HAL
open science

Étude physique des limites en puissance des lasers à cascade quantique

Ezzeddine Ouerghemmi

▶ **To cite this version:**

Ezzeddine Ouerghemmi. Étude physique des limites en puissance des lasers à cascade quantique. Optique [physics.optics]. Ecole Polytechnique X, 2011. Français. NNT : 2011EPXX0072 . pastel-00605931

HAL Id: pastel-00605931

https://pastel.hal.science/pastel-00605931

Submitted on 4 Jul 2011

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

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

THESE

Pour obtenir le grade de :

Docteur de L'Ecole Polytechnique

Présentée et soutenue publiquement par :

Ezzeddine Ouerghemmi

Le 3 mars 2011

Etude physique des limites en puissance des lasers à cascade quantique

Directeur de thèse : M. Julien NAGLE

Jury :

Roland TEISSIER	Rapporteur
Christophe MINOT	Rapporteur
Børge VINTER	Examinateur
Gérald BASTARD	Examinateur
Henri-Jean DROUHIN	Examinateur
Jérôme FAIST	Examinateur
Julien NAGLE	Directeur

REMERCIEMENTS

Le moment est venu de clôturer ces trois années de thèse. Difficile est ce moment qui consiste à les résumer en quelques lignes, d'autant plus que plusieurs lecteurs n'iront pas au delà de ces quelques lignes de remerciements. Plusieurs fois j'ai fait cela moi-même parce que je suis convaincu qu'au-delà de l'apport scientifique, il y a une composante essentielle et majeure dans la réussite de la thèse : c'est l'apport humain.

La règle est de commencer par remercier les membres du Jury. Je vais déroger à cette règle en commençant par remercier Julien Nagle, mon directeur de thèse, qui a voulu me prendre en stage de master et ensuite m'a proposé ce sujet de thèse. Je voudrais le remercier pour les moments que nous avons passé à décortiquer les équations et le programme. Il a su me laisser la liberté nécessaire à l'accomplissement de mes travaux, tout en y gardant un œil critique et avisé. Nos échanges permanents, si fructueux, ont sûrement été la clé de la réussite de ce travail.
Mes remerciements vont aussi à Virginie Trinité qui a su à l'aide de ses recommandations éclairées me guider le long de ces trois années de thèse. Merci à Nathalie Vast du laboratoire des Solides Irradié de l'école polytechnique pour son soutient et ses conseils avisés.

Je remercie aussi l'ensemble de l'équipe QCL de III-V Lab avec qui j'ai pu partager pendant une période le labo et sans l'aide de qui une partie conséquente de ce travail n'aurait pas pu avoir lieu. Je pense tout particulièrement à Bouzid Simozrag dont les qualités tant humaines que professionnelles (c'est bien grâce sa touche magique que les composants de fin de thèse ont finalement vu le jour) en font un collègue hors-pair et à Michel Garcia pour la pertinence de ses conseils.
Je remercie également l'ensemble des personnes avec qui j'ai partagé la vie Thalesienne et qui ont fait que tourner la page des ces trois années de thèse ne soit pas aussi facile. Merci à Fabien pour ces moments de détente et ces discussions aussi intéressantes que fructueuses. Merci à Nathalie, Greg, Vincent, Maël, Charles, Mickael, Anthony, Romain, Mohsine….
Mes remerciements vont aussi à Daniel Dolfi qui a su m'aider avec ses conseils et ses recommandations lors des moments assez difficiles. Merci également à Shailendra Bansropun pour son aide et pour sa bonne humeur lors des matchs de foot du vendredi (allez les Red Devils…).

Ma profonde considération revient ensuite aux membres de mon jury qui ont bien voulu juger ce travail de thèse en particulier à Roland Tessier et Christophe Minot pour avoir accepté de rapporter ce travail ainsi que pour la pertinence de leurs remarques. Je tiens à exprimer également mes remerciements aux autres membres du jury, à savoir Henri-Jean Drouhin le président du jury, Gérald Bastard et Jérôme Faist. Un grand Merci à Børge Vinter pour avoir voulu examiner ce travail mais aussi pour m'avoir fait profiter de son immense connaissance scientifique.

Je remercie également ma famille pour leur soutien permanent : merci à Maman, merci à Papa et merci à mon frère pour leur soutien sans bornes.
Je finirai par un remerciement tout particulier à Nadia mon épouse qui a su me montrer lors de ces trois années de thèse tant d'affection, de patience et de compréhension…les mots me font défaut pour décrire tout ce qu'elle a pu faire pour moi….

Etude physique des limites en puissance des lasers à cascade quantique

Résumé

Cette thèse concerne l'étude théorique et expérimentale des limitations de la puissance de sortie des lasers à cascade quantique (LCQ). Nous y exposons une modélisation globale de leurs propriétés électro-optiques. Le fonctionnement du laser est décrit en incluant la structure électronique, les mécanismes de diffusion responsables des transitions non radiatives des électrons et le couplage électron- photon de la cavité. Ce modèle nous a permis de reproduire avec succès l'ensemble des caractéristiques (courant et puissance optique en fonction de la tension appliquée) d'un LCQ sur un large domaine de température de fonctionnement.

Dans un premier temps, ce modèle a été utilisé pour le calcul de la température électronique dans les LCQ. Il en ressort que la diffusion par des phonons–LO est le seul mécanisme avec lequel le gaz d'électrons peut transférer son énergie vers le réseau. Les mécanismes élastiques de diffusion sont des sources d'énergie pour le gaz d'électrons. Deux paramètres physiques permettent de décrire complètement le comportement de la température électronique dans le composant : la résistance thermique électronique de l'hétérostructure et le coefficient de couplage courant température électronique.

Ensuite, l'étude du couplage des électrons avec les photons de la cavité montre que ce couplage peut modifier notablement la distribution électronique sur les niveaux énergétiques. Le gain de la zone active du laser diminue avec la densité de photons. Cet effet appelé saturation de gain joue un rôle important sur les performances des LCQ.

La minimisation de cet effet peut augmenter la puissance maximale de sortie du laser d'un facteur deux. Cette étude nous a permis de proposer de nouveaux dessins de zone active ayant des performances améliorées. La fabrication de certaines de ces structures a permis de valider l'approche que nous avons suivie pour améliorer les performances de ce type de laser.

Limiting factors for high power and high wallplug efficiency quantum cascade lasers

Abstract

This thesis work is devoted to the theoretical and experimental study of the limiting factors of quantum cascade lasers (QCL) output power. It exposes a global modeling of their electro-optical properties. Laser operation is described in particular by including the electronic structure, non-radiative electron scattering mechanisms and the electron-photon coupling along the laser cavity. This model allowed us to successfully reproduce all the characteristics (current and optical power as a function of the applied voltage) of a QCL over the whole range of operating temperatures.

This model was used to calculate the electron temperature in QCL. It showed that scattering by LO phonons is the only mechanism by which the gas of electron can transfer energy towards the lattice. Elastic scattering mechanisms are sources of energy for the electron gas. Two physical parameters allow to fully describe the electron temperature in the device: the electronic thermal resistance of the heterostructure and the temperature current coupling factor.

Taking into account the electron-photon coupling shows that it may influence the electronic distribution over energy levels. Therefore, the gain of the active zone of the laser is reduced in the presence of this coupling. This effect, called gain saturation, plays an important role on the output performances of QCL.

Minimizing this effect can increase the maximum power output of the laser by a factor of two. This study allowed us to propose new design rules of active regions to improve the QCL output performances. The experimental characterization of some of these structures has validated the approach we have followed towards performances improvement.

Sommaire

SOMMAIRE **7**

INTRODUCTION **11**

CHAPITRE I : ETAT DE L'ART ET PREMIERS ELEMENTS DE MODELISATION **13**

I.A. PRINCIPALES APPLICATIONS DES SOURCES INFRAROUGE 13
I.A.1. Télécommunications *13*
I.A.2. Spectroscopie *14*
I.A.3. Sécurité et Défense *14*
I.B. DIODES LASER DANS L'INFRAROUGE 14
I.B. DIODES LASERS DANS L'INFRAROUGE 15
I.C. LASERS A CASCADE QUANTIQUE 16
I.C.1. PRINCIPE DE FONCTIONNEMENT ET ETAT DE L'ART 17
I.C.2. Modèle simple à trois niveaux et règles de dessins usuelles *21*
I.D. MODELE COMPLET DU LCQ POUR LA SIMULATION DU TRANSPORT 27
I.D.1. Modèle à trois bandes *27*
I.D.2. Effet des contraintes *29*
I.D.3. Paramètres matériaux utilisés *33*
I.E. DIFFERENTS MODELES DE TRANSPORT DANS LES LCQ 33
I.E.1. Transport en mini-bande *35*
I.E.2. Saut d'électron entre états de Wannier-Stark *36*
I.E.3. Effet tunnel séquentiel *44*
I.F. CALCUL DES TEMPS DE TRANSITION ET DIFFERENTS MECANISMES DE DIFFUSION 47
I.F.1. Emission et absorption des phonons *48*
I.F.1.a. Phonon LO 48
I.F.1.b. Phonon LA 50
I.F.2. Désordre d'alliage *51*
I.F.3. Diffusion par la rugosité d'interface *52*
I.F.4. Diffusion par les impuretés *53*
I.F.5. Schrödinger-Poisson *54*
I.G. CONCLUSION 56
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES 57

CHAPITRE II : TEMPERATURE ELECTRONIQUE DANS LES LASERS A CASCADE QUANTIQUE **61**

II.A. APPROCHE MACROSCOPIQUE DU PROBLEME 61
II.B. APPROCHE MICROSCOPIQUE DU PROBLEME 63
II.B.1. Bilan énergétique *64*
II.B.1.a. Limite basses températures électroniques 68
II.B.1.b. Limite hautes températures électroniques 69
II.B.2. Calcul de la température électronique dans les hétérostructures complexes *71*
II.B.2.a. Hypothèses 71
II.B.2.b. Equations bilans discrétisées 72

II.B.3. Effet des mécanismes de diffusion des électrons *75*
II.B.3.a. Apport énergétique par mécanisme 77
1. Phonons 77
2. Mécanismes élastiques 77
II.B.3.b. Application au calcul de la température électronique 80
II.B.4. Comparaison expérience-calcul *82*
II.B.5. Comparaison InGaAs-AlGaAs *84*
II.B.6. Influence de la longueur d'onde et de la discontinuité de bande sur la température électronique *85*
II.B.6.a. Effet de la longueur d'onde (GaInAs/InAlAs) 85
II.B.6.b. Cas du GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ 87
II.B.7. Effet de la densité de dopage *88*
II.C. CONCLUSION 90
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES 91

CHAPITRE III : PROPRIETES OPTIQUES DES LASERS A CASCADE QUANTIQUE 93

III.A. CALCUL DES PROPRIETES OPTIQUES LINEAIRES DES LCQ 93
III.A.1. Temps de vie stimulé : *94*
III.A.2. Absorption et gain linéaire *96*
III.A.2.a. Règles de sélection 97
III.A.2.b. Absorption linéaire 98
1. Force d'oscillateur et règle de somme 99
2. Quel type d'élargissement pour le gain linéaire ? 100
3. Calcul de la taille de l'élargissement 101
4. Elargissement apparent du gain 105
5. Effet de la température 108
6. Discussion 109
III.B. GUIDE D'ONDE DANS L'INFRAROUGE 109
III.B.1. Facteur de recouvrement du guide *111*
III.B.2. Pertes optiques du guide *114*
III.B.2.a. Effets intrinsèques : Pertes par porteurs libres 114
III.B.2.b. Pertes extrinsèques 114
III.B.3. Equation bilan porteurs-photons *115*
III.B.3.a. Photo-courant 118
1. Photocourant du laser sans tension appliquée 118
2. Effet de la présence de photons sur le courant de la structure 121
III.B.3.b. Saturation de gain 122
1. Effet de l'échauffement des porteurs 124
2. Détermination d'une expression approchée du facteur de compression du gain dans les LCQ 125
III.C. APPLICATION AU CALCUL DE LA PUISSANCE OPTIQUE DANS LES LCQ 129
III.D. EFFET DE LA SATURATION DU GAIN 134
III.E. CONCLUSION 135
REFERENCES BILBLIOGRAPHIQUES 136

CHAPITRE IV : OPTIMISATION DES LASERS A CASCADE QUANTIQUE 139

IV.A. POURQUOI LES DESSINS INJECTEUR COURT 139
IV.B. LASER EMETTANT DANS LA BANDE III 140
IV.B.1. Optimisation de la région active *144*

IV.B.1.a. Optimisation en saturation de gain 144
IV.B.1.b. Etude théorique du guide d'onde 148
IV.B.2. Résultats expérimentaux et comparaison avec le calcul :..... 151
IV.B.2.a. Réalisation pratique et étapes technologiques..... 151
IV.B.2.b. Résultats expérimentaux 153
1. Effet de la taille transverse du ruban 153
2. Effet du rapport cyclique..... 157
IV.B.2.c. Comparaison calcul expérience..... 160
IV.B.3. Discussion et voie d'amélioration..... 164
IV.C. LASER EMETTANT DANS LA BANDE II 165
IV.C.1. Structure émettant à 5 µm 165
IV.C.1.a. Description du dessin 165
IV.C.1.b. Comparaison modèle expérience 166
IV.C.1.c. Optimisation de la structure 169
IV.C.2. Dessin de la structure émettant à 4µm..... 173
IV.D. CONCLUSION 176
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES..... 177

CONCLUSION..... 179

ANNEXE : COMPLEMENT DE MODELISATION..... 181

A. PARAMETRISATION EMPIRIQUE DES COURBES P(I) 181
B. FIT EMPIRIQUE DES DEPENDANCES EN TEMPERATURE D'UN LASER A 11 µM 183
C. FIT EMPIRIQUE DES DEPENDANCES EN TEMPERATURE D'UN LASER A 8 µM 188
D. EXTRAPOLATION DES PUISSANCES CW POUR UN EMETTEUR UNIQUE : APPLICATION AU CAS DES LASERS QCL EN BANDE III 192
E. EXTRAPOLATION AU FONCTIONNEMENT CW DE BARRETTES MULTI-EMETTEURS EN BANDE III 197
F. CONCLUSION 198

Introduction

Les lasers à cascade quantique sont une source de lumière cohérente exploitant l'effet tunnel résonant et les transitions optiques entre états quantifiés de la bande de conduction. Ils sont une illustration des nouveaux systèmes physiques dont la fabrication est devenue possible grâce au développement technologique. Ces lasers ont été imaginés par deux chercheurs russes (R.F.Kazarinov et R.A.Suris) dans les années 70 dans un travail qui est resté au stade de l'étude théorique jusqu'aux années 1990. À cette date, le premier laser de ce type a vu le jour dans les laboratoires Bell-Labs.
Dans ces dispositifs semi-conducteurs, les principes de fonctionnement sont basés sur deux caractéristiques essentielles. Le premier principe est l'unipolarité, les transitions optiques ont lieu entre sous-bandes de la même bande de départ grâce à l'ingénierie quantique des niveaux d'énergie électroniques et de la mise en forme de leurs fonctions d'onde. La longueur d'onde d'émission du laser n'est alors plus fixée par l'énergie du gap du matériau semi-conducteur utilisé, mais en choisissant judicieusement l'épaisseur des matériaux constituant l'hétérostructure. L'autre principe est le fait que les électrons sont recyclés d'une période à une autre contribuant ainsi au gain et à l'émission de photons à plusieurs reprises.
Les performances de ces composants ont rapidement progressé ces dernières années et cette technologie représente désormais une solution de choix pour la fabrication de lasers dans le moyen et le lointain infrarouge, jusqu'au domaine du THz. Aujourd'hui, les meilleurs lasers à cascade quantique peuvent fonctionner à température ambiante. Cependant le mode de fonctionnement CW à température ambiante n'est généralement pas accessible avec ces composants. L'objectif de fonctionnement CW motive de nombreux travaux des équipes de recherche dans le domaine.

