particules sont confinées dans une seule

direction, si bien que  $k_x = k_y = 0$  et  $k_z = \frac{n_z \pi}{L_z}$ . La densité d'états devient donc

$$\rho^{2D}(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \frac{n_z}{L_z} \quad (1.5)$$

Puisque  $n_z = 1, 2, 3, \dots$ , la densité d'états en deux dimensions croît par paliers.

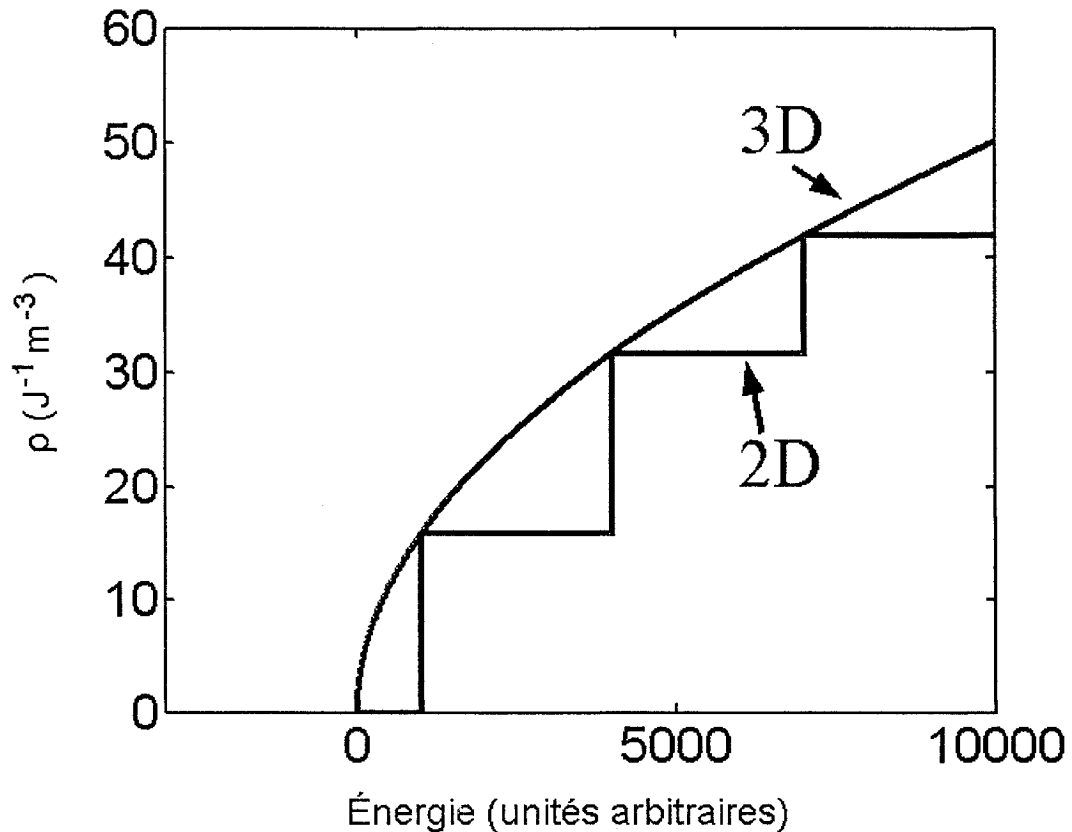


Figure 1.1: Densité d'états en fonction de l'énergie pour un matériau massif (3D) et pour un puits quantique (2D).

Cette différence de densité d'états électroniques fait en sorte que pour un même courant d'injection, un puits quantique conduira à un gain plus élevé qu'un matériau massif. Pour obtenir un gain optique élevé, il faut en effet créer une inversion de population entre deux niveaux possédant des densités d'états élevées. Dans le cas d'un matériau massif, il faut d'abord remplir les états de faibles énergies possédant une faible densité de porteurs avant d'accéder à des niveaux intéressants. Il y a donc un « gaspillage » de

porteurs dans les niveaux de basse énergie. Avec le puits quantique, les porteurs sont directement injectés dans des niveaux comportant des densités d'états élevées. Un laser conçu avec des puits quantiques présentera donc un courant de seuil plus bas que celui fabriqué d'un matériau massif.

Il faut aussi savoir que plus l'injection de porteurs est importante, plus les pertes internes sont élevées. Les lasers à puits quantiques, en opérant avec moins de porteurs que les structures massives, sont donc plus efficaces et peuvent générer des puissances de sortie plus élevées.

### 1.2.2 Facteur de confinement

On définit le facteur de confinement  $\Gamma_c$  de la façon suivante :

$$\Gamma_c = \frac{\text{Intensité du champ optique dans la région active}}{\text{Intensité totale du champ optique}} \quad (1.6)$$

Les dispositifs optoélectronique à puits quantique présentent une région active extrêmement mince. Il en résulte un facteur de confinement très faible ( $\Gamma_c$  puits quantique  $\approx 0.03$  alors que  $\Gamma_c$  massif  $\approx 0.5$ ). Ceci a pour effet de diminuer le gain modal, défini par :

$$g_{\text{mod}} = \Gamma_c \cdot g_{\text{mat}} \quad (1.7)$$



où  $g_{\text{mat}}$  est le gain matériel. Il s'agit d'un désavantage qui peut être surmonté en adoptant une structure avec un profil d'indice variable de chaque côté de la région active. Ceci crée un guide qui permet de confiner le champ optique. Les structures à puits quantiques multiples présentent aussi un meilleur facteur de confinement que celles à puits unique puisque l'aire de la région active se trouve augmentée.

### 1.3 Structure de bandes

La quantification des états d'énergie amène aussi une modification de la structure de bandes du semi-conducteur. Dans la bande de valence, on observe une séparation de la bande de trous légers (appelée *bande LH* pour *light holes*) et de la bande des trous lourds (*bande HH* pour *heavy holes*) au point  $\Gamma$ . Nous nous attarderons plus spécifiquement sur la structure de bandes au chapitre 2.

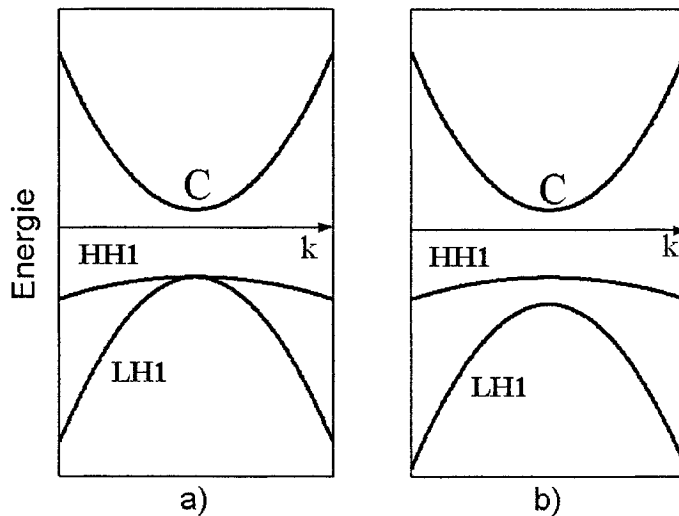


Figure 1.2 : Bandes d'énergie paraboliques d'un semi-conducteur a) massif, b) puits quantique.

## 1.4 Puits quantiques sous contraintes

Lorsqu'on fait la croissance épitaxiale d'une couche mince sur un substrat pour former un puits quantique, on choisit habituellement la composition des matériaux pour que le puits et les barrières présentent le même paramètre de maille. Il en résulte un puits quantique non contraint. Or, il peut être intéressant d'introduire des contraintes dans le puits quantique en choisissant des paramètres de maille légèrement différents. Si la couche est assez mince, le paramètre de maille de la couche s'ajuste sur celui du substrat sans provoquer de dislocation. L'introduction de faibles contraintes mécaniques (environ 0.1% à 1%) permet de modifier la bande interdite et la masse effective des porteurs de charge de façon significative, ce qui influence les propriétés optiques et électriques du cristal.

Considérons le dépôt d'une couche épitaxiale de paramètre de maille  $a'$  sur un substrat de paramètre de maille  $a_0$  (les deux matériaux sont de maille cubique). On dit que la contrainte est biaxiale car le cristal subira une contrainte dans la direction de croissance (axe  $z$ ) ainsi qu'une autre dans le plan dans le plan  $xy$ . Dans le cas d'une couche déposée selon la direction cristalline  $\langle 100 \rangle$  et avec les axes définis selon la figure 1.3, les seules composantes non nulles de la contrainte sont les suivantes :

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_0 - a'}{a_0} \quad (1.8)$$

$$\varepsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{xx} \quad (1.9)$$

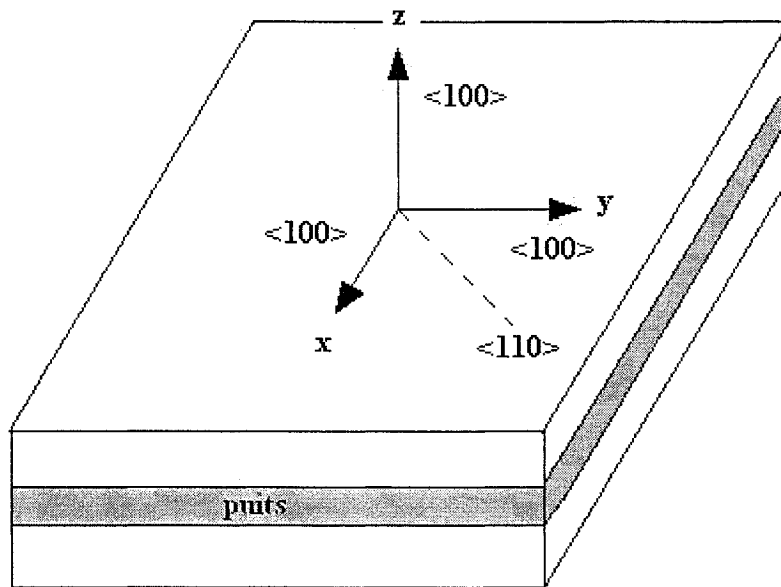


Figure 1.3 : Définition des axes x, y et z pour l'hétérostructure.

Les paramètres  $C_{11}$  et  $C_{12}$  sont des constantes d'élasticité qui dépendent de la composition du matériau. Si  $a' < a_0$ , la couche mince est en tension, tandis que dans le cas contraire elle est en compression (voir figures suivantes).

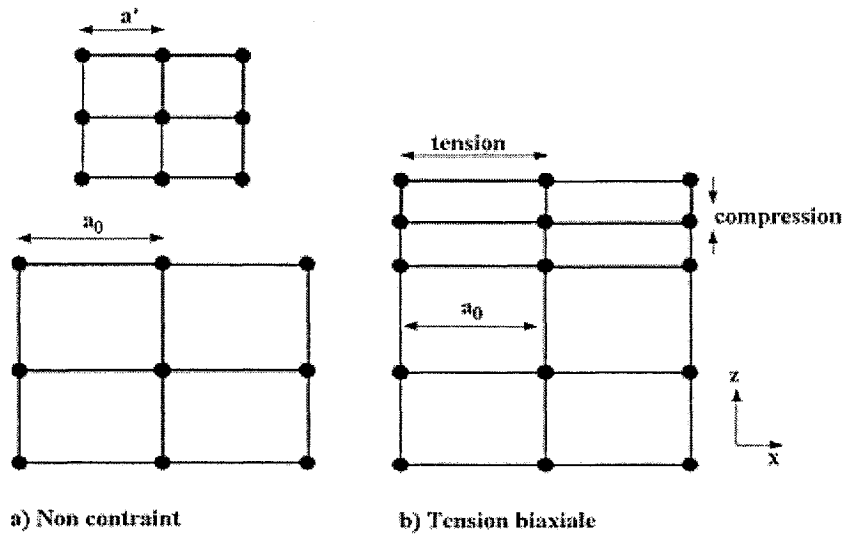


Figure 1.4 : Contrainte de tension biaxiale formée par une couche mince de paramètre de maille inférieur à celui du substrat.

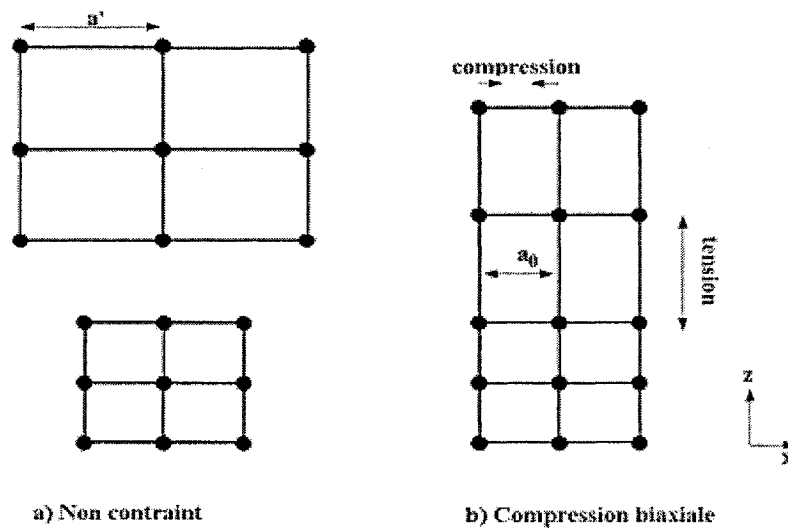


Figure 1.5 : Contrainte de compression biaxiale formée par une couche mince de paramètre de maille supérieur à celui du substrat.

Les contraintes affectent la structure de bandes du semi-conducteur par l'intermédiaire de deux composantes du potentiel de déformation :

- La composante hydrostatique  $\delta_H$ , considérée positive en compression et négative en tension.
- La composante de cisaillement  $\delta_S$ , également considérée positive en compression et négative en tension. Pour une contrainte biaxiale, ces deux termes sont calculés de la façon suivante :

$$\delta_H = -a(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) = -a(2\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) \quad (1.10)$$

$$\delta_S = -b(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) = -2b(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz}) \quad (1.11)$$

où a et b sont les potentiels de déformation de Pikus-Bir. L'énergie de bande interdite d'un matériau sous contraintes est donnée par :

$$Eg_{avec\ contrainte} = Eg_{sans\ contrainte} + \delta H \pm \delta S \quad (1.12)$$

où le signe (+) relatif au terme de cisaillement s'applique aux trous légers tandis que le signe (-) s'applique aux trous lourds.

La figure 1.6 illustre de façon schématique l'effet des contraintes sur la structure de bandes d'un semi-conducteur.

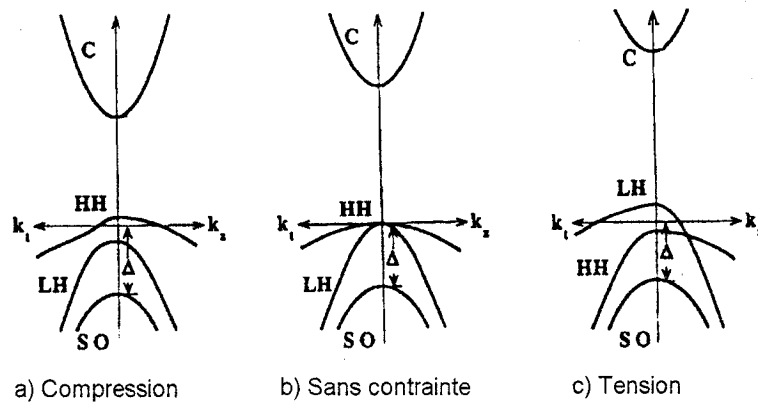


Figure 1.6: Représentation schématique de l'effet des contraintes sur la structure de bandes d'un semi-conducteur massique [1].

Nous verrons au chapitre 5 comment il est possible de tirer profit de ces modifications de la structure de bandes pour concevoir des amplificateurs optiques à semi-conducteurs (AOS) insensibles à la polarisation de la lumière incidente.

Notons cependant que les puits quantiques sous contraintes ne sont pas seulement utilisés pour le design d'AOS insensibles à la polarisation. Ils sont aussi largement utilisés dans la conception de lasers à semi-conducteurs. Des systèmes sous contraintes tel  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ ,  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$  et  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$  permettent d'accéder à une large gamme de longueurs d'onde facilement modifiable (voir [2], p.144).

Les puits en compression sont particulièrement intéressants dans le cas des lasers pour deux raisons. D'abord, la bande HH et la bande LH sont bien découplées, ce qui favorise l'accumulation des trous dans une seule bande et limite le « gaspillage » de porteurs dans les bandes plus profondes. Ensuite, les puits quantiques en compression présentent une masse effective dans le plan confiné plus faible. Ceci accentue la courbure des bandes de valences, et il faut alors moins de porteurs pour faire augmenter (en valeur absolue) le quasi-niveau de Fermi des trous. L'inversion de population est donc plus facile à réaliser, ce qui se traduit par un courant de seuil plus faible (voir [2], p. 428).

Les puits quantiques sous contraintes amènent de nouveaux défis du point de vue de la modélisation des dispositifs. Dans le prochain chapitre, nous examinerons comment calculer la structure de bandes d'un puits quantique sous contraintes.

## CHAPITRE 2

### Calcul de bandes

Pour étudier les propriétés optiques d'un semi-conducteur comme l'absorption ou le gain, il faut être en mesure de décrire les transitions électroniques qui se produisent dans le matériau en présence d'un champ optique. Ceci nécessite la connaissance de la structure de bandes électroniques du matériau, c'est-à-dire les bandes d'énergie et leurs fonctions d'onde correspondantes.

Dans ce chapitre, nous examinerons différents modèles permettant de calculer la structure de bandes d'un puits quantique sous contraintes. Nous prendrons comme point de départ le modèle le plus simple, soit l'approximation des bandes paraboliques, et nous examinerons dans quelles conditions il peut être valable. Nous évoluerons ensuite vers des modèles plus complets, le but étant de trouver le meilleur modèle disponible.

Les modèles décrits s'appliquent à des puits quantiques formés de semi-conducteurs à bande interdite directe. Le système  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{InP}$ , particulièrement utilisé pour applications en télécommunications, est un exemple de ce que nous cherchons à modéliser.



## 2.1 Aperçu

Les bandes d'énergie d'un semi-conducteur proviennent des orbitales atomiques des atomes qui composent le réseau cristallin. Les couches « s » et « p » les plus extérieures des atomes de semi-conducteur se combinent dans un cristal pour donner naissance aux bandes d'énergie les plus intéressantes pour notre étude (celles entre lesquelles la majorité des transitions optiques se produisent).

Les orbitales « s » des atomes individuels conduisent aux bandes de conduction du groupe  $\Gamma_1^c$  dans le réseau, tandis que les orbitales « p » donnent naissance aux bandes de valence du groupe  $\Gamma_5^v$ .

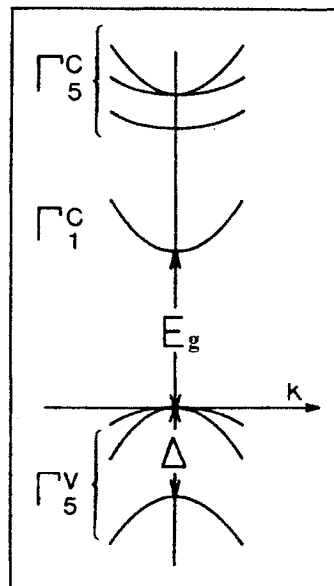


Figure 2.1 : Schéma de la structure de bandes typique d'un semi-conducteur [3].

Les orbitales  $p_x$ ,  $p_y$  et  $p_z$  des atomes conduisent aux fonctions de Bloch  $|x\rangle$ ,  $|y\rangle$  et  $|z\rangle$  du cristal. Les bandes de valence des trous lourds (bande HH pour *heavy holes*), des trous légers (bande LH pour *light holes*) et des trous splits-off (bande SO) sont des combinaisons linéaires de ces trois fonctions de Bloch.

$$\begin{aligned}
 |HH\rangle \chi_{\uparrow} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle + i|y\rangle) \chi_{\uparrow} \\
 |HH\rangle \chi_{\downarrow} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|x\rangle - i|y\rangle) \chi_{\downarrow} \\
 |LH\rangle \chi_{\uparrow} &= -\frac{1}{\sqrt{6}}(|x\rangle \chi_{\downarrow} + i|y\rangle \chi_{\downarrow} - 2|z\rangle \chi_{\uparrow}) \\
 |LH\rangle \chi_{\downarrow} &= \frac{1}{\sqrt{6}}(|x\rangle \chi_{\uparrow} - i|y\rangle \chi_{\uparrow} + 2|z\rangle \chi_{\downarrow}) \\
 |SO\rangle \chi_{\uparrow} &= -\frac{1}{\sqrt{3}}(|x\rangle \chi_{\downarrow} + i|y\rangle \chi_{\downarrow} + |z\rangle \chi_{\uparrow}) \\
 |SO\rangle \chi_{\downarrow} &= \frac{1}{\sqrt{3}}(|x\rangle \chi_{\uparrow} - i|y\rangle \chi_{\uparrow} - |z\rangle \chi_{\downarrow})
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

Les symboles  $\chi_{\uparrow}$  et  $\chi_{\downarrow}$  représentent les deux états possible du spin. La plupart des transitions optiques se produisent entre les bandes de conduction du niveau  $\Gamma_1^c$  et les bandes de valence du groupe  $\Gamma_5^v$  (HH, LH et SO). Ce sont donc ces bandes qui seront considérées ici. On suppose que les bandes de valence plus profondes sont complètement remplies d'électrons et que les bandes de conduction d'énergies supérieures demeurent inaccessibles aux porteurs et ne sont donc pas peuplées.

## 2.2 Approximation des bandes paraboliques

Nous voulons connaître la forme des bandes autour du point  $\Gamma$ , qui est le point de symétrie où le vecteur  $k = 0$ . La solution la plus simple est de supposer qu'elles prennent la forme de paraboles. Pour un matériau massif, on approxime les bandes de conduction à l'aide de la relation suivante :

$$E_e(k) = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_e} [k_x^2 + k_y^2 + k_z^2] \quad (2.2)$$

où  $E_e$  est l'énergie de l'électron,  $E_c$  l'énergie de bord de bande de conduction, et  $k_x$ ,  $k_y$  et  $k_z$  les vecteurs d'onde de l'électron dans les trois dimensions de l'espace.

Dans le cas d'un puits quantique infini avec le confinement selon l'axe  $z$ , la quantification entraîne que  $k_z = \frac{n\pi}{L}$  (avec  $L$  l'épaisseur du puits quantique et  $n$  un entier qui donne le niveau de l'état confiné). La relation devient :

$$E_e(k) = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_e} \left[ k_x^2 + k_y^2 + \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2 \right] \quad (2.3)$$

La variable  $m_e$  représente la masse effective de l'électron. Ce paramètre inclut l'effet du potentiel périodique du réseau sur l'électron et est déterminé expérimentalement (par exemple par résonance cyclotron).

La bande de valence suit la même forme :

$$E_h(k) = E_v - \frac{\hbar^2}{2m_v} \left[ k_x^2 + k_y^2 + \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2 \right] \quad (2.4)$$

où  $E_h$ ,  $E_v$ , et  $m_v$  sont respectivement l'énergie du trou, l'énergie de bord de bande de valence et la masse effective du trou. Notons que la masse effective des trous varie selon le type de trou (HH, LH, SO) et selon la direction considérée (perpendiculaire au plan non confiné  $xy$  ou parallèle à ce plan). Comme la masse effective de l'électron, les masses effectives des trous proviennent de données expérimentales.

Nous définissons l'énergie zéro au centre de la bande interdite du puits, si bien que les énergies de conduction sont positives et les énergies de valence négatives.

### *Alignement de bandes*

Les énergies de bord de bande  $E_c$  et  $E_v$  sont dictées par l'alignement de bandes. Dans une hétérostructure, la différence entre la bande interdite de la barrière et celle du puits quantique se répartit entre la bande de conduction et la bande de valence. Les

hétérostructures étudiées dans le cadre de ce travail sont toutes formées d'InGaAsP, et nous considérons que  $\Delta E_c = 0,36 \Delta E_g$  ( $\Delta E_c$  est alors donné par le complément, soit  $1 - \Delta E_c = 0,64 \Delta E_g$ ). Il est aussi possible d'utiliser la théorie du modèle solide (*solid-model theory*) pour calculer l'alignement de bandes [2].

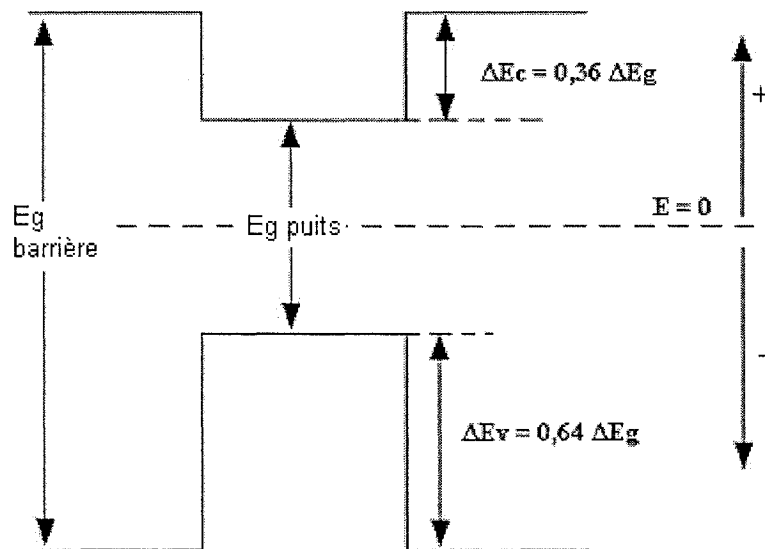


Figure 2.2 : Alignement de bandes d'une hétérostructure.

L'approximation des bandes paraboliques a été abondamment utilisée pour décrire la structure de bandes de puits quantiques non contraints [4, 5, 6]. Des efforts ont aussi été faits pour l'adapter aux puits quantiques sous contraintes tel que décrit dans la section suivante.

## 2.3 Approximation des bandes paraboliques incluant les contraintes

Il existe des modèles qui tiennent compte des contraintes tout en conservant des bandes paraboliques [7, 8]. Les contraintes sont modélisées en décalant les bandes des trous lourds et des trous légers et en modifiant leur courbure par l'entremise d'un changement de leur masse effective. Les bandes de conduction sont aussi décalées mais ne subissent pas de changement de courbure.

Ces modèles intermédiaires sont en fait des approximations de la méthode k·p présentée à la section suivante. Les bandes de conduction, de trous lourds et de trous légers sont calculées avec les relations suivantes :

$$E_c(k) = E_c + a_c \delta H + \frac{\hbar^2}{2m_c} \left[ k_x^2 + k_y^2 + \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2 \right] \quad (2.5)$$

$$E_{HH}(k) = E_v - a_v \delta H + \frac{\delta S}{2} - \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k_x^2 + k_y^2)}{m_{xy}^{hh}} + \frac{1}{m_z^{hh}} \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2 \right] \quad (2.6)$$

$$E_{LH}(k) = E_v - a_v \delta H - \frac{\delta S}{2} - \frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{(k_x^2 + k_y^2)}{m_{xy}^{lh}} + \frac{1}{m_z^{lh}} \left( \frac{n\pi}{L} \right)^2 \right] \quad (2.7)$$

où  $a_c$  et  $a_v$  sont les proportions du potentiel de déformation hydrostatique  $\delta_H$  qui s'appliquent sur la bande de conduction et la bande de valence respectivement.

On peut vérifier que pour  $k = 0$ , on retrouve les bandes interdites suivantes :

$$E_c(0) - E_{HH}(0) = E_c - E_v + \delta H - \frac{\delta S}{2} \quad (2.8)$$

$$E_c(0) - E_{LH}(0) = E_c - E_v + \delta H + \frac{\delta S}{2} \quad (2.9)$$

ce qui vérifie la relation générale 1.12.