Les travaux menés au cours de cette thèse s'inscrivent dans ce contexte et sont centrés sur la compréhension des facteurs physiques limitant le rendement de conversion électrique-optique et la puissance maximale accessible.

Ce manuscrit est divisé en trois grandes parties.

Dans la première partie, nous présentons une description des lasers à cascade quantiques. Ces lasers ont des champs d'applications diverses. Cette première partie présente les principaux domaines d'utilisation de ce type de lasers. Nous mettons l'accent en particulier, sur les différents types de zone active que nous trouvons dans la littérature ainsi que sur les performances obtenues pour de tels composants en termes de puissance de sortie. Un premier modèle simple est ensuite présenté. Il nous permet d'avoir un outil simple de compréhension du fonctionnement du laser et de décrire qualitativement les voies d'améliorations des dessins de zones actives. Les différents modèles de description du transport dans les lasers à cascade quantique sont présentés. Les éléments du modèle retenu sont décrits.

La connaissance de la distribution énergétique des électrons dans les bandes est une étape importante du processus de modélisation des composants électroniques. Suite à l'application d'un champ électrique à la structure, les électrons voient leurs énergies augmenter. Ce qui influe sur la distribution énergétique des électrons dans les sous-bandes. Nous nous intéressons dans le second volet de cette thèse, à la détermination de la température électronique dans ces composants. Cette étude nous a permis de déterminer les mécanismes de relaxation en énergie des électrons. Elle a mis en lumière le lien entre la puissance

électrique dissipée à l'intérieur du composant et la température des porteurs à l'intérieur des sous bandes de la structure. Un modèle minimal qui reproduit les dépendances expérimentales de la température électronique et qui sera utile en termes de temps de calcul est enfin proposé.

Au delà de cette étude électronique, nous abordons dans le troisième volet de cette thèse la description de ces composants d'un point de vue optique. Nous y décrivons en particulier le gain optique de la structure ainsi que le guide optique important dans le fonctionnement du laser. Cette étude montre que le couplage entre les électrons sur les états dans la structure et le champ électromagnétique influence le fonctionnement de ces composants par le biais d'une modification de la distribution électronique entre les différents niveaux énergétiques. Le gain de la zone active du laser va diminuer en présence de ce couplage. Cet effet appelé saturation de gain joue un rôle important sur les performances des LCQ. Ce modèle a été utilisé pour expliquer les spectres de photocourant des structures lasers.

A l'issue de cette dernière phase, une figure de mérite, dont la minimisation peut augmenter la puissance maximale de sortie du laser d'un facteur deux, a été extraite. Le dernier volet de cette thèse est dédié à l'optimisation des structures des lasers à cascade quantique en termes de puissance de sortie et de rendement à la prise en se basant sur cette figure de mérite. Cette partie de l'étude porte sur plusieurs axes : expérimental, théorique, et technologique. De nouvelles structures qui montrent le rôle décisif de la saturation du gain dans l'augmentation des puissances maximales ont été dessinées, fabriquées et caractérisées expérimentalement. La prise en compte réaliste de l'évolution de la température électronique est essentielle ici pour réussir à simuler les dépendances exactes. Ce point a été vérifié et le modèle développé reproduit avec une grande précision, sans avoir à introduire de paramètres ajustables, la dépendance avec la température des différents paramètres électro-optiques.

Chapitre I : Etat de l'art et premiers éléments de modélisation

Les lasers à CO_2 sont aujourd'hui les seuls lasers de forte puissance moyenne disponibles dans la bande III de l'infrarouge (longueur d'onde entre 8 et 12 µm). Il s'agit d'une technologie mature qui a connu un développement important pour les applications industrielles. De fait, on trouve aujourd'hui des lasers industriels à tube scellé dans la gamme 1W – 1 kW pouvant fonctionner plusieurs milliers d'heures sans recharge de gaz. Ces lasers compacts et efficaces ont des caractéristiques compatibles avec celles demandées pour les applications industrielles.
Dépasser les performances du laser CO_2 en rendement et volume suppose l'utilisation d'un milieu solide dense avec une seule conversion électrique-optique, et c'est ce que permettent les lasers à semiconducteurs. Le développement de ce type de laser dans le proche infrarouge montre le potentiel de cette technologie : compacité record, rendement électrique-optique supérieur à 50 %, et faible coût de production. La puissance pour un émetteur unique mono mode dépasse 10 W et il devient possible de combiner plusieurs émetteurs pour atteindre plusieurs centaines de Watts.

I.A. Principales applications des sources Infrarouge

I.A.1. Télécommunications

La télécommunication en espace libre est une application émergente des sources dans le moyen infrarouge. En effet, comme le montre la figure.I.1, l'atmosphère a trois fenêtres de transmission principale : Bande I, Bande II, et Bande III, dans lesquelles la transmission de l'information peut être faite sans distorsion (faible diffusion Rayleigh et faible perturbation atmosphérique).

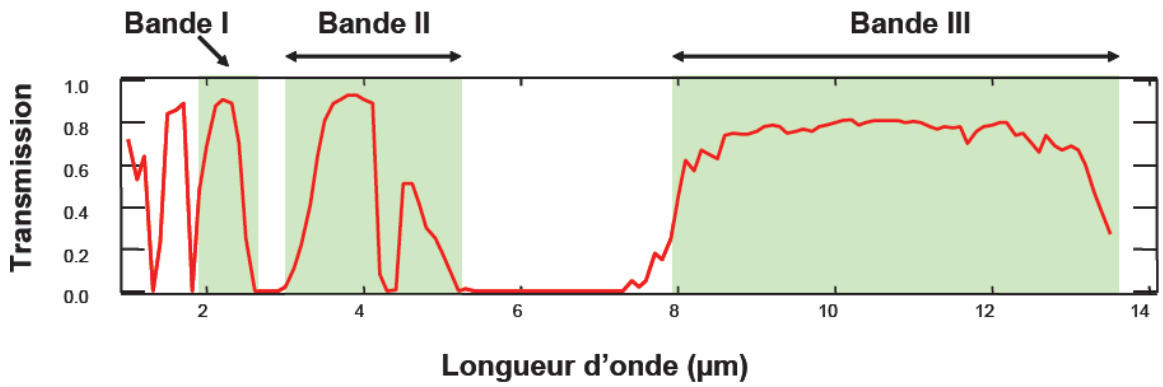


Fig. I .1: Diagramme de transmission typique de l'atmosphère sur une distance de transmission de 1 km. L'information peut être transmise sans distorsion dans les fenêtres de transmission indiquées par Bande I, Bande II, Bande III

Le principal intérêt d'une telle application consiste à proposer une solution pour aider le domaine des télécommunications à répondre à une demande croissante de transmission de données en ouvrant de nouveaux canaux de transmission de l'information.

I.A.2. Spectroscopie

Beaucoup d'applications des sources dans l'infrarouge reposent sur la spectroscopie d'absorption de molécules de gaz. En effet comme le montre la figure.I.2 tirée de la référence [1], les signatures moléculaires de la plupart des molécules qu'on cherche à détecter se trouvent dans le moyen infrarouge. Dans le proche infrarouge, les raies d'absorption des différentes molécules sont des harmoniques de celles fondamentales présentes dans le moyen infrarouge. Donc les amplitudes des raies d'absorption dans la bande II et III sont beaucoup plus grandes et sont ainsi plus simplement exploitables que celles dans la bande I. Les systèmes de spectroscopie avec des sources dans l'infrarouge auront donc des sensibilités très élevées (quelques parties par milliard), et la détection des molécules précurseurs d'explosifs et des drogues devient plus efficace. Ces applications intéressent par exemple les services de sécurité dans les aéroports.

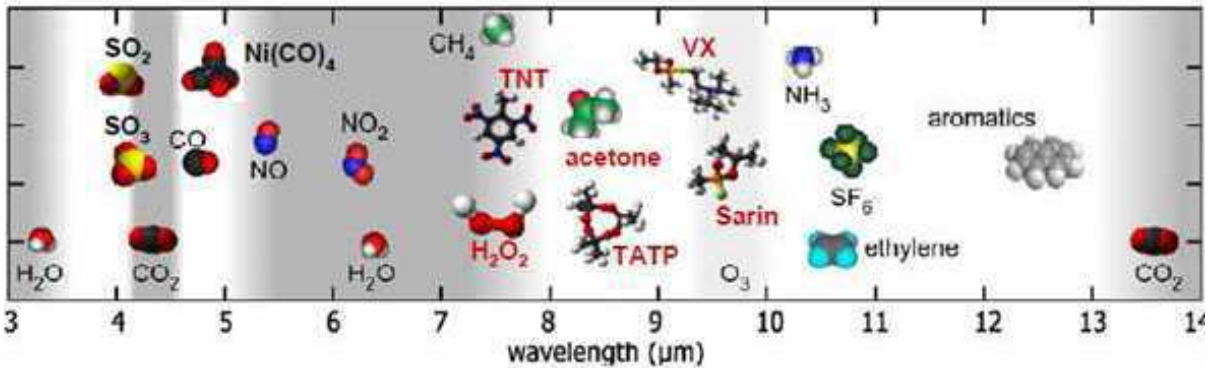


Fig. I .2: Spectre représentant les raies d'absorption de plusieurs molécules : polluants, explosifs…tirée de la référence [**1**]

I.A.3. Sécurité et Défense

Les contre mesures optiques représentent la deuxième grande application des sources dans l'infrarouge. En effet, les détecteurs dans le moyen infrarouge sont très répandus dans le domaine militaire. Une source efficace dans le moyen infrarouge peut alors servir pour aveugler le détecteur et créer une diversion. Dans la figure.I.3, nous avons donné un exemple de ce type d'application. Il s'agit d'aveugler un missile équipé de détecteur infrarouge lui permettant de détecter la source de chaleur que représente le réacteur de l'avion. L'utilisation d'un laser dans la bande adaptée va permettre de brouiller le détecteur.

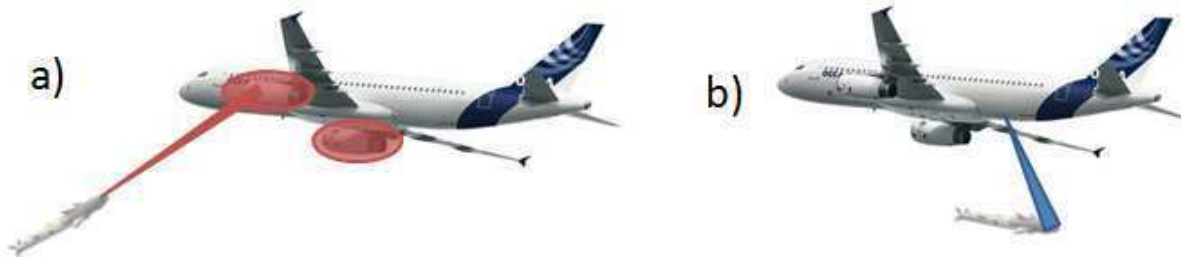


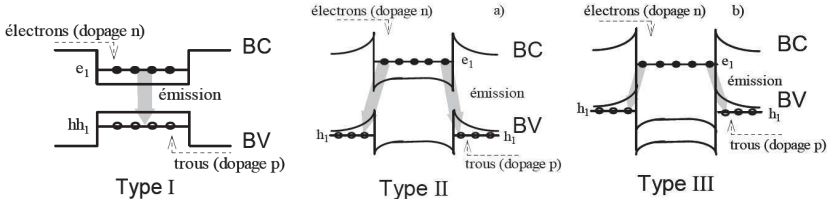
Fig.I.3: Schéma de principe de la contre mesure. a : le missile détecte un point chaud dans l'avion, b : le missile est dévié de la cible

I.B. Diodes lasers dans l'infrarouge

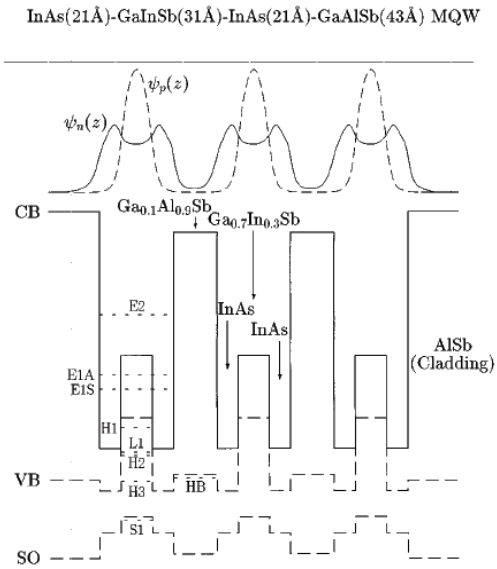
Depuis la démonstration dans les années 1970 des lasers semiconducteurs basés sur des doubles hétérostructures ou sur un puits quantique, les recherches pour avoir des sources lasers émettant dans des longueurs d'onde plus grandes que celles obtenues jusque là n'ont pas abouti à des sources efficaces qui fonctionnent en mode continu (CW) à température ambiante.

Les premiers lasers semi-conducteurs dans l'infrarouge étaient des lasers bipolaires qui font intervenir une recombinaison entre un électron de la bande de conduction et un trou de la bande de valence. La longueur d'onde d'émission du laser est fixée dans ce cas par l'énergie du gap du matériau utilisé. Ainsi, des matériaux à faible énergie de gap, comme ceux contenant de l'antimoine (Sb) ou du InAs épitaxié sur GaSb ou InAs, ont été utilisés. Pour ce faire, la bande de valence et de conduction peuvent être alignées de différentes manières. Les premières diodes lasers étaient basées sur un schéma d'alignement de bande de type I (voir figure.I.4). Leur principale limitation vient du fort courant seuil qui empêche le fonctionnement en mode continu. Ceci est dû au grand taux de recombinaison non radiative par le mécanisme d'Auger. La probabilité de ce mécanisme augmente en augmentant le dopage ou la température et avec l'utilisation de semi-conducteurs à petit gap nécessaire pour l'émission infrarouge [2].

Une solution à ce problème est d'utiliser un alignement de bande en type II ou III (voir figure.I.4.a) que permettent d'obtenir les matériaux contenant l'antimoine. Cependant, on est face à un problème d'un autre genre qui est la faible efficacité de la transition radiative. En effet dans ce cas, les électrons localisés dans le matériau puits et les trous localisés dans le matériau barrière sont spatialement séparés. Donc le recouvrement entre les fonctions d'ondes des porteurs n'est pas bon. Pour remédier à cet inconvénient, les super-réseaux ont été proposés pour augmenter l'efficacité de la transition optique en augmentant le recouvrement entre les fonctions d'onde des trous et électrons. Cependant, dans ce cas le courant seuil du laser est plus grand comparé à celui des lasers basés sur un seul puits quantique [3, 4]. Une autre solution possible est les zones actives dites en « W » comme l'indique la figure.I.4.b. La zone active de ce laser est basée sur InAs/GaInSb/InAs : deux puits de InAs pour les électrons entourés par deux barrières de GaInSb le tout déposé par épitaxie sur InAs. Cet agencement de couches donne à la bande de conduction et de valence une forme de « W » et rend la transition optique verticale dans l'espace réel. Le recouvrement entre les électrons et les trous augmente donc comme le montre la figure.I.4.b [5]. En jouant sur les épaisseurs des couches des matériaux utilisés, les recombinaisons par mécanisme Auger peuvent être minimisées. Ce dessin présente aujourd'hui les meilleures caractéristiques des lasers interbandes émettant dans l'infrarouge avec une température caractéristique de T_0 = 40 K, une puissance maximale de P = 500 mW à T = 78 K et une température maximale de fonctionnement en régime continu de T_{max} = 218 K [6].



a. Différents types d'alignement de bande



b. Structure de bande de multipuits quantiques InAs/GaInSb/InAs à géométrie W [6]. Au dessus on voit les densités de probabilité de présence des électrons (en trait plein) et des trous (en pointillé)

Fig.I.4: Différents types d'alignement de bande et structure d'une région active en géométrie W d'un laser émettant dans le moyen infrarouge

I.C. Lasers à cascade quantique

En 1971, deux chercheurs russes : R.F.Kazarinov et R.A.Suris ont proposé un modèle théorique pour observer l'amplification de la lumière infrarouge dans les super-réseaux de semi-conducteur [7]. Ils imaginèrent alors une structure périodique dans laquelle, suite à l'application d'un champ électrique, peut avoir lieu une inversion de population entre deux états localisés dans deux puits adjacents séparés par une barrière tunnel de la structure. L'interaction entre ces deux états peut être modifiée en changeant seulement l'épaisseur de la barrière qui sépare les deux puits.

Cependant, les sources lasers émettant en infrarouge sont restées pendant plusieurs années basées sur les transitions interbandes pour deux raisons essentielles. La première est le fait que le modèle de R.F.Kazarinov et R.A.Suris était très difficile à obtenir expérimentalement par suite de formation de domaines électriques instables [8]. Le champ électrique n'étant pas homogène sur toute la structure, l'inversion de population aura lieu dans un point instable de la courbe courant-tension. La deuxième est la difficulté théorique d'inverser la population entre sous bandes dès que la différence d'énergie de la transition dépasse celle d'un phonon longitudinal optique. Dans ce cas le temps de transition par émission de phonon LO est

beaucoup plus court que celui de l'émission spontanée. Le niveau haut se dépeuple par une transition non radiative.
C'est grâce à l'amélioration considérable dans les méthodes de dépôt des couches de matériaux (par MBE (Molecular Beam Epitaxy) [9] et plus récemment MOCVD (Molecular Organic Chemical Vapor Deposition) [10]) que les lasers à cascade quantique ont pu être réalisés pour la première fois aux AT&T Bell Labs au cours de l'année 1994 [9]. Ces progrès ont, en effet, rendu possible une ingénierie de bande très précise à l'échelle atomique et ont permis d'observer des phénomènes quantiques et de modifier les propriétés optiques et celles du transport électronique dans le composant de manière unique.

I.C.1. Principe de fonctionnement et état de l'art

Comparés aux lasers semiconducteurs classiques, les lasers à cascades quantiques possèdent deux caractéristiques essentielles comme le montre la figure.I.5.

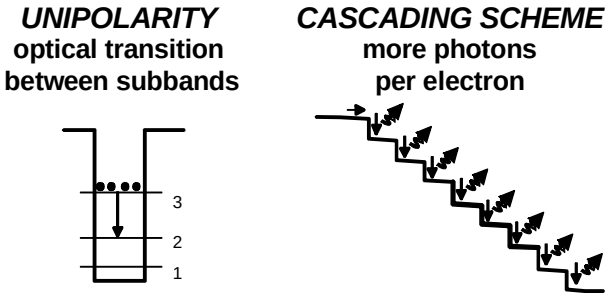


Fig.I.5: Représentation schématique des deux propriétés qui font la spécificité des lasers à cascade quantique : l'unipolarité et le schéma en cascade. On notera aussi que des transitions inter-sous-bandes entre trou dans la bande de valence sont possibles en utilisant le matériau SiGe comme puit quantique et le silicium comme barrière [42]

Ils mettent en contribution un seul type de porteur, les électrons : c'est ce qu'on appelle un laser unipolaire. Grâce à un schéma en cascade, l'électron peut émettre plusieurs photons lors de son passage dans le milieu laser. Les propriétés physiques du LCQ dépendent des caractéristiques structurales (épaisseur, concentration) de l'empilement périodique formant l'hétérostructure. Le dessin et le contrôle de l'empilement de couches d'épaisseur très fines (quelques nm) permettent d'obtenir les propriétés électro-optiques désirées. Il faut que le laser présente une courbe courant-tension stable et en même temps il faut que l'ingénierie de bande permette une inversion de population et un large gain dans la structure.
La figure.I.6 est une représentation schématique du profil de la bande de conduction dans la direction de la croissance de deux périodes d'un LCQ. On remarque, que pour répondre aux exigences citées au-dessus, le dessin d'un LCQ consiste en un ensemble périodique de région active plus complexe que ce qui a été proposé au départ par R.F.Kazarinov et R.A.Suris. En effet chaque période de la structure d'un laser à cascade quantique est constituée d'un agencement complexe de couches de matériaux. Deux sous-parties, ayant des rôles différents dans le fonctionnement du composant, peuvent ainsi être distinguées.

1. La zone appelée injecteur joue un rôle important dans le transport électronique de ces lasers en connectant les périodes entre elles. En effet, c'est dans cette partie que l'électron va acquérir l'énergie nécessaire pour qu'il soit transféré à la période suivante de manière efficace sans qu'il soit perdu dans le continuum. Une partie de

l'injecteur est aussi dopée n pour constituer un réservoir d'électrons. Ceci empêche la formation des domaines de champ électrique qui peuvent altérer le fonctionnement du composant [11, 12]. Deux types d'injecteur sont généralement utilisés dans les dessins de régions actives. Historiquement, les premiers LCQ avaient un injecteur en super-réseau. Les états électroniques forment une minibande dans laquelle les électrons vont perdre progressivement l'énergie en excès acquise lorsqu'ils traversent la structure jusqu'à être injecté sur le niveau haut du laser de la période suivante [13]. L'autre type d'injecteurs utilisés est l'injecteur court à un ou à deux puits. Les injecteurs courts présentent un défaut en tension[1] beaucoup plus faible que dans le cas de la minibande [14]. L'idée principale commune entre les deux cas reste d'avoir les états électroniques de l'injecteur délocalisés sur plusieurs puits permettant ainsi d'avoir un transport efficace.

2. La deuxième zone de la période est la partie où la transition radiative a lieu et est appelée aussi la région du gain. Là aussi plusieurs dessins sont proposés. On pourra citer le dessin en « trois-puits » ou la transition optique est légèrement diagonale dans l'espace réel (voir figure.I.6).

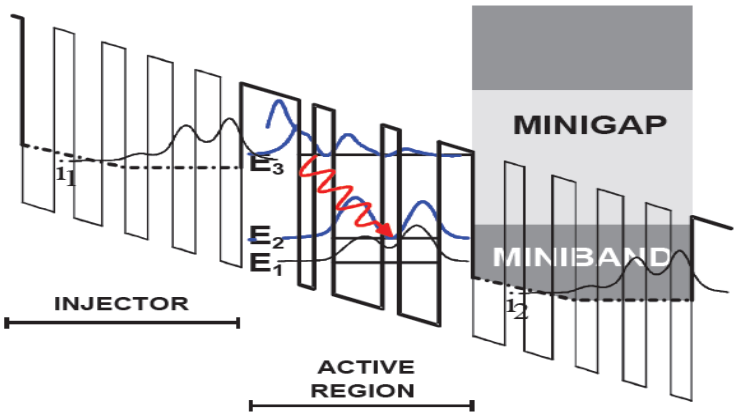


Fig.I.6: Dessin d'un laser à cascade quantique : deux sous régions sont visibles : la région injecteur et la région active ou la région de gain

Dans ce cas, l'état bas du laser est mis en résonance phonon avec un autre état pour permettre une bonne extraction des électrons de cet état. C'est ce qui est représenté dans la figures.I. 6 et I.7. Un autre dessin légèrement différent est celui qu'on appelle « dessin à double phonon » (voir figure.I.7). Cette fois-ci on utilise quatre puits au lieu de trois pour augmenter l'efficacité de vidage de l'état bas du laser qui se fait par une double résonance phonon vers un état énergétiquement plus bas. Il y aussi la région active en super-réseau comme le montre la figure.I.8. Dans ce cas étant donné que l'état bas du laser n'est qu'un état parmi plusieurs de la minibande, son temps de vie est très court. La diffusion des électrons des autres états de la minibande vers cet état devient donc improbable. La transition radiative se fait entre minibandes. L'inversion de population est garantie par un temps de transition interminibande plus grand que celui intraminibande. Le nombre de périodes utilisées varie généralement autour d'une dizaine pour les LCQ basés sur des régions actives en super-réseau et de 30 à 80 dans

[1] Le défaut de tension dans le LCQ correspond à la tension qu'on doit appliquer à la structure pour aligner l'état le plus bas de l'injecteur et l'état haut du laser.

les autres dessins. On reviendra sur ces dessins dans le paragraphe suivant où l'on aura l'occasion de les comparer en détail.

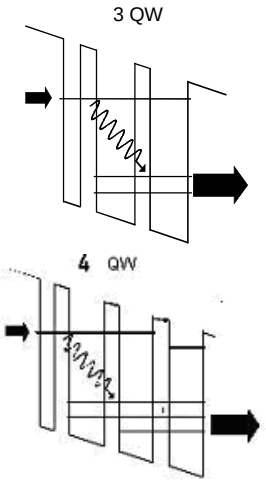


Fig.I.7: Représentation schématique d'une région active à trois puits quantiques (haut) et à 4 puits quantiques (bas)

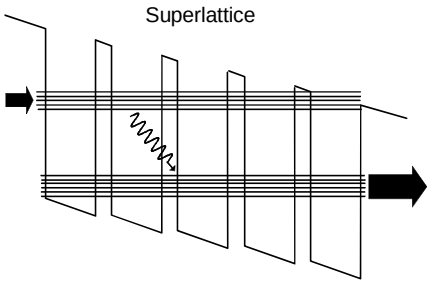


Fig.I.8: Représentation schématique d'une région active en super-réseau

La figure.I.9 montre l'évolution au cours des années des meilleurs rendements différentiels obtenus pour des LCQ qui émettent dans la bande III (8-12 µm). On constate que depuis leur invention, les caractéristiques de ce type de lasers ont connu des améliorations continuelles. Actuellement, les LCQ sont les seules sources semi-conductrices émettant dans l'infrarouge fonctionnant à température ambiante, rendant cette technologie semiconductrice attractive pour la réalisation de lasers infrarouges sur une plage de longueur d'onde très importante (3,5-160 µm). Les meilleures performances sont obtenues pour des longueurs d'onde comprises entre 4 et 12 µm. Les performances à l'état de l'art (puissance moyenne, puissance pic, température de fonctionnement) en fonction du système de matériaux et de la longueur d'émission sont indiquées dans le tableau I.1 ci-dessous. On peut constater qu'il est cette fois question de plusieurs centaines de mW à température ambiante, sans commune mesure avec la technologie IV-VI.

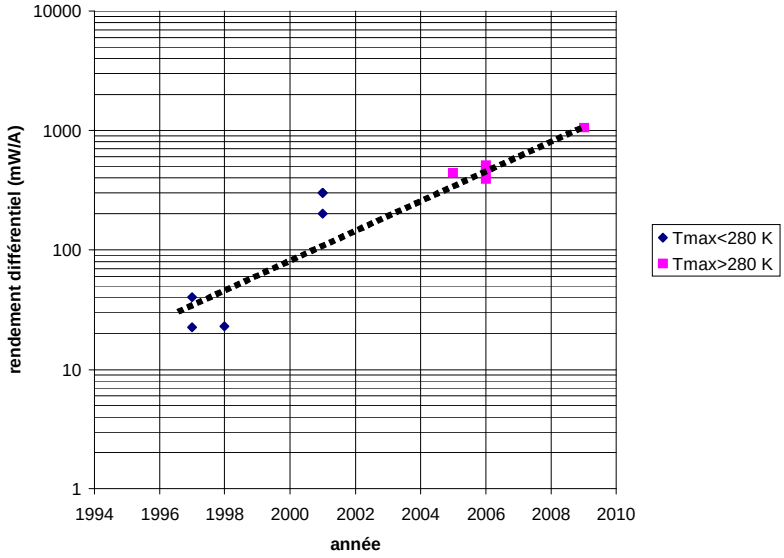


Fig.I.9 : Représentation de l'amélioration du rendement différentiel des LCQs en fonction de temps (cas particulier des lasers émettant dans la bande III). Les points en rose représentent les lasers qui ont une température de fonctionnement supérieure à 280 K les points en noir sont ceux qui ont une température plus faible que 280 K