Les variables  $m_{xy}^{hh}$  et  $m_z^{hh}$  représentent les masses effectives des trous lourds dans le plan  $xy$  et selon l'axe  $z$  respectivement. De la même façon,  $m_{xy}^{lh}$  et  $m_z^{lh}$  représentent les masses effectives des trous légers dans le plan  $xy$  et selon l'axe  $z$ . Pour estimer ces valeurs, on utilise l'équation de dispersion analytique  $E(k)$  du matériau massique de même composition provenant de la résolution de l'hamiltonien de Luttinger-Kohn. (Notons que pour les puits quantiques, cette relation analytique n'existe pas et il faut résoudre l'hamiltonien de Luttinger-Kohn au complet, tel qu'expliqué à la section suivante). On calcule les masses effectives en faisant correspondre une parabole à cette équation analytique du quatrième degré en  $k$  et en calculant la courbure de cette parabole.

L'avantage de ce modèle est sa simplicité. Il fournit une expression analytique pour  $E(k)$ , ce qui facilite grandement le calcul de gain (voir le modèle d'Asada à la section 3.1).

Cette simplicité de calcul est particulièrement importante dans des applications comme les simulateurs de laser en deux dimensions, où le gain doit être évalué à plusieurs points de l'espace et pour plusieurs longueurs d'onde.

On peut dire que le modèle des bandes paraboliques incluant les contraintes peut fournir une approximation intéressante dans le cas des puits faiblement contraints et pour les puits en compression. Dans ces derniers, la bande HH et la bande LH sont bien découplées par l'effet de la contrainte et ne s'affectent pas beaucoup l'une l'autre.

Le problème réside dans les puits en tension, où la composante de cisaillement du potentiel de déformation est de signe contraire pour les trous HH et les trous LH. Ceci a pour effet de rapprocher les bandes l'une de l'autre. Le couplage entre elles devient alors important, et de brusques changements de courbure peuvent se produire si les bandes se rapprochent suffisamment. Tenter de faire correspondre des paraboles à de telles bandes devient alors un exercice assez douteux.

Il faut dans ce cas considérer un modèle qui tient compte du mélange de bandes, c'est-à-dire de l'influence des bandes les unes sur les autres.



## 2.4 La méthode $k \cdot p$

Pour un calcul plus précis de la structure de bandes, il faut résoudre l'équation de Schrödinger :

$$H\Psi(r) = \left[ \frac{p^2}{2m_0} + V(r) \right] \Psi(r) = E(k)\Psi(r) \quad (2.10)$$

où  $H$  est l'hamiltonien du cristal,  $\Psi(r)$  la fonction d'onde électronique,  $p$  l'opérateur quantité de mouvement,  $m_0$  la masse de l'électron,  $V(r)$  le potentiel périodique du cristal et  $E(k)$  l'énergie.

Il existe plusieurs façons d'obtenir la structure de bandes à partir de cette équation. La méthode LCAO (Linear Combinations of Atomic Orbitals) aussi appelée méthode des liaisons fortes (*tight binding*) consiste à développer les fonctions d'onde du cristal sous forme de combinaisons linéaires d'orbitales atomiques. On peut aussi choisir une approche inverse et considérer que les états électroniques sont des états libres perturbés par le potentiel périodique du cristal. On développe alors sur une base d'ondes planes. La méthode du pseudopotentiel consiste quant à elle à approximer le potentiel agissant sur l'électron par un potentiel effectif lentement variable. Dans la méthode cellulaire, on divise plutôt une maille élémentaire du réseau cristallin en cellules contenant un seul atome, où le potentiel est considéré sphérique.

Dans le cas qui nous intéresse, nous désirons connaître la structure de bandes autour du point  $\Gamma$  (donc à  $k = 0$ ) d'un semi-conducteur à bande interdite directe. Dans ce cas, la méthode la plus appropriée est la méthode  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ . Elle fut introduite par Bardeen et Seitz et appliquée par Kane [9]. Il s'agit d'un calcul perturbatif visant à développer la structure de bandes autour d'un extremum (ici le point  $\Gamma$ ) qui est abondamment utilisé pour les matériaux III-V à bande interdite directe [1, 7, 10, 11].

## 2.5 Hamiltonien de Kohn-Luttinger

### 2.5.1 Description de l'hamiltonien

C'est l'hamiltonien de Kohn-Luttinger qui décrit le couplage entre les différentes bandes. Différents niveaux de couplage peuvent être envisagés. Le plus simple considère le couplage le plus important, soit celui entre les bandes HH et LH. On peut aller plus loin en incluant aussi les interactions avec la bande de valence SO (spin-orbite). Chang et Chuang [1] ont montré que le couplage SO est important dans la description de puits quantiques d'InGaAsP sous contraintes. Dans ces modèles, la bande de conduction est considérée indépendante des bandes de valence et est approximée par une parabole.

Dès 1957, Kane a proposé un modèle où les interactions entre les bandes de valence (HH, LH et SO) et les bandes de conduction sont prises en compte [9]. C'est un tel modèle que nous décrivons ici.

Les fonctions d'onde du cristal sont décomposées sur la base des fonctions orthogonales suivantes :

$$\begin{aligned}
u_1 &= |s\rangle \chi_{\downarrow} \\
u_2 &= |s\rangle \chi_{\uparrow} \\
u_3 &= \frac{-i}{\sqrt{6}}(|x\rangle + i|y\rangle) \chi_{\downarrow} + i\sqrt{\frac{2}{3}}|z\rangle \chi_{\uparrow} \\
u_4 &= \frac{i}{\sqrt{2}}(|x\rangle + i|y\rangle) \chi_{\uparrow} \\
u_5 &= \frac{-i}{\sqrt{2}}(|x\rangle - i|y\rangle) \chi_{\downarrow} \\
u_6 &= \frac{i}{\sqrt{6}}(|x\rangle - i|y\rangle) \chi_{\uparrow} + i\sqrt{\frac{2}{3}}|z\rangle \chi_{\downarrow} \\
u_7 &= \frac{-i}{\sqrt{3}}(|x\rangle - i|y\rangle) \chi_{\uparrow} + \frac{i}{\sqrt{3}}|z\rangle \chi_{\downarrow} \\
u_8 &= \frac{-i}{\sqrt{3}}(|x\rangle + i|y\rangle) \chi_{\downarrow} - \frac{i}{\sqrt{3}}|z\rangle \chi_{\uparrow}
\end{aligned} \tag{2.11}$$

$\chi_{\uparrow}$  et  $\chi_{\downarrow}$  représentent les deux états possible du spin. Les fonctions  $|s\rangle, |x\rangle, |y\rangle$  et  $|z\rangle$  sont les fonctions de Bloch.

Nous utilisons l'hamiltonien de Kohn-Luttinger 8x8 qui s'écrit [10] :

$$H_0 = \begin{bmatrix} A & 0 & V^+ & 0 & \sqrt{3}V & -\sqrt{2}U & -U & \sqrt{2}V^+ \\ 0 & A & -\sqrt{2}U & -\sqrt{3}V^+ & 0 & -V & \sqrt{2}V & U \\ V & -\sqrt{2}U^+ & -P+Q & -S^+ & R & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}Q \\ 0 & -\sqrt{3}V & -S & -P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}R & \frac{1}{\sqrt{2}}S \\ \sqrt{3}V^+ & 0 & R^+ & 0 & -P-Q & S^+ & \frac{1}{\sqrt{2}}S^+ & \sqrt{2}R^+ \\ -\sqrt{2}U^+ & -V^+ & 0 & R^+ & S & -P+Q & \sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ \\ -U^+ & \sqrt{2}V^+ & \sqrt{\frac{3}{2}}S^+ & -\sqrt{2}R^+ & \frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}Q & Z & 0 \\ \sqrt{2}V & U^+ & -\sqrt{2}Q & \frac{1}{\sqrt{2}}S^+ & \sqrt{2}R & \sqrt{\frac{3}{2}}S & 0 & Z \end{bmatrix} \quad (2.12)$$

Les éléments de la matrice sont :

$$\begin{aligned}
A &= E_c + \frac{\hbar^2}{2m_0} A'(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = E_c + \frac{\hbar^2}{2m_0} A'(k_t^2 + k_z^2) \\
A' &= \left[ \frac{m_0}{m_c} - \frac{2E_p}{3E_g} - \frac{E_p}{3(E_g + \Delta)} \right] \\
U &= \frac{1}{\sqrt{3}} P_0 k_z \\
V &= \frac{1}{\sqrt{6}} P_0 (k_x - ik_y) = \frac{1}{\sqrt{6}} P_0 k_t e^{-i\phi} \\
P &= -E_v + \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = -E_v + \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 (k_t^2 + k_z^2) \\
Q &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 (k_t^2 - 2k_z^2) \\
R &= -\frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2m_0} \left[ \gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) - 2i\gamma_3 k_x k_y \right] = -\frac{\sqrt{3}\hbar^2 k_t^2}{2m_0} \left[ e^{2i\phi} \left( \frac{\gamma_2 - \gamma_3}{2} \right) + e^{-2i\phi} \left( \frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) \right] \\
S &= \sqrt{3}\gamma_3 \frac{\hbar^2}{m_0} k_z (k_x - ik_y) = \sqrt{3}\gamma_3 \frac{\hbar^2}{m_0} k_z k_t e^{-i\phi} \\
Z &= E_v - \Delta - \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = E_v - \Delta - \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 (k_t^2 + k_z^2)
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Plusieurs variables doivent ici être définies.

$E_g$  est l'énergie de la bande interdite,  $\Delta$  l'énergie de spin-orbite,  $E_c$  l'énergie de la bande de conduction et  $E_v$  celle de la bande de valence de sorte que  $E_g = E_c - E_v$ . Les variables  $k_x$ ,  $k_y$  et  $k_z$  sont les vecteurs d'onde dans chacune des dimensions spatiales. La quantification selon l'axe  $z$  entraîne que  $k_z = -i \frac{\partial}{\partial z}$ .  $m_0$  et  $m_e$  sont la masse de l'électron

et la masse effective de l'électron respectivement.  $P_0$  est la constante de couplage entre la bande de conduction et la bande de valence et est donnée par :

$$P_0 = \langle s | p_x | x \rangle = \langle s | p_y | y \rangle = \langle s | p_z | z \rangle \quad (2.14)$$

où  $|s\rangle, |x\rangle, |y\rangle$  et  $|z\rangle$  sont les fonctions de Bloch utilisées pour définir les bases de l'équation (2.11). Il est pratique de convertir  $P_0$  en unités d'énergie selon l'expression suivante :

$$E_p = \frac{2m_0}{\hbar^2} P_0^2 \quad (2.15)$$

### 2.5.2 Paramètres de Luttinger

Les variables  $\gamma_1^L$ ,  $\gamma_2^L$  et  $\gamma_3^L$  sont les paramètres de Luttinger. Ce sont des paramètres théoriques utilisés dans le modèle pour définir la masse effective des trous. Rappelons que la masse effective des trous ( $m_v$ ) varie selon le type de trou (HH, LH ou SO) et selon la direction considérée (perpendiculaire au plan non confiné  $xy$ , notée  $m_v^\perp$ , ou parallèle à ce plan, notée  $m_v^\parallel$ ). On peut relier les paramètres de Luttinger aux masses effectives (qui elles sont mesurables expérimentalement) à l'aide des relations suivantes :

$$\begin{aligned}
\frac{m_{vHH}^\perp}{m_0} &= \frac{1}{\gamma_1^L - 2\gamma_2^L}, & \frac{m_{vHH}^\parallel}{m_0} &= \frac{1}{\gamma_1^L + \gamma_2^L} \\
\frac{m_{vLH}^\perp}{m_0} &= \frac{1}{\gamma_1^L + \gamma_2^L}, & \frac{m_{vLH}^\parallel}{m_0} &= \frac{1}{\gamma_1^L - \gamma_2^L} \\
\frac{m_{vSO}^\perp}{m_0} &= \frac{1}{\gamma_1^L}, & \frac{m_{vSO}^\parallel}{m_0} &= \frac{1}{\gamma_1^L}
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Les variables  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  et  $\gamma_3$  sont les paramètres de Luttinger modifiés. Ils sont propres au modèle 8x8 et contiennent une correction due au couplage conduction-valence donnée par les expressions suivantes :

$$\gamma_1 = \gamma_1^L - \frac{E_p}{3E_g + \Delta} \tag{2.17}$$

$$\gamma_2 = \gamma_2^L - \frac{1}{2} \frac{E_p}{3E_g + \Delta} \tag{2.18}$$

$$\gamma_3 = \gamma_3^L - \frac{1}{2} \frac{E_p}{3E_g + \Delta} \tag{2.19}$$

Notons que cette correction est importante et peut même faire changer leur signe.

### 2.5.3 Vecteur d'onde dans le plan non-confiné

La quantification est définie selon l'axe z. Les axes x et y définissent donc le plan non-confiné. Plutôt que d'utiliser les deux vecteurs d'onde  $k_x$  et  $k_y$ , nous définissons un

vecteur d'onde transverse  $k_t$  dans le plan non confiné. Les relations suivantes existent entre  $k_x$ ,  $k_y$  et  $k_t$  :

$$k_x = k_t \cos \varphi \quad (2.20)$$

$$k_y = k_t \sin \varphi \quad (2.21)$$

$\varphi$  est l'angle entre  $k_t$  et  $k_x$  tel qu'illustré à la figure 2.3 :

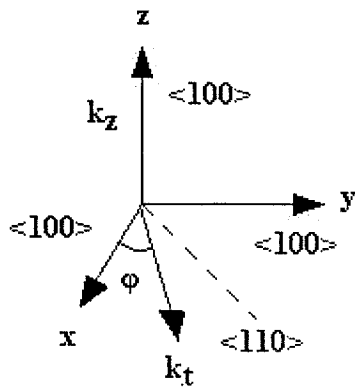


Figure 2.3 : Définition du vecteur d'onde dans le plan non confiné.

#### 2.5.4 Approximation axiale

Kane [9] a le premier fait remarquer qu'en utilisant une combinaison linéaire formée des bases définies en (2.11), il était possible de réduire l'hamiltonien  $8 \times 8$  en deux hamiltoniens diagonaux de dimensions  $4 \times 4$ . Cette procédure s'appelle « diagonalisation en bloc » et est abondamment utilisée dans la littérature[1, 7, 10, 12, 13]. Cette



simplification implique cependant que le vecteur  $k_t$  ne peut se trouver n'importe où dans le plan  $xy$ . Exprimées dans les nouvelles bases, les équations demeurent générales seulement si  $k_t$  est dirigé selon les directions  $\langle 110 \rangle$  ou  $\langle 100 \rangle$  du cristal. Cette direction du vecteur  $k_t$  a un impact sur le couplage entre les bandes. La diagonalisation en bloc utilise la moyenne arithmétique entre le couplage résultant d'un vecteur  $k_t$  dirigé selon la direction  $\langle 110 \rangle$  du cristal et le couplage produit si le vecteur  $k_t$  était selon la direction  $\langle 100 \rangle$ . C'est l'approximation axiale, qui est équivalente à fixer  $\gamma_2 \approx \gamma_3$  dans l'opérateur  $R$  (voir [2] ). **Nous avons choisi d'implanter un modèle plus général qui permet de donner n'importe quelle direction au vecteur  $k_t$  en fixant l'angle  $\varphi$ .**

### 2.5.5 Hamiltonien de Kohn-Luttinger incluant les contraintes

À l'hamiltonien  $H_0$  indépendant des contraintes s'ajoute l'hamiltonien  $D$  contenant les termes de contraintes mécaniques. L'hamiltonien total est donc donné par  $H = H_0 + D$  où  $D$  est donné par la formule 2.22.

$Op^+$  indique le complexe conjugué de l'opérateur  $Op$ . Il faut prendre garde au fait que l'opérateur  $k_z = -i\partial/\partial z$  est déjà hermitien et ne doit donc pas être modifié.

$$D = \begin{bmatrix} a'e & 0 & -v^+ & 0 & -\sqrt{3}v & \sqrt{2}u & u & -\sqrt{2}v^+ \\ 0 & a'e & \sqrt{2}u & \sqrt{3}v^+ & 0 & v & -\sqrt{2}v & -u \\ -v & \sqrt{2}u^+ & -p+q & -s^+ & r & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}}s & -\sqrt{2}q \\ 0 & \sqrt{3}v & -s & -p-q & 0 & R & -\sqrt{2}R & \frac{1}{\sqrt{2}}S \\ -\sqrt{3}v^+ & 0 & r^+ & 0 & -p-q & s^+ & \frac{1}{\sqrt{2}}s^+ & \sqrt{2}r^+ \\ \sqrt{2}u^+ & v^+ & 0 & r^+ & s & -p+q & \sqrt{2}q & \sqrt{\frac{3}{2}}s^+ \\ u^+ & -\sqrt{2}v^+ & \sqrt{\frac{3}{2}}s^+ & -\sqrt{2}r^+ & \frac{1}{\sqrt{2}}s & \sqrt{2}q & -ae & 0 \\ -\sqrt{2}v & -u^+ & -\sqrt{2}q & \frac{1}{\sqrt{2}}s^+ & \sqrt{2}r & \sqrt{\frac{3}{2}}s & 0 & -ae \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

Les termes de l'hamiltonien sont définis de la façon suivante :

$$\begin{aligned} p &= a(e_{xx} + e_{yy} + e_{zz}) \\ q &= b[e_{zz} - \frac{1}{2}(e_{xx} + e_{yy})] \\ u &= \frac{1}{\sqrt{3}}P_0 \sum_j e_{zj}k_j \\ r &= \frac{\sqrt{3}}{2}b(e_{xx} - e_{yy}) - ide_{xy} \\ v &= \frac{1}{\sqrt{6}}P_0 \sum_j (e_{xj} - ie_{yj})k_j \\ s &= -d(e_{xz} - ie_{yz}) \\ e &= e_{xx} + e_{yy} + e_{zz} \end{aligned} \quad (2.23)$$

Les termes  $a$ ,  $b$ ,  $d$  et  $a'$  sont des constantes liées aux potentiels de déformation qui couplent les contraintes mécaniques aux bandes d'énergie. Les  $e_{ij}$  sont les composantes du tenseur de déformation mécanique.

Dans le cas de contraintes biaxiales, seules les composantes  $e_{xx}$ ,  $e_{yy}$  et  $e_{zz}$  sont non-nulles et  $e_{xx} = e_{yy}$  (voir section 1.4). Certains des termes ci-haut peuvent alors être simplifiés selon les expressions suivantes :

$$\begin{aligned}
 p &= a(2e_{xx} + e_{zz}) \\
 q &= b[e_{zz} - e_{xx}] \\
 u &= \frac{1}{\sqrt{3}} P_0 e_{zz} k_z \\
 v &= \frac{1}{\sqrt{6}} P_0 e_{xx} (k_x - ik_y) = \frac{1}{\sqrt{6}} P_0 e_{xx} k_r e^{-i\phi} \\
 e &= 2e_{xx} + e_{zz} \\
 r &= s = 0
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

### 2.5.6 Hamiltonien découplé 6 x 6

Le modèle implanté dans le cadre de ce mémoire se voulait le plus général possible, et c'est pourquoi nous avons utilisé un hamiltonien 8 x 8. Pour des raisons de simplicité, nous nous en tiendrons cependant au couplage entre les bandes de valence pour le reste du travail et négligerons les interactions conduction-valence. Cette approximation est courante dans la littérature pour les matériaux InGaAsP et se justifie par le fait que la bande interdite est grande par rapport à la distance séparant les bandes de valence entre

elles [1, 7, 11, 14]. Ceci facilitera la validation du modèle avec des résultats publiés dans la littérature qui sont obtenus avec un modèle 6x6. D'un point de vue pratique, ceci signifie que la constante de couplage conduction-valence  $P_0$  est posée à zéro dans la définition des opérateurs (équations 2.13 et 2.24).

### 2.5.7 Paramètres utilisés

Le tableau suivant résume les valeurs des différents paramètres utilisés (tirées de [15]).

Tableau 2.1 : Paramètres des matériaux binaires utilisés pour le calcul de bandes.

Paramètre	InAs	InP	GaAs	GaP
$\gamma_1^L$	20,4	5,0	6,85	4,05
$\gamma_2^L$	8,37	1,5	2,1	0,49
$\gamma_3^L$	9,1	2,35	2,86	1,25
$m_e/m_0$	0,023	0,079	0,067	0,170
$E_g$ (eV)	0,35	1,35	1,42	2,75
$\Delta$ (eV)	0,43	0,11	0,34	0,10
$E_p$ (eV)	22,2	20,4	25,7	22,2
$a'$ (eV)	-5,4	-5,4	-7,1	-7,1
$a$ (eV)	-0,6	-1,0	-2,7	-2,2
$b$ (eV)	-1,8	-2,0	-1,7	-1,5
$d$ (eV)	-3,6	-5,0	-4,6	-4,6

Pour une composition  $x$  et  $y$  d' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ , nous avons interpolé à partir des paramètres ci-dessus. La formule d'interpolation pour une propriété  $P$  est la suivante (pour une température de 298 K) :

$$P(x, y) = (1-x)y * P(\text{InAs}) + (1-x)(1-y) * P(\text{InP}) + xy * P(\text{GaAs}) + x(1-y) * P(\text{GaP}) \quad (2.25)$$

Notons que pour la détermination de la bande interdite, un calcul plus complexe, soit la procédure d'interpolation de Glisson et al, a été utilisé [15].

## 2.6 Résolution numérique

La méthode des différences finies a été utilisée pour résoudre numériquement l'équation de Schrödinger  $H\Psi(\vec{r}) = E(\vec{k})\Psi(\vec{r})$ . Puisque le confinement amène que  $k_z = -i \frac{\partial}{\partial z}$ , on pose un maillage selon l'axe  $z$  pour discrétiser les dérivées premières et secondes. Le maillage est représenté de la façon suivante :

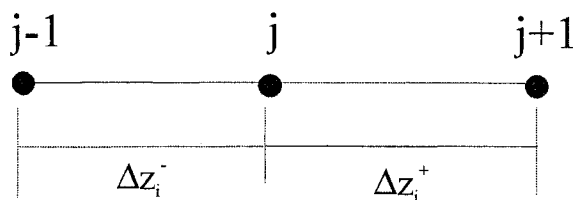


Figure 2.4 : Maillage selon l'axe  $z$  utilisé pour les différences finies.

### 2.6.1 Dérivée première

Les opérateurs U et S de l'hamiltonien contiennent l'opérateur  $k_z = -i \frac{\partial}{\partial z}$  et effectuent donc une dérivée première lorsqu'on les applique sur la fonction d'onde  $\Psi(\vec{r})$ . Puisque les paramètres de Luttinger  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  et  $\gamma_3$  dépendent de  $z$  (ils n'ont pas la même valeur dans les barrières que dans le puits), nous appliquons la recette suivante pour des raisons de symétrie :

$$\gamma(z) \frac{\partial}{\partial z} (\Psi(z)) = \frac{1}{2} \left[ \gamma(z) \frac{\partial \Psi(z)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} (\Psi(z) \gamma(z)) \right] \quad (2.26)$$

La dérivée première est représentée à l'aide d'une différence centrée d'ordre 1 :

$$\begin{aligned} & \left( \gamma(z) \frac{\partial \Psi(z)}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} (\Psi(z) \gamma(z)) \right) \\ & \rightarrow \frac{1}{\Delta z_i^- + \Delta z_i^+} \left[ -(\gamma(z_{i-1}) + \gamma(z_i)) \Psi(z_{i-1}) + (\gamma(z_i) + \gamma(z_{i+1})) \Psi(z_{i+1}) \right] \end{aligned} \quad (2.27)$$

### 2.6.2 Dérivée seconde

Les opérateurs A, P, Q, et Z contiennent une dérivée seconde en z. Toujours pour des raisons de symétrie, on applique :

$$\gamma(z) \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z^2} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \gamma(z) \frac{\partial \Psi(z)}{\partial z} \right) \quad (2.28)$$

Pour calculer la dérivée seconde, on suppose l'existence de points intermédiaires entre les points existants  $(z_{i-1}, z_i)$  et  $(z_i, z_{i+1})$ . La valeur des paramètres  $\gamma$  à ces points est donnée par la moyenne de  $\gamma$  aux points voisins. En représentant la dérivée première extérieure comme une différence centrée d'ordre 1 basée sur ces points intermédiaires, on retrouve une expression qui contient uniquement les points du maillage initial :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \gamma(z) \frac{\partial \Psi(z)}{\partial z} \right) \rightarrow \left( \frac{1}{\Delta z_i^- + \Delta z_i^+} \right) \times \left[ \begin{aligned} & \left( \frac{\gamma(z_{i-1}) + \gamma(z_i)}{\Delta z_i^-} \right) \Psi(z_{i-1}) \\ & - \left( \frac{\gamma(z_{i-1}) + \gamma(z_i)}{\Delta z_i^-} + \frac{\gamma(z_i) + \gamma(z_{i+1})}{\Delta z_i^+} \right) \Psi(z_i) \\ & + \left( \frac{\gamma(z_i) + \gamma(z_{i+1})}{\Delta z_i^+} \right) \Psi(z_{i+1}) \end{aligned} \right] \quad (2.29)$$

Notons que pour être valable, cette discrétisation suppose que tout changement de région (barrière/puits) survient entre deux points de maillage.

Pour s'assurer d'obtenir un système symétrique indépendamment du maillage utilisé, on multiplie chaque côté de l'équation aux valeurs propres par  $(\Delta z_i^- + \Delta z_i^+)$ , ce qui conduit au problème aux valeurs propres généralisé :

$$A\Psi = EB\Psi \quad (2.30)$$

### 2.6.3 Résolution de l'équation aux valeurs propres

La tâche de tracer la structure de bandes du semi-conducteur revient donc à résoudre l'équation 2.30. Les valeurs propres de l'équation représentent les énergies accessibles aux porteurs, et les fonctions propres donnent les fonctions d'onde.

La fonction d'onde électronique est décomposée sur la base des huit fonctions orthogonales définies par l'équation 2.11 :

$$\Psi = \sum_{i=1}^8 u_i \varphi_i \quad (2.31)$$

où les  $\varphi_i$  sont les fonctions propres trouvées en résolvant le problème aux valeurs propres, qu'on appelle fonctions enveloppe. A et B sont des matrices de taille  $(8*n_z \text{ par } 8*n_z)$ , où  $n_z$  représente le nombre de points de maillage utilisés. Leurs éléments sont donnés par :

$$A = \langle \varphi_1 | H | \varphi_2 \rangle \quad (2.32)$$



$$B = \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle \quad (2.33)$$

On construit et on résout le système pour chaque valeur de  $k_t$ . Les valeurs propres permettent de tracer la structure de bandes  $E(k)$ . Les fonctions d'onde des porteurs sont conservées pour calculer les forces de transition en fonction de  $k_t$  (voir chapitre 3).

#### 2.6.4 Conditions limites

Dans la réalité, les fonctions d'onde s'atténuent à l'infini selon l'axe  $z$ . Pour modéliser les conditions limites, nous avons fixé le domaine de calcul à une région 50 fois plus grande que la largeur du puits quantique. Aux extrémités de ce domaine, nous avons forcé la fonction d'onde  $\Psi$  à s'annuler. Ceci est conceptuellement équivalent à placer le puits quantique dans un puits imaginaire avec une hauteur de barrière infinie.

#### 2.6.5 Opérateurs discrétisés

Nous donnons ici les expressions des opérateurs discrétisés selon la méthode présentée ci-haut. Les expressions incluent le facteur de multiplication  $(\Delta z_i^- + \Delta z_i^+)$ .

Les indices  $c$ ,  $m$ , et  $p$  relatifs aux opérateurs indiquent que l'opérateur s'applique respectivement sur la fonction d'onde au point de maillage courant  $z_i$ , ( $c$  pour courant), au point à gauche  $z_{i-1}$  ( $m$  pour moins) et au point à droite  $z_{i+1}$  ( $p$  pour plus) respectivement.

L'indice  $m$  appliqué aux paramètres représente la somme des paramètres au point courant ( $z_i$ ) et au point à gauche ( $z_{i-1}$ ), tandis que l'indice  $p$  indique que le paramètre a été sommé sur sa valeur au point courant ( $z_i$ ) et au point à droite ( $z_{i+1}$ ). Par exemple,  $A'_m = A'_{z_i} + A'_{z_{i-1}}$  et  $A'_p = A'_{z_i} + A'_{z_{i+1}}$ . L'indice  $c$  indique que le paramètre est évalué au point courant  $z_i$  :  $A'_c = A'_{z_i}$ . Les opérateurs sont écrits en caractères gras pour éviter la confusion avec les paramètres.