Universities/companies	Material system	Wavelength	Average Power or CW	Peak Power
THALES R&T/Neuchâtel [15]	Lattice-matched GaInAs/AlInAs//InP (Bande III)	9 µm	0,18 W à 290 K	1 W à 290 K
Alpes laser (www.alpeslasers.ch)		7-10 µm	10 mW à 300 K	0,5 W à 300 K
Uni of Sheffield (MOCVD) [16]		9 µm	-	0,5 W à 280 K
Northwestern [17]		9,6 µm	0,10 W à 300 K	1 W à 300 K
Harvard/Agilent (HR) [66]		8,25 µm	0,20 W à 300 K	
III-V Lab		7,9 µm	-	0,5 W à 300 K
III-V Lab		8,3 µm	-	1,0 W à 300 K
III-V Lab [15]		9,5 µm	-	1,7 W à 300 K
Hamamatsu [18]		7,9 µm	36 mW à 300 K	
Harvard/Hamamatsu [19]		9,5 µm	65 mW à 300 K	1,2 W à 300 K
Lucent Tech.[67]	Strain-compensated GaInAs/AlInAs//InP (Bande II)	3,6-4,7 µm	-	0,1 W à 300 K
Neuchâtel		5 µm	5 mW à 250K	0,5 W à 300 K
Alpes laser (www.alpeslasers.ch)		5–7 µm	10 mW à 300K	0,5 W à 300 K
Fraunhofer Freiburg		5,1 µm	-	0,2 W à 300 K
Neuchâtel (3 stacks)		4,4 µm	-	2,1 W à 300 K
Harvard/Agilent (HR) [68]		5,25 µm	0,3 W à 300 K	
Northwestern		6 µm	0,8 W à 300 K	1,5 W à 300 K
Northwestern [20]		5,25 µm	0,5 W à 300 K	1,5 W à 300 K
Northwestern [21]		4,8 µm	0,2 W à 300 K	1,5 W à 300 K
III-V Lab		5,4 µm	-	0,43 W à 300 K
Northwestern [22], [23]		4,0 µm	0,16 W à 298 K	
Adtech/Maryland [69]		5,1 µm	74 mW à 298 K	
Northwestern [24]		4,7 µm	0,68 W à 298 K	
Northwestern [25]		4,6 µm	2,5 W à 298 K	
Uni of Sheffield [26], [27]	AlAsSb/GaInAs//InP (Bande II).	4,5 µm		0,4 mW à 240 K
Fraunhofer Freiburg [28]		5,0 µm		0,2 W à 300 K
III-V Lab		4,2–4,6 µm	Light Emitting Devices	
Uni of Sheffield	GaAs/AlGaAs//GaAs (Bande III, THz)	8,5 µm	-	50 mW à 280 K
TU Vienna		9–20 µm	-	
THALES R&T		9 µm	15 mW à 243 K	0,3 W à 300 K
THALES R&T/CEM2	InAs/AlSb//InAs (Bande II)	4,5 µm	2 mW à 250 K	50 mW à 290 K
Tohoku Uni [70]		10 µm	-	-

Tableau.I.1 : Tableau récapitulatif des performances à l'état de l'art en fonction du système de matériaux et de la longueur d'onde d'émission du laser

I.C.2. Modèle simple à trois niveaux et règles de dessins usuelles

Plusieurs axes d'optimisation peuvent être dégagés de cette étude bibliographique. En premier lieu le système de matériau utilisé. Comme le montre le tableau.I.9, la longueur d'onde visée et les performances souhaitées vont dicter le choix du matériau. Par exemple pour les lasers cascades terahertz, le couple de matériaux GaAs/AlGaAs épitaxié sur GaAs est souvent utilisé. Dans la région 4-12 µm (les bandes II et III), les matériaux de choix sont GaInAs/AlInAs épitaxiés sur InP. C'est de loin le choix qui montre les meilleures performances. Le record, aujourd'hui, pour un mono émetteur est de ~3W à température ambiante en fonctionnement continu pour des lasers émettant à 4 µm [25, 29]. Dans un même système de matériaux, des optimisations à plusieurs niveaux peuvent être effectuées notamment sur le plan de dessin de la région active. Dans le paragraphe précédent nous avons précisé qu'il peut y avoir plusieurs types de dessins, chacun ayant ses avantages et inconvénients. Dans chaque cas plusieurs paramètres sont pris en compte et doivent être optimisés en même temps. Dans la référence [30], J.Faist et al. en se basant sur une vision simple du laser mettent en avant quelques paramètres les plus pertinents pour l'optimisation de la zone active. Dans cette approche, le laser est modélisé par un milieu à gain à trois niveaux comme le montre la figure.I.10. Les paramètres nécessaires pour décrire ce modèle y sont schématisés.

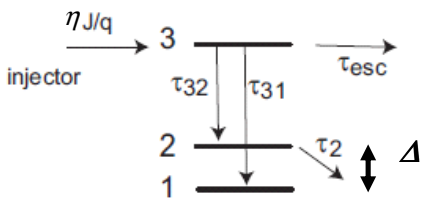


Fig.I.10: Représentation du modèle à trois niveaux avec les différents paramètres pertinents. L'inversion de population a lieu entre les deux niveaux du haut.

Les électrons sont injectés sur l'état 3 avec un taux égal à ηJ/q, ils peuvent ensuite diffuser vers l'état bas n = 2 avec un temps τ_{32}, vers l'état n = 1 avec un temps de τ_{31} ou finalement peuvent être perdus par un processus quelconque caractérisé par un temps τ_{esc}. Le temps de vie de l'état haut va s'écrire dans ce cas comme $\frac{1}{\tau_3}=\frac{1}{\tau_{32}}+\frac{1}{\tau_{31}}+\frac{1}{\tau_{esc}}$. Les électrons peuvent aussi être activés thermiquement sur l'état 2 du laser. La population thermique de l'état bas s'écrira dans le modèle simple de Boltzmann : $n_2^{therm} = n_g.\exp(-\frac{\Delta}{kT})$, où Δ est la différence d'énergie entre l'état injecteur et celle de l'état bas du laser, n_g est la densité surfacique d'électrons de l'injecteur. Dans ce cas les équations qui gèrent le système sont les suivantes :

$$\frac{dn_3}{dt} = \frac{\eta.J}{q} - \frac{n_3}{\tau_3} - \Gamma_p.v_g.S.g_c.(n_3 - n_2) \qquad \text{(I.1)}$$

$$\frac{dn_2}{dt} = \frac{n_3}{\tau_{32}} + \Gamma_p.v_g.S.g_c.(n_3 - n_2) - \frac{n_2 - n_2^{therm}}{\tau 2} \qquad \text{(I.2)}$$

$$\frac{dS}{dt} = v_g.\left(N_p.\Gamma_p.g_c.(n_3 - n_2) - \alpha_{tot}\right)S + \beta\frac{n_3}{\tau_{sp}} \tag{I.3}$$

Dans ces équations, J est le courant qui traverse la structure, Γ_p est le recouvrement du mode optique avec une période de la région active du laser, v_g est la vitesse du groupe du mode optique dans le milieu laser, S est la densité photonique, le terme α_{tot} représente les pertes totales dans le laser : somme des pertes internes du guide et celle des miroirs et β est la fraction des photons émis spontanément dans le mode laser. On notera aussi que les deux premières équations sont écrites pour une seule période dans le laser qui est en réalité formé par un nombre de périodes N_p plus grand. g_c est la section efficace du gain dans la structure définie par :

$$G = \Gamma.g_c.\Delta n \tag{I.4}$$

Où G est le gain modal, $\Gamma = N_p.\Gamma_p$ est le recouvrement du mode optique sur toute la zone active du laser et Δn est la différence de population entre l'état haut et bas du laser. Dans cette vision à trois états g_c s'écrira comme suit [31] :

$$g_c = \Gamma\frac{4.\pi.q^2}{\varepsilon_0.n_{eff}\lambda}\frac{z_{32}^2}{2.\gamma_{32}.L_p} \tag{I.5}$$

z_{32} est l'élément de matrice dipolaire, γ_{32} est l'élargissement de la transition, n_{eff} est l'indice effectif du mode guidé, λ est la longueur d'onde de la transition et L_p est la longueur de la période. En dessous du seuil du laser l'équation (I.3) va être négligée car la densité de photons S est très faible. Dans un régime stationnaire, les dérivées temporelles sont nulles et on montre en utilisant l'équation (I.1) et (I.2) que :

$$\Delta n = (n_3 - n_2) = \frac{\eta.J.\tau_3}{q}(1 - \frac{\tau_2}{\tau_{32}}) - n_2^{therm} = \frac{\eta.J.\tau_{up}}{q} - n_2^{therm} \tag{I.6}$$

Le seuil est atteint lorsque le gain égale les pertes du guide $g_c.\Delta n = \frac{\alpha_{tot}}{\Gamma}$, ce qui nous donne l'expression du courant seuil en utilisant les équations ((I.4)-(I.6)) :

$$J_{th} = \frac{q}{\eta}.\frac{\frac{\alpha_{tot}}{g_c} + n_2^{therm}}{\tau_3.(1 - \frac{\tau_2}{\tau_{32}})} = \frac{q}{\eta}.\frac{\frac{\alpha_{tot}}{g_c} + n_2^{therm}}{\tau_{up}} \tag{I.7}$$

$\tau_{up} = \tau_3.(1 - \frac{\tau_2}{\tau_{32}})$ est le temps effectif de l'état haut du laser.

Au-dessus du seuil, le nombre de photons augmente considérablement dans la cavité laser et on peut supposer que le temps de vie stimulé $\tau_{stim}\ \alpha\frac{1}{g_c.S}$ est beaucoup plus court que le temps de vie spontané τ_{spont} ($\tau_{spont} >> \tau_{stim}$). On néglige donc le second terme dans l'équation (I.3) ce qui donne :

$$G = g_c.(n_3 - n_2) = \frac{\alpha_{tot}}{N.\Gamma_p} \tag{I.8}$$

On voit donc que le gain au-dessus du seuil est alors clampé à sa valeur au seuil. La densité de photons dans la cavité va augmenter linéairement en fonction de la densité de courant qui traverse la structure selon l'équation suivante en utilisant les équations ((I.1), (I.2), (I.6), (I.7)) :

$$S = N_p.\frac{n_s}{c.\alpha_{tot}}.\frac{\eta}{q}.\frac{\tau_{32}-\tau_2}{\tau_{32}+\frac{\tau_{32}.\tau_2}{\tau_3}-\tau_2}(J - J_{th}) = N_p.\frac{n_s}{c.\alpha_{tot}}\frac{\eta}{q}.\eta_{tr}(J - J_{th}) \tag{I.9}$$

où n_s est la densité surfacique des électrons par période.
La valeur pertinente est la puissance totale mesurée à la sortie du laser. Elle est donnée par le produit de la densité des photons dans la cavité par l'énergie portée par chaque photon, par le volume de chaque mode le tout étant multiplié par le taux d'échappement proportionnel aux pertes miroirs α_m, $P_{sortie} = \frac{c}{n_g}.h.\nu.\alpha_m.S.w.L$, avec w la largeur du laser et L sa longueur.
Ceci nous permet de déterminer l'expression suivante du rendement différentiel du laser :

$$\eta_d = \frac{dP}{dI} = \eta.\eta_{tr}.N_p.\frac{\hbar\upsilon}{q_0}.\frac{\alpha_m}{\alpha_{tot}} \tag{I.10}$$

Une autre quantité importante dans la caractérisation des lasers est le rendement à la prise. Celui-ci est défini comme étant le rapport entre la puissance optique de sortie et la puissance électrique totale fournie au milieu actif. En se basant sur l'équation (I.10), le rendement à la prise s'écrira comme suit [30] :

$$\eta_{WP} = \frac{(J_{\max} - J_{th})}{J_{\max}.U}\frac{dP}{dJ} = \eta_{tr}.\frac{\alpha_m}{\alpha_{tot}}.\frac{1}{1+\frac{\Delta}{\hbar\omega}}.[1 - \frac{\tau_{trans}}{\tau_{up}}(\frac{\alpha_{tot}}{n_s.N_p.g_c} + \frac{n_2^{therm}}{ns})] \tag{I.11}$$

Le temps de transit τ_{trans} dans la structure est défini de telle façon que le courant qui correspond à la tension où la puissance est maximale s'écrit $J_{\max} = \frac{q.n_s}{\tau_{trans}}$, et $U = N_p.\left(\frac{\hbar.\omega}{q} + \Delta\right)$ est la tension qu'on doit appliquer à la structure pour être au seuil du laser[2]. Ces expressions ((I.7)-(I.11)) nous permettent de dégager quelques paramètres clé à optimiser pour améliorer le fonctionnement du laser.

1. Pour diminuer le courant seuil du laser, il est important d'augmenter au mieux l'efficacité d'injection des électrons sur l'état haut du laser. Il est ainsi nécessaire de confiner l'état haut du laser. La solution consiste pour cela en la séparation de la période en région active

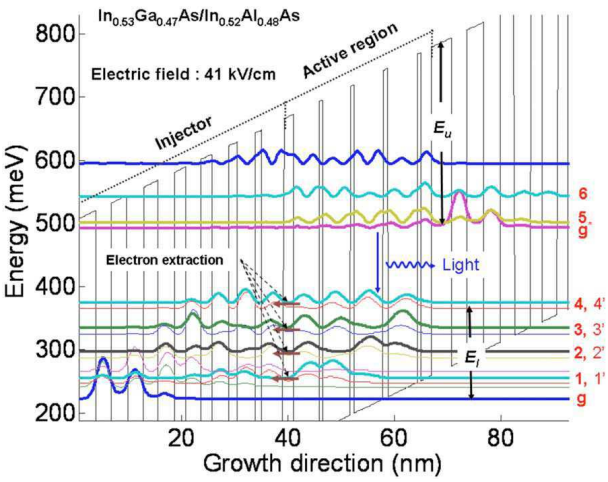
[2] On néglige dans cette approximation la résistance série du laser.

et région d'injection/relaxation des électrons. Dans ce schéma par exemple plusieurs approches peuvent être utilisées pour diminuer les pertes des électrons vers le continuum. Ceci pourra se faire par l'utilisation de la région injectrice comme miroir de Bragg pour les électrons comme décrit dans la référence [13], ou par le contrôle de la taille de la barrière d'injection [32], ou encore en utilisant des énergies de confinement d'états plus fortes par augmentation de la discontinuité des bandes des matériaux utilisées. Le design en 3 puits quantique de la figure.I.7, par exemple, permet une injection efficace sur l'état haut du laser grâce au caractère diagonal dans l'espace réel de la transition radiative. En effet le puits le plus petit du dessin va élargir l'extension de la fonction enveloppe de l'état haut du laser assurant ainsi un bon couplage avec l'état injecteur.

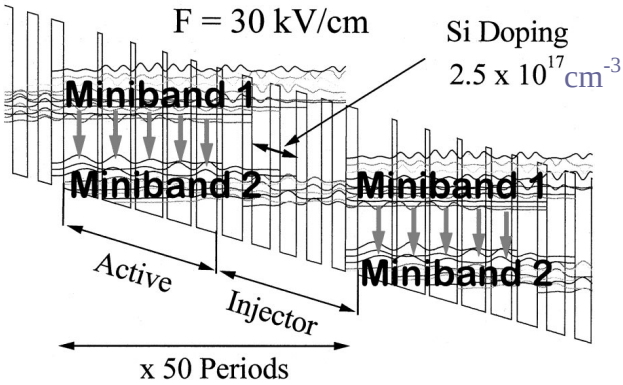
2. Il faudra aussi dans la même optique diminuer la population de l'état bas du laser. Historiquement les premiers LCQ étaient basés sur un dessin à trois puits quantiques où l'état bas était mis en résonance phonon avec un seul état. Cependant, il a été démontré [33] que dans ce dessin les électrons s'accumulent sur le niveau bas du laser ce qui est dû à une mauvaise extraction des électrons appelée effet « bottleneck ». Le ratio $\frac{n_2}{n_3}$ atteint alors 0,59 à température ambiante valeur beaucoup plus grande que celle estimée par le rapport des temps de vie $\frac{\tau_2}{\tau_{32}}$. Ceci rend l'inversion de population difficile à atteindre et dégrade ainsi le fonctionnement du laser surtout à haute température. Pour remédier à cela quelques nouveaux dessins ont été proposés. Dans un premier temps, J.Faist et al. [33] ont proposé un dessin en double phonon (voir figure.I.7 bas). La double résonance phonon assure un bon vidage de l'état bas du laser. Les meilleures performances sont obtenues aujourd'hui avec ce type de lasers avec des puissances de sortie de l'ordre du Watt, un rendement à la prise de 12,5 % et un fonctionnement en régime continu à température ambiante [25]. Récemment, Q.J.Wang et al. [19] ont publié une nouvelle structure émettant à 9 µm et basée sur une triple résonance phonon pour diminuer encore le temps de vie des électrons sur l'état bas du laser (figure.I.11.a). Ceci est fait en utilisant une zone active de cinq puits pour créer un nouveau niveau de résonance phonon. Ce dessin présente aussi de bonnes performances. Une puissance de sortie de 65 mW et un fonctionnement en mode continu à température ambiante ont été obtenus (pour un laser traité anti-reflet de 3mm de long, 12 µm de large). Une autre approche pour améliorer l'extraction sur le niveau bas du laser consiste en l'utilisation de région active en super-réseau [34]. Ce dessin présente de bonnes performances en utilisant des super-réseaux « chirpés » (les tailles des barrières dépendent de la position de celle-ci) pour compenser l'effet du champ électrique et obtenir une mini-bande plate [35] (figure.I.11.b). Ainsi, A. Tahraoui et al [36] ont obtenu en utilisant ce concept des lasers émettant à 11 µm avec 0,5 W en régime pulsé et un courant seuil de 3,83 kA/cm² à température ambiante. Il faut cependant noter que les solutions proposées pour améliorer l'extraction sur l'état bas du laser dictent le dessin de la zone active. Une fois par exemple la condition de la double résonance phonon fixée, on n'a plus beaucoup de liberté pour le choix des épaisseurs et les matériaux utilisés. A. Lyakh et al [29] (figure.I.11.c) ont proposé un nouveau dessin à cinq puits quantiques où ils ne conservent que la première résonance phonon, et où l'état 1 est remplacé par deux états résonnants 1et 1'. Ceci permettra d'obtenir une extraction aussi efficace que celle du dessin à double phonon.

3. Les pertes jouent aussi un rôle important dans le bon fonctionnement du laser. Elles peuvent être décrites comme la somme de quatre termes $\alpha_{tot} = \alpha_{wg} + \alpha_{m1} + \alpha_{m2} + \alpha_{fc}$ où α_{wg} sont les pertes de la cavité sans le milieu actif qui sont dues à l'absorption dans les

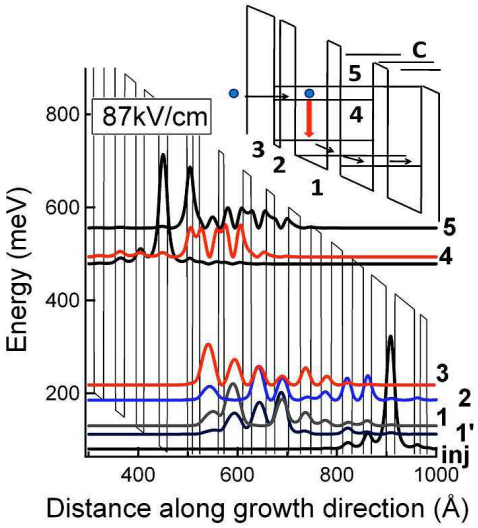
claddings du guide et les bords du guide, α_{m1}, α_{m2} sont les pertes miroirs et α_{fc} sont les pertes dues au porteurs libres.



a. Dessin à trois phonons de Q.J.Wang et al[19]



b. Dessin en super-réseau 'chirpé' de A. Tahraoui et al [36]



c. Dessin pour une extraction non résonante phonon de A.Lyakh et al [29]

Fig.I.11 : Différents dessins proposés pour améliorer l'extraction sur le niveau bas du laser

Supposons que ces dernières sont proportionnelles au dopage de la zone active $\alpha_{fc} = g_{fc}.n_g$ (cette approximation n'est probablement plus vraie pour les grands dopages) [30]. Un bon dessin de zone active maximise aussi le rendement énergétique à la prise donné par la formule (I.11) par rapport aux pertes miroirs. Evidemment, dans ce cas nous avons intérêt que les pertes du guide α_{wg} soient négligeables. Dans le cadre de ces hypothèses, le maximum du rendement à la prise par rapport aux pertes miroirs est donné analytiquement par l'équation suivante [30] :

$$\eta_{WP,\max} = \eta_{tr} \cdot \frac{1}{1+\frac{\Delta}{\hbar\omega}} \cdot [\frac{\sqrt{g^*.\tau^*}-1}{\sqrt{g^*.\tau^*}}]^2 \qquad \text{(I.12)}$$

où $g^* = \frac{g_c}{g_{fc}}$ est le rapport entre la section efficace du gain et celle des porteurs libres, $\tau^* = \frac{\tau_{up}}{\tau_{trans}}$ est le rapport entre le temps de vie effectif de l'état haut du laser et le temps de transit de l'électron. De cette équation (I.12) on peut déterminer deux nouveaux paramètres importants pour l'optimisation du dessin de la zone active d'un LCQ : Il faut en effet que le terme $\sqrt{g^*.\tau^*}$ soit grand devant 1 et que $\frac{\Delta}{\hbar\omega}$ <<1. La première condition implique qu'il faut maximiser le gain par rapport aux pertes par porteurs libres et que le temps de passage de l'électron dans la structure soit court par rapport au temps de vie. Ces paramètres sont contrôlés à la fois par la qualité de croissance des matériaux, par l'état des interfaces et par les temps de vie des différents états. Contrairement aux deux premiers facteurs, le temps de vie d'un état est dépendant dans une large mesure du dessin de la zone active. La deuxième condition est de minimiser le rapport entre la taille en énergie de l'injecteur et celle du photon émis par le laser $\frac{\Delta}{\hbar\omega}$. En effet pour une même taille d'injecteur, le rendement à la prise d'un laser qui émet dans la bande II sera plus grand qu'un laser émettant dans la bande III. C'est une limitation physique due à la différence de taille des quantas d'énergie entre la bande II et III. D'autre part, plus la taille de l'injecteur est petite meilleur est le rendement à la prise. On se trouve ainsi face à une contradiction avec les dessins qu'on a cités jusqu'à maintenant où pour assurer une extraction efficace on utilise des dessins tel que $\Delta > 2*\hbar.\omega_{Lo} \approx 70meV$ pour le dessin à double phonon et Δ est encore plus grande (*~100meV)* pour le dessin à trois phonons [19] et le dessin de A. Lyakh et al [29]. De plus en plus de dessins explorent la voie de diminuer la taille de l'injecteur [37] d'autant plus que ceci va permettre de diminuer le temps de transit des électrons dans la structure et donc la condition $\sqrt{g^*.\tau^*} >> 1$ sera plus simple à atteindre.

En résumé, bien que le modèle à 3 bandes soit une vision très simplifiée de la réalité, il donne un outil commode pour l'optimisation des dessins des zones actives. Il faut cependant garder à l'esprit que la réalité est plus complexe et que l'optimisation est souvent une question d'équilibre entre différentes contraintes.

I.D. Modèle complet du LCQ pour la simulation du transport

Dans ce qui suit, nous décrivons les hypothèses ainsi que les modèles qui ont permis de construire les briques de base que nous avons utilisées tout le long de cette thèse.

I.D.1. Modèle à trois bandes

Pour résoudre l'équation de Schrödinger**,** ces modèles se basent sur l'approximation de la fonction enveloppe [3, 38]. Elle permet un grand gain de temps et de ressources par rapport à d'autres méthodes de calcul tel que les calculs ab-initio.
Dans le cas le plus simple on prend en compte uniquement la bande de conduction en supposant que les sous-bandes sont parfaitement paraboliques. L'équation décrivant le système s'écrit alors comme suit :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2}+V(z)\right).\psi(z)=\varepsilon.\psi(z) \tag{I.13}$$

où z est la direction de croissance des matériaux. Un modèle un peu plus élaboré est le modèle à trois bandes [39] qui prend en compte l'effet des bandes des trous légers et du split-off. Ce modèle est dérivé du modèle $\vec{k}.\vec{p}$ 8 bandes autour du point Γ. Dans ce cas, la bande des trous lourds apparaît comme découplée des autres bandes de valences. L'hamiltonien dans cette approximation s'écrit alors sous la forme suivante :

$$H=\begin{pmatrix} E_c(z) & \sqrt{\frac{2}{3}}\frac{p_{cv}}{m_0}p_z & -\sqrt{\frac{1}{3}}\frac{p_{cv}}{m_0}p_z \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{p_{cv}}{m_0}p_z & E_{lh}(z) & 0 \\ \sqrt{\frac{1}{3}}\frac{p_{cv}}{m_0}p_z & 0 & E_{so}(z) \end{pmatrix} \tag{I.14}$$

Où $P_{cv}=i.\sqrt{\frac{m_0.E_p}{2}}$, m_0 est la masse de l'électron libre, E_p est l'énergie de Kane, p_z est la quantité de mouvement de la particule dans la direction de croissance des couches et E_c, E_{lh} ainsi que E_{so} sont les énergies en k = 0 respectivement de la bande de conduction, des trous légers et de la bande de spin orbite. Dans ce cas la fonction enveloppe est un vecteur à trois composantes :

$$\psi(z)=\begin{pmatrix} \phi_c(z) \\ \phi_{lh}(z) \\ \phi_{so}(z) \end{pmatrix} \tag{I.15}$$

En remplaçant ϕ_{lh} et ϕ_{so} solutions de (I.14) dans la première ligne de (I.14), l'équation de Schrödinger se simplifie et on obtient une équation portant sur ϕ_c [39]:

$$p_z\frac{1}{2m(E,z)}p_z\phi_c+E_c(z)\phi_c=E\phi_c \tag{I.16}$$

Dans l'équation (I.16), la masse effective qui apparaît dépend à la fois de la position et de l'énergie. Elle est donnée par la formule suivante :

$$\frac{1}{m(E,z)} = \frac{1}{m_0}\left[\frac{2}{3}\frac{E_p}{E-E_{lh}} + \frac{1}{3}\frac{E_p}{E-E_{so}}\right] \qquad \text{(I.17)}$$

La figure.I.12 montre une comparaison entre le gain spectral calculé dans le cadre du modèle à une bande et celui calculé suivant le modèle à trois bandes pour deux lasers à cascade quantique différents émettant à 5 et 9 µm [40, 33]. Le modèle à 1 bande ne donne pas de résultat satisfaisant. En effet, ce modèle suppose que la bande est isolée donc sera difficilement applicable pour la bande de conduction sauf si on utilise des puits quantiques ayant de grandes épaisseurs où les énergies de confinement sont faibles par rapport au gap du matériau. Pour les LCQ, étant donné les épaisseurs de couche utilisées (quelques dizaines d'angstroems), il est clair qu'on sort d'une telle approximation. Comme le montrent les courbes noires de la même figure, le maximum de gain calculé est en bon accord avec la longueur d'onde d'émission expérimentale (0,260 eV pour le laser qui émet à 5 µm et 0,139 eV pour le laser qui émet à 9 µm).

Le modèle à trois bandes permet d'avoir une description suffisante de la dispersion des états électroniques de la bande de conduction. Un traitement plus complet en prenant une base plus grande n'est pas nécessaire dans la mesure où les LCQ que nous essayons de modéliser sont des composants unipolaires qui ne font intervenir que les électrons de la bande de conduction. Il est cependant important de changer de modèle si les composants étudiés font intervenir les trous de la bande de valence. Dans ce cas, des couplages existent entre états de la bande de valence et ceux des autres bandes du matériau qui ne peuvent être négligés. Il faut alors résoudre tout l'hamiltonien $\vec{k}.\vec{p}$ à 14 bandes.