Notons qu'à cause de la discrétisation, les opérateurs contenant une dérivée première sont évalués à gauche et à droite du point courant, tandis que les opérateurs contenant une dérivée seconde sont évalués aux trois endroits (au point courant, à gauche et à droite de ce dernier). Les opérateurs discrétisés sont donc les suivants :

**Opérateur A**

$$A_m = \frac{-\hbar^2 A'_m}{2m_0 \Delta z_m} \quad (2.34)$$

$$A_c = \left[ Ec_c + \frac{\hbar^2}{2m_0} A'_c k_i^2 \right] (\Delta z_i^- + \Delta z_i^+) + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \frac{A'_m}{\Delta z_m} + \frac{A'_p}{\Delta z_p} \right] \quad (2.35)$$

$$A_p = \frac{-\hbar^2 A'_p}{2m_0 \Delta z_p} \quad (2.36)$$

**Opérateur U**

$$U_m = \frac{iP_{0m}}{2\sqrt{3}} \quad (2.37)$$

$$U_p = -\frac{iP_{0p}}{2\sqrt{3}} \quad (2.38)$$

**Opérateur V**

$$V_c = \frac{1}{\sqrt{6}} P_{0c} k_i e^{-i\phi} (\Delta z_i^- + \Delta z_i^+) \quad (2.39)$$

**Opérateur P+Q**

$$(\mathbf{P} + \mathbf{Q})_m = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\gamma_{1m} + 2\gamma_{2m}}{\Delta z_m} \quad (2.40)$$

$$(\mathbf{P} + \mathbf{Q})_c = \left[ Ev_c + \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_{2c} - \gamma_{1c}) k_l^2 \right] (\Delta z_i^- + \Delta z_i^+) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \frac{(\gamma_{1m} + 2\gamma_{2m})}{\Delta z_m} + \frac{(\gamma_{1p} + 2\gamma_{2p})}{\Delta z_p} \right] \quad (2.41)$$

$$(\mathbf{P} + \mathbf{Q})_p = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{(\gamma_{1p} + 2\gamma_{2p})}{\Delta z_p} \quad (2.42)$$

**Opérateur (P-Q)**

$$(\mathbf{P} - \mathbf{Q})_m = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{(\gamma_{1m} - 2\gamma_{2m})}{\Delta z_m} \quad (1.43)$$

$$(\mathbf{P} - \mathbf{Q})_c = \left[ Ev_c + \frac{\hbar^2}{2m_0} (-\gamma_{2c} - \gamma_{1c}) k_l^2 \right] (\Delta z_i^- + \Delta z_i^+) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \frac{(\gamma_{1m} - 2\gamma_{2m})}{\Delta z_m} + \frac{(\gamma_{1p} - 2\gamma_{2p})}{\Delta z_p} \right] \quad (1.44)$$

$$(\mathbf{P} - \mathbf{Q})_p = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{(\gamma_{1p} - 2\gamma_{2p})}{\Delta z_p} \quad (1.45)$$

**Opérateur Q**

$$\mathbf{Q}_m = \frac{\hbar^2}{m_0} \frac{\gamma_{2m}}{\Delta z_m} \quad (2.46)$$

$$\mathbf{Q}_c = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \gamma_{2c} k_t^2 (\Delta z_i^- + \Delta z_i^+) - 2 \left( \frac{\gamma_{2m}}{\Delta z_m} + \frac{\gamma_{2p}}{\Delta z_p} \right) \right] \quad (1.47)$$

$$\mathbf{Q}_p = \frac{\hbar^2}{m_0} \frac{\gamma_{2p}}{\Delta z_p} \quad (1.48)$$

**Opérateur R**

$$\mathbf{R}_c = -\sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} k_t^2 (\Delta z_i^- + \Delta z_i^+) \times \mathbf{g}_{corr} \quad (2.49)$$

où  $\mathbf{g}_{corr}$  est le terme définissant le vecteur  $k_t$  dans le plan non confiné et s'écrit :

$$\mathbf{g}_{corr} = (\gamma_{2m} + \gamma_{3m}) \frac{e^{-2i\varphi}}{2} + ax_{ap} \times (\gamma_{2m} - \gamma_{3m}) \frac{e^{2i\varphi}}{2} \quad (2.50)$$

La direction du vecteur  $k_t$  est déterminée en modifiant les variables  $\varphi$  et  $ax_{ap}$  (pour approximation axiale). Pour utiliser l'approximation axiale, on pose  $\varphi = 0$  est  $ax_{ap} = 0$ .

Sinon, on pose  $ax_{ap} = 1$  et on fixe  $\varphi$  à la valeur désirée.

**Opérateur S**

$$S_m = i \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} k_i \gamma_{3m} e^{-i\phi} \quad (2.51)$$

$$S_p = -i \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} k_i \gamma_{3p} e^{-i\phi} \quad (2.52)$$

**Opérateur Z**

$$Z_m = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\gamma_{1m}}{\Delta z_m} \quad (2.53)$$

$$Z_c = \left[ E v_c - \Delta_c - \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_{1m} k_i^2 \right] (\Delta z_i^- + \Delta z_i^+) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left( \frac{\gamma_{1m}}{\Delta_{zm}} + \frac{\gamma_{1p}}{\Delta_{zp}} \right) \quad (2.54)$$

$$Z_p = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\gamma_{1p}}{\Delta z_p} \quad (2.55)$$

*Opérateurs dépendant des contraintes*

Seuls les opérateurs u et v subissent une discrétisation et s'écrivent alors :

$$u_m = \frac{iP_{0m}e_{z-m}}{2\sqrt{3}} \quad (2.56)$$

$$u_p = -\frac{iP_{0p}e_{z-p}}{2\sqrt{3}} \quad (2.57)$$

$$v_c = \frac{1}{\sqrt{6}}P_{0c}k_1e_{xx-c}e^{-i\phi} \quad (2.58)$$

## 2.7 Validation des résultats

La structure de bandes calculée avec le modèle ci haut est comparée à des résultats publiés dans la littérature [1]. Le calcul considère le couplage entre les bandes HH, LH et SO. Les puits quantiques étudiés sont les suivants (les variables x et y réfèrent à la composition de l'alliage  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$  du puit) :

Tableau 2.2 : Caractéristiques des puits étudiés pour la validation du calcul de bandes.

Type de contrainte	x	y	Épaisseur (Å)
Compression	0,41	1	45
Sans contraintes	0,47	1	60
Tension	0,59	1	140

Dans les trois types de puits, les barrières sont formées d' $\text{In}_{0.8216}\text{Ga}_{0.1734}\text{As}_{0.3785}\text{P}_{0.6215}$ . Ces compositions sont choisies de façon à ce que le paramètre de maille des barrières soit ajusté à celui du substrat d'InP et que la barrière ait une bande interdite de longueur d'onde  $\lambda = 1.15\mu\text{m}$ . L'épaisseur des puits est choisie de façon à ce que la transition entre la bande de conduction de plus basse énergie (C1) et la bande de valence la moins profonde (HH1 pour les puits en compression et sans contraintes, LH1 pour le puits en tension) se situe près de  $1,55\mu\text{m}$  (longueur d'onde qui correspond aux pertes minimales dans les fibres optiques). Les résultats sont illustrés aux figures suivantes :

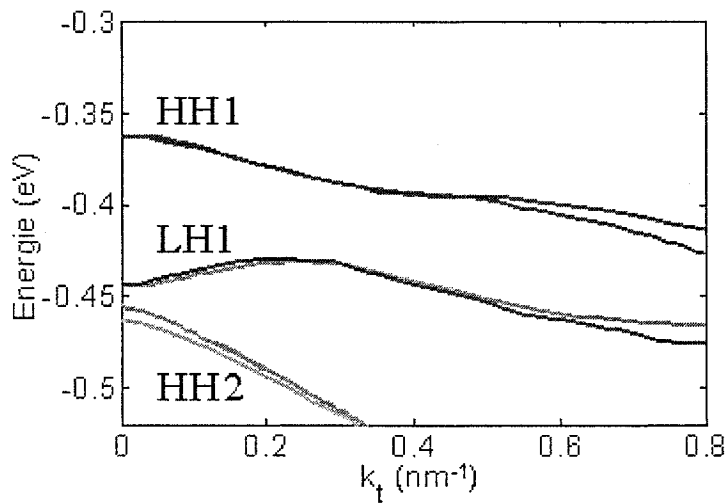


Figure 2.5 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour un puits en compression.



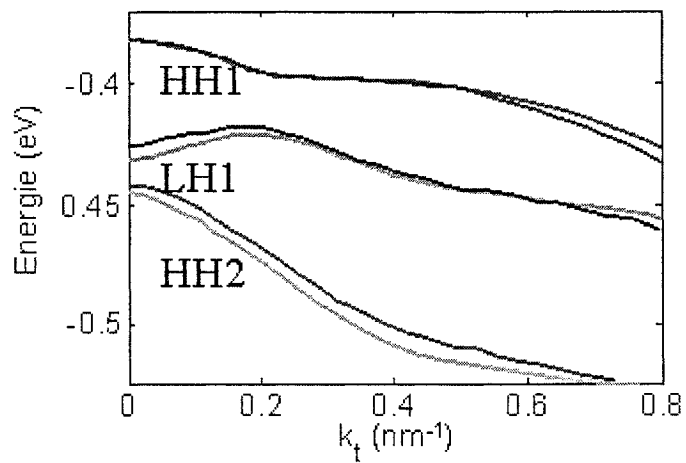


Figure 2.6 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour un puits sans contraintes.

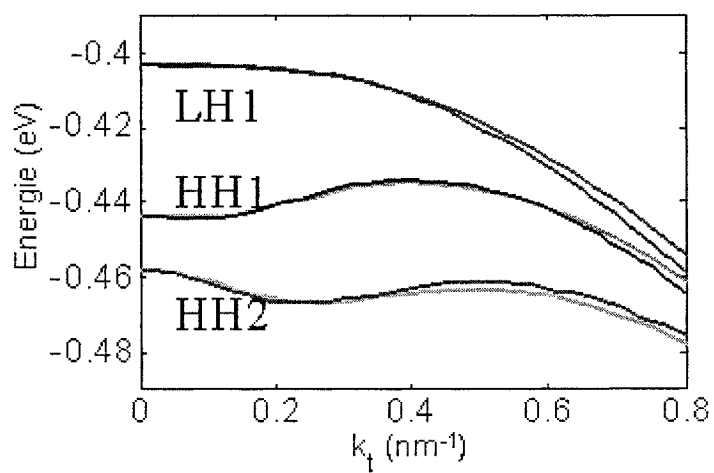


Figure 2.7 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour un puits en tension.

## 2.8 Discussion

Les figures précédentes montrent que les résultats calculés correspondent bien à ceux de la littérature. Les légers écarts peuvent être attribuables à la résolution numérique. Les auteurs ne précisent pas comment ils résolvent l'équation aux valeurs propres. Des différences dans la méthode utilisée, le maillage ou les conditions frontières peuvent affecter les valeurs propres. De légères différences dans la valeur numérique des paramètres répertoriés au tableau 2.1 ou dans les formules d'interpolation utilisées pour ces paramètres (formule (2.25) ) sont également possibles.

Notons également que la méthode  $k \cdot p$  étant un calcul perturbatif, les résultats présentés sont exacts à  $k = 0$  et sont de moins en moins précis à mesure qu'on s'éloigne de cet extremum.

## CHAPITRE 3

### Calcul de gain

Une fois la structure de bandes calculée, les niveaux d'énergie des porteurs de charge sont connus. Des transitions optiques se produisent entre ces niveaux énergétiques, conduisant à l'absorption ou à l'émission de photons. La prochaine étape est de faire le bilan de ces transitions afin d'obtenir le gain matériel du puits quantique. Les photons émis ou absorbés s'échelonnent sur une gamme d'énergies, et c'est la courbe de gain en fonction de l'énergie de photon qui nous intéresse. Comme pour le calcul de bandes, plusieurs approches peuvent être envisagées pour le calcul du gain matériel.

#### 1.13 Le modèle d'Asada

Le modèle d'Asada est utilisé lorsque la structure de bandes provient d'un calcul parabolique. Nous considérons ici seulement les bandes HH et LH. Le gain est alors donné par :

$$g(\hbar\omega) = \sum_n \sum_m \int_{E_{nm}}^{\infty} C_0(\hbar\omega) \rho_r^{nm}(E) |M_{nm}(E)| (f_c^n(E) - f_v^m(E)) L(E, \hbar\omega) dE \quad (3.1)$$

où la sommation porte sur toutes les  $n$  bandes de conduction et sur les  $m$  bandes de valence.  $E$  est l'énergie du porteur de charge tandis que  $\hbar\omega$  est l'énergie du photon.  $C_0$  un facteur qui dépend de l'énergie du photon et qui s'écrit :

$$C_0(\hbar\omega) = \frac{\pi e^2}{n_{\text{eff}} c \varepsilon_0 m_0^2 \omega} \quad (3.2)$$

avec  $e$  la charge de l'électron,  $n_{\text{eff}}$  l'indice effectif du semi-conducteur,  $\varepsilon_0$  la permittivité du vide,  $m_0$  la masse de l'électron au repos et  $\omega$  la fréquence angulaire du photon. Les autres termes qui entrent dans la formule de gain sont les suivants :

### 3.1.1 La densité d'état réduite

Elle est définie par

$$\rho_r^{nm} = \frac{\rho(k)}{dE_t(k)/dk} \quad (3.3)$$

où  $\rho(k)$  est la densité d'état dans l'espace  $k$  et  $E_t$  est l'énergie de transition ( $E_e - E_h$ ). C'est le fait d'avoir une relation analytique  $E(k)$  provenant de l'approximation parabolique qui permet d'obtenir une expression pour la densité d'états réduite.

### 3.1.2 Élément de matrice de transition optique

L'élément de matrice de transition donne la force de la transition. Dans le cas des matériaux massiques, l'élément de matrice de transition est indépendant de l'orientation du champ électrique et ne varie pas selon le type de bande de valence. Il s'exprime par :

$$M_b^2 = \frac{m_0}{6} \left( \frac{m_0}{m_c} - 1 \right) \frac{E_g (E_g + \Delta)}{E_g + 2\Delta/3} = \frac{m_0}{6} E_p \quad (3.4)$$

avec

$$E_p = \frac{2m_0}{\hbar^2} P_0^2 \quad (3.5)$$

où  $P_0$  est la constante de couplage entre la bande de conduction et la bande de valence (voir section 2.5). Pour ce qui est des puits quantiques, les éléments de matrice de transition dépendent de la polarisation du champ appliqué et varient en fonction du type de bande (HH, LH ou SO). On écrira donc les éléments de matrice de transition de la façon suivante :

$$|M_{nm}|^2 = M_b^2 \cdot A_j \cdot \left| \langle \varphi_c^n | \varphi_v^m \rangle \right|^2 \quad (3.6)$$

$A_j$  est un facteur qui dépend de la polarisation du champ électrique et du type de trou impliqué dans la transition. Le terme  $\left| \langle \varphi_c^n | \varphi_v^m \rangle \right|$  représente l'intégrale de recouvrement des fonction enveloppes de conduction  $\varphi_c^n$  et de valence  $\varphi_v^m$ .

On utilise souvent le principe des « transitions interdites » pour évaluer cette intégrale de recouvrement. Cette approximation stipule qu'une transition impliquant une bande de conduction de nombre quantique  $n_c$  et une bande de valence de nombre quantique  $n_v$  prend la valeur :

- 1 si  $n_c = n_v$  (les fonctions enveloppes sont alors considérées identiques et la transition est permise)
- 0 si  $n_c \neq n_v$  (les fonctions enveloppes sont considérées orthogonales et la transition est interdite)

Cependant, cette façon de faire est approximative dans le cas des puits quantiques aux barrières finies [13]. Dans le cadre de ce travail, les intégrales de recouvrement des fonctions enveloppes seront donc calculées explicitement pour plus de précision.

Le tableau suivant résume les facteurs  $A_j$  à utiliser pour chacune des polarisations et pour chacun des types de trou. Notons que la polarisation TE implique que le champ électrique est orienté selon l'axe x ou l'axe y (dans le plan non confiné) tandis que la polarisation TM implique que le champ électrique est orienté selon z.

Tableau 3.1 : Facteurs de correction  $A_j$  pour le calcul des éléments de matrice de transition des puits quantique [2].

	TE	TM
<b>Trous lourds</b>	$\frac{3}{4}(1 + \cos^2 \theta)$	$\frac{3}{2} \sin^2 \theta$
<b>Trous légers</b>	$\left(\frac{5}{4} - \frac{3}{4} \cos^2 \theta\right)$	$\frac{1}{2}(1 + 3 \cos^2 \theta)$
<b>Trous split-off</b>	1	1

L'angle  $\theta$  est l'angle entre le vecteur d'onde du trou avec l'axe z, i.e.

$$\cos \theta = \frac{k_z}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}} \quad (3.7)$$

*A - La règle de sélection en k*

Lors d'une transition optique, la quantité de mouvement de l'électron dans son état final est égale à la somme de celle qu'il avait dans son état initial et de celle du photon :

$$\hbar k_v = \hbar k_c + \hbar k_{\text{photon}} \quad (3.8)$$

Puisque  $k_{\text{photon}} \sim 2\pi/\lambda$  et que  $k_c$  et  $k_v$  sont l'ordre de grandeur de  $2\pi/a_0$  où  $a_0$  est le paramètre de maille du semi-conducteur,  $k_{\text{photon}}$  est beaucoup plus petit que  $k_c$  et  $k_v$  et on peut considérer qu'une transition doit respecter la condition :

$$k_c \approx k_v \quad (3.9)$$

### B - Dégénérescence en énergie

Chaque état énergétique peut être occupé par deux porteurs de spin différent. Chaque bande de conduction et chaque bande de valence est donc dédoublée en énergie. Nous noterons  $u_c$  la bande de conduction et  $u_c'$  la même bande de conduction dégénérée, et de la même façon  $u_v$  et  $u_v'$  pour les bandes de valence. Il faut considérer toutes les transitions possibles entre ces quatre bandes, tel qu'illustré à la figure 3.1.

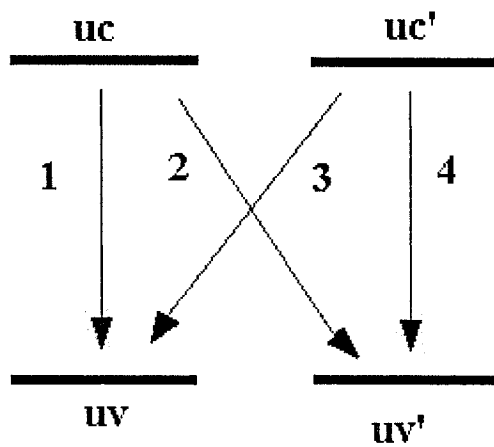


Figure 3.1 : Schéma des 4 transitions possibles entre une bande de conduction et une bande de valence dégénérées en énergie.



### 3.1.3 Les fonctions d'occupation de Fermi

Les fonctions d'occupation de Fermi donnent la probabilité d'occupation des porteurs à une énergie donnée et s'écrivent :

$$f_c^n(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-F_n)/k_B T}} \quad (3.10)$$

$$f_v^n(E) = \frac{1}{1 + e^{(F_p - E)/k_B T}} \quad (3.11)$$

pour les électrons et les trous respectivement.  $F_n$  et  $F_p$  sont les quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous respectivement.

### 3.1.4 La fonction d'élargissement

Les porteurs de charge ne sont pas situés sur des états d'énergie précis où ils demeurent indéfiniment jusqu'à ce qu'ils interagissent avec un photon. Des collisions avec d'autres porteurs et avec des phonons font continuellement changer les porteurs d'états d'énergie. Puisque les porteurs changent d'état à l'intérieur de leur propre bande d'énergie, on appelle ce phénomène la relaxation intrabande. Cette relaxation provoque un élargissement du spectre d'émission et une diminution de la valeur du pic de gain.

Pour modéliser ce phénomène, le gain est convolué avec une fonction d'élargissement  $L$ .

La fonction la plus simple et la plus utilisée est la lorentzienne donnée par :

$$L(k_t, \hbar\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\hbar / \tau_m}{(E_t(k_t, \hbar\omega) - \hbar\omega)^2 + (\hbar / \tau_m)^2} \quad (3.12)$$

où  $\tau_m$  est le temps de relaxation intrabande. Il s'agit d'un paramètre phénoménologique qui représente l'inverse de la probabilité de collision des porteurs, moyenné entre les électrons et les trous. Ce paramètre est estimé théoriquement en tenant en compte de plusieurs mécanismes de collision. Nous nous attarderons plus spécifiquement sur la fonction d'élargissement dans la section 3.3.

### 3.2 Modèle de gain avec mélange de bandes

Le modèle d'Asada ne peut pas être utilisé lorsque la structure de bandes a été calculée en tenant compte du mélange de bandes. Une première raison est qu'il est impossible de calculer la densité d'états réduite car il n'existe pas de relation analytique  $E(k)$ . L'équation de gain ne peut donc pas être utilisée et on doit procéder en intégrant sur le vecteur d'onde  $k_t$  plutôt que sur l'énergie.

De plus, les forces de transition ne peuvent plus être calculées de la même façon. Les fonctions d'onde des porteurs ne sont plus des états purs « lourds », « légers » ou « split-off » mais sont formées d'une combinaison de toutes ces bases.

À la base, la force de transition entre la  $n^{\text{ème}}$  bande de conduction et la  $m^{\text{ème}}$  bande de valence en présence d'un champ électrique  $\hat{e}$  est donnée par :

$$|M_{nm}|^2 = |\hat{e} \cdot p_{vc}|^2 \quad (3.13)$$

où  $p_{cv}$  est l'élément de matrice de transition donné par :

$$p_{cv} = \langle \Psi_c^n | p | \Psi_v^m \rangle \quad (3.14)$$

avec  $\Psi_c^n$  la fonction d'onde de l'électron de la  $n^{\text{ème}}$  bande de conduction et  $\Psi_v^m$  la fonction d'onde du trou de la  $m^{\text{ème}}$  bande de valence.

Dans le cas du mélange de bandes, ces fonctions d'onde sont développées sur la base de fonctions  $u_1$  à  $u_8$  utilisées pour construire l'hamiltonien, avec les fonctions enveloppes  $\varphi_1$  à  $\varphi_8$  comme coefficients (voir équation 2.31).

L'élément de matrice de transition peut donc s'écrire :

$$p_{cv} = \langle \Psi_c^n | p | \Psi_v^m \rangle = \sum_{j=1}^8 \sum_{k=1}^8 \langle u_{cj} | p | u_{vk} \rangle \delta_{kt,kt'} I_{cj}^{vk} \quad (3.15)$$

avec

$$I_{cj}^{vk} = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{cj}^*(z) \varphi_{vk}(z) dz \quad (3.16)$$

Le delta de Dirac de l'équation (3.15) indique que le vecteur d'onde de l'électron et du trou considéré doivent avoir la même valeur (règle de sélection en k).

### *Cas de l'hamiltonien découplé*

Dans le cas étudié ici, soit celui où les bandes de conduction ne sont pas couplées aux bandes de valence (voir section 2.5.6), la fonction d'onde de conduction est une combinaison linéaire des bases  $u_1$  et  $u_2$  tandis que la fonction d'onde de valence est une combinaison linéaire des bases  $u_3$  à  $u_8$ .

La définition des bases  $u_1$  à  $u_8$  (voir équation 2.15) montre qu'elles sont elles-mêmes des combinaisons linéaires des fonctions de Bloch  $|s\rangle, |x\rangle, |y\rangle$  et  $|z\rangle$ . Pour des raisons de symétrie du cristal propre au réseau cubique, les seuls éléments de matrice non nuls pour ces fonctions de Bloch sont les suivants :

$$\left| \langle s | p_x | x \rangle \right|^2 = \left| \langle s | p_y | y \rangle \right|^2 = \left| \langle s | p_z | z \rangle \right|^2 = P_0^2 = 3M_b^2 \quad (3.17)$$

De ces résultats, on déduit que les seuls éléments de matrice non nuls pour la base des fonctions  $u_1$  à  $u_8$  sont les suivants :

$$\begin{aligned}
\langle u_1 | \mathbf{p} | u_3 \rangle &= \frac{-i}{\sqrt{6}} \langle s | p_x | x \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle s | p_y | y \rangle \\
\langle u_1 | \mathbf{p} | u_5 \rangle &= \frac{-i}{\sqrt{2}} \langle s | p_x | x \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle s | p_y | y \rangle \\
\langle u_1 | \mathbf{p} | u_6 \rangle &= i \sqrt{\frac{2}{3}} \langle s | p_z | z \rangle \\
\langle u_1 | \mathbf{p} | u_7 \rangle &= \frac{i}{\sqrt{3}} \langle s | p_z | z \rangle \\
\langle u_1 | \mathbf{p} | u_8 \rangle &= \frac{-i}{\sqrt{3}} \langle s | p_x | x \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle s | p_y | y \rangle \\
\langle u_2 | \mathbf{p} | u_3 \rangle &= i \sqrt{\frac{2}{3}} \langle s | p_z | z \rangle \\
\langle u_2 | \mathbf{p} | u_4 \rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}} \langle s | p_x | x \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle s | p_y | y \rangle \\
\langle u_2 | \mathbf{p} | u_6 \rangle &= \frac{i}{\sqrt{6}} \langle s | p_x | x \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle s | p_y | y \rangle \\
\langle u_2 | \mathbf{p} | u_7 \rangle &= \frac{-i}{\sqrt{3}} \langle s | p_x | x \rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} \langle s | p_y | y \rangle \\
\langle u_2 | \mathbf{p} | u_8 \rangle &= \frac{-i}{\sqrt{3}} \langle s | p_z | z \rangle
\end{aligned} \tag{3.18}$$

On peut ensuite tirer les expressions finales pour les forces de transition en présence d'un champ électrique polarisé TE (selon le plan x-y) et TM (selon l'axe z).

$$|M_{nmTE}(k_i)|^2 = 3M_b^2 \times \left[ \frac{1}{\sqrt{6}} \langle \varphi_1 | \varphi_3 \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \varphi_1 | \varphi_5 \rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} \langle \varphi_1 | \varphi_8 \rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \varphi_2 | \varphi_4 \rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} \langle \varphi_2 | \varphi_6 \rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} \langle \varphi_2 | \varphi_7 \rangle \right]^2 \tag{3.19}$$

$$|M_{nmTM}(k_t)|^2 = 3M_b^2 \times \left[ i\sqrt{\frac{2}{3}} \langle \varphi_1 | \varphi_6 \rangle + \frac{i}{\sqrt{3}} \langle \varphi_1 | \varphi_7 \rangle + i\sqrt{\frac{2}{3}} \langle \varphi_2 | \varphi_3 \rangle - \frac{i}{\sqrt{3}} \langle \varphi_2 | \varphi_8 \rangle \right]^2 \quad (3.20)$$

Le gain est donc finalement calculé avec la formule suivante :

$$g(\omega) = \frac{C_0}{L_z} \sum_n \sum_m \int_0^\infty k_t M_{nm}(k_t) (f_c^n - f_v^m) L(k_t, \hbar\omega) dk_t \quad (3.21)$$

#### *Modification de la formule de gain*

Bien que la formule (3.21) soit abondamment utilisée, elle présente deux anomalies :

Le point de transparence (où gain = absorption = 0) ne correspond pas toujours à la différence des niveaux de Fermi ( $F_n - F_p$ ) tel qu'il se doit.

La courbe de gain peut présenter une absorption pour des énergies de photons inférieures à celle de la bande interdite, ce qui n'est pas physiquement explicable.

Une façon de régler ces anomalies est de calculer le gain en utilisant la relation fondamentale entre l'émission spontanée et les coefficients d'absorption [16].

En utilisant l'identité

$$[f_1(E_1) - f_2(E_2)] \cdot \delta(E_1 - E_2 - \hbar\omega) = \left(1 - \exp\left[\frac{\hbar\omega - \Delta F}{kT}\right]\right) \times f_1(E_1)(1 - f_2(E_2)) \cdot \delta(E_1 - E_2 - \hbar\omega) \quad (3.22)$$

et en l'insérant dans la formule (3.21), on obtient la formule de gain suivante :

$$g(\omega) = \left[1 - \exp\left(\frac{\hbar\omega - \Delta F}{kT}\right)\right] \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon}} \left(\frac{e^2}{m_0^2 \omega}\right) \times \sum_n \sum_m \int_0^\infty \frac{k_t}{\pi L_z} M_{nm}(k_t) f_c^n (1 - f_v^m) L(k_t, \hbar\omega) dk_t \quad (3.23)$$

L'utilisation de cette formule garantit :

- 1) La correspondance entre le point de transparence et la différence des niveaux de Fermi.
- 2) L'absence d'absorption à des énergies inférieures à celle de la bande interdite.

### 3.3 Modélisation de l'élargissement

Tel qu'expliqué plus haut, la convolution du gain avec une fonction d'élargissement permet de modéliser la relaxation intrabande que subissent les porteurs. Jusqu'à présent, les modèles présentés utilisaient la fonction lorentzienne pour faire la convolution. Récemment, des comparaisons avec des résultats expérimentaux sont venues remettre en

question la validité de la lorentzienne [13, 16]. On lui reproche entre autres de ne pas s'atténuer assez rapidement pour les basses énergies. Toujours dans l'optique d'améliorer le modèle de gain disponible, nous présentons ici une revue des différentes fonctions d'élargissement rencontrées dans la littérature.

L'utilisation d'une fonction lorentzienne pour la modélisation de l'élargissement intrabande est un modèle dit markovien parce qu'il implique une réaction instantanée aux perturbations extérieures [17]. Le modèle non-markovien le plus simple et le plus utilisé est l'utilisation d'une fonction d'élargissement gaussienne qui contient des effets de mémoire. La gaussienne a l'avantage de s'atténuer plus rapidement que la lorentzienne [12, 13].

D'après Asada (voir [13], chapitre 2), la fonction d'élargissement se situe entre une lorentzienne et une gaussienne. En définissant  $\Delta E$  comme étant la largeur de la distribution en énergie des porteurs, Asada montre que la limite  $\Delta E\tau \gg \hbar$  conduit à une forme lorentzienne tandis que la limite  $\Delta E\tau \ll \hbar$  conduit à une gaussienne. Selon ce raisonnement, la forme approche de la lorentzienne à haute injection car la distribution  $\Delta E$  s'élargit.

D'autres modèles existent, mais il ne semble pas y avoir de consensus clair à ce sujet.



- Yamanishi et Lee [18] ont étudié de façon théorique les collisions entre les porteurs et les phonons pour calculer une fonction d'élargissement plus étroite que la lorentzienne. Chinn et al [6] ont présenté des résultats semblables.
- Asada [19] a aussi développé une fonction asymétrique qui décroît beaucoup plus rapidement qu'une lorentzienne.
- Kucharska et Robbins [20] ont conservé une forme lorentzienne, mais avec un temps de relaxation qui dépend de l'énergie de l'état considéré.
- Le modèle de Landsberg [4] a été utilisé par Ma et al [21] et est une simplification du modèle d'Asada.

### 3.4 Validation des résultats

Comme pour le calcul de bandes (section 2.7), les forces de transition et le gain optique obtenus avec les formules décrites ci haut sont comparés aux résultats de Chang et Chuang [1]. Les puits quantiques étudiés sont les mêmes que ceux ayant servi à valider le calcul de bandes (voir tableau 2.2) Nous présentons la comparaison entre les résultats calculés et publiés pour les forces de transition à la section 3.4.1, et la comparaison du gain optique à la section 3.4.2. Une discussion sur l'ensemble des résultats suit à la section 3.4.3.

### 3.4.1 Comparaison des forces de transition

Nous présentons les forces de transition entre la première bande de conduction et les bandes de valence HH1 et LH1 pour chacune des polarisations (TE et TM).

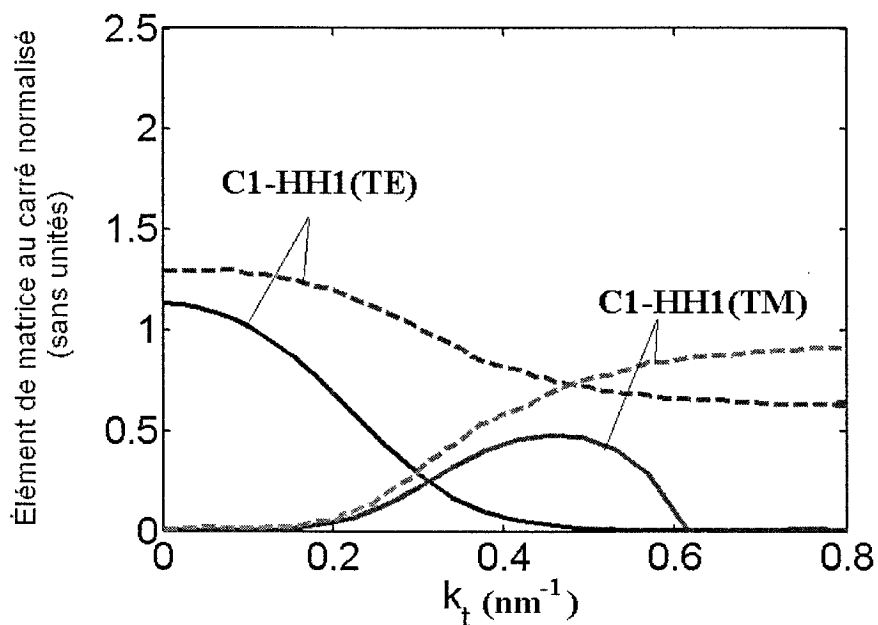


Figure 3.2 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour la force de transition C1-HH1 d'un puits quantique en compression.

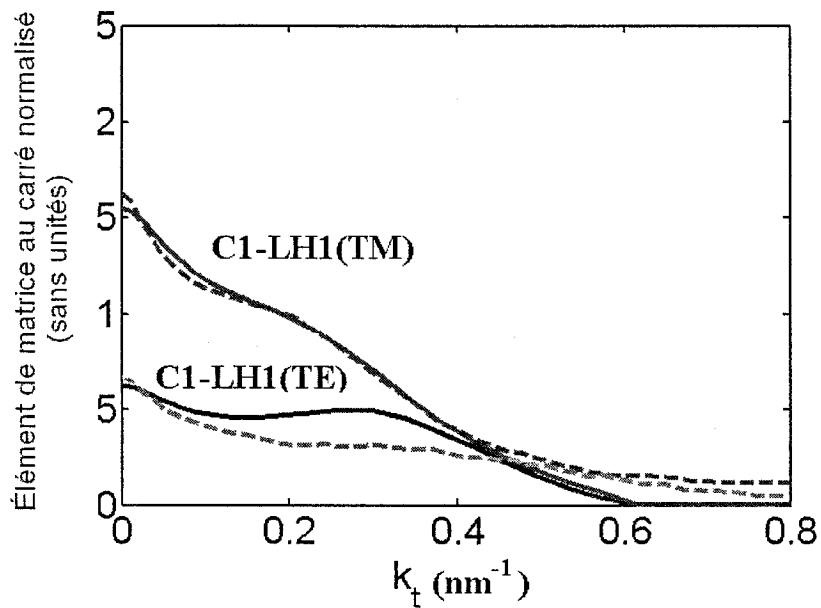


Figure 3.3 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour la force de transition C1-LH1 d'un puits quantique en compression.

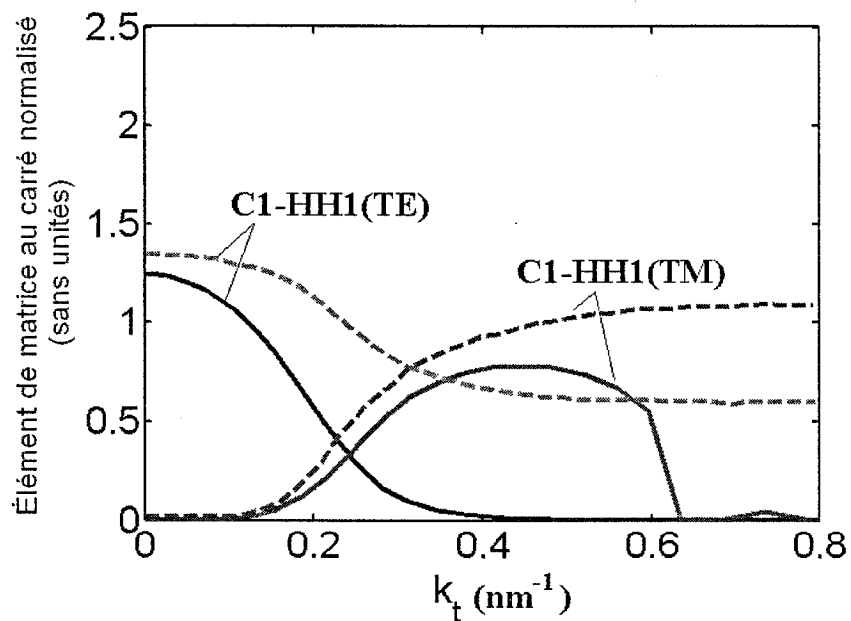


Figure 3.4 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour la force de transition C1-HH1 d'un puits quantique sans contraintes.

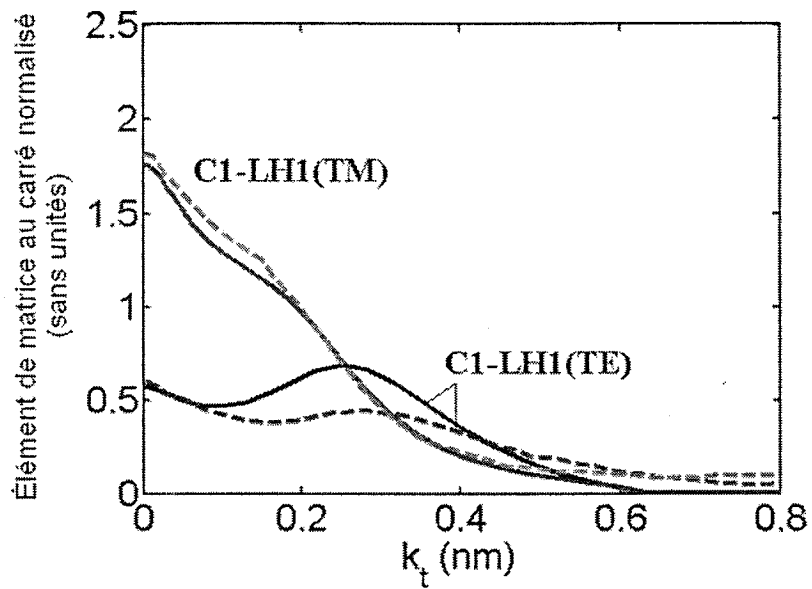


Figure 3.5 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour la force de transition C1-LH1 d'un puits quantique sans contraintes.

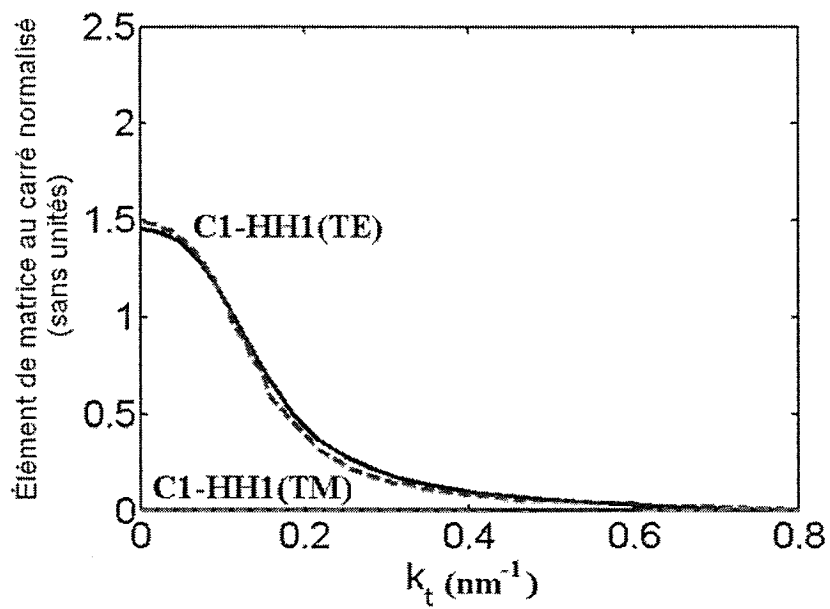


Figure 3.6 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour la force de transition C1-HH1 d'un puits quantique en tension.

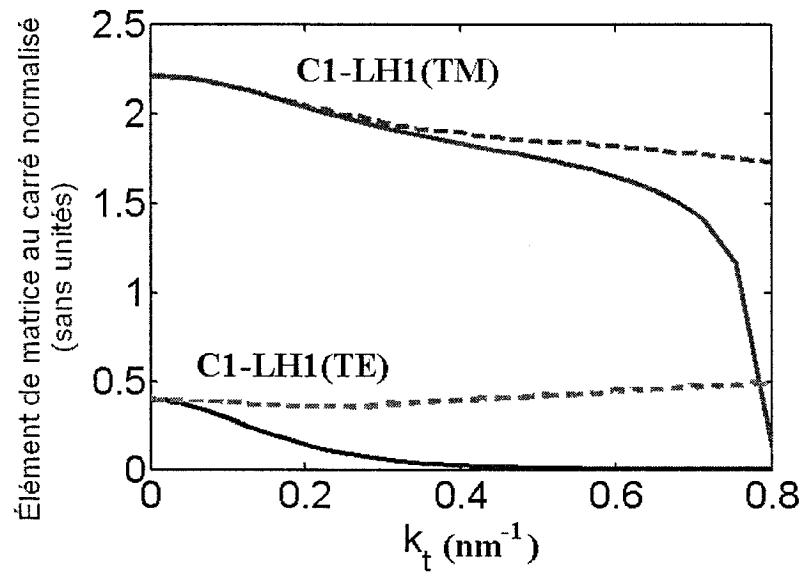


Figure 3.7 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour la force de transition C1-LH1 d'un puits quantique en tension.

### 3.4.2 Comparaison du gain modal

Le gain modal est calculé pour une densité de porteurs surfacique de  $n_{2-D} = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

Un facteur de confinement  $\Gamma$  proportionnel à la largeur du puits et donné par

$\Gamma = 1.67 \times 10^{-4} \text{ \AA}^{-1} * L$  est utilisé. Les valeurs pour chacun des puits sont donc les suivantes :

Tableau 3.2 : Paramètres utilisés pour la comparaison avec la littérature.

Type de puit	Largeur L (Å)	Densité de porteurs volumique	Facteur de confinement
Compression	45	$6,66 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	0,0075
Sans contraintes	60	$5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	0,01
Tension	120	$2,5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	0,02

Les résultats sont présentés aux figures suivantes :

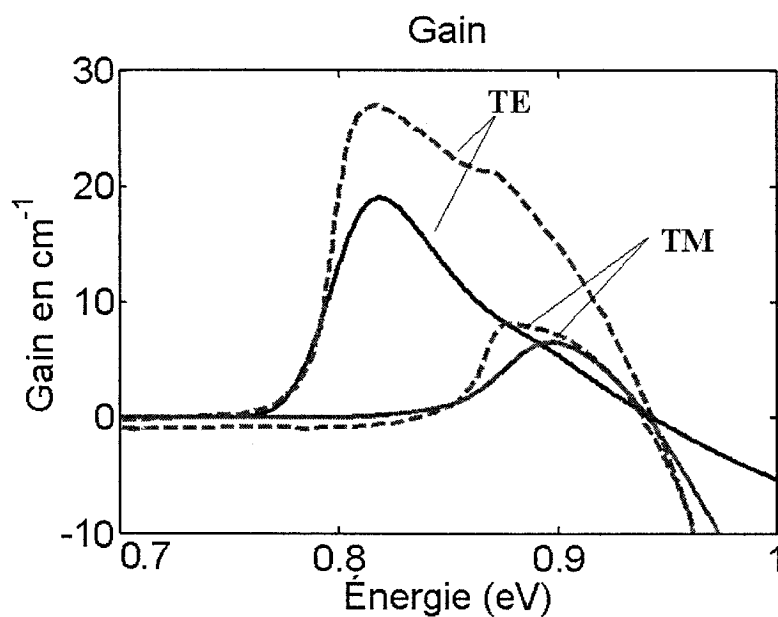


Figure 3.8 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour le gain modal d'un puits en compression.

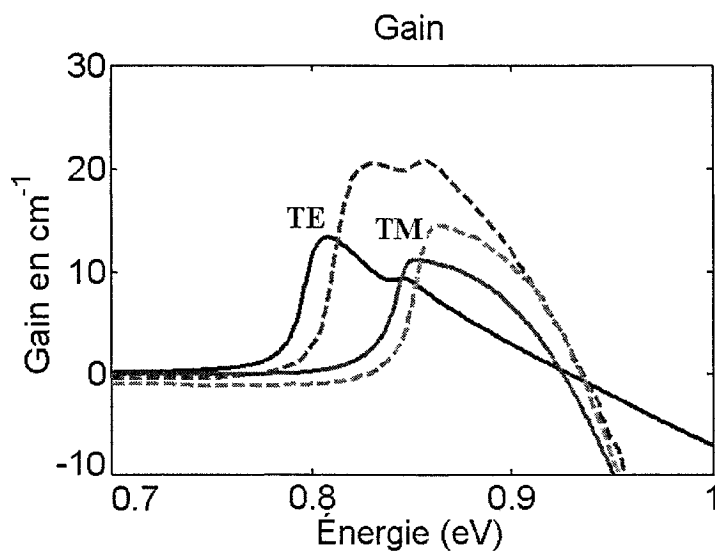


Figure 3.9 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour le gain modal d'un puits sans contraintes.

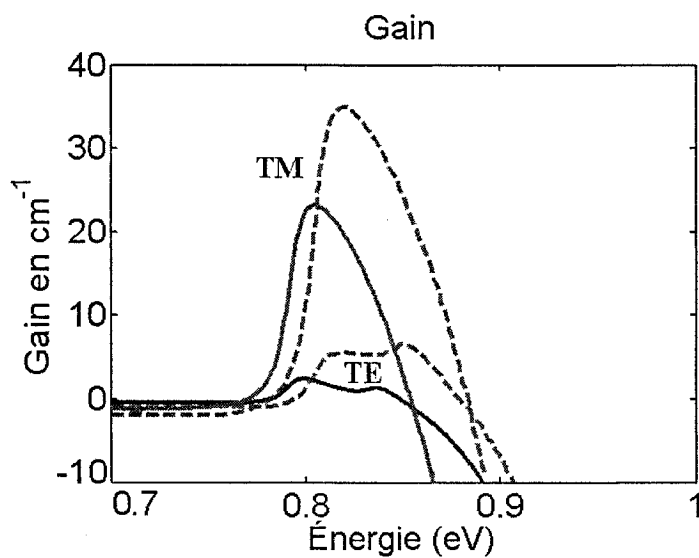


Figure 3.10 : Comparaison entre les résultats calculés (traits pleins) et publiés [1] (traits pointillés) pour le gain modal d'un puits en tension.

### 3.4.3 Discussion des résultats

Contrairement à la validation du calcul de bandes, les forces de transition et le gain calculés ne correspondent pas toujours aux résultats publiés. Suite à ces différences, le calcul des forces de transition a été refait de façon indépendante par d'autres membres du groupe. Les résultats obtenus sont exactement les mêmes que ceux présentés à la section précédente, ce qui contribue à renforcer notre confiance dans nos résultats.

Le fait que les énergies propres correspondent aux résultats publiés semble indiquer que l'hamiltonien de Luttinger-Kohn a été bien construit. Nous croyons que les différences entre les résultats calculés et publiés proviennent de la façon dont sont traitées les conditions limites pour les fonctions d'onde. Tel qu'expliqué à la section 2.8.1, nous avons fixé le domaine de calcul à une région 50 fois plus grande que le puits quantique. Nous avons forcé les fonctions d'onde à s'annuler aux extrémités de ce domaine. Il y a évidemment plusieurs autres façons de traiter les conditions limites. Ces conditions ont des répercussions sur la forme des fonctions d'onde, ce qui se reflète dans l'intégrale de recouvrement des fonctions enveloppes et donc dans la valeur des forces de transitions.

La façon dont sont traitées les conditions limites n'est jamais mentionnée explicitement dans la littérature (à tout le moins dans les articles dont nous avons pris connaissance). Dans l'article de Chang et Chuang qui a servi à la comparaison des résultats [1], des figures montrent que les fonctions d'onde s'annulent beaucoup plus rapidement que les nôtres. Ces figures montrent que les fonctions d'onde atteignent zéro à une distance de



100 Å du milieu du puits de chaque côté. Il est possible qu'un domaine plus restreint de calcul ait forcé ces fonctions d'onde à s'annuler prématurément.

La figure suivante illustre le cas du puits en tension. On y voit la fonction enveloppe de la première bande de valence à  $k_t = 0$  (nous avons tracé seulement la composante LH, la composante HH étant nulle à  $k_t = 0$  et la composante SO pratiquement nulle également). La fonction publiée dans la littérature s'annule brusquement à 100 Å, à peine à 20 Å de la fin du puit. La fonction calculée semble s'atténuer plus naturellement.

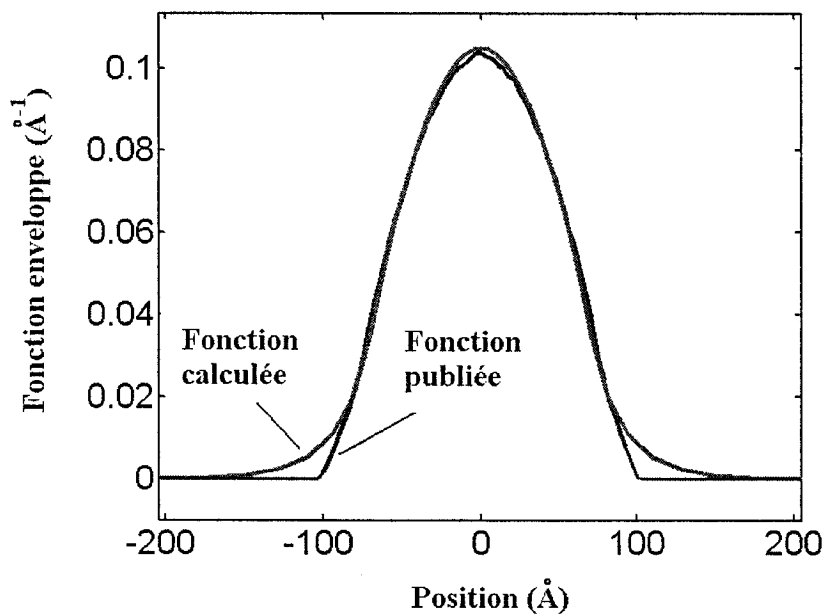


Figure 3.11 : Composante LH de la fonction enveloppe de la première bande de valence d'un puits en tension, courbe calculée et courbe publiée [1].

En restreignant le domaine de calcul à 200 Å tel qu'illustré dans l'article, nous avons effectivement noté une modification importante des forces de transition (voir figure 3.12). Avec un domaine de calcul plus petit, nos forces de transitions s'atténuent moins rapidement en  $k_t$ , comme le font celles de Chang et Chuang. Ceci s'explique par le fait qu'un domaine de calcul plus restreint comprime les fonctions d'onde dans le domaine spatial, ce qui augmente le recouvrement entre les fonctions de conduction et de valence. Les bandes d'énergie n'ont pas été modifiées par un tel changement.

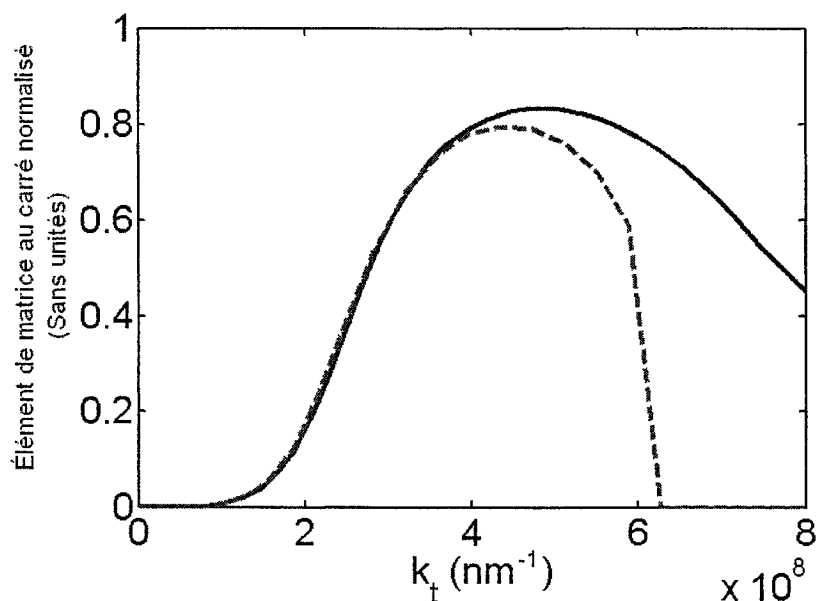


Figure 3.12 : Force de transition C1-HH1 (TM) pour un puits sans contraintes avec un domaine de calcul de 3000 Å (trait pointillé) et de 200 Å (trait plein).

Le domaine de calcul affecte la façon dont les forces de transition s'atténuent à grand  $k_t$ , mais ne semble pas affecter la valeur des forces de transition à  $k_t = 0$ . Les résultats

calculés et publiés présentent pourtant des différences à ce niveau à deux endroits (les forces de transition C1-HH1 TE pour les puits en compression et sans contraintes).

Les expressions utilisées pour les forces de transition de Chang et Chuang ne peuvent pas être comparées directement aux nôtres. En effet, Chang et Chuang ont fait subir une transformation aux fonctions qui forment la base de l'hamiltonien afin que ce dernier puisse être diagonalisé en bloc, ce qui accélère le calcul. Cette transformation est seulement valide dans le cas de l'approximation axiale (voir section 2.5.4). **Nous avons choisi de garder une forme plus générale, ce qui fait qu'il est possible que l'approximation axiale ne soit pas traitée exactement de la même façon dans les travaux de Chang et Chuang que dans les nôtres.**

Les différences dans les forces de transition semblent être à l'origine de celles qu'on retrouve dans les courbes de gain. Des forces de transition moins importantes conduisent évidemment à un gain plus faible.

**Malgré les différences observées, nous croyons que notre modèle de gain est fiable. Deux implémentations différentes ont conduit aux mêmes résultats. Le but ultime de notre modèle est de reproduire des résultats expérimentaux, et il semble bien remplir cette fonction tel que décrit au chapitre 5.**

## CHAPITRE 4

### Effets à N corps

Une description complète du gain nécessite un traitement plus rigoureux que celui présenté au chapitre 3. En effet, les hautes densités de porteurs nécessaires à l'obtention d'un gain dans la région active (densités supérieures à  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ) conduisent à des interactions coulombiennes importantes entre les porteurs. La description de ces interactions conduit à ce qu'on appelle les effets à N corps. La théorie des effets à N corps est basée sur la mécanique quantique à plusieurs corps et dépasse le cadre de ce travail. Notre objectif est seulement de vérifier si ces effets sont significatifs et doivent être inclus dans un modèle de gain. Nous nous contenterons donc ici d'expliquer brièvement l'origine physique des effets et de présenter les formules utilisées.

#### 1.17 Origine physique des effets

##### *Renforcement coulombien ou excitonique (excitonic or coulomb enhancement)*

À cause de l'attraction coulombienne, un électron de la bande de conduction et un trou de la bande de valence ont tendance à se trouver dans le même voisinage pour une durée plus longue que si les deux particules n'interagissaient pas ensemble. Cette augmentation

du temps d'interaction augmente la probabilité de recombinaison électron-trou. Les électrons et les trous interagissant ensemble forment des états liés appelés excitons de Wannier [22].

Le renforcement coulombien conduit à une augmentation du gain et une modification de la forme des courbes de spectre de gain. Il est surtout important à faible densité de porteurs, car l'augmentation du nombre de porteurs amène un écrantage qui atténue l'attraction coulombienne électron-trou, tel qu'expliqué au paragraphe suivant.

#### *Écrantage plasma (plasma screening)*

L'écrantage plasma est prédominant à hautes densités de porteurs. Dans ce cas, l'attraction coulombienne électron-trou est masquée par la présence des charges environnantes. Cet effet tend donc à annuler le renforcement coulombien.