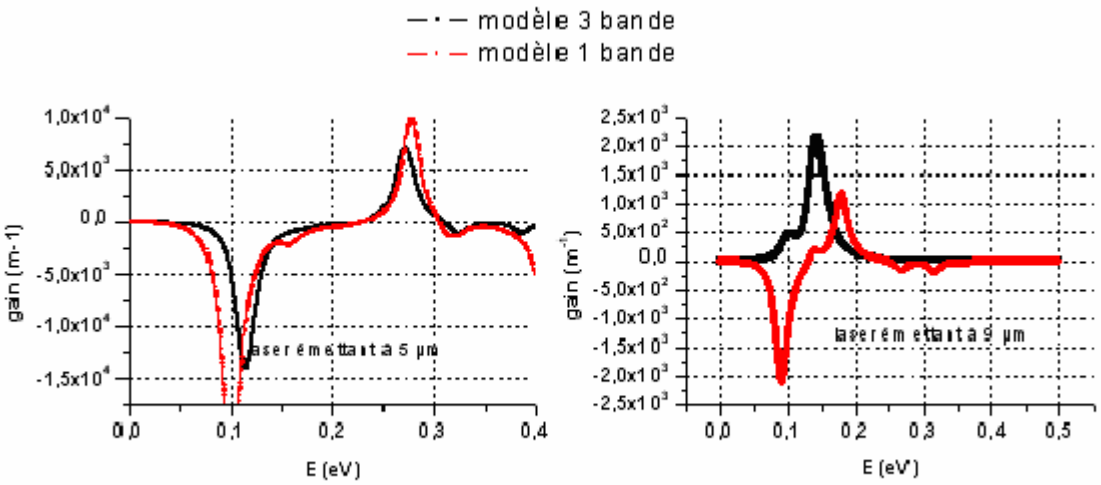


Fig.I.12: Effet du modèle de calcul sur le calcul du gain du laser. Les courbes de gauche correspondent à un laser qui émet à 5 µm tiré de [40], et celles de droite correspondent à un laser qui émet à 9 µm tiré de [33]. Les calculs sont faits pour un champ électrique de 140 kV/cm pour le laser à 5 µm et de 50 kV/cm pour le laser à 9 µm

I.D.2. Effet des contraintes

Pour avoir des lasers à cascade quantique dans la bande II, il est important d'utiliser des matériaux qui présentent une plus grande discontinuité de bande (700 meV) que les matériaux qui sont utilisés pour les lasers dans la bande III (520 meV). En effet, pour obtenir de bonnes performances pour ces lasers un bon confinement électronique est essentiel comme cela a été dit dans le paragraphe précédent [41]. Une des solutions proposées est l'utilisation des matériaux $In_xGa_{1-x}As/Al_yIn_{1-y}As$ qui ne sont pas adaptés en maille sur l'InP. L'idée principale dans l'utilisation d'un système à contraintes compensées se base sur l'observation qu'en dessous d'un certain seuil la déformation n'altère pas la qualité du matériau. L'utilisation de $In_xGa_{1-x}As$ en compression et de $Al_yIn_{1-y}As$ en tension donne un degré de liberté supplémentaire pour le dessin de la région active. En effet tout en imposant une contrainte totale du système nulle, on peut changer les discontinuités de bandes en changeant la concentration en indium dans le puits et la barrière. D'autres solutions ont été proposées comme l'utilisation de InAs/AlSb/InAs ou InAs/AlSb/GaSb qui présentent une grande discontinuité de bande ~2,1 eV. Cependant ni la conductivité thermique de ces systèmes moins bonne que celle du système sur InP ni leur croissance épitaxiale beaucoup plus difficile à contrôler [42] n'en font une solution de choix pour le fonctionnement en régime continu. Pour les lasers à cascade quantique basés sur du GaAs, la discontinuité de bande plus faible dégrade considérablement les performances de ce type de laser [41]. Pour remédier à cela il faut augmenter le pourcentage de l'aluminium dans la barrière. Cependant, la fiabilité des composants va vite se détériorer s'il contient beaucoup d'aluminium suite à sa très rapide oxydation en contact avec l'air. De plus, la proximité des vallées X et L limite les performances des lasers.

Nous nous sommes focalisés dans cette thèse sur les lasers de type $In_xGa_{1-x}As/Al_yIn_{1-y}As/InP$ qui actuellement présentent expérimentalement les meilleures performances en termes de puissance de sortie et de température maximale de fonctionnement. De plus, ce système à d'autres avantages dont on peut citer :

- Utiliser un nombre de périodes aussi grand que l'on veut au-delà de l'épaisseur critique imposée par les contraintes que subissent les matériaux, puisque la contrainte moyenne de chaque période est nulle.
- L'écart entre la vallée Γ et les vallées X augmente dans le $In_xGa_{1-x}As$ en compression ce qui diminue les fuites par les vallées X.
- Les guides d'ondes en InP présentent les meilleures performances en termes de faible résistance thermique et faibles pertes et peuvent toujours être utilisés avec ce système de matériaux.

Nous rappelons dans ce qui suit les modèles théoriques pour la prise en compte des contraintes dans les calculs. Leur existence dans la couche de matériaux impose une modification des équations qui ont été utilisées jusque là. En effet, l'hamiltonien (I.14) n'est valable que pour des matériaux ne subissant pas de contraintes (ils ont un paramètre de maille égal à celui du substrat). L'existence des contraintes va influer sur la structure de bandes des matériaux. Elles vont induire des déformations du réseau cristallin, ce qui sera accompagné par une perte de symétrie du réseau cristallin. La discontinuité de la bande de conduction peut être calculée dans le cadre du modèle proposé par Pikus et Bir [43, 44]. La direction [001] du cristal est la direction d'épitaxie communément utilisée. Le cristal subira une contrainte hydrostatique qui a pour effet de modifier le volume du cristal et une contrainte de cisaillement qui est dans les plans des couches et qui a pour effet de lever la dégénérescence

entre les trous lourds et les trous légers. Le tenseur de déformation est diagonal. Ses coefficients s'écrivent comme suit $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon = \frac{a_{sub} - a}{a}; \varepsilon_{zz} = -2.\frac{C_{12}}{C_{11}}.\varepsilon;$ où a_{sub} (resp. a) est la constante de maille du substrat (resp du matériau). Chacune de ces composantes contribue donc au changement dans les énergies des bandes à $k = 0$ de la façon suivante :

$$\delta E_c^{hyd} = a_c.(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) = 2.a_c.(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}).\varepsilon = a_c.e_T \quad \text{(I.18)}$$

$$\delta E_v^{hyd} = a_v.(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) = 2.a_v.(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}).\varepsilon = a_v.e_v \quad \text{(I.19)}$$

$$\delta E_{hh}^{cis} = \frac{b}{2}.(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2.\varepsilon_{zz}) = b.(1 + 2.\frac{C_{12}}{C_{11}}).\varepsilon = B \quad \text{(I.20)}$$

$$\delta E_{lh}^{cis} = -\frac{b}{2}.(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2.\varepsilon_{zz}) = -b.(1 + 2.\frac{C_{12}}{C_{11}}).\varepsilon = -B \quad \text{(I.21)}$$

δE_c^{hyd} (resp. δE_v^{hyd}) est l'effet des contraintes hydrostatiques sur l'énergie de la bande de conduction (resp. la bande de valence), δE_{hh}^{cis} (resp. δE_{lh}^{cis}) est l'effet des contraintes de cisaillement sur la bande de trous lourds (resp. trous legers), C_{11} et C_{12} sont les coefficients élastiques du matériau, a_c et a_v sont les potentiels de déformation hydrostatique et b le potentiel de déformation de cisaillement. Finalement le décalage total de l'énergie du gap s'écrit comme la somme des trois premiers termes :

$$\delta E_g = \delta E_c^{hyd} + \delta E_v^{hyd} + \delta E_{hh}^{cis} \quad \text{(I.22)}$$

Ces équations montrent que les contraintes vont avoir un effet sur le gap du matériau ainsi que sur le band-offset. En restant au voisinage du centre de la zone de Brillouin (point Γ), l'application des contraintes modifie l'hamiltonien comme le montre l'équation (I.23). Par comparaison avec l'hamiltonien (I.14), des nouveaux termes apparaissent. Ils traduisent une augmentation du couplage entre les bandes. Donc la masse effective de l'électron sera aussi affectée [45] :

$$H_{cont} = \begin{pmatrix} E_c(z) & \sqrt{\frac{2}{3}}\frac{p_{cv}}{m_0}p_z + \sqrt{2}.P_0.k_z.\varepsilon_{zz} & -\sqrt{\frac{1}{3}}\frac{p_{cv}}{m_0}p_z + P_0.k_z.\varepsilon_{zz} \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{p_{cv}}{m_0}p_z + \sqrt{2}.P_0.k_z.\varepsilon_{zz} & E_{lh}(z) + a_v.e_T - B & \sqrt{2}.B \\ \sqrt{\frac{1}{3}}\frac{p_{cv}}{m_0}p_z + P_0.k_z.\varepsilon_{zz} & \sqrt{2}.B & E_{so}(z) + a_v.e_T \end{pmatrix} \quad \text{(I.23)}$$

où P_0 est donnée par la relation : $\hbar^2.E_P = 2.m_0.P_0^2$; E_p étant l'énergie de Kane. De même qu'en I.D.1, nous voulons obtenir une équation de Schrödinger portant uniquement sur ϕ_c. En suivant le même raisonnement que celui fait pour obtenir l'équation (I.16) [39] (on utilise la deuxième et troisième ligne pour résoudre l'équation trouvée dans la première) on montre que la fonction enveloppe de l'électron de la bande de conduction est définie par le même type d'équation différentielle. La masse effective de l'électron devient alors :

$$\frac{1}{m^*_{BC}(E,z)} = \left\{ 1 + \frac{E_p}{3}.(1-\varepsilon_{zz})^2.\frac{3.\left[E_g + \delta E_g + 2.\Delta_0\right]}{\left[E_g + \delta E_g + 2.B\right]\left[E_g + \delta E_g + B + \Delta_0\right] - 2.B^2} \right\} \qquad \text{(I.24)}$$

on remarque que pour des contraintes nulles ($\delta E_g = 0$ et $B = 0$) on retrouve bien sûr l'équation (I.17). La figure.I.13 compare la masse effective de l'électron dans le GaInAs calculé en faisant varier les contraintes (pour cela le %In est varié) et en les négligeant (dans ce cas la masse effective est calculée dans l'hypothèse du cristal virtuel et est donnée par une interpolation d'ordre deux entre les valeurs des masses des binaires). On voit que la masse effective réelle d'un électron dans la bande de conduction de GaInAs contraint sur InP devient quasiment constante et indépendante de la composition ; sa valeur est donnée par la masse effective de la composition correspondant au matériau GaInAs adapté en maille sur InP.
La figure.I.14 compare le gain spectral, pour les mêmes lasers que pour la figure.I.12, calculé en prenant en compte les effets des contraintes sur la masse effective de l'électron (courbe noire) et en les négligeant (courbe rouge). Ces courbes montrent bien que les contraintes ont un effet non négligeable sur la courbe du gain pour le laser à 5 µm dont le design est basé sur la compensation des contraintes. On remarque notamment que la position du maximum de gain change de manière significative entre les deux calculs. Il subit un red-shift important par suite de la présence des contraintes dans les couches. Pour le laser émettant à 9 µm, dont la région active est constituée de matériaux adaptés en paramètre de maille sur le substrat InP, aucun effet sur l'énergie du maximum du gain n'est perceptible. Un léger effet sur le maximum de la courbe est perceptible. Ceci s'explique par le fait que la composition réelle des matériaux correspondant à des contraintes nulles est légèrement différente de celle avec laquelle est fait ce calcul. Ce sont donc les contraintes résiduelles qui expliquent cet effet sur le maximum de gain.
Il est donc clair que pour une bonne prédiction de la longueur d'émission du laser il est indispensable de prendre les contraintes dans les couches de l'hétérostructure en compte.

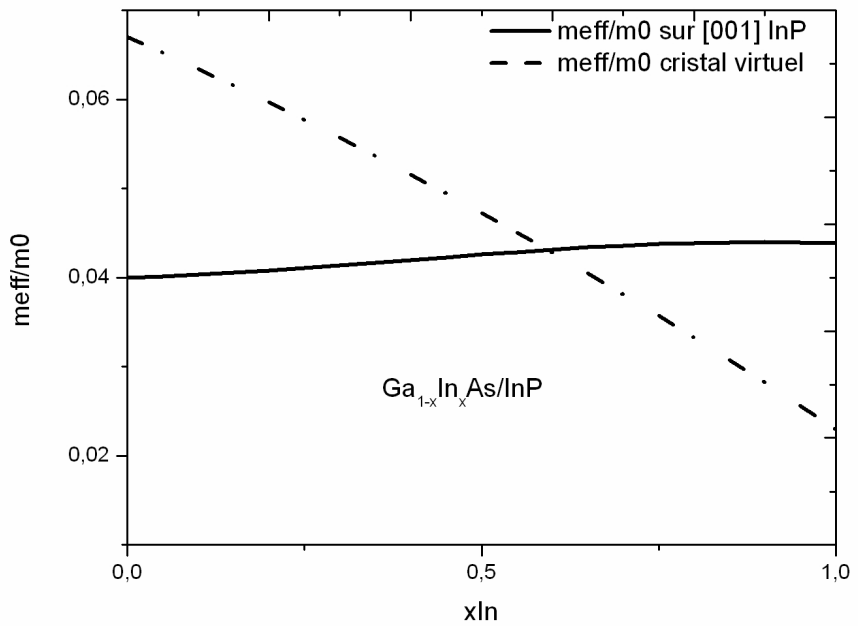


Figure.I.13: Effet des contraintes sur la masse effective de l'électron dans la direction k_z. On remarque que par suite de la prise en compte des contraintes la masse devient presque constante et indépendante de la composition. La ligne tiretée représente la masse effective des électrons dans l'approximation du cristal virtuel qui consiste à calculer la masse électronique par une interpolation d'ordre deux entre les valeurs des masses des binaires

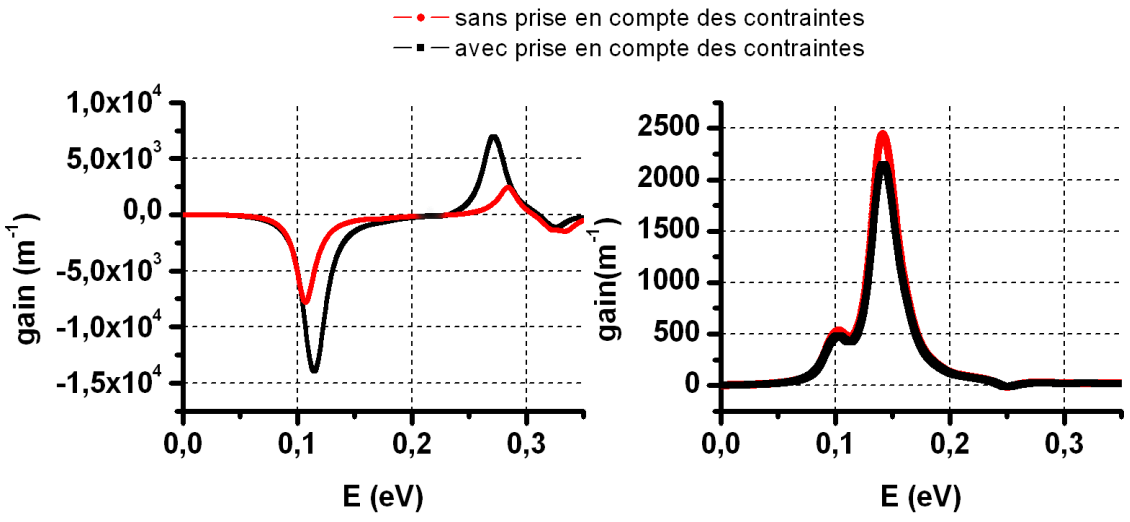


Figure.I.14: Effet des contraintes sur le gain de la structure. La courbe à gauche est celle correspondant à une structure à contrainte compensée [40], celle de droite à une structure adaptée en paramètre de maille [33]

I.D.3. Paramètres matériaux utilisés

Les principaux matériaux utilisés dans les lasers à cascade quantique sont des alliages III-V de la forme $A_xB_{1-x}C$. Dans les cas des binaires (x = 0 ou x = 1), nous nous sommes basés sur les références [46], [47] et [48] pour déterminer les paramètres électroniques nécessaires. Pour les alliages ternaires, nous avons utilisé l'approximation du cristal virtuel. Cette approximation consiste à faire une moyenne entre les binaires AC et AB en utilisant l'équation d'ordre 2 simple suivante :

$$P\ (ABC) = x*P(AC)+(1-x)*P(AB)-c*(1-x)*x \qquad (I.25)$$

Où *P* est la caractéristique physique à déterminer et c est le paramètre de bowing qui rendra compte de la déviation à la linéarité. Les paramètres des bowings sont bien référencés dans la littérature et on s'est basé sur les références [46], [47] et [48] pour les déterminer.
Certains de ces paramètres dépendent de la température, en particulier on prendra pour l'énergie du gap une dépendance qui suit la loi empirique de Varshni :

$$E = E_g(T=0) - \frac{\alpha.T^2}{T+\beta} \qquad (I.26)$$

En ce qui concerne les paramètres de mailles, nous avons utilisé une variation linéaire :

$$a = a(T=300) + \delta.(T-300) \qquad (I.27)$$

Dans ces équations, T est la température à laquelle le calcul est fait, α , β et δ sont des paramètres tabulés que nous avons tirés aussi des même références citées dans ce paragraphe.