#### *Renormalisation de la bande interdite*

La renormalisation de la bande interdite est un effet à N corps des plus importants. Dans les dernières années, on a noté que les modèles à porteurs libres échouaient à prédire la longueur d'onde du pic d'émission de différents semi-conducteurs. Les longueurs d'onde mesurées étaient systématiquement décalées vers les longues longueurs d'onde par rapport aux prévisions théoriques [23, 24]. L'inclusion de la renormalisation de la bande

interdite permet de remédier à ce problème. Cette renormalisation résulte d'un écrantage entre l'attraction répulsive des électrons de la bande de conduction et ceux de la bande de valence. Pour comprendre cet effet, considérons la situation à basse densité de porteurs. La bande de valence est alors presque remplie d'électrons, et le manque d'états vacants empêche ces derniers de se distribuer de façon à écranter efficacement la répulsion entre les électrons de la bande de conduction et ceux de la bande de valence. À mesure que la densité de porteurs augmente, les états vacants de plus en plus nombreux dans la bande de valence vont permettre aux électrons de se redistribuer de façon à réaliser un meilleur écrantage. Puisqu'il s'agit de l'écrantage d'une interaction répulsive, il en résultera une diminution de l'énergie de transition qu'on appelle déplacement de Debye (*Debye shift*) ([22], p. 135). Ainsi, la renormalisation de la bande interdite décale la courbe de gain vers les grandes longueurs d'onde et modifie la forme de cette dernière.

## 4.2 Modèle retenu

Suivant Park et al [12] un modèle de gain plus complet incluant les effets à N corps a été retenu. Le modèle tient compte des effets suivants:

- L'écrantage plasma
- Le renforcement coulombien
- La renormalisation de la bande interdite

De plus, puisque le modèle obtenu est dérivé de la relation fondamentale entre l'émission spontanée et les coefficients d'absorption, on s'assure des points suivants :

- Le point de transparence correspond à la différence des niveaux de Fermi.
- Le modèle ne conduit pas à une absorption non-physique à des énergies inférieures à la bande interdite.

Un modèle markovien (lorentzien) et non-markovien (gaussien) ont été implantés pour fins de comparaison. La formule de gain utilisée est en fait la formule 3.23, retranscrite ici pour plus de clarté :

$$g(\omega) = \left[ 1 - \exp\left(\frac{\hbar\omega - \Delta F}{kT}\right) \right] \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon}} \left(\frac{e^2}{m_0^2 \omega}\right) \times \sum_{\sigma} \sum_n \sum_m \int_0^{\infty} \frac{k_t}{\pi L_z} M_{nm}^{\sigma}(k_t) f_c^n (1 - f_v^m) L(E_t) dk_t$$

La fonction d'élargissement lorentzienne est donnée par :

$$L(k_t, \hbar\omega) = \frac{\Gamma_{cv}(k_t, \hbar\omega)}{\Gamma_{cv}^2 + E_{nm}^2(k_t, \hbar\omega)} \times \frac{\left[ (1 - \text{Re } Q(k_t, \hbar\omega)) + \frac{\text{Im } Q(k_t, \hbar\omega) E_{nm}(k_t, \hbar\omega)}{\Gamma_{cv}} \right]}{\left[ (1 - \text{Re } Q(k_t, \hbar\omega))^2 + \text{Im } Q(k_t, \hbar\omega)^2 \right]} \quad (4.1)$$

et la gaussienne par

$$L(k_t, \hbar\omega) = \frac{(1 - \text{Re } Q(k_t, \hbar\omega)) \times [\text{Re } \Xi(E_{nm}(k_t, \hbar\omega)) - \text{Im } Q(k_t, \hbar\omega) \text{Im } \Xi(E_{nm}(k_t, \hbar\omega))]}{\left[ (1 - \text{Re } Q(k_t, \hbar\omega))^2 + \text{Im } Q(k_t, \hbar\omega)^2 \right]} \quad (4.2)$$

où  $\Gamma_{cv} = \frac{\hbar}{\tau_m}$ .

L'énergie de transition renormalisée est donnée par :

$$E_{nm}(k_t, \hbar\omega) = E_n^c(k_t) - E_m^v(k_t) + \Delta E_{SX} + \Delta E_{CH} - \hbar\omega \quad (4.3)$$

Les termes  $\Delta E_{SX}$  et  $\Delta E_{CH}$  sont les deux contributions à la renormalisation de la bande interdite et seront définis plus loin.

Le terme  $Q(k_t, \hbar\omega)$  est lié au renforcement coulombien et est donné pour la lorentzienne par :

$$Q(k_t, \hbar\omega) = -i \frac{a_0 E_R}{\pi \lambda_s |M_{nm}(k_t)|^{1/2}} \int_0^\infty dk_t' |k_t' |M_{nm}(k_t')|^{1/2} \times \frac{f_n^c(k_t') - f_m^v(k_t')}{\Gamma_{cv} + iE_{nm}(k_t, \hbar\omega)} \Theta(k_t, k_t') \quad (4.4)$$

et pour la gaussienne par :

$$Q(k_t, \hbar\omega) = i \frac{a_0 E_R}{\pi \lambda_s |M_{nm}(k_t)|^{1/2}} \int_0^\infty dk_t' |k_t' |M_{nm}(k_t')|^{1/2} \times (f_n^c(k_t') - f_m^v(k_t')) \Xi(E_{nm}(k_t, \hbar\omega)) \Theta(k_t, k_t') \quad (4.5)$$

Il importe ici de définir quelques termes et d'en expliquer l'origine.



- $a_0$  et  $E_R$  sont respectivement le rayon de Bohr et l'énergie de Rydberg. Ces deux termes proviennent du modèle excitonique utilisé dans la description du renforcement coulombien. On peut en effet décrire l'exciton à l'aide du modèle de Bohr de l'atome d'hydrogène, en remplaçant la masse du proton par la masse réduite électron-trou. L'exciton est donc considéré comme un « atome » hydrogénoïde possédant une durée de vie finie. Dans cette description, le rayon de Bohr est le rayon de l'état d'exciton de plus faible énergie et est donné par :

$$a_0 = \frac{4\pi\hbar^2\epsilon}{q^2 m_r} \quad (4.6)$$

où  $\hbar$  doit être exprimé en J•s et  $m_r$  est la masse réduite électron-trou en kilogrammes :

$$\frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h} \quad (4.7)$$

L'énergie associée à ce même état est l'énergie de Rydberg :

$$E_R = \frac{\hbar^2}{2m_r a_0^2} \quad (4.8)$$

Notons que le rayon de Bohr de l'exciton est beaucoup plus grand que celui de l'atome d'hydrogène (124 Å pour le GaAs comparativement à 0,5 Å pour

l'hydrogène) et que son énergie de Rydberg est beaucoup plus faible ( 0,0042 eV pour le GaAs comparativement à 13,6 eV pour l'hydrogène).

- $\lambda_s$  est l'inverse de la longueur d'écrantage (*inverse screening length*) :

$$\lambda_s = \frac{q^2}{2\epsilon} \left( \frac{\partial N}{\partial F_n} + \frac{\partial P}{\partial F_p} \right) \times \frac{L}{q} \quad (m^{-1}) \quad (4.9)$$

avec  $F_n, F_p$  en eV et  $N$  (densité d'électrons) et  $P$  (densité de trous) en  $m^{-3}$ .

Il s'agit d'une mesure de l'efficacité de l'écrantage de l'attraction coulombienne entre deux porteurs par les porteurs environnants. L'importance du renforcement coulombien dépend du rapport entre  $a_0$  et la longueur d'écrantage ( $1/\lambda_s$ ) et de celui entre  $E_R$  et  $k_B T$ .

- $k_t$  et  $k_t'$  représentent les vecteurs d'onde dans le plan non-confiné. Le calcul se fait par une procédure itérative où un porteur de charge de vecteur d'onde  $k_t$  interagit avec les porteurs de tous les autres vecteurs d'onde  $k_t' \neq k_t$ .
- Le terme  $\Theta(k_t, k_t')$  est donné par :

$$\Theta(k_t, k_t') = \int_0^{2\pi} d\theta \left( 1 + \frac{C\lambda_s a_0 q_t^2}{32\pi N L_z} \right) \left( 1 + \frac{q_t}{\lambda_s} + \frac{C a_0 q_t^3}{32 N L_z} \right)^{-1} \quad (4.10)$$

où  $\theta$  est l'angle entre les vecteurs  $k_t$  et  $k_t'$  et

$$q_t = \sqrt{k_t^2 - k_t'^2 - 2k_t k_t' \cos \theta} \quad (4.11)$$

Pour ce qui est de la gaussienne, les termes suivants doivent aussi être définis :

$$\text{Re } \Xi(E_{nm}(k_t, \hbar\omega)) = \sqrt{\frac{\pi\tau_{co}}{2\hbar\Gamma_{cv}}} \times \exp\left(-\frac{\tau_{co}}{2\hbar\Gamma_{cv}} E_{nm}^2(k_t, \hbar\omega)\right) \quad (4.12)$$

$$\text{Im } \Xi(E_{nm}(k_t, \hbar\omega)) = \frac{\tau_{co}}{\hbar} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{\Gamma_{cv}\tau_{co}}{2\hbar} t^2\right) \times \sin\left(\frac{\tau_{co}E_{nm}(k_t, \hbar\omega)}{\hbar} t\right) dt \quad (4.13)$$

où  $\tau_{co}$  est un temps de corrélation relié au renforcement non-Markovien du gain optique et est considéré constant [12]. Sa valeur a été fixée à 20 femtosecondes [11].

Notons que la variable  $t$  est une variable d'intégration sans unités.

#### 4.2.1 Modèle pour la renormalisation de la bande interdite

La renormalisation de la bande interdite comprend deux contributions. La contribution «coulomb-trou» est donnée par :

$$\Delta E_{CH} = -2E_R a_0 \lambda_s \ln\left(1 + \sqrt{\frac{32\pi N L_z}{C \lambda_s^3 a_0}}\right) \quad (4.14)$$

tandis que la contribution provenant de l'échange écranté s'écrit :

$$\Delta E_{SX} = -\frac{2E_R a_0}{\lambda_s} \int_0^\infty dk_t k_t \frac{1 + \frac{C \lambda_s a_0 k_t^2}{32\pi N L_z}}{1 + \frac{k_t}{\lambda_s} + \frac{C a_0 k_t^3}{32\pi N L_z}} \times [f_n^c(k_t) + 1 - f_m^v(k_t)] \quad (4.15)$$

Dans ces formules,  $C$  est une constante sans unités dont la valeur varie entre 1 et 4 [12].

Les effets à plusieurs corps décrits dans ce chapitre seront inclus dans le modèle de gain afin d'étudier leur influence au chapitre suivant.

## **CHAPITRE 5**

### **Application aux amplificateurs optiques à semi-conducteurs**

Dans ce chapitre, nous utilisons les modèles décrits aux chapitres précédents pour faire des comparaisons avec des mesures expérimentales. Ces mesures ont été effectuées au laboratoire d'optoélectronique de l'École Polytechnique de Montréal sur des structures destinées à former des amplificateurs optiques à semi-conducteurs (AOS) insensibles à la polarisation de la lumière. Ces structures sont formées d'une alternance de puits en tension et de puits en compression et représentent donc un cas très intéressant pour tester les modèles théoriques.

#### **1.19 Définition d'un amplificateur optique à semi-conducteurs**

Un amplificateur optique à semi-conducteurs est un dispositif optoélectronique de petite taille (typiquement entre 300 et 500  $\mu\text{m}$  de longueur) qui permet d'augmenter l'intensité d'un signal lumineux en utilisant l'émission stimulée. Une inversion de population est créée au préalable dans le milieu semi-conducteur par pompage électrique ou optique. On distingue deux types d'AOS :

### **5.1.1 L'amplificateur à onde progressive (ou de simple passage)**

Dans un tel composant, le signal à amplifier ne traverse l'AOS qu'une seule fois. On peut obtenir un AOS à onde progressive en déposant des couches anti-reflets sur les facettes d'entrée et de sortie d'un laser à semi-conducteurs pour supprimer la rétroaction. Il est aussi possible d'utiliser un guide d'onde incliné par rapport aux facettes ou encore un guide d'onde terminé en fuseau à ses deux extrémités pour empêcher la rétroaction.

Ce dispositif est caractérisé par un gain large bande qui correspond à celui du médium de gain. Il est donc tout désigné pour les applications où on désire transmettre plusieurs longueurs d'onde à la fois comme les systèmes WDM (Wavelength Division Multiplexing). Notons que la réflectivité des facettes n'est jamais parfaitement nulle, ce qui entraîne la formation de faibles modes longitudinaux dans l'amplificateur. Puisque le gain est sensiblement plus élevé aux longueurs d'onde correspondant à ces modes, la courbe de gain d'un AOS à onde progressive présente des ondulations. Le fait de supprimer la rétroaction signifie aussi que le courant d'injection nécessaire pour opérer les AOS à onde progressive est plus élevé que celui utilisé pour les AOS Fabry-Pérot.

### **5.1.2 L'amplificateur Fabry-Pérot (ou multi passages)**

Dans ce type d'amplificateur, les facettes d'entrée et de sortie sont réfléchissantes et forment une cavité Fabry-Pérot. L'amplificateur présente donc un gain très élevé pour

les longueurs d'onde correspondant aux modes de la cavité. Les intensités optiques élevées qui s'y trouvent favorisent l'apparition de phénomènes non-linéaires, et ce type d'amplificateur est surtout utilisé pour les applications de traitement de signal exploitant ces phénomènes. L'AOS Fabry-Pérot est très sensible aux variations de courant d'injection, de température et de polarisation du signal incident qui affectent la cavité laser.

L'AOS est un composant très versatile qui peut s'employer aussi bien dans l'amplification de signaux que dans le traitement de l'information optique. L'annexe I présente quelques-unes des applications des AOS.

## **5.2 Sensibilité à la polarisation**

La sensibilité à la polarisation de la lumière incidente est un problème pour l'utilisation des AOS dans les systèmes de transmission optique. La polarisation de la lumière varie lors de la propagation dans une fibre optique, et il faut s'assurer d'avoir un gain constant quelle que soit la polarisation du signal d'entrée pour éviter de perturber les signaux. Les gains transverse électrique (TE) et transverse magnétique (TM) peuvent présenter une différence aussi élevée que 8 dB si on n'y prend garde. Ceci est dû au fait que le facteur de confinement  $\Gamma_c$  et l'indice de réfraction ne sont pas les mêmes pour les deux polarisations.

La différence de  $\Gamma_c$  est d'autant plus marquée que l'épaisseur et la largeur de la région active sont différentes. La situation est donc particulièrement préoccupante dans le cas des structures à puits quantiques. De plus, le confinement quantique lève la dégénérescence entre les bandes de valence LH et HH au bord de bande à  $k = 0$  (voir figure 1.2). Ceci ajoute au problème puisque les transitions stimulées entre la bande de conduction et la bande HH produisent du gain TE, tandis que celles entre la bande de conduction et la bande LH produisent surtout du gain TM. La séparation des deux bandes au point  $\Gamma$  contribue donc à augmenter la différence entre les gains TE et TM.

Il existe plusieurs façons de contourner le problème. La première est d'utiliser une région active qui n'est pas trop asymétrique. Par exemple, on obtient une différence de gain inférieure à 1.3 dB avec une région active de  $0.26 \mu\text{m}$  par  $0.4 \mu\text{m}$ . Par contre, on se prive alors des avantages que procurent les puits quantiques (voir section 1.2).

Plusieurs configurations utilisent deux amplificateurs, ou font passer la lumière deux fois dans le même amplificateur. Par exemple, dans la configuration de la figure 5.1 a), la lumière passe dans deux amplificateurs orientés à  $90^\circ$  l'un par rapport à l'autre. La lumière TE du premier amplificateur devient TM pour le deuxième et vice-versa. En b), on sépare plutôt les deux polarisations du faisceau incident, puis chaque polarisation passe par un AOS différent. On peut aussi faire passer la lumière deux fois dans le même amplificateur en tournant la polarisation de  $90^\circ$  entre les deux passages, tel qu'illustré en c).



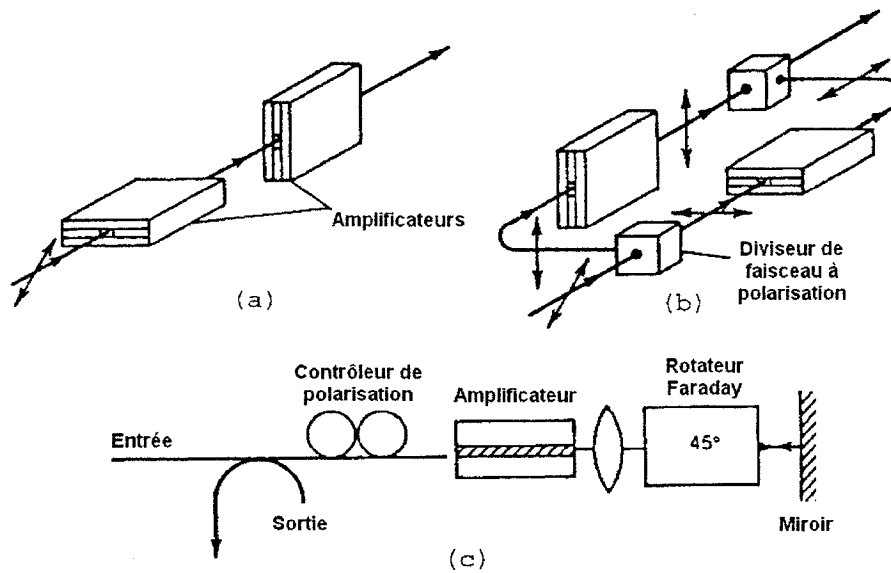


Figure 5.1 : Configurations à base d'AOS permettant d'éliminer la sensibilité à la polarisation [25].

Ces solutions sont loin d'être idéales puisqu'elles engendrent du couplage entre les deux amplificateurs ou conduisent à des pertes de puissance dues à la séparation et la recombinaison des signaux.

D'autres solutions ont été proposées. En utilisant une région active massique sous tension, des AOS à la fois insensibles à la polarisation et possédant une puissance de sortie élevée ont été fabriqués [26]. Une autre alternative intéressante est l'insertion de couches minces sous contraintes à l'intérieur de puits quantiques (*delta-strained layers*). Le nombre et la position de ces couches affectent la dépendance à la polarisation des puits quantiques, et il est possible d'obtenir des configurations insensibles à la polarisation [27].

Mais la solution la plus flexible et la plus simple est certainement l'utilisation de puits quantiques sous contraintes. Cette méthode est basée sur le fait que les bandes de valence HH et LH produisent des gains de polarisation différente. En effet, une transition entre une bande de conduction et une bande HH conduit uniquement à du gain TE. Celle impliquant la bande LH produit au contraire plus de gain TM que de gain TE, dans des proportions de 3 pour 1. Les contraintes permettent d'éloigner ou de rapprocher les bandes HH et LH de la bande de conduction (voir figure 1.6) et donc de favoriser l'une ou l'autre polarisation.

Par exemple, dans les puits en tension, la bande LH passe souvent au-dessus de la bande HH, ce qui produira plus de gain TM que de gain TE. Par une combinaison de puits quantiques sous contraintes judicieusement choisie, il est possible d'équilibrer les gains TE et TM et ainsi réaliser une structure insensible à la polarisation. Par exemple, dans les puits en tension, la bande LH passe souvent au-dessus de la bande HH, ce qui produira plus de gain TM que de gain TE (voir figure 5.2).

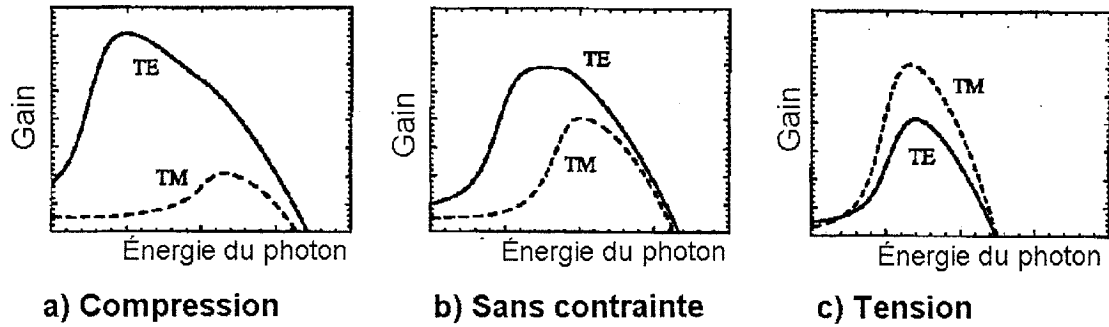


Figure 5.2 : Exemple de gain TE et TM de puits quantiques sous contraintes pour un puits en compression (a), un puits sans contraintes (b) et un puits en tension (c) [1].

### 5.3 Structure étudiée

La structure utilisée pour faire les comparaisons est formée de 3 puits en compression en alternance avec 3 puits en tension (structure C3T3). Elle a été conçue pour émettre autour de  $1,55 \mu\text{m}$ , la longueur d'onde correspondant au minimum d'absorption dans les fibres optiques. Les puits sont entourés de barrières d'InGaAsP non contraintes. Le tableau suivant donne les caractéristiques des couches constituant la région active, toutes formées d' $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ .

Tableau 5.1 : Caractéristiques de la région active de la structure utilisée pour faire les comparaisons.

<b>Fonction</b>	<b>x (proportion de Ga)</b>	<b>y (proportion de As)</b>	<b>Épaisseur (nm)</b>	<b>Bande interdite (eV)</b>
Barrière	0.2486	0.5401	8	0.9647
Puits en compression	0.179	0.699	11	0.7659
Barrière	0.2486	0.5401	8	0.9647
Puits en tension	0.554	0.94	14,5	0.8725
Barrière	0.2486	0.5401	8	0.9647
Puits en compression	0.179	0.699	11	0.7659
Barrière	0.2486	0.5401	8	0.9647
Puits en tension	0.554	0.94	14,5	0.8725
Barrière	0.2486	0.5401	8	0.9647
Puits en compression	0.179	0.699	11	0.7659
Barrière	0.2486	0.5401	8	0.9647
Puits en tension	0.554	0.94	14,5	0.8725

La figure suivante illustre le diagramme de bandes de la structure :

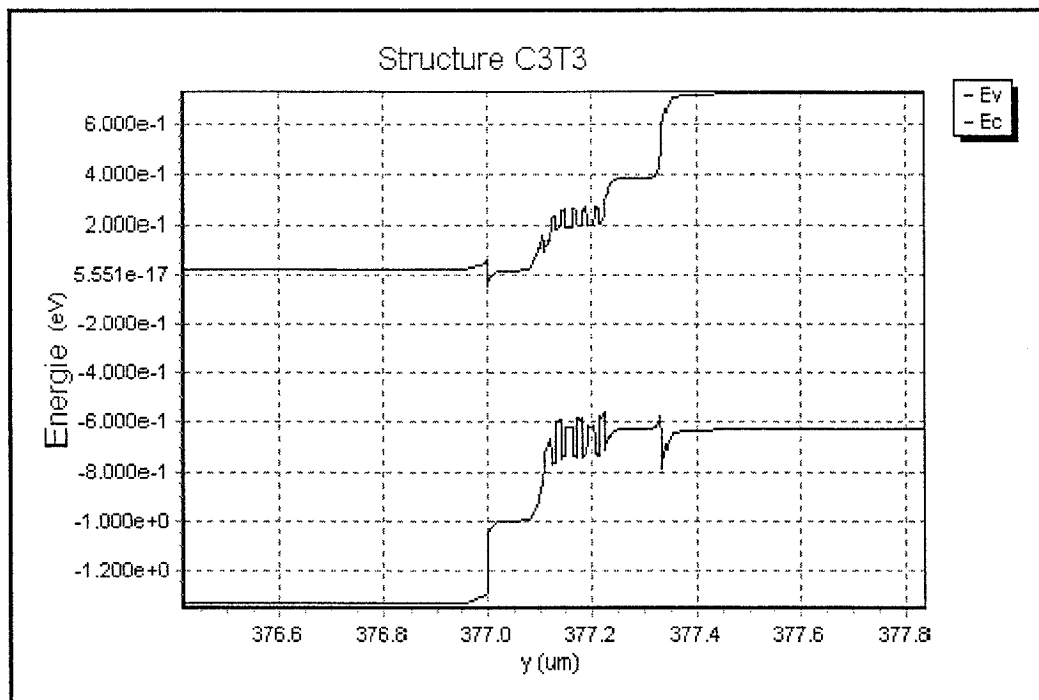


Figure 5.3 : Diagramme de bandes de la structure C3T3.

## 5.4 Procédure de comparaison

La façon la plus directe de comparer les résultats expérimentaux et théoriques est d'utiliser l'émission spontanée. Il aurait aussi été possible d'obtenir le gain modal expérimental de la structure par la méthode d'Hakki-Paoli. Ce gain inclut cependant le facteur de confinement et les pertes internes; il aurait donc fallu évaluer ces paramètres et les inclure dans la simulation pour faire la comparaison, ce qui est difficile à réaliser.

### 5.4.1 Procédure expérimentale

Les courbes expérimentales proviennent du Laboratoire d'Optoélectronique de l'École Polytechnique de Montréal et ont été obtenues par photoluminescence standard. Le schéma expérimental est présenté à la figure 5.3. Les échantillons sont excités par un laser argon émettant à une longueur d'onde de 514 nm. Le faisceau est dirigé sur une lame demi onde ( $\lambda/2$ ), puis traverse un cube polariseur (CP) qui sélectionne un seul des deux modes du laser. Un objectif de microscope (O1) focalise la lumière dans une fibre optique. Le couplage se fait grâce au positionneur à trois vis micrométriques P1. À sa sortie de la fibre, le faisceau passe dans un collimateur, puis un cube séparateur de puissance (C1/2). Une partie du faisceau est focalisée sur l'échantillon à l'aide d'un objectif de microscope (O2). La lumière de pompe génère des paires électrons-trous dans l'échantillon, ce qui produit de l'émission spontanée. Celle-ci est collectée à la surface de l'échantillon par l'objectif de microscope (O2). Le cube séparateur en puissance (C 1/2) dirige la lumière collectée vers une lentille convergente, puis dans un objectif de microscope (O3) pour la coupler dans une fibre optique. Grâce au positionneur P2, la lumière est dirigée sur le hacheur qui module le signal à une fréquence de 900 Hz. L'émission spontanée est focalisée dans la fente d'entrée du monochromateur avec les objectifs O4 et O5. Une détection synchrone utilisant un circuit construit avec une photodiode permet de capter le signal de photoluminescence sur une plage de longueurs d'onde de 1000 à 1800 nm. La carte d'acquisition Labview effectue une lecture de la puissance optique du spectre. Un logiciel permet de contrôler le monochromateur via une interface série et de tracer le spectre.

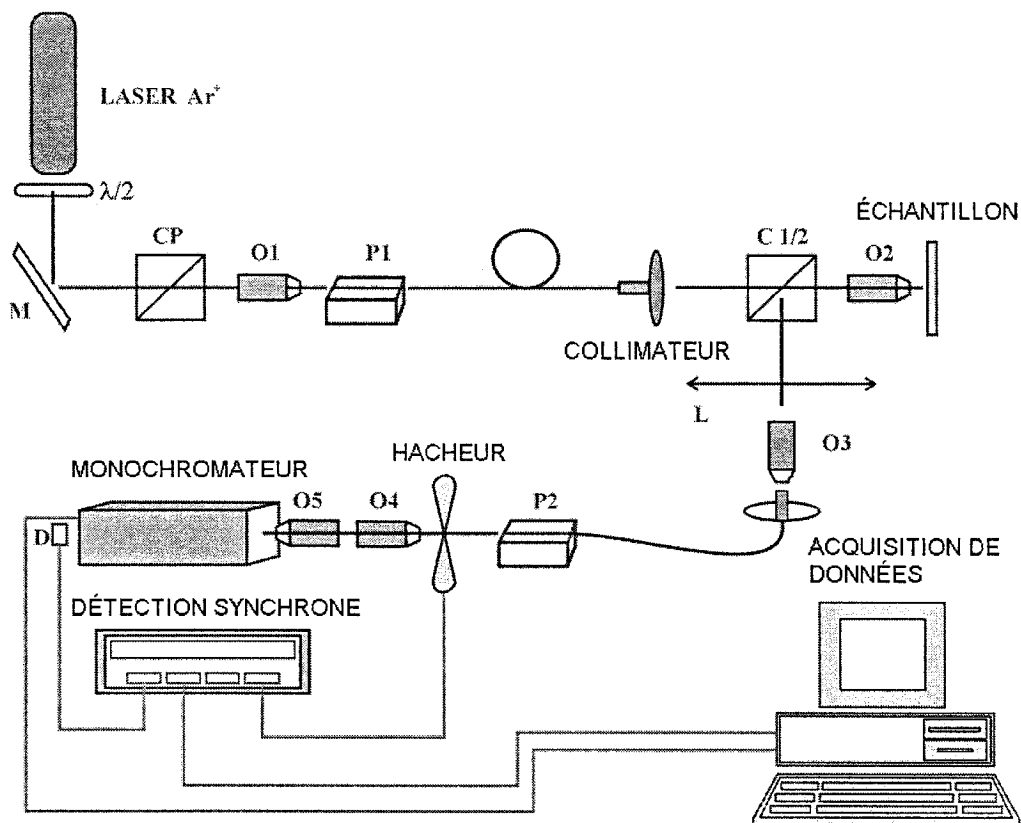


Figure 5.4 : Montage expérimental utilisé pour la mesure de l'émission spontanée.