I.E. Différents modèles de transport dans les LCQ

Dans cette section nous traiterons d'une question essentielle dans la simulation des hétérostructures qui est : Comment décrire le transport électronique et comment l'hétérostructure influe-t-elle sur ce dernier ?
Dans ce qui suit le LCQ sera modélisé par un système périodique contenant N périodes dont chacune est constituée d'un nombre donné de couche de semi-conducteur. L'hamiltonien qui décrit ce système sera décrit comme suit :

$$H = H_0 + H_{scatt} \qquad (I.28)$$

H_0 décrit l'effet de l'hétérostructure et du champ électrique appliqué. H_{scatt} est l'hamiltonien décrivant les effets des mécanismes de diffusions. Cet hamiltonien sera traité comme une perturbation de H_0. La densité de courant qui traverse la structure s'écrira sous cette forme :

$$J = \frac{e}{V}.\left\langle \frac{dZ}{dt} \right\rangle = \frac{ie.\langle [H_0 + H_{scatt}, Z] \rangle}{\hbar V} = \frac{ie.\langle [H_0, Z] \rangle}{\hbar V} + \frac{ie.\langle [H_{scatt}, Z] \rangle}{\hbar V} = J_0 + J_{scatt} \qquad (I.29)$$

où V est le volume du système, Z est l'opérateur position, J_0 (respectivement J_{scatt}) est le courant cohérent (respectivement le courant non cohérent).

Cette description du système purement quantique donnée par l'équation (I.29) et l'hamiltonien (I.28), qui est la description la plus rigoureuse, demande un effort de calcul considérable.

Arrivé à ce stade le choix de la base pour traiter le système s'impose. On décrira ici les trois approches les plus communes pour aborder cette problématique. La différence principale entre les trois approches est le choix de la base dans laquelle la résolution du problème est faite. En théorie, ce choix de la base ne devrait pas changer les résultats des calculs. En pratique, des approximations sont toujours faites dans ce genre d'approches pour rendre les calculs faisables, or ces approximations sont souvent dépendantes de la base choisie. Comme on le montrera, le choix de la base est crucial dans l'interprétation physique du résultat. Il peut conduire à des visions apparemment opposées du comportement du système présentant le système de deux points de vue différents de par les choix d'approximation faits au départ.

Dans un premier temps, on décrira le transport en mini-bande où les électrons occupent des états de Bloch délocalisés sur toute la structure. C'est cette base (constituée par les états de Bloch) qui diagonalise l'hamiltonien qui décrit le système sans champ électrique appliqué. La dynamique des électrons sur un état de la mini-bande est donnée par le principe fondamental de la dynamique en approximation semiclassique. Ce qui donne l'équation de Boltzmann.

Cependant l'application d'un champ électrique à la structure brise la symétrie du réseau et les états de Bloch ne sont plus les états les mieux appropriés pour décrire le système. Dans ce cas, ce sont les états de type Wannier –Stark qui diagonalisent le hamiltonien H_0 qui sont des états plutôt localisés. Les électrons sautent d'un état localisé à l'autre à l'aide des mécanismes de diffusion. Ce qui entraîne l'existence d'un courant net dans la direction du champ électrique.

Dans le cas où les états de la structure sont couplés entre eux, la base est constituée des fonctions localisées de Wannier. Le transport électronique est assuré par l'effet tunnel, le faible couplage résiduel permettant aux électrons de passer par effet tunnel à travers la structure. Cette méthode appelée transfert de charge par effet tunnel séquentiel est la troisième méthode que nous aborderons dans cette section.

La figure.I.15, tirée de la référence [12] montre le domaine de validité de chacune des approches dans le cas des super-reseaux en fonction du champ appliqué à la structure F et la largeur en énergie de la sous-bande étudiée. Dans ce qui suit, on va décrire en détail chacune des approches.

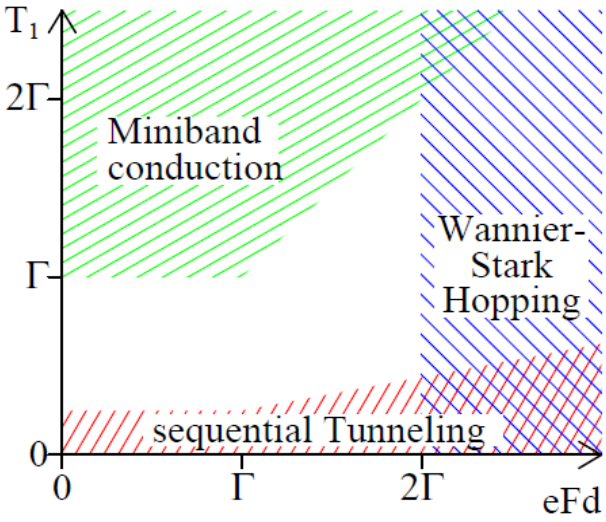


Fig.I.15 : Représentation schématique des différents domaines de validité des approches de calcul du transport dans les super-réseaux tirée de la référence [12], T_1 est l'énergie de couplage entre états, Γ est l'élargissement de l'état et eFd est l'énergie cédée par le champ appliqué

I.E.1. Transport en mini-bande

Cette approche se base sur une description semi-classique du transport électronique. La base utilisée dans ce cas est construite à partir des fonctions de Bloch. Les fonctions d'onde des électrons sont données par :

$$\varphi^{\nu}_{q,k}(z) = \varphi^{\nu}_{q}(z).\frac{e^{i\vec{k}.\vec{r}}}{2.\pi} \tag{I.30}$$

où q est le vecteur de Bloch dans la direction de croissance des couches, k est celui dans le plan perpendiculaire à celle-ci et ν est l'indice de la bande. L'occupation de ses états est donnée par la fonction de distribution *f(q,k,ν,t)*. L'application d'un champ électrique *F* dans la direction de croissance *z* brise la périodicité du cristal. Cependant, dans cette approche on négligera cet effet. Pour cela le champ électrique appliqué doit être faible de telle façon que *eFd* soit négligeable devant la largeur en énergie de la mini-bande. Les électrons sont ainsi traités comme des particules classiques dont le mouvement en présence du champ électrique sera déterminé par l'équation de Boltzmann :

$$\frac{df(q,k,\nu,t)}{dt} = \frac{\partial f(q,k,\nu,t)}{\partial t} + \frac{eF}{\hbar}\frac{\partial f}{\partial q} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{scatt} \tag{I.31}$$

Le terme de droite décrit la variation de la distribution électronique due aux diffusions électroniques et s'écrit de manière générale comme suit :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{scatt} = \sum_{\nu'} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} dq' \int d^2k'.\left\{P(q',\vec{k}',\nu' \to q,\vec{k},\nu).f(q',\vec{k}',\nu').- P(q,\vec{k},\nu \to q',\vec{k}',\nu').f(q,\vec{k},\nu)\right\} \tag{I.32}$$

où $P(q,\vec{k},\nu \to q',\vec{k}',\nu')$ est la probabilité de passage d'un état $(q,\vec{k},\nu)$ à un état $(q',\vec{k}',\nu')$ et est donnée par la règle d'or de Fermi :

$$P(q,\vec{k},\nu \to q',\vec{k}',\nu') = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle \varphi^{\nu'}_{q',k'} \middle| H^{scatt} \middle| \varphi^{\nu}_{q,k} \right\rangle\right| \delta(E(q',\vec{k}',\nu') - E(q,\vec{k},\nu)[\pm\hbar\omega_{phonon}]).[1 - f(q',\vec{k}',\nu')] \qquad \text{(I.33)}$$

Des variantes simplifiées des termes $(\frac{\partial f}{\partial t})_{scatt}$ sont souvent utilisées dans la littérature qui simplifient considérablement la résolution de l'équation (I.31). Une fois la distribution électronique obtenue, la densité de courant peut être déterminée en utilisant la formule suivante :

$$J_{MBT} = \frac{2.e}{(2\pi)^3}.\sum_{\nu}\int_{-\pi/d}^{\pi/d} dq \int d^2k.f(q,\vec{k},\nu,t).v^{\nu}(q) \qquad \text{(I.34)}$$

où $v^{\nu}(q) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E^{\nu}(q)}{\partial q}$ est la vitesse de l'état de la Bloch q dans la mini-bande ν et e est la charge élémentaire de l'électron.

Cependant cette méthode suppose que l'on connaît à la fois l'énergie et la position de la particule. Il faut donc garder à l'esprit que l'équation de Boltzmann n'est valable que pour des particules classiques et à condition que les processus de diffusion soit indépendants. La prise en compte des effets quantiques n'est faite que par l'introduction de la dispersion d'énergie en k $E^{\nu}(q,k)$. C'est la limite principale d'une telle approche. Ceci ne peut être traité que par l'approche microscopique des fonctions de Green que nous n'aborderons pas dans ce manuscrit. Des déviations peuvent en effet être induites par la nature quantique de certains phénomènes qui se produisent dans les hétérostructures comme la corrélation entre les phénomènes de diffusion ainsi que les élargissements des états induits par la diffusion. Le fait que cette méthode semi-classique soit largement utilisée pour traiter le transport électronique sous champs électrique est dû à la difficulté de décrire de manière satisfaisante les phénomènes quantiques qui interviennent ainsi qu'à l'existence de solutions opérationnelles (la méthode de Monte-Carlo par exemple) pour résoudre numériquement l'équation de Boltzmann.

I.E.2. Saut d'électron entre états de Wannier-Stark

Si un champ électrique est appliqué dans le composant, les états propres de l'hamiltonien qui décrit le système étudié en présence de champ électrique ne sont plus délocalisés sur toute la structure. Ce sont des états de Wannier-Stark que nous noterons $\phi^{\nu}_{j,\vec{k}}(\vec{r},z) = \phi^{\nu}_{j}(z).\frac{e^{i\vec{k}.\vec{r}}}{\sqrt{A}}$, avec une énergie $E^{\nu}_{j,k}$. La figure.I.16 présente les états électroniques calculés dans l'approximation de la fonction enveloppe pour une structure laser émettant à 9µm pour un champ électrique appliqué F = 10 kV/cm. On remarque que sous champ électrique les états de la structure forment ce qu'on appelle une échelle de Wannier-Stark .

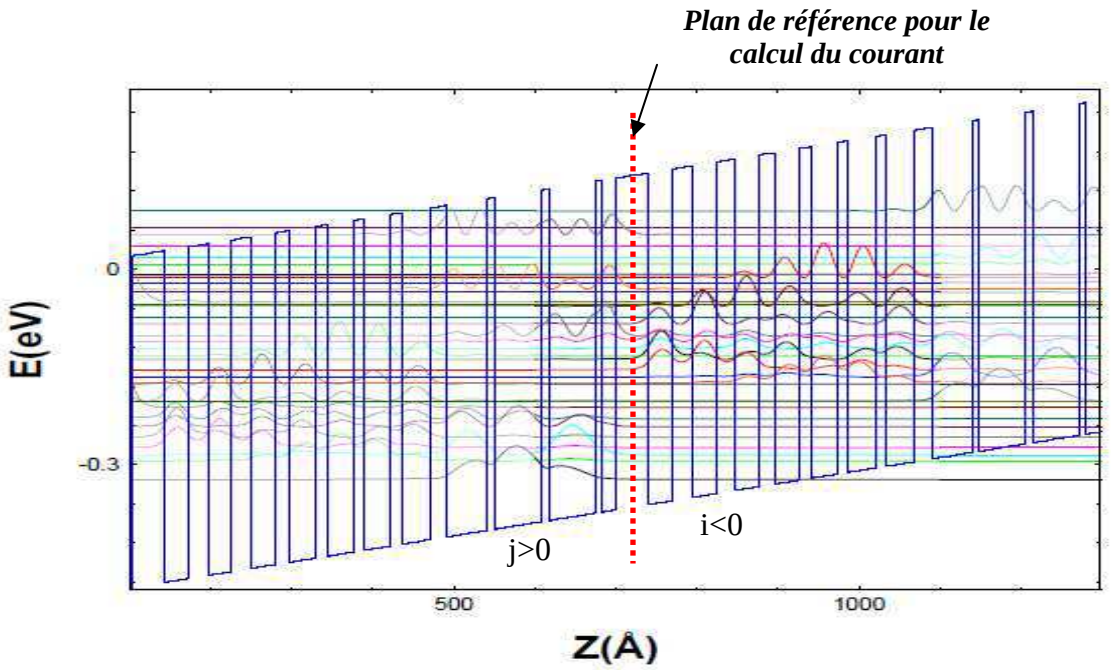


Fig.I.16: Effet de l'application du champ électrique sur les états de la structure : les états ne sont plus délocalisés sur toute la structure si on applique un champ électrique non nul. Le plan de référence est choisi au milieu de la barrière d'injection.