La puissance de l'émission spontanée mesurée en laboratoire peut être reliée au taux d'émission spontanée par la relation suivante :

$$P(\lambda) = K_1 \frac{hc}{\lambda} r_{\text{spont}}(\lambda) d\lambda V \quad (5.1)$$

où  $P(\lambda)$  est la puissance captée par le récepteur,  $K_1$  le coefficient de couplage,  $hc/\lambda$  l'énergie des photons,  $d\lambda$  la résolution du spectromètre (fixée à 0.1 nm pour correspondre

à la résolution du monochromateur) et  $V$  le volume de la région active. Nous utilisons cette relation pour trouver le taux d'émission spontanée expérimental. Notons que l'expérience ne recueille qu'une partie de l'émission spontanée totale. L'amplitude des courbes n'est donc pas significative dans la comparaison, et le maximum de la courbe théorique sera ajusté au maximum de la courbe mesurée. Ceci fait en sorte que la valeur du coefficient de couplage  $K_1$  n'a pas à être estimée.

#### 5.4.2 Méthode de calcul théorique

Les méthodes de calcul de l'émission spontanée sont les mêmes que celles décrites aux chapitres précédents pour le gain. Le gain et l'émission spontanée sont en effet liés par la formule

$$r^{spont}(\omega) = \left( \frac{8\pi n_r^2 (\hbar\omega)^2}{h^3 c^2} \right) \frac{1}{1 - e^{(\hbar\omega - (F_n - F_p))/k_B T}} g(\omega) \quad (5.2)$$

L'émission spontanée de chacun des six puits est calculée indépendamment, puis additionnée pour obtenir l'émission spontanée totale de la structure. Nous supposons les barrières assez épaisses pour négliger le couplage entre les puits. L'émission spontanée provenant des niveaux non confinés et celle provenant des barrières sont aussi négligées. Puisque le montage expérimental recueille la lumière sans égard à sa polarisation, nous calculons l'émission spontanée TE et TM et nous les additionnons avec la formule suivante [2]:



$$r_{spon}^{TOT} = \frac{2r_{spon}^{TE} + r_{spon}^{TM}}{3} \quad (5.3)$$

Cette équation se justifie par le fait que dans les puits quantiques, les directions x et y correspondent à une polarisation TE tandis que la direction z correspond à une polarisation TM.

La répartition de la densité de porteurs dans les puits est calculée à partir de l'intensité optique du laser de pompe selon la méthode décrite à la section suivante. Cette approche est plus complète que celle que l'on retrouve habituellement dans la littérature où la densité de porteurs des courbes théoriques est ajustée pour correspondre aux résultats expérimentaux [12]. Tel qu'expliqué à la section précédente, l'amplitude des courbes théoriques est ajustée sur celle des courbes expérimentales puisque ces dernières ne collectent qu'une petite partie de l'émission spontanée totale émise. Les valeurs de la renormalisation de la bande interdite et du temps de relaxation intrabande (qui détermine la largeur de la fonction d'élargissement) sont également déterminées à partir des courbes expérimentales. Pour tenir compte du chauffage dans la région active, nous avons effectué les simulations pour une température de 315 K.

#### *Calcul de la densité de porteurs*

Nous utilisons un logiciel de simulation en deux dimensions de structure laser pour calculer la répartition des porteurs dans la région active de la structure. Ce logiciel

(LAS2D) a été développé au Laboratoire d'Optoélectronique de l'École Polytechnique de Montréal. Le simulateur a été modifié pour remplacer l'injection électrique par une injection optique afin de simuler l'excitation par le laser argon. Le faisceau de pompe est représenté par un profil gaussien se propageant dans la structure. L'interaction entre la lumière et le matériau semi-conducteur génère des paires électrons-trous. Le simulateur résout l'équation de Poisson et les équations de continuité pour ces électrons et ces trous afin de calculer des propriétés comme l'indice de réfraction, les pertes, le gain ou la densité de porteurs en tout point de la structure. Dans le cadre de cette étude, le simulateur a été utilisé seulement pour connaître la répartition des porteurs dans les différents puits.

Pour calculer l'intensité optique incidente sur les échantillons, nous avons mesuré la puissance directement à la surface de l'échantillon (donc à la sortie de l'objectif O2) pour tenir compte des pertes dans le montage (cubes séparateurs, etc.) La mesure a été effectuée à l'aide d'un photodétecteur dont la surface est beaucoup plus grande que celle du faisceau pour s'assurer d'en mesurer la totalité. L'intensité est obtenue en divisant la puissance par la surface du faisceau. Celle-ci a été évaluée par une mesure du profil spatial qui a conduit à une valeur de 52  $\mu\text{m}$  de diamètre pour le faisceau.

Le tableau suivant montre les densités de porteurs confinés obtenues pour les quatre intensités optiques du laser de pompe qui serviront aux comparaisons. Notons que la réflexion à la surface de l'échantillon a aussi été calculée par le simulateur avec les

coefficients de Fresnel. Les résultats montrent que les porteurs se répartissent de façon à ce que la densité d'électrons et de trous soit la même pour chacun des puits en compression; même chose pour les puits en tension.

*Tableau 5.2* : Densités de porteurs calculés par le simulateur LAS2D pour les quatre puissances optiques d'excitation utilisées en laboratoire.

<b>Puissance optique à la surface (mW)</b>	<b>N compression (cm<sup>-3</sup>)</b>	<b>P compression (cm<sup>-3</sup>)</b>	<b>N tension (cm<sup>-3</sup>)</b>	<b>P tension (cm<sup>-3</sup>)</b>
38	$4,2 \times 10^{17}$	$1,16 \times 10^{18}$	$3,49 \times 10^{17}$	$3,49 \times 10^{17}$
88	$8,4 \times 10^{17}$	$1,62 \times 10^{18}$	$6,55 \times 10^{17}$	$6,55 \times 10^{17}$
120	$1,02 \times 10^{18}$	$1,85 \times 10^{18}$	$8,1 \times 10^{17}$	$8,1 \times 10^{17}$
200	$1,29 \times 10^{18}$	$2,22 \times 10^{18}$	$1,04 \times 10^{18}$	$1,09 \times 10^{18}$

## 5.5 Résultats

### 5.5.1 Comparaison avec le modèle à porteurs libres, fonction d'élargissement lorentzienne

Les courbes théoriques suivantes ont été obtenues avec une fonction d'élargissement lorentzienne à partir du modèle développé au chapitre 3, donc excluant les effets à plusieurs corps. La renormalisation de la bande interdite a par contre été incluse pour que les courbes soient centrées à la même énergie.

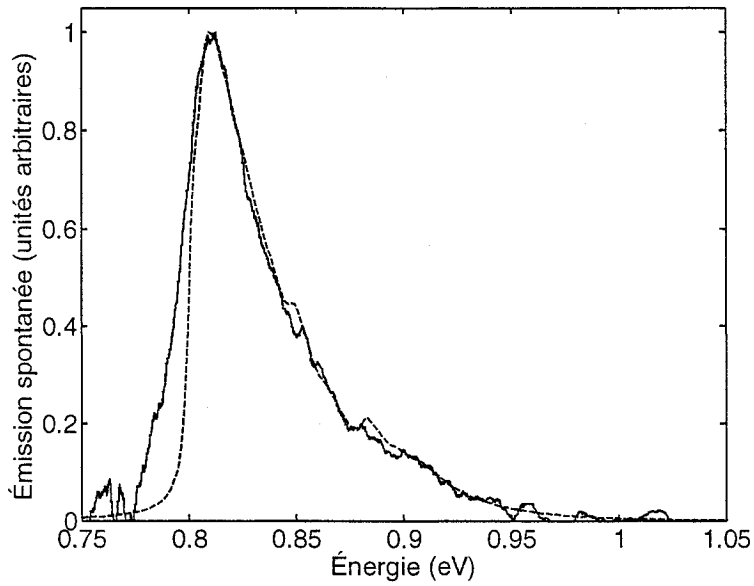


Figure 5.5 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effets à N corps lorentzien (trait pointillé) pour une puissance optique de 38 mW.

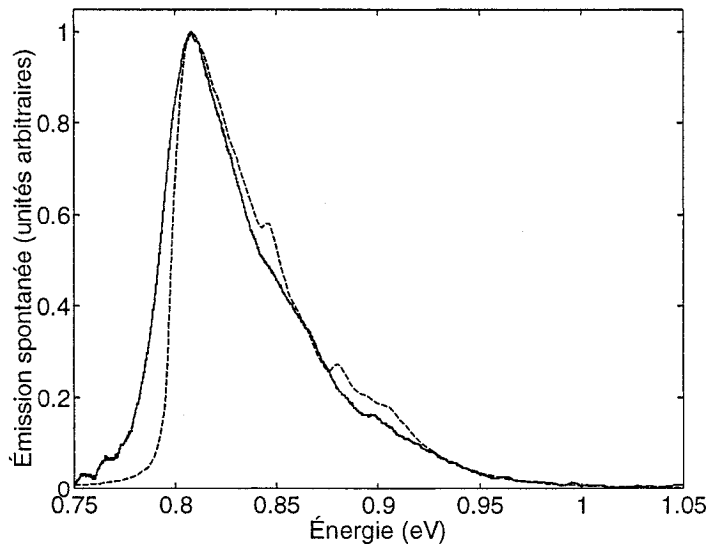


Figure 5.5 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effets à N corps lorentzien (trait pointillé) pour une puissance optique de 88 mW.

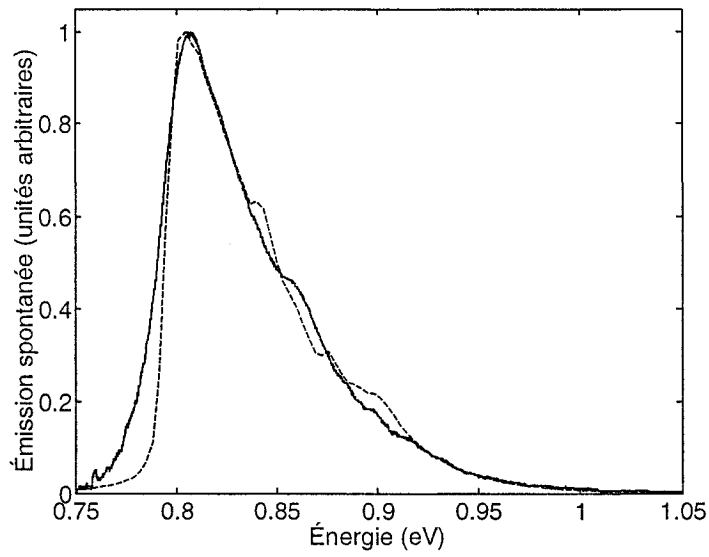


Figure 5.5 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effets à N lorentzien (trait pointillé) pour une puissance optique de 120 mW.

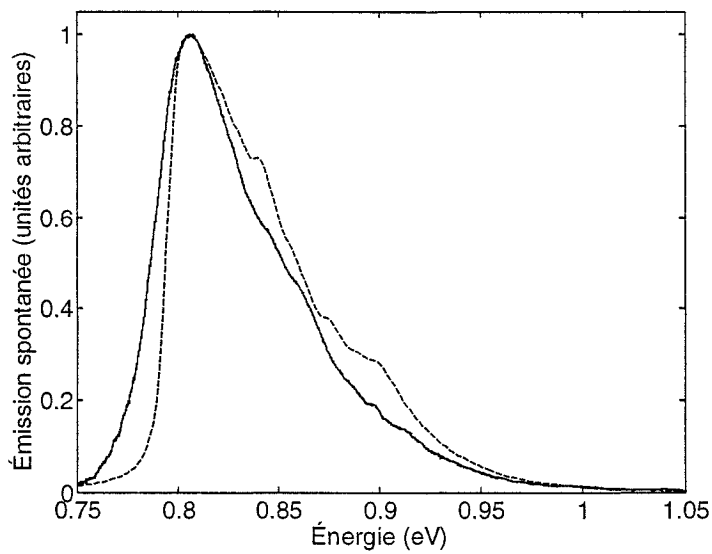


Figure 5.6 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effets à N lorentzien (trait pointillé) pour une puissance optique de 200 mW.

### 5.5.2 Comparaison avec le modèle à porteurs libres, fonction d'élargissement gaussienne

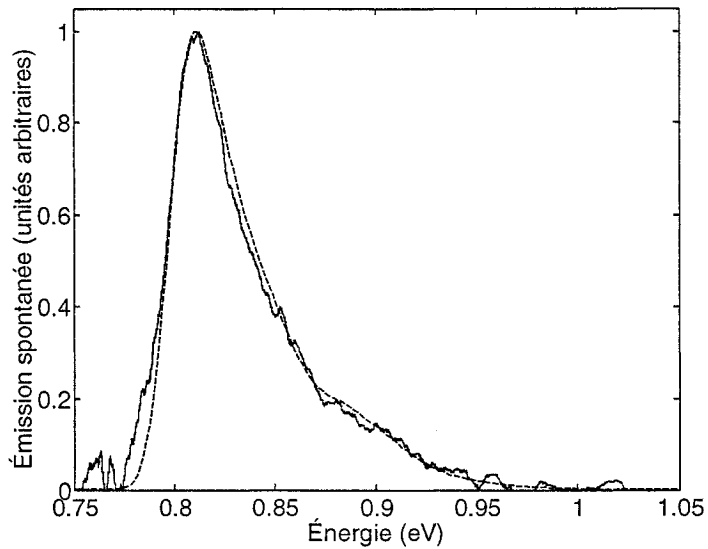


Figure 5.7 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effet à N corps gaussien (trait pointillé) pour une puissance optique de 38 mW.

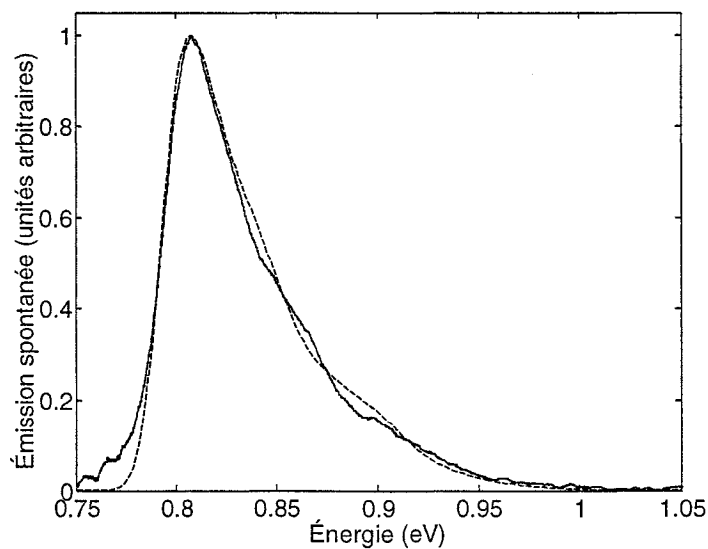


Figure 5.8 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effets à N corps gaussien (trait pointillé) pour une puissance optique de 88 mW.

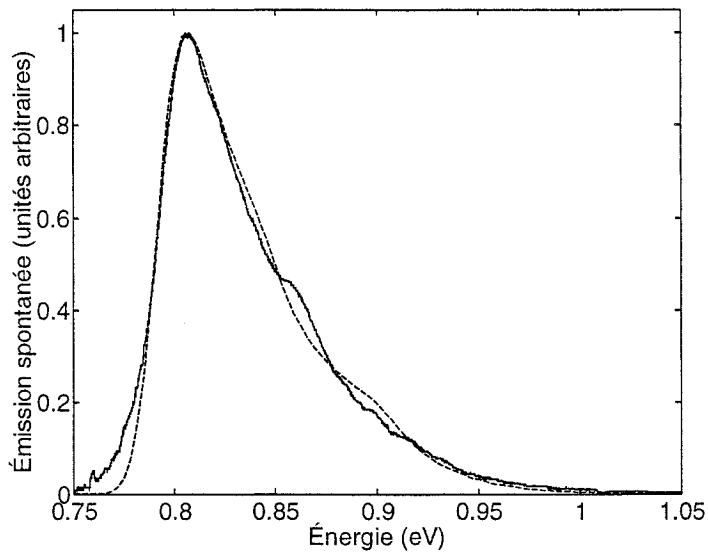


Figure 5.9 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effets à N corps gaussien (trait pointillé) pour une puissance optique de 120 mW.

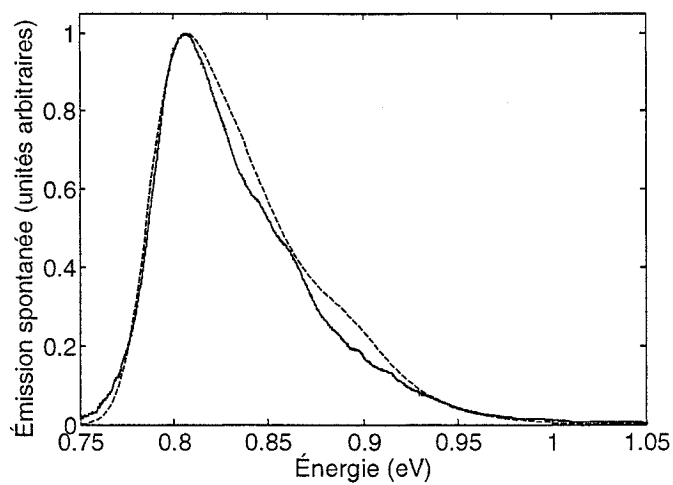


Figure 5.10 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique sans effets à N corps gaussien (trait pointillé) pour une puissance optique de 200 mW.

### 5.5.3 Comparaison avec le modèle incluant les effets à N corps

Les courbes théoriques suivantes ont été obtenues à l'aide du modèle décrit au chapitre 4, en utilisant une fonction d'élargissement gaussienne.

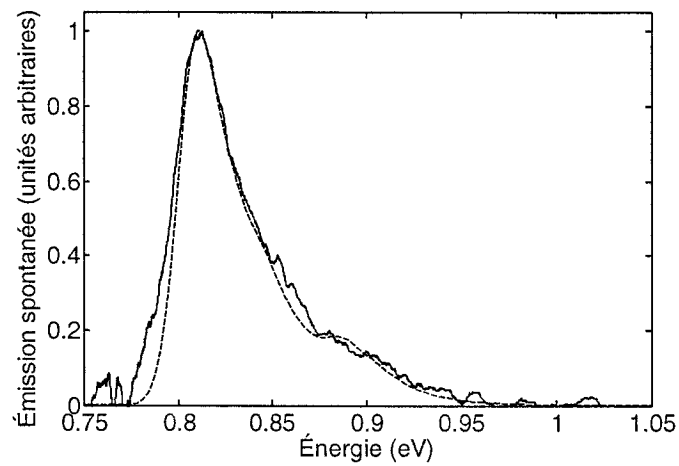


Figure 5.11 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique incluant les effets à N corps (trait pointillé) pour une puissance optique de 38 mW.



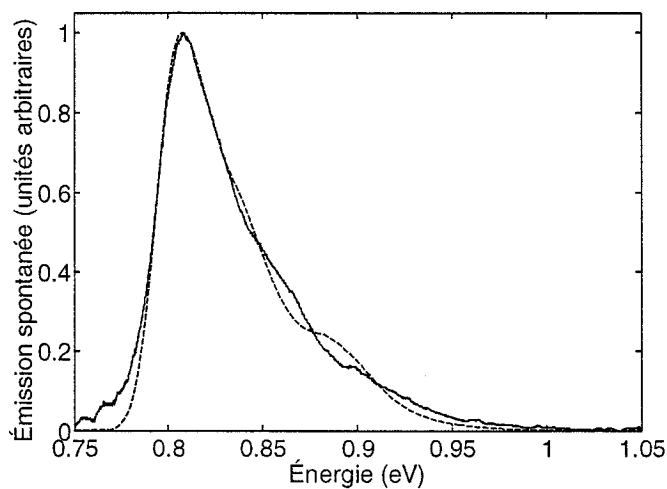


Figure 5.12 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique incluant les effets à N corps (trait pointillé) pour une puissance optique de 88 mW.

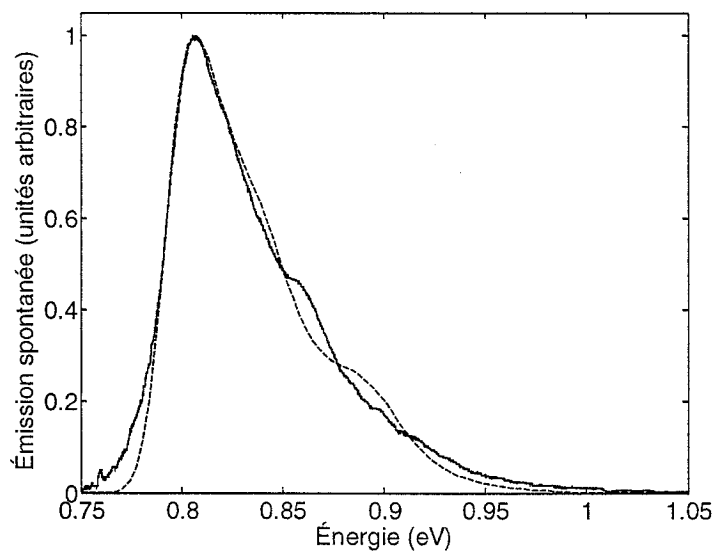


Figure 5.13 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique incluant les effets à N corps (trait pointillé) pour une puissance optique de 120 mW.

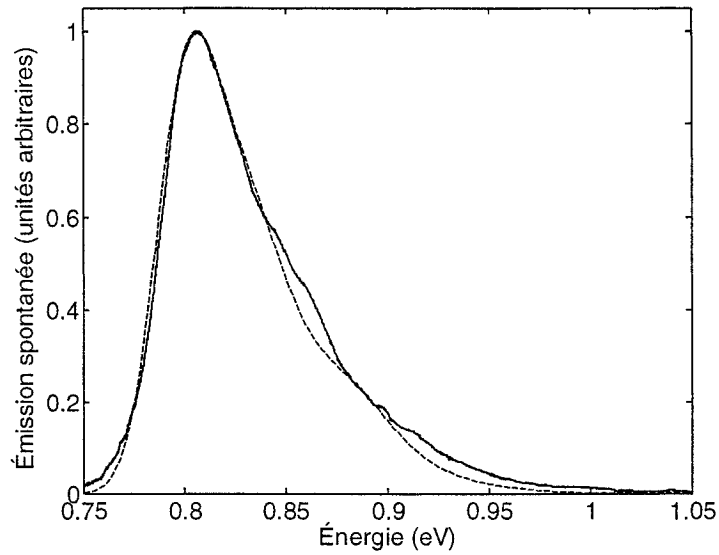


Figure 5.14 : Comparaison entre la courbe expérimentale (trait plein) et le calcul théorique incluant les effets à N corps (trait pointillé) pour une puissance optique de 200 mW.

## 5.6 Discussion

### 5.6.1 Écart-type

Afin de déterminer quel modèle théorique correspond le mieux aux données expérimentales, nous présentons ici l'écart type entre les courbes théoriques et expérimentales pour chacune des densités de porteurs étudiées.

Tableau 5.3 : Écart-type entre les courbes expérimentale et théorique pour différents modèles étudiés.

	$\langle \sigma^2 \rangle$	$\langle \sigma^2 \rangle$	$\langle \sigma^2 \rangle$	$\langle \sigma^2 \rangle$
	Puissance d'excitation de 38 mW	Puissance d'excitation de 88 mW	Puissance d'excitation de 120 mW	Puissance d'excitation de 200 mW
<b>modèle à porteurs libres (fonction lorentzienne)</b>	$6,36 \times 10^{-3}$	$7,86 \times 10^{-3}$	$1,0 \times 10^{-2}$	$1,7 \times 10^{-2}$
<b>modèle à porteurs libres (fonction gaussienne)</b>	$4,83 \times 10^{-3}$	$4,23 \times 10^{-3}$	$4,68 \times 10^{-3}$	$8,59 \times 10^{-3}$
<b>modèle à N corps (fonction gaussienne)</b>	$1,84 \times 10^{-3}$	$3,385 \times 10^{-3}$	$4,10 \times 10^{-3}$	$3,25 \times 10^{-3}$

### 5.6.2 Comparaison des fonctions d'élargissement gaussienne et lorentzienne

Le tableau 5.3 montre que l'écart type entre les courbes expérimentales et théoriques est systématiquement inférieur pour le modèle utilisant une fonction d'élargissement gaussienne que pour celui utilisant la fonction lorentzienne. Un coup d'œil aux graphiques révèle que pour un même temps de relaxation d'intrabande, les transitions

sont plus visibles sur la lorentzienne. De plus, la courbe générée avec ce modèle tombe trop abruptement à basse énergie. La supériorité de la fonction gaussienne sur la lorentzienne que nous observons rejoint les résultats publiés dans la littérature [14, 16, 17, 28]. Pour cette raison, l'étude des effets à N corps a été réalisée seulement avec la fonction gaussienne; le reste de l'analyse qui suit s'applique aussi uniquement aux résultats obtenus avec une fonction d'élargissement gaussienne.

### 5.6.3 Transitions

La courbe d'émission spontanée est la somme de plusieurs transitions optiques provenant à la fois des puits en compression et des puits en tension. Les puits en compression possèdent une bande de conduction et 6 bandes de valence, ce qui fait un total de 6 transitions possibles. Les puits en tension possèdent 2 bandes de conduction et 5 bandes de valence pour un total de 10 transitions. Cependant, seulement quelques-unes des combinaisons entre ces niveaux énergétiques contribuent de façon significative à l'émission spontanée. Le tableau suivant illustre toutes les transitions possible pour chaque puits ainsi que les éléments de matrice de transition TE et TM associés.

Tableau 5.4 : Transitions des puits en compression et des puits en tension à  $k_t = 0$  pour la structure C3T3 avec les éléments de matrice optique associés.

Type de puit	Type de transition	$A_{ij}$ TE	$A_{ij}$ TM
<b>Compression</b>	<b>C1-HH1</b>	<b>0.8722</b>	$\approx 0$
	C1-HH2	$\approx 0$	$\approx 0$
	C1-HH3	0.1032	$\approx 0$
	<b>C1-LH1</b>	<b>0.4028</b>	<b>1.5415</b>
	C1-HH4	$\approx 0$	$\approx 0$
	C1-LH2	$\approx 0$	$\approx 0$
<b>Tension</b>	<b>C1-LH1</b>	<b>0.5026</b>	<b>1.9933</b>
	<b>C1-HH1</b>	<b>1.4577</b>	$\approx 0$
	C1-HH2	$\approx 0$	$\approx 0$
	C1-LH2	$\approx 0$	$\approx 0$
	C1-HH3	0.0284	$\approx 0$
	C2-LH1	$\approx 0$	$\approx 0$
	C2-HH1	$\approx 0$	$\approx 0$
	<b>C2-HH2</b>	<b>1.2727</b>	$\approx 0$
	<b>C2-LH2</b>	<b>0.4993</b>	<b>1.9968</b>
	C2-HH3	$\approx 0$	$\approx 0$

Le tableau montre que l'analyse peut s'effectuer en considérant seulement 6 des 16 transitions de la structure, 2 provenant du puits en compression et 4 provenant du puits en tension. On voit que les transitions dominantes (soulignées en caractères gras dans le tableau) sont celles pour lesquelles le nombre quantique «  $n$  » de la bande de conduction est le même que celui de la bande de valence. Ceci s'explique par le meilleur recouvrement des fonctions d'onde et justifie la règle des « transitions interdites » (voir section 3.1.2) parfois utilisée pour estimer le recouvrement des fonctions d'onde.

Le tableau suivant montre l'énergie des transitions d'intérêt et la façon dont elles sont renormalisées selon la densité de porteurs :

Tableau 5.5 : Énergies des transitions principales à  $k_z=0$  incluant la renormalisation de la bande interdite.

Transition	Énergie non renormalisée	Énergie renormalisée* P = 38 mW	Énergie renormalisée P = 88 mW	Énergie renormalisée P = 120 mW	Énergie renormalisée P = 200 mW
C1-HH1 Compression	0.8118	0.7934	0.7920	0.7902	0.7870
C1-LH1 Compression	0.8920	0.8736	0.8722	0.8704	0.8672
C1-LH1 Tension	0.8125	0.7994	0.7971	0.7953	0.7923
C1-HH1 Tension	0.8538	0.8407	0.8384	0.8366	0.8336
C2-HH2 Tension	0.9110	0.8979	0.8956	0.8938	0.8908
C2-LH2 Tension	0.9132	0.9001	0.8978	0.8960	0.8930

\* Voir section 5.6.4 pour les détails sur la renormalisation

Une conclusion intéressante de cette étude est de constater que les modèles théoriques permettent d'identifier les transitions optiques visibles sur les courbes expérimentales. La

courbe suivante montre par exemple l'identification des transitions sur la courbe mesurée à la plus grande puissance d'excitation.

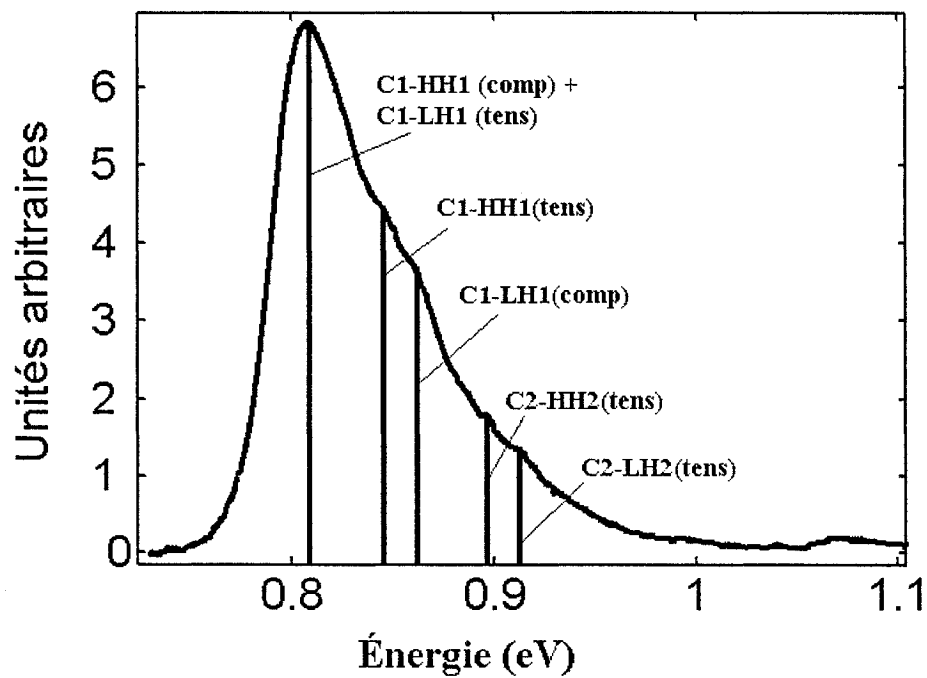


Figure 5.15 : Identification des transitions sur la courbe expérimentale obtenue avec une puissance optique d'excitation de 200 mW.



### 5.6.4 Effets à N corps

L'inclusion des effets à N corps améliore la correspondance entre les courbes théoriques et les courbes expérimentales. Les transitions dominantes qui forment le sommet de la courbe sont mieux modélisées. L'inclusion des effets à N corps produit en effet des courbes plus étroites au sommet. Ceci est dû à l'effet du renforcement coulombien qui augmente la probabilité de transition entre les électrons et les trous pour les transitions les plus importantes. Les figures suivantes montrent bien l'impact des effets à N corps sur les courbes d'émission stimulée.

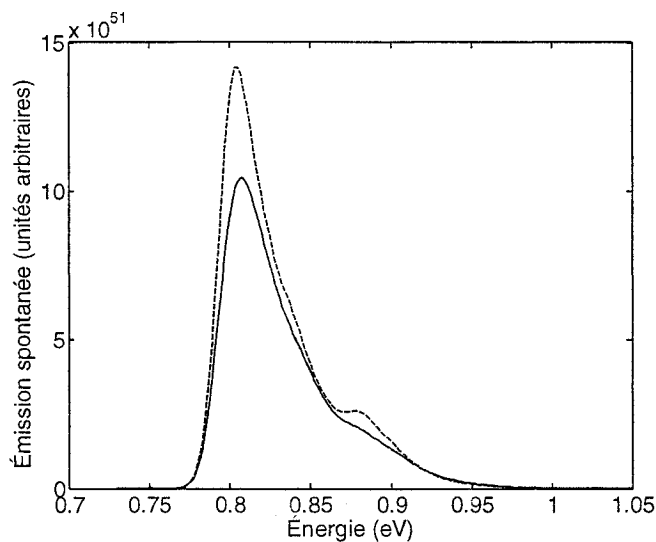


Figure 5.16 : Comparaison entre le modèle théorique sans effets à N corps (trait plein) et le modèle théorique avec les effets à N corps (trait pointillé) pour la densité de porteurs calculée à partir d'une puissance d'excitation de 38 mW.

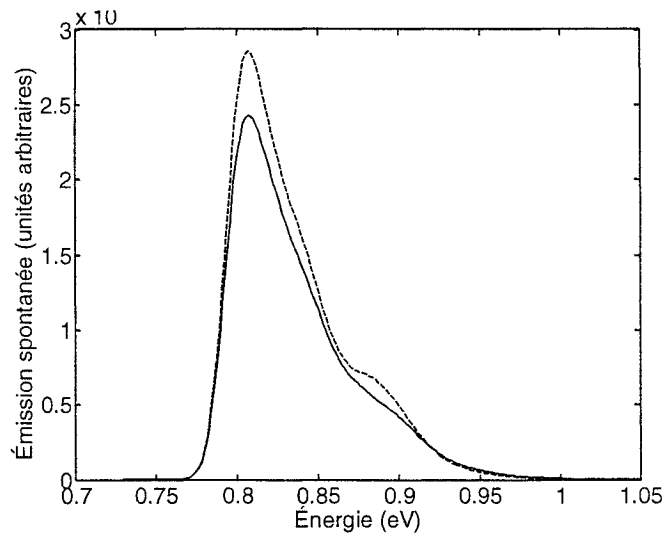


Figure 5.17 : Comparaison entre le modèle théorique sans effet à N corps (trait plein) et le modèle théorique avec les effets à N corps (trait pointillé) pour la densité de porteurs calculée à partir d'une puissance d'excitation de 88 mW.

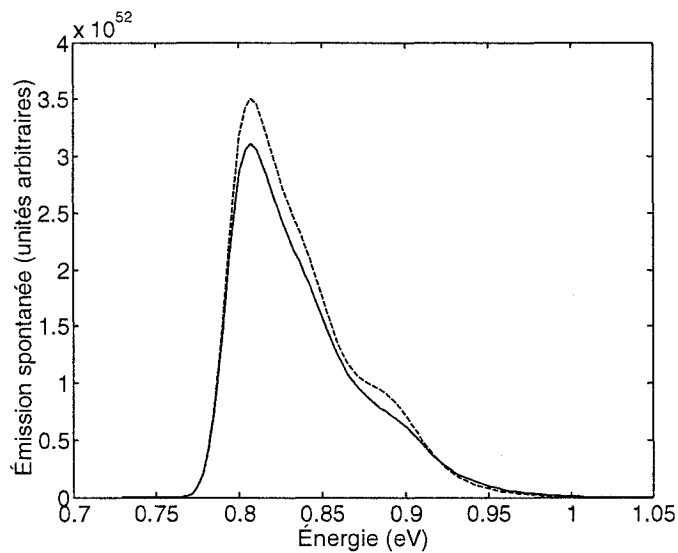


Figure 5.18 : Comparaison entre le modèle théorique sans effet à N corps (trait plein) et le modèle théorique avec les effets à N corps (trait pointillé) pour la densité de porteurs calculée à partir d'une puissance d'excitation de 120 mW.

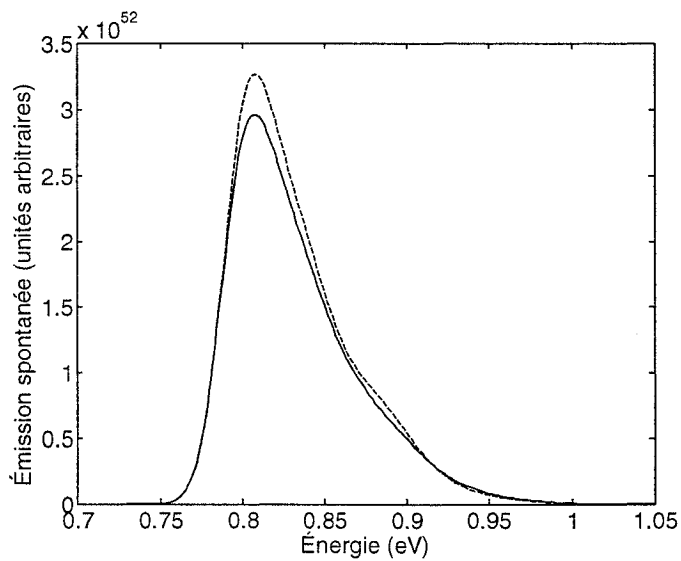
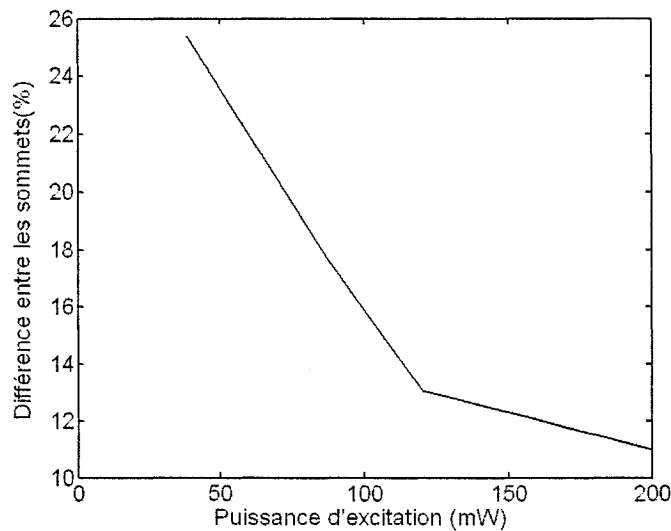


Figure 5.19 : Comparaison entre le modèle théorique sans effet à N corps (trait plein) et le modèle théorique avec les effets à N corps (trait pointillé) pour la densité de porteurs calculée à partir d'une puissance d'excitation de 200 mW.

La figure suivante illustre la différence entre l'amplitude du sommet de la courbe incluant les effets à N corps et celle du sommet de la courbe sans effet à N corps en fonction de la puissance d'excitation. :



*Figure 5.20* : Différence entre l'amplitude du sommet de la courbe incluant les effets à N corps et celle du sommet de la courbe sans effet à N corps en fonction de la puissance d'excitation.

On remarque que l'effet du renforcement coulombien diminue avec l'augmentation de la densité de porteurs. Ceci s'explique par le fait que l'écrantage coulombien augmente avec la densité de porteurs et masque l'effet du renforcement, tel que discuté à la section 4.1.

#### *Renormalisation de la bande interdite*

Les résultats montrent que la renormalisation de la bande interdite est essentielle afin de bien modéliser les courbes expérimentales. Cette renormalisation a été calculée à partir des formules 4.14 et 4.15. Cependant, l'utilisation de ces formules a conduit à une

renormalisation trop importante par rapport aux courbes expérimentales, et nous avons été contraints de l'ajuster arbitrairement pour pouvoir comparer les courbes entre elles.

Notons que la renormalisation calculée dépend de la densité de porteurs et de la structure de bandes, et la valeur de la renormalisation pour un puits en tension est donc différente de celle d'un puits en compression. Pour un même puit, la contribution « coulomb-trou » est la même pour chacune des transitions, tandis la contribution provenant de l'écrantage s'applique différemment à chacune des transitions puisque les fonctions d'occupation de Fermi entrent dans son calcul.

La surévaluation de la renormalisation par rapport aux résultats expérimentaux est difficile à expliquer, et il est clair qu'une étude plus complète nécessiterait une meilleure compréhension théorique des interactions coulombiennes et des outils mathématiques qui permettent de les modéliser. Notons cependant que le calcul de l'inverse de la longueur d'écrantage, dont la valeur affecte l'amplitude de la renormalisation, est problématique. Plusieurs formules existent dans la littérature, et elles vont jusqu'à différer selon les publications des mêmes auteurs (voir [22], p. 168 et [29], p. 99).

Nous avons noté que les résultats correspondaient bien si l'on appliquait à toutes les transitions d'un même puits la même composante provenant de l'écrantage (dont la valeur était la moyenne des contributions de chaque transition), et si la renormalisation

totale était divisée par deux. Bref, la renormalisation de la bande interdite a été évaluée selon la formule suivante :

$$\Delta E = \frac{\Delta E_{CH} + \frac{\sum_{n_t} \Delta E'_{SX}}{n_t}}{2} \quad (5.4)$$

où  $n_t$  est le nombre de transitions présente dans le puits.

Les graphiques suivants présentent les valeurs de renormalisation obtenues pour chacun des types de puits en fonction de la densité de porteurs.

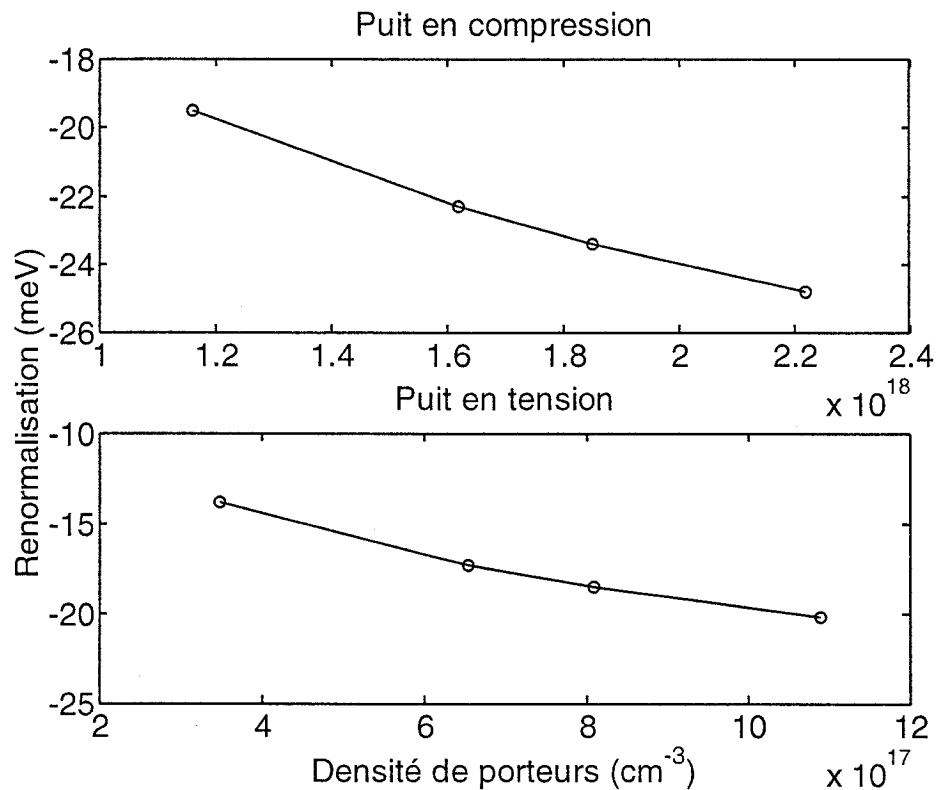


Figure 5.21 : Renormalisation utilisée pour ajuster les courbes théoriques aux courbes expérimentales.

On remarque que la valeur de la renormalisation augmente avec la densité de porteurs. Ceci correspond aux résultats théoriques publiés pour des structures similaires [17].

Puisque les densités de porteurs des puits en compression et des puits en tension sont différentes (voir tableau 5.2), il n'est pas possible de comparer la renormalisation des deux types de puits dans des conditions similaires. Cette comparaison théorique a par contre été effectuée par Ahn, qui a conclu que la renormalisation dépend fortement de

l'amplitude et du type de contrainte. Ceci est dû au fait que la densité d'états de trous dans la bande de valence est différente pour les deux types de puits [17].

### **5.6.5 Autres éléments de discussions**

1) On constate que la correspondance entre les courbes expérimentales et théoriques est bonne pour la densité de porteurs la plus basse. Au fur et à mesure qu'on augmente l'intensité de pompe, l'intensité relative des pics est différente entre les courbes théoriques et expérimentales. Dans les courbes expérimentales, la transition C1-LH1 du puits en compression qui se situe autour de 0.86 eV est plus accentuée que sur les courbes théoriques. Ceci peut s'expliquer par le fait que les porteurs sont en réalité répartis différemment entre les deux types de puits que ce qui a été calculé par le simulateur LAS2D. Des variations de composition et d'épaisseur dans les structures fabriquées en laboratoire peut également expliquer les différences entre les courbes théoriques et les courbes expérimentales.

2) Dans toutes les figures 5.4 à 5.13, on note également que la queue à basse énergie des courbes expérimentales est systématiquement plus large que celle de la courbe théorique. Ceci peut s'expliquer par une variation de l'épaisseur des puits dans la structure expérimentale. Par exemple, les trois puits en compression de la structure n'ont peut-être pas exactement la même épaisseur. Ceci fait en sorte que les transitions se produisent à des énergies légèrement différentes pour chacun des puits. En convoluant chacune de ses



transitions avec la fonction d'élargissement, ceci élargit la courbe de gain. Puisque le modèle théorique utilise une même largeur pour chacun des puits du même type, l'élargissement est moins important.

3) Pour ajuster les courbes théoriques sur les courbes expérimentales, nous avons utilisé des temps de relaxation intrabande de  $3 \times 10^{-13}$  seconde, sauf dans le cas de la plus haute intensité de pompe où un temps de  $2 \times 10^{-13}$  seconde a donné une meilleure correspondance. Ces valeurs correspondent tout à fait à celles que l'on retrouve dans la littérature pour des structures similaires [19]. La diminution du temps de relaxation pour la plus haute densité de porteurs peut s'expliquer par le fait qu'une augmentation de porteurs conduit à une augmentation des collision, et donc à un temps de relaxation plus faible. Cet effet est cependant contrebalancé dans une certaine mesure par la diminution de la longueur d'écrantage avec l'augmentation de la densité de porteurs. Asada montre par exemple qu'aux densités de porteurs étudiées ici, le temps de relaxation intrabande diminue légèrement avec l'augmentation de la densité de porteurs pour des structures d'InGaAsP [19].

## Conclusion

L'objectif de cette étude était de développer un modèle permettant de calculer le gain optique d'un puits quantique sous contraintes. L'utilisation de puits quantiques sous contraintes dans le design de nouveaux composants électroniques – par exemple dans le cas des AOS insensibles à la polarisation – rendait nécessaire l'implantation d'un tel modèle. Le travail a permis de réaliser les points suivants :

- Le développement d'un calcul de bandes qui tient compte du mélange de bandes et dont les résultats ont été validés avec la littérature. Le modèle calcule les interactions entre les bandes HH, LH et SO grâce à un calcul basé sur l'hamiltonien de Kohn-Luttinger 6x6. Il représente une amélioration par rapport à l'approximation parabolique auparavant utilisée par le Laboratoire d'Optoélectronique.
- L'implantation d'un modèle qui permet le calcul des forces de transition et du gain optique à partir des résultats d'une structure de bandes considérant le mélange de bandes.
- Un calcul des effets à N corps, soit le renforcement coulombien, l'écrantage plasma et la renormalisation de la bande interdite. Nous avons démontré l'importance d'inclure ces effets dans un calcul impliquant les hautes densités de porteurs nécessaires à l'obtention de gain optique dans les structures étudiées.

- Une comparaison entre des spectres d'émission spontanée théoriques provenant des modèles développés et des résultats expérimentaux réalisés en laboratoire. Ce faisant, nous avons montré qu'il est possible de calculer la densité de porteurs présents dans les structures plutôt que d'ajuster cette valeur à partir des résultats expérimentaux comme cela est fait dans la littérature.

### *Améliorations possibles*

Ce travail représente un premier effort dans la modélisation de structures complexes faisant intervenir des puits quantiques sous contraintes et dans le rapprochement des résultats expérimentaux avec des résultats théoriques. Pour chaque étape du calcul, nous examinerons ici quelles améliorations il serait possible d'apporter.

Le point de départ du calcul est la détermination des bandes d'énergie du puits quantique, telle que décrite au chapitre 2. Pour des raisons de simplicité, nous nous sommes limités dans ce travail à un calcul 6x6 qui considère les interactions entre les bandes de valence HH, LH et SO. Nous avons néanmoins fait en sorte qu'il soit possible de prendre aussi en compte l'influence des bandes de conduction sur le calcul de bande. Ceci pourrait faire l'objet d'un travail ultérieur afin de déterminer si cette influence est significative sur le calcul.

Dans ce travail, la méthode des différences finies a été utilisée pour la résolution numérique de l'équation de Schrödinger. Récemment, une méthode de résolution semi-

analytique basée sur la méthode de Galerkin a été présentée dans la littérature [30].

La méthode consiste à approximer les fonctions propres de l'équation de Schrödinger par une somme linéaire des fonctions d'onde de l'hamiltonien découplé. Puisqu'elle n'implique pas de discrétisation, la méthode conduit à un calcul plus rapide qui ne dépend pas du maillage utilisé. Son implantation représenterait une amélioration par rapport à la méthode de calcul utilisée dans ce mémoire.

Le chapitre trois se penche sur le calcul de gain optique. Un élément important de ce calcul est la fonction d'élargissement avec laquelle le spectre de gain est convolué. Nous avons dressé une liste de toutes les fonctions rencontrées dans la littérature, sans les essayer une à une. Plutôt que de se limiter à la comparaison entre la lorentzienne et la gaussienne, un modèle plus complet pourrait permettre de choisir parmi plusieurs fonctions d'élargissement.

L'étude a permis de montrer que l'inclusion des effets à N corps décrits au chapitre 4 est importante dans le calcul du gain optique. Une étude plus complète de ces effets passe cependant par une meilleure compréhension théorique des interactions coulombiennes et des outils mathématiques qui permettent de les modéliser. Le fait qu'il ait fallu ajuster la valeur de la renormalisation calculée montre qu'il est nécessaire de pousser l'étude plus loin. L'influence de chaque effet – renforcement coulombien, écrantage plasma et renormalisation de la bande interdite – sur l'allure de la courbe de gain en fonction de la densité de porteurs devrait aussi être étudiée.

La comparaison avec des résultats expérimentaux présentée au chapitre 5 représente un premier effort de rapprochement entre les résultats théoriques et expérimentaux. Ce travail a permis de tester la validité des modèles implantés. Cependant, la comparaison aurait été facilitée s'il elle avait porté sur un échantillon ne contenant qu'un seul puits quantique. Il pourrait s'agir d'une expérience intéressante à réaliser dans le futur. Dans tous les cas, une meilleure caractérisation expérimentale des structures utilisées pour la comparaison permettrait d'améliorer le rapprochement. L'épaisseur des couches minces et leur composition peuvent varier considérablement par rapport aux paramètres qui ont guidé leur fabrication. En connaissant plus précisément ces valeurs qui sont des valeurs d'entrée du modèle, les valeurs de sortie (les spectres de gain optique et d'émission spontanée) seraient aussi plus précis.

Une autre limite de la comparaison est qu'elle ne permet pas de prédire l'amplitude des spectres. Pour chaque courbe présentée, le maximum de la courbe théorique est ajusté sur la courbe expérimentale. Le protocole expérimental ne permettait pas de déterminer une amplitude de référence pour une densité de porteurs donnée, puis de comparer les amplitudes relatives des différentes courbes. Il s'agirait d'une amélioration importante à apporter à la comparaison, même s'il est reconnu que la calibration absolue dans les mesures de puissance optique est très difficile à réaliser.

**BIBLIOGRAPHIE**

- [1] C. S. Chang et S. L. Chuang, "Modeling of strained quantum-well lasers with spin-orbit coupling," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 10, no.2, pp. 218-229, 1995.
- [2] S. L. Chuang, *Physics of Optoelectronic devices*, New-York: Wiley-Interscience, 1995.
- [3] C. Hermann et C. Weibuch, "k•p perturbation theory in III-V compounds and alloys : a reexamination," *Physical Review B*, vol. 15, no.2, pp. 823-833, 1977.
- [4] E. Zielinski, H. Schweizer, S. Hausser, R. Stuber, M. H. Pilkuhn et G. Weimann, "Systematics of laser operation in GaAs/AlGaAs multiquantum well heterostructures," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 23, no.6, pp. 969-976, 1987.
- [5] E. Zielinski, F. Keppler, S. Hausser, M. H. Pilkuhn, R. Sauer et W. T. Tsang, "Optical gain and loss processes in GaInAs/InP MQW laser structure," *IEEE Journal of Quantum Electronic*, vol. 25, no. 6, pp. 1407-1416, 1989.
- [6] S. R. Chinn, P. Zory et A. R. Reisinger, "A model for GRIN-SCH-SQW diode lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 24, no. 11, pp. 2191-2214, 1988.

- [7] S.L. Chuang, "Efficient band-structure calculations of strained quantum wells," *Physical Review B*, vol. 43, no. 4, pp. 9649-9661, 1991.
- [8] Z. M. Li, M. Dion, Y. Zou, J. Wang, M. Davies et S. P. McAlister, "An approximate  $kp$  theory for optical gain of strained InGaAsP quantum-well lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 30, no. 2, pp. 538-546, 1994.
- [9] E.O. Kane, "Band structure of indium antimonide," *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 1, pp. 249-261, 1957.
- [10] T.B. Bahder, "Eight-band  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  model of strained zinc-blende crystals," *Physical Review B*, vol. 41, no. 6, pp. 11 992 - 12 001, 1990.
- [11] D. Ahn, D. et S. L. Chuang, "Optical gain in a strained-layer quantum-well laser," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 24, no. 12, pp. 2400-2406, 1988.
- [12] S.H. Park, S. L. Chuang, J. Minch et D. Anh, "Intraband relaxation time effects on non-markovian gain with many-body effects and comparison with experiment," *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 15, no. 11, pp. 203-208, 1999.
- [13] P. Zory, *Quantum Well Lasers*, New York : Academic Press, 1993.

- [14] J. Minch, S. H. Park, T. Keating et S. L. Chuang, "Theory and experiment of  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$  and  $\text{In}_{1-x-y}\text{Ga}_x\text{Al}_y\text{As}$  long-wavelength strained quantum-well lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 35, no. 5, pp. 771-782, 1999.
- [15] I. Vurgatman et J. R. Meyer, "Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys," *Journal of Applied Physics*, vol. 89, no. 11, pp. 5815-5875, 2001.
- [16] P. M. Enders, "Enhancement and spectral shift of optical gain in semiconductors from non-markovian intraband relaxation," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 33, no. 4, pp. 580-588, 1997.
- [17] D. Ahn, "Theory of non-markovian gain in strained-layer quantum-well lasers with many-body effects," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 34, no. 2, pp. 344-352, 1998.
- [18] M. Yamanishi et Y. Lee, "Phase dampings of optical dipole moments and gain spectra in semiconductor lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 23, no. 4, pp. 367-370, 1997.
- [19] M. Asada, "Intraband relaxation time in quantum-well lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 25, no. 9, pp. 2019-2026, 1999.



- [20] A. I. Kucharsa et D. J. Robbins, "Lifetime broadening in GaAs-AlGaAs quantum well lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 26, no. 3, pp. 443-448, 1990.
- [21] T. M. Ma, Z. M. Li, T. Makino et M. S. Wartak, "Approximate optical formulas for 1.55- $\mu\text{m}$  strained quaternary quantum-well lasers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 31, no. 1, pp. 29-34, 1995.
- [22] W. W. Chow, S. Koch et M. Sargent III, *Semiconductor-Laser Physics*, Berlin : Springer-Verlag, 1994.
- [23] P. A. Chen, C. Juang et C. Y. Chang, "Carrier-induced energy shift in GaAs/AlGaAs multiple quantum well laser diodes," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 29, no. 10, pp. 2607-2618, 1993.
- [24] S. Tarucha, Y. Horikoshi et H. Okamoto, "Optical absorption characteristics of GaAs-AlGaAs multi-quantum-wells heterostructure waveguides," *Japan. J. Appl. Phys.*, vol.22, no. 8, pp. L482-L484, 1983.
- [25] G. P. Agrawal, "Optical Amplifiers", in *Semiconductor Lasers*, New York : Van Nostrand Reinhold, 1993, pp. 487-529.
- [26] K. Morito, "High-output-power polarization-insensitive semiconductor optical amplifier," *IEEE Journal of Lightwave Technology*, vol. 21, no. 1, pp. 176-181, 2003.

- [27] Y. S., Cho et W. Y. Choi, "Analysis and optimization of polarization-insensitive semiconductor optical amplifiers with delta-strained quantum wells," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 37, no. 4, pp. 574-579, 2001.
- [28] T. C. Newell, M. W. Wright, H. Hou et L. F. Lester, "Carrier distribution, spontaneous emission and gain engineering in lasers with nonidentical quantum wells," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 5, no. 3, pp. 620-626, 1999.
- [29] W. W. Chow et S. W. Koch, *Semiconductor-Laser Fundamentals - Physics of the Gain Materials*, Berlin: Springer, 1999.
- [30] G. B. Morrison, S. C. Woodworth, H. Wang et D. T. Cassidy, "Galerkin method for calculating valence-band wavefunction in quantum-well structures using exact envelope theory," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 40, no. 3, pp. 222-229, 2004.
- [31] M. Connelly, "Semiconductor Optical Amplifiers and their Applications", *Universidad Carlos III de Madrid*. [En ligne]. Disponible : [http://www.uc3m.es/uc3m/dpto/IN/dpin08/Semiconductor\\_optical\\_amplifiers.pdf](http://www.uc3m.es/uc3m/dpto/IN/dpin08/Semiconductor_optical_amplifiers.pdf). [Consulté le 3 juin 2003].
- [32] M. J. O'Mahony, "Optical Amplifiers", in *Photonics in Switching*, New York : Academic Press, 1995, pp. 147-167.

- [33] D.R. Zimmerman et L. H. Spiekman, "Amplifiers for the masses : EDFA, EDWA, and SOA amplifiers for metro and access applications," *Journal of Lightwave Technology*, vol. 22, no. 1, pp. 63-70, 2004.
- [34] A. K. Srivastava, "EDFA Transient Response to Channel Loss in WDM Transmission System," *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 9, no. 3, pp. 386-389, 1997.
- [35] J. De Merlier, "All-optical 2R regeneration based on integrated asymmetric Mach-Zender interferometer incorporation MMI-SOA," *Electronic Letters*, vol. 38, no. 2, pp. 238-239, 2002.

## **ANNEXE I**

### **Applications des amplificateurs optiques à semi-conducteurs**

L'amplificateur optique à semi-conducteur (AOS) est un composant très polyvalent qui peut s'employer aussi bien dans l'amplification de signaux que dans le traitement de l'information optique. Nous présentons ici ses principales applications.

#### **I.1 L'AOS pour l'amplification**

Les AOS peuvent être employés comme bloc d'amplification dans les systèmes de communication, où ils jouent le rôle de répéteur non-régénérateur pour compenser les pertes dans les fibres optiques. Ceci évite d'avoir à convertir le signal optique en signal électrique, puis de régénérer le signal optique.

Ils peuvent également être placés devant les récepteurs optiques pour en améliorer la sensibilité. Il faut alors filtrer le bruit introduit par l'AOS et s'assurer d'avoir un bon couplage entre le signal d'entrée et l'AOS. On peut aussi placer l'AOS tout de suite après

le laser qui émet le signal de départ. Ceci réduit le nombre de répéteurs qui doivent être utilisés par la suite.

Les AOS peuvent compenser les pertes de puissance introduites par des composants optiques comme les modulateurs, les multiplexeurs et les séparateurs. Bref, ils peuvent être utilisés partout où il est nécessaire d'amplifier un signal optique.

### **I.1.1 Avantages et inconvénients**

De façon générale, un bon amplificateur optique devra présenter les caractéristiques suivantes :

- Un gain élevé
- Une large bande passante
- Une saturation de la puissance de sortie élevée
- Une faible détérioration du rapport signal sur bruit
- Un temps de réponse rapide
- Une faible sensibilité à la polarisation de la lumière incidente
- Une faible consommation de courant électrique

Le tableau I.1 résume les performances de l'AOS par rapport à l'autre principal type d'amplificateur optique, soit l'amplificateur à fibre dopée à l'erbium (EDFA pour *Erbium Doped Fiber Amplifier*).

Tableau I.1 : Comparaison de la performance des AOS et des amplificateurs à fibre [31].

	<b>AOS</b>	<b>EDFA</b>
<b>Gain</b>	> 25 dB	> 24 dB
<b>Longueurs d'onde</b>	InGaAsP : 1200 – 1650 nm	1525-1565 nm
<b>Bande passante</b>	Pour une composition donnée d'InGaASP : 80 nm	25-40 nm
<b>Déviati on maximale d'un gain plat</b>	< 0.1 dB/nm	< 0.75 dB/nm
<b>Consommation de puissance</b>	< 5 W	< 1 W
<b>Pertes d'insertion</b>	4-6 dB	< 1dB
<b>Temps de vie des porteurs</b>	100 ps	10 ms
<b>Longueur</b>	< 1mm	Plusieurs mètres
<b>Possibilité d'intégration</b>	Oui	Non
<b>Dépendance à la polarisation</b>	Oui	Non

On constate l'intérêt de l'AOS pour les réseaux de télécommunication. Son gain large-bande élevé et plat permet d'amplifier plusieurs canaux simultanément dans les systèmes WDW. Puisqu'il est petit et formé de semi-conducteurs, on peut l'intégrer à d'autres composants sur un même substrat pour former des circuits optiques ou optoélectroniques.

La dynamique de l'AOS est très rapide comparativement aux amplificateurs à fibre. Ceci conduit à la fois à des avantages et des inconvénients. Un avantage est qu'il peut être contrôlé électriquement à des fréquences très rapide (de l'ordre du gigahertz), par exemple pour former des portes logiques (voir section I.2.3). Par contre, sa dynamique rapide fait en sorte que l'AOS provoque de l'interférence inter-symboles s'il est utilisé en régime de saturation. Dans un tel régime, le gain du signal varie en fonction de la puissance d'entrée (le gain décroît avec une augmentation de la puissance d'entrée à cause du phénomène de saturation, voir figure I.1). Dans le cas de l'AOS, cette variation se produit sur une échelle de temps comparable à celle du signal. Ainsi, des bits successifs subiront un gain différent. Dans le cas des amplificateurs à fibre, le temps de repopulation est tellement long que la variation de gain se fait à l'échelle du kilohertz, ce qui n'affecte pas le signal [32].

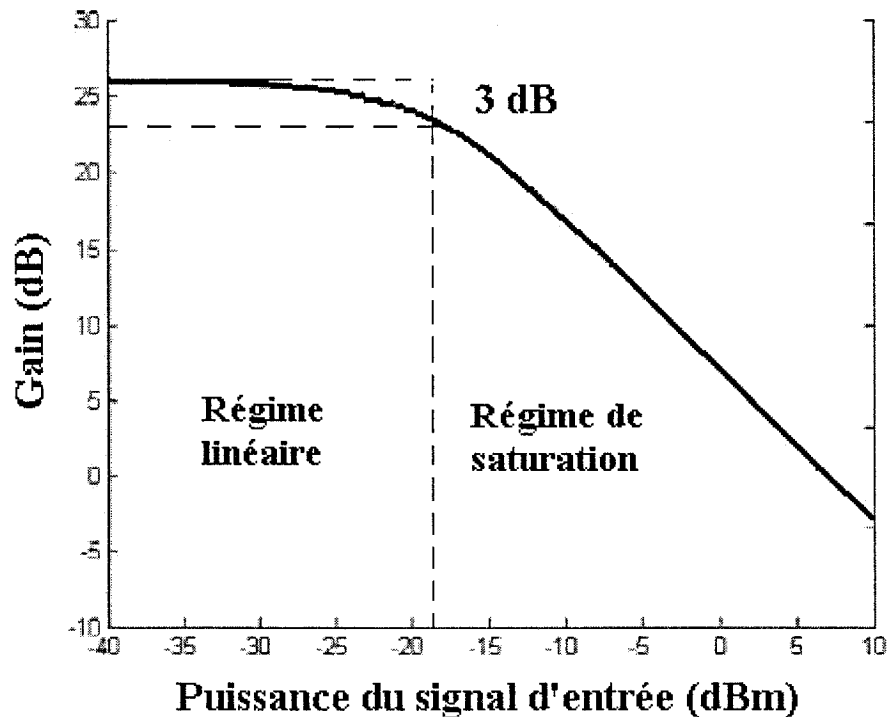


Figure I.1 : Exemple d'une courbe de gain vs signal d'entrée pour un AOS.

Notons par contre qu'un AOS réagira mieux à une modification du nombre de canaux optiques qu'un amplificateur à fibre utilisé en régime de saturation. Une telle modification se produit dans les systèmes WDM avancés, où des canaux optiques peuvent être ajoutés ou retirés. Ceci affecte la puissance moyenne incidente sur l'amplificateur optique. Dans le cas d'un AOS, ce changement de puissance moyenne n'affecte pas le gain puisqu'il est utilisé dans la région linéaire de la courbe gain vs puissance d'entrée. Dans le cas des amplificateurs à fibre utilisés en saturation, ce changement de puissance moyenne peut provoquer des conséquences indésirables. Par exemple, si des canaux sont ajoutés, le gain chute, et la puissance d'un canal peut alors



tomber sous le seuil de sensibilité des détecteurs. Au contraire, retirer des canaux peut faire augmenter la puissance des canaux restant de façon à ce que des effets non-linéaires indésirables apparaissent [33, 34].

Un problème lié aux AOS est la dégradation du ratio signal sur bruit qui provient de l'émission spontanée. Ceci limite le nombre d'AOS qui peuvent être placés en cascade sur une ligne de transmission.

La sensibilité à la polarisation est aussi une caractéristique indésirable qui a été traité à la section 5.2 du mémoire.

## **I.2 Le traitement de signal**

Les AOS sont également d'excellents candidats pour effectuer du traitement optique de l'information. La plupart de ces applications sont basées sur des phénomènes non-linéaires qui se produisent dans les amplificateurs, dont voici les principaux.

### **I.2.1 Phénomènes non-linéaires**

#### *Modulation croisée de gain*

Si on envoie plusieurs signaux de longueurs d'onde différentes dans un AOS, le gain d'un signal donné peut être influencé par un signal à une autre longueur d'onde. Cette

situation est due au fait que le gain matériel d'un AOS est décrit par un élargissement homogène. Dans ce type d'élargissement, la réduction de gain causée par l'arrivée d'un signal monochromatique est uniforme sur toute la courbe de gain plutôt que de s'appliquer localement. On peut par exemple utiliser un signal modulé de haute intensité pour faire varier la densité de porteurs dans l'AOS et ainsi moduler le gain d'un autre canal.

#### *Modulation croisée de phase*

Ce phénomène dérive du fait que l'indice de réfraction d'un AOS varie en fonction de la densité de porteurs, et donc du gain matériel. Puisqu'on joue ici sur la phase du signal, il faudra utiliser l'AOS dans un interféromètre pour convertir les variations de phase en variation d'intensité par interférence constructive ou destructive.

#### *Mélange à quatre ondes*

Dans ce processus, un signal de fréquence angulaire  $\omega_0$  et un autre de fréquence  $\omega_0 - \Omega$  génèrent un signal conjugué de fréquence  $\omega_0 + \Omega$ . Les deux signaux incidents doivent être de même polarisation. On peut exploiter cette non-linéarité pour réaliser des convertisseurs de longueur d'onde, des compensateurs de dispersion et des démultiplexeurs.

## I.2.2 Conversion de longueur d'onde

Dans un système WDM, il peut s'avérer nécessaire de transférer l'information contenue dans une longueur d'onde à une autre longueur d'onde. Ceci ajoute à la flexibilité du réseau et permet d'en augmenter la capacité. Pour réaliser cette opération de façon tout-optique, les trois effets non-linéaires décrits ci-dessus peuvent être mis à profit dans les AOS.

### *Convertisseur à base de modulation croisée de gain*

La figure I.2 illustre la situation où un signal modulé de forte intensité ainsi qu'un signal en continu de faible intensité de longueur d'onde différente sont injectés simultanément dans un AOS. Le signal modulé de haute intensité provoquera une modulation de la densité de porteurs, ce qui se reflètera sur le gain du signal en continu. La modulation est donc transmise au signal en continu, et l'AOS agit comme un convertisseur de longueur d'onde.

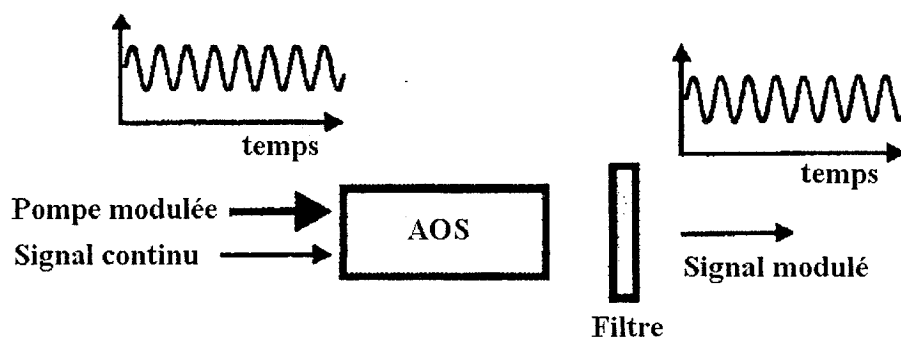
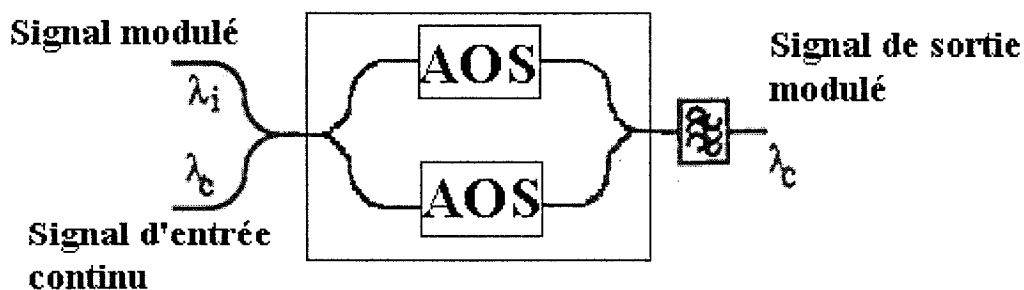


Figure I.2 : Conversion de longueur d'onde à base de modulation croisée de gain.

*Convertisseur à base de modulation croisée de phase*

Dans cette configuration, on veut transmettre la modulation du signal  $\lambda_i$  au signal en continu  $\lambda_c$ . En passant dans les AOS, le signal  $\lambda_i$  fait fluctuer la densité de porteurs, et donc l'indice de réfraction. Ceci provoque des retards de phase dans chaque branche, retards qui varient en fonction de l'intensité du signal  $\lambda_i$ . Un coupleur à la sortie recombine les signaux, qui subissent alors des interférences constructives ou destructives. La modulation de phase est donc convertie en modulation d'intensité grâce au coupleur, et le signal modulé initialement à la longueur d'onde  $\lambda_c$  est transmis à la longueur d'onde  $\lambda_i$ . Notons qu'un seul AOS est en fait nécessaire dans cette configuration, mais qu'on obtient un meilleur gain avec un AOS dans chaque branche. Ce type de conversion est plus efficace que celui basé sur la modulation croisée de gain.



*Figure I.3 : Conversion de longueur d'onde à base de modulation croisée de phase.*

*Convertisseur à base de mélange à quatre ondes*

Un signal de fréquence  $\omega_0 - \Omega$  est mixé à un signal de pompe en continu  $\omega_0$  pour obtenir un nouveau signal modulé de fréquence  $\omega_0 + \Omega$ . Cette façon de faire n'est par contre pas très efficace et les deux signaux incidents doivent avoir la même polarisation.

On peut contourner le problème de la polarisation avec la configuration de la figure I.4. Ici, le signal de pompe est polarisé à  $45^\circ$  par rapport aux axes de polarisation d'un diviseur de polarisation DIV1. Le signal modulé passe aussi par DIV1, si bien que dans chacune des branches on se retrouve avec la moitié de l'intensité du signal de pompe combinée à une composante du signal de même polarisation. À partir de ces deux signaux, chaque AOS génère un signal conjugué selon le principe du mélange à quatre ondes. Chaque signal conjugué aura la même polarisation que les deux parties qui l'ont formé (ils seront donc polarisés orthogonalement). Ils sont ensuite combinés par le diviseur de polarisation DIV2. Si les deux AOS ont le même gain et la même efficacité de conversion, le convertisseur de longueur d'onde ne dépend pas de la polarisation du signal.

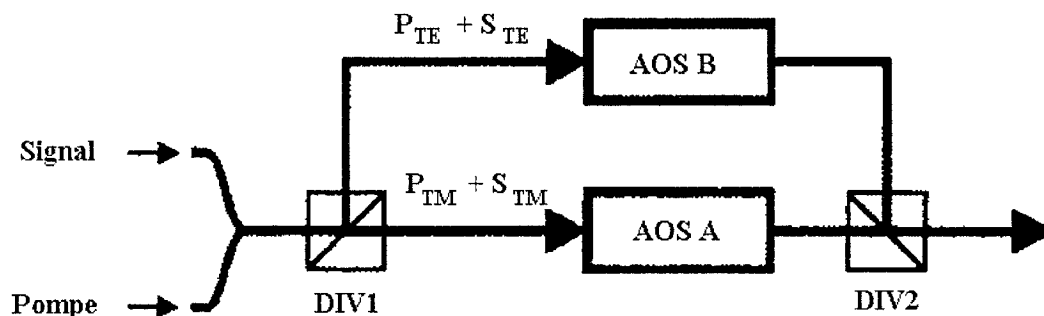


Figure I.4 : Convertisseur de longueur d'onde indépendant de la polarisation basé sur le mélange à quatre ondes.

### I.2.3 Porte optique (optical gate)

Un AOS peut bloquer un signal optique ou le laisser passer selon qu'il est alimenté ou non. En effet, un AOS sans courant d'injection n'est pas en inversion de population et absorbera la lumière incidente. L'AOS peut alors être utilisé comme interrupteur contrôlé électriquement. Lorsque l'AOS est alimenté, il a l'avantage de non seulement laisser passer le signal mais aussi de l'amplifier. Les AOS peuvent être intégrés pour former des matrices d'interrupteurs, comme à la figure I.5. On peut diriger les signaux initiaux dans n'importe quelle sortie en alimentant les AOS appropriés.

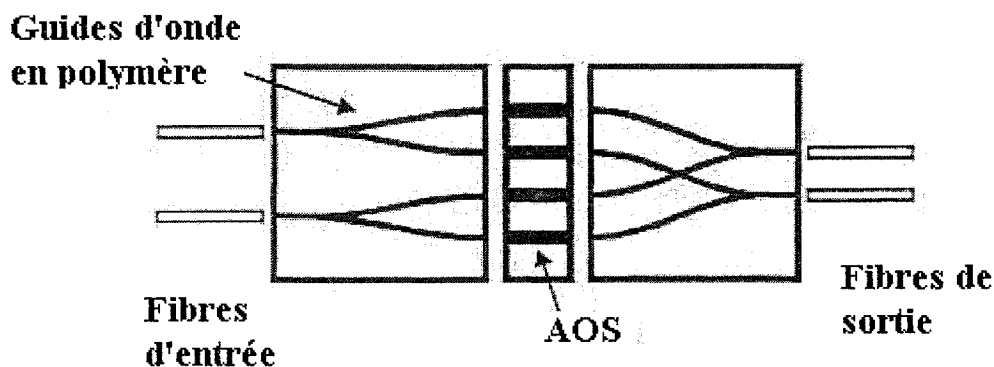


Figure I.5 : Routeur optique à base d'AOS.

Le temps de commutation de l'AOS correspond au temps de vie des porteurs et est de l'ordre de 100 ps. Il est possible de réduire considérablement ce temps de réponse en adoptant l'ingénieuse configuration de la figure I.6.

Un signal incident  $\lambda_2$  est envoyé dans un coupleur 50 :50 pour former le signal 1 dans la branche de gauche et le signal 2 dans la branche de droite. Un AOS est placé dans la boucle, légèrement décalé par rapport centre. Le signal 2 arrive donc à l'AOS avec un retard par rapport au signal 1.

Un signal de commutation  $\lambda_1$  est synchronisé pour envoyer une impulsion après le signal 1, mais avant le signal 2. L'AOS est alors contrôlé optiquement par ce signal de commutation (et non plus électriquement comme c'était le cas à la figure I.5). Cette impulsion de commutation modifie la densité de porteurs de l'AOS et donc son indice de réfraction. Ceci produit un décalage de phase pour le signal 2 qui arrive tout de suite

après (phénomène de saturation croisée de phase). On peut choisir la puissance de l'impulsion de commutation de façon à provoquer un décalage de  $\pi$  sur le signal 2. Les signaux 1 et 2 sont donc en opposition de phase lorsqu'ils se recombinent à la sortie de la boucle.

Un tel composant s'appelle un TOAD (Terahertz Optical Asymmetric Demultiplexer). On peut aussi l'utiliser pour démultiplexer des signaux à débit très rapide.

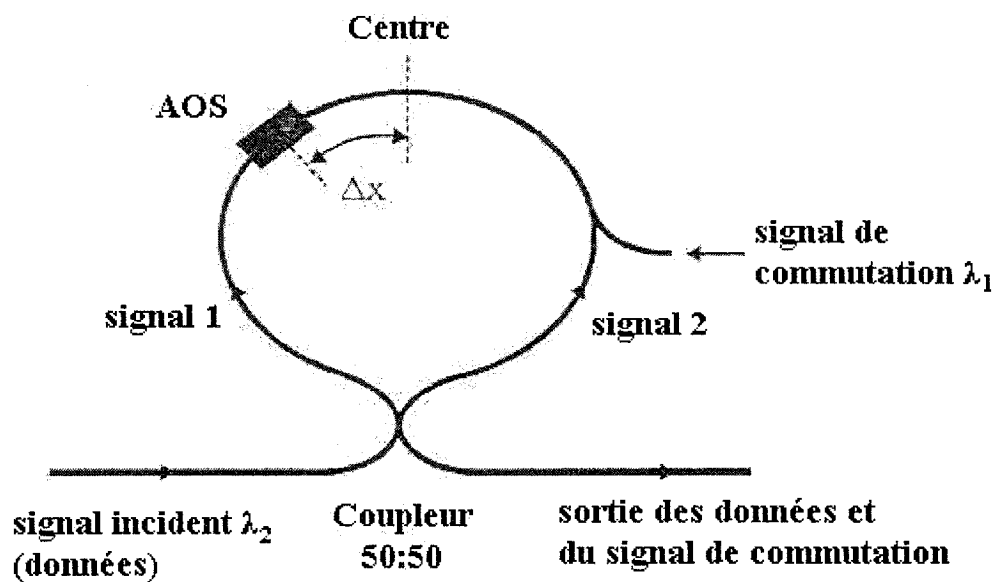


Figure I.6 : Interrupteur optique utilisant un TOAD.



### I.2.4 Démultiplexage

Dans un système WDM, il est nécessaire de faire du réarrangement de canaux à certains nœuds du réseau. On doit pouvoir retirer certaines longueurs d'onde ou en insérer d'autres sans affecter les autres canaux. Pour ce faire, on peut utiliser un composant formé d'un AOS intégré à un réseau de diffraction. Ce dernier agit comme un filtre et ne laisse passer qu'une bande très étroite de longueurs d'onde. Le courant  $I_2$  dans la deuxième partie de l'amplificateur permet de changer l'indice effectif de cette région et et ainsi de déplacer la longueur d'onde du filtre.

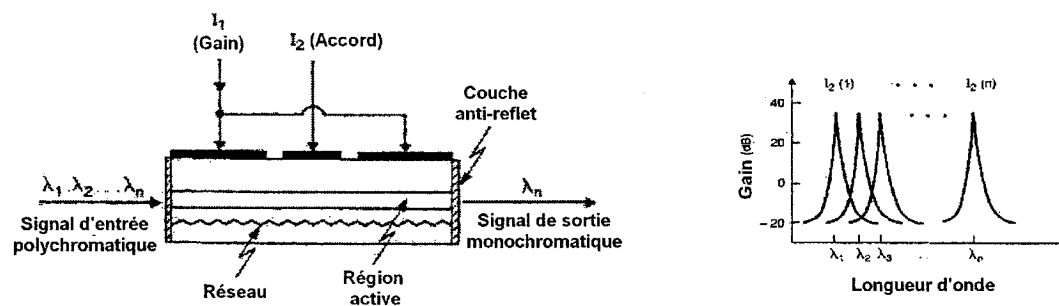


Figure I.7 : AOS à filtre accordable utilisé comme démultiplexeur.

### **I.2.5 Régénération 2R**

Nous avons décrit à la section I.1 comment un AOS pouvait jouer le rôle d'amplificateur non-régénérateur. Or, les signaux subissent des distorsions lorsqu'ils voyagent dans les réseaux. La dispersion des fibres, l'accumulation du bruit des amplificateurs et l'interférence inter-symboles affectent leur forme. Il est donc nécessaire de non seulement les amplifier, mais aussi de les reformer. L'industrie se dirige de plus en plus vers des solutions tout-optiques de régénération 2R (ré-amplifier, reformer). Les AOS promettent de jouer un rôle important dans la régénération 2R. Plusieurs configurations basées sur des interféromètres Mach-Zender contenant des AOS ont été proposées [31, 35].

### **I.2.6 Régénération 3R et réseaux OTDM**

Les services en ligne et les usagers d'Internet augmentent sans cesse, entraînant une demande de bande passante de plus en plus élevée. Pour répondre à cette demande, on envisage aujourd'hui d'implanter des réseaux qui combinent le WDM et le multiplexage dans le domaine temporel (OTDM pour Optical Time Domain Multiplexing). Comme l'illustre la figure 1.8, il s'agit d'imbriquer différents canaux dans le temps, ce qui augmente la densité d'information véhiculée.



Figure I.8 : Principe du multiplexage dans le domaine temporel.

L'implantation de tels réseaux exige la maîtrise de certaines fonctions de traitement de signaux. Par exemple, la récupération d'horloge (optical time recovery) exige de pouvoir évaluer le temps qui sépare deux impulsions très rapprochées. On parle alors de régénération 3R (reamplification, reshaping, retiming). Ces fonctions peuvent être réalisées électroniquement, mais lorsque les débits excèdent 40 Gbits/s il faut se tourner vers des solutions optiques. Les configurations utilisées sont, encore une fois, basées sur des AOS [31].

Les réseaux OTDM amènent aussi une demande pour des démultiplexeurs dans le domaine temporel (OTDDM pour *Optical Time Division Demultiplexers*). Des configurations combinant la régénération 2R et le démultiplexage temporel ont été proposées [31].