Dans ce cas $\phi^{\nu}_{j,\vec{k}}(\vec{r},z)$ est un état de la structure avec une énergie $E^{\nu}_{j,k}$ se trouvant dans la période ν, et alors $\phi^{\nu+1}_{j,\vec{k}}(\vec{r},z)=\phi^{\nu}_{j,\vec{k}}(\vec{r},z-d)$ est un état de la structure se trouvant dans la periode ν+1 avec une énergie $E^{\nu+1}_{j,k}= E^{\nu}_{j,k}-eFd$. Les transitions électroniques se font alors par des sauts entre états de Wannier-Stark assistés par des mécanismes de diffusion dont le taux de transition d'un état initial $(\vec{k},j)$ à un état final $(\vec{k}',j')$, $R_{j',\vec{k}'\to j,\vec{k}}$ est donné par une équation de type (I.33). A la fin de ce chapitre nous reviendrons sur la description des mécanismes pertinents de diffusions dans les lasers à cascade quantique.
Une première approche serait de résoudre l'équation ressemblant à l'équation de Boltzmann[3] sur la base constituée par les états de Wannier-Stark et qui s'écrira comme suit pour chaque état $(\vec{k},\nu)$:

$$\frac{df_i(\vec{k})}{dt}=\sum_{\vec{k}',j}\left[R_{j,\vec{k}'\to i,\vec{k}}\cdot f_j(\vec{k}')-R_{i,\vec{k}\to j,\vec{k}'}\cdot f_i(\vec{k})\right] \qquad \text{(I.35)}$$

où la somme sur j court sur tous les états possibles de la structure.
Cette équation est résolue par auto cohérence en utilisant la méthode de Monte-Carlo. Le courant, dans ce cas, sera donné par un bilan de flux d'électrons de part et d'autre d'un plan de référence dans la structure comme le montre l'équation (I.36):

[3] La différence avec l'équation de Boltzmann est que le terme $\frac{e.F}{\hbar}\frac{\partial f}{\partial q}$ est négligé dans l'équation (I.35)

$$J = \frac{2.e}{A} \sum_{i \le 0} \sum_{j \ge 0} \sum_{k,k'} \left[R_{i,k \to j,k'} \cdot f_i(\vec{k}) - R_{j,k' \to i,k} \cdot f_j(\vec{k}) \right] \qquad \text{(I.36)}$$

En pratique, le plan de référence est au milieu de la barrière d'injection (voir figure.I.16)
En se basant sur cette approche microscopique, C.Iotti et al [49] ont calculé la caractéristique courant-tension d'un LCQ émettant à 7 µm. La figure.I.17 tirée de cette référence [49] représente une comparaison entre les résultats des calculs en prenant en compte les interactions électron-électron pour la courbe rouge et en les omettant dans le cas de la courbe noire. A travers ce résultat, C.Iotti et al ont montré que l'interaction électron-électron joue un rôle très important dans la distribution des porteurs dans la sous-bande. De plus, ils montrent que dans la base choisie dans ce calcul les termes non diagonaux de la matrice densité sont négligeables et donc que le transport est principalement incohérent.

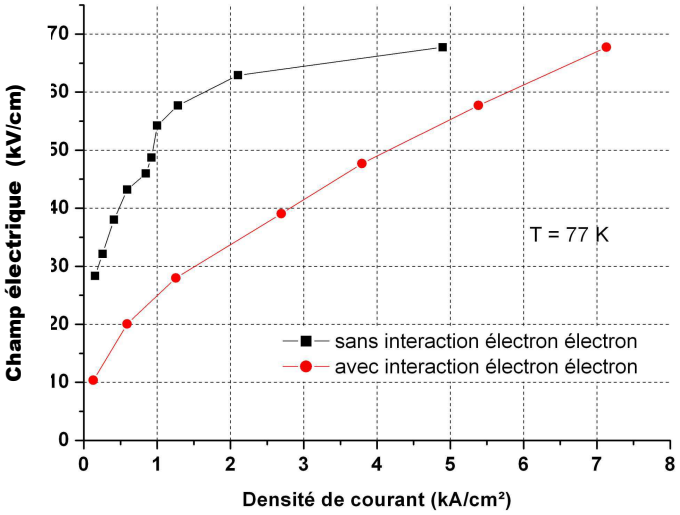


Fig.I.17: Caractéristique I-V calculée par résolution de l'équation de Bolzmann tirée de [49] L'effet de l'interaction électron-électron est important

Ce résultat important va permettre d'utiliser une approximation supplémentaire qui simplifiera encore le traitement de transport électronique. Il nous permettra de passer d'une description microscopique imposée par la résolution de l'équation de Botzmann vers une description mésoscopique du composant. Elle consiste à supposer que les distributions dans les sous bandes sont décrites par une température électronique unique. En effet, les temps de transition intra-sous-bande sont beaucoup plus courts que ceux inter-sous-bande [50, 51] comme le montre la figure.I.18. Elle représente les tracés des temps de diffusion par mécanisme électron-électron entre deux états 3 et 4 dans une structure LCQ tirée de [51]. Les taux de diffusion intra-sous-bande sont deux ordres de grandeurs plus grands que ceux inter-sous-bande. Ceci implique que les interactions intra-sous-bande sont donc efficaces pour restaurer l'équilibre thermique dans les sous bandes de la structure. Une distribution statistique de type Fermi-Dirac représente alors la distribution d'énergie des électrons dans les sous-bandes. Dans notre cas (température élevée et densité faible de dopants), cette distribution peut être approximée par une statistique de Maxwell-Boltzmann. L'équation (I.35) décrivant le laser peut être simplifiée en introduisant le temps de transition moyen de l'état initial et l'état final. Notons (α,k) un état de la sous bande de départ *i* et (β,k') un état de la sous bande d'arrivée f de l'électron. Le temps de transition de l'état (α,k) vers la

sous bande f est donné par la formule suivante dans le cas d'un mécanisme élastique qui entre en jeu lors de la transition

$$\frac{1}{t_{\alpha->f}} = \frac{2.\pi}{\hbar}.\sum\left|\left\langle\phi_{\alpha,k}\left|H^{scatt}\right|\phi_{\beta,k'}\right\rangle\right|^2.\delta(\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha).(1 - f(\varepsilon_f, T_e) \qquad \text{(I.37)}$$

Dans cette équation $\varepsilon_\alpha = E_i + \frac{\hbar^2.k^2}{2.m*}$, $\varepsilon_\beta = E_f + \frac{\hbar^2.k'^2}{2.m*}$, Te est la température électronique.
Dans le cas des phonons-LO la conservation de l'énergie dans l'équation (I.37) est remplacée par $\delta(\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha \pm \hbar\omega)$ selon qu'il y ait absorption ou émission de phonon LO.

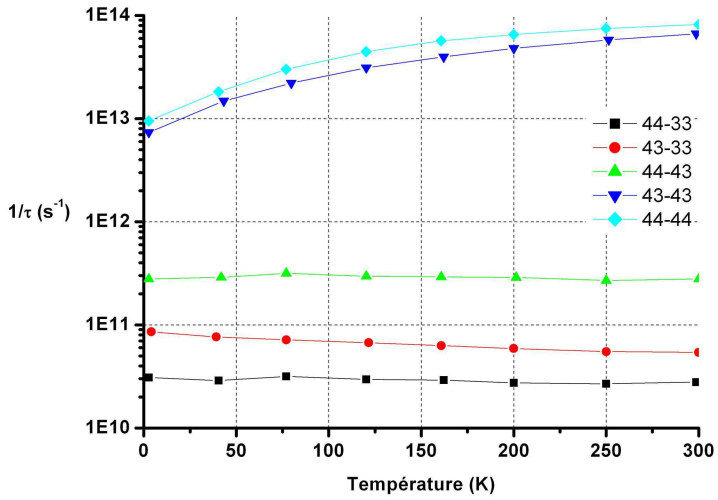


Fig.I.18: Dépendance en température du taux de transition par mécanisme électron-électron. La figure est tirée de la référence [51]

La somme est prise sur tout les états β décrits par des fonctions d'état $\left|\phi_\beta\right\rangle$ et une énergie ε_β, $f(\varepsilon_f, T_e)$ est la probabilité d'occupation de l'état d'énergie ε_f. Le temps de transition $t_{\alpha->f}$ se simplifie et prend la forme suivante :

$$\frac{1}{t_{\alpha->f}} = \sum_\beta R_{\alpha->\beta} \qquad \text{(I.38)}$$

Cette équation peut être réécrite en transformant la somme discrète en somme continue, et le temps de vie d'un état i s'écrit dans ce cas comme suit :

$$\frac{1}{t_{\alpha->f}} = \int d\varepsilon_\beta.D_f(\varepsilon_\beta).R_{\alpha\to\beta} \qquad \text{(I.39)}$$

où $D_f(\varepsilon_\beta) = \frac{a^2}{(2\pi)^2}\rho_{2D}.\Theta(\varepsilon_\beta - E_f)$ est la densité d'état, a étant le paramètre de maille dans les directions perpendiculaires à celle de la croissance des couches, $\rho_{2D} = \frac{m^*}{\pi.\hbar^2}$ étant la densité des électrons par unité de surface et d'énergie des électrons, Θ est la fonction de Heaviside.
Finalement, le temps de diffusion moyen est obtenu en moyennant cette fois-ci sur toutes les possibilités de l'état de départ ce qui donne la formule suivante :

$$\frac{1}{t_{i,f}} = \int d\varepsilon_\alpha.D_i(\varepsilon_\alpha).f(\varepsilon_\alpha,T_e).\frac{1}{t_{\alpha->f}} = \int d\varepsilon_\alpha.D_i(\varepsilon_\alpha).f(\varepsilon_i,T_e)\int d\varepsilon_\beta D_f(\varepsilon_\beta).(1-f(\varepsilon_\beta,T_e))R_{\alpha\to\beta} \quad \text{(I.40)}$$

En faisant ces hypothèses on se ramène à une description où seule compte l'énergie en bas de la sous-bande, et où les apports en énergie dus à la diffusion des électrons entre les sous-bandes sont rapidement dissipés dans la structure pour ramener la sous-bande à l'équilibre. C'est cette remarque qui nous permettra de calculer les températures électroniques dans les lasers à cascade quantique et ce qui fera l'objet du chapitre II de ce manuscrit.

La figure.I.19 montre une comparaison entre la statistique de Maxwell-Boltzmann et celle de Fermi-Dirac en fonction de la densité du dopage et de la température tirée de la référence [52]. On remarque que quelle que soit la température entre 300 K et 700 K et pour des dopages inférieurs à 2.10^{11} cm^{-2} les deux statistiques sont équivalentes. Les dopages communément utilisés dans les lasers à cascade quantique ne dépassent généralement pas une densité surfacique par période de 10^{11} cm^{-2}. Ceci est le résultat d'une optimisation sur le dopage de la zone active dans les LCQ. En effet, d'une part le dopage de la zone active est une nécessité pour s'affranchir des domaines d'instabilité électrique qui peuvent se former. D'autre part, il faut diminuer la densité des dopants. Elle induit des pertes par porteurs libres qui sont proportionnelles dans un modèle simple au dopage dans la zone active. C'est pour cette raison d'ailleurs que le dopage est généralement fait dans l'injecteur loin (~20 Å) de la zone où la transition active a lieu. On a donc un nombre de porteurs suffisamment faible dans les sous-bandes de telle façon que les statistiques de Fermi-Dirac et celle de Maxwell Boltzmann sont équivalentes. Nous choisirons donc la distribution de Maxwell-Boltzmann pour décrire la distribution électronique dans les sous-bandes, car elle permet d'alléger les calculs numériques. On fera aussi l'hypothèse supplémentaire suivante qui consiste à supposer que l'état d'arrivée est toujours vide ($1-f(E_\beta,T_e)=1$). Or la population de l'état de départ s'écrit comme $\int_{E_i} dE_i\rho_{2D}.e^{\frac{(E_i-E_{iF0})}{kT_e}} = n_i$, E_{iF0} est le quasi-niveau de Fermi de la sous-bande. On introduit la quantité E_{i0} calculée de telle façon que l'intégrale $\int_{\varepsilon_i} dE_i\rho_{2D}.e^{\frac{(E_{i0}-E_{iF0})}{kT_e}} = 1$. Dans le cadre de ses hypothèses, le temps de diffusion total d'un état *i* vers un état *f* donné par l'équation (I.37) se simplifie et prend la forme suivante :

$$\frac{1}{t_{i,f}} = n_i.\rho_{2D}\int_{E_i} d\varepsilon_\alpha.e^{\frac{(\varepsilon_\alpha-E_{i0})}{kT_e}}.\int_{E_f} d\varepsilon_\beta.R_{\alpha\to\beta} = n_i.\rho_{2D}\int_{E_i} dE_i.e^{\frac{(\varepsilon_\alpha-E_{i0})}{kT_e}}\frac{1}{t_{\alpha->f}} \quad \text{(I.41)}$$

Le temps de diffusion moyen en découle simplement en divisant l'équation (I.41) par n_i ce qui donne la forme suivante :

$$\frac{1}{\tau_{i,f}} = \rho_{2D} \int_{E_i} d\varepsilon_\alpha . e^{\frac{(\varepsilon_\alpha - E_{i0})}{kT_e}} . \int_{E_f} d\varepsilon_\beta . R_{\alpha \to \beta} \quad = \rho_{2D} \int_{E_i} dE_i . e^{\frac{(\varepsilon_\alpha - E_{i0})}{kT_e}} \frac{1}{t_{\alpha -> f}} \tag{I.42}$$

Considérons maintenant une structure QCL (comme le montre la figure.I.16**)** qui contient un large nombre de périodes. La figure.I.20 montre un modèle schématique d'un laser à cascade quantique. Chaque période a un nombre N identique de niveaux d'énergie. Dans cette structure périodique (la distribution des électrons est prise identique d'une période à l'autre), faisons un bilan sur les populations électroniques d'un état *i* quelconque dans la structure.

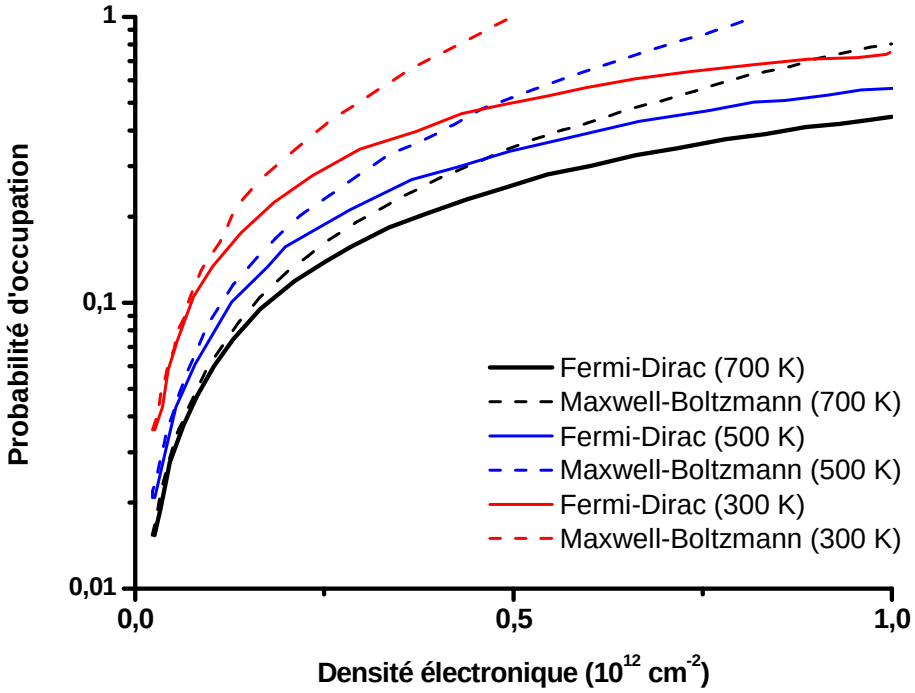


Fig.I.19: Comparaison entre la distribution de Maxwell-Boltzmann et celle de Fermi Dirac pour différents dopages et températures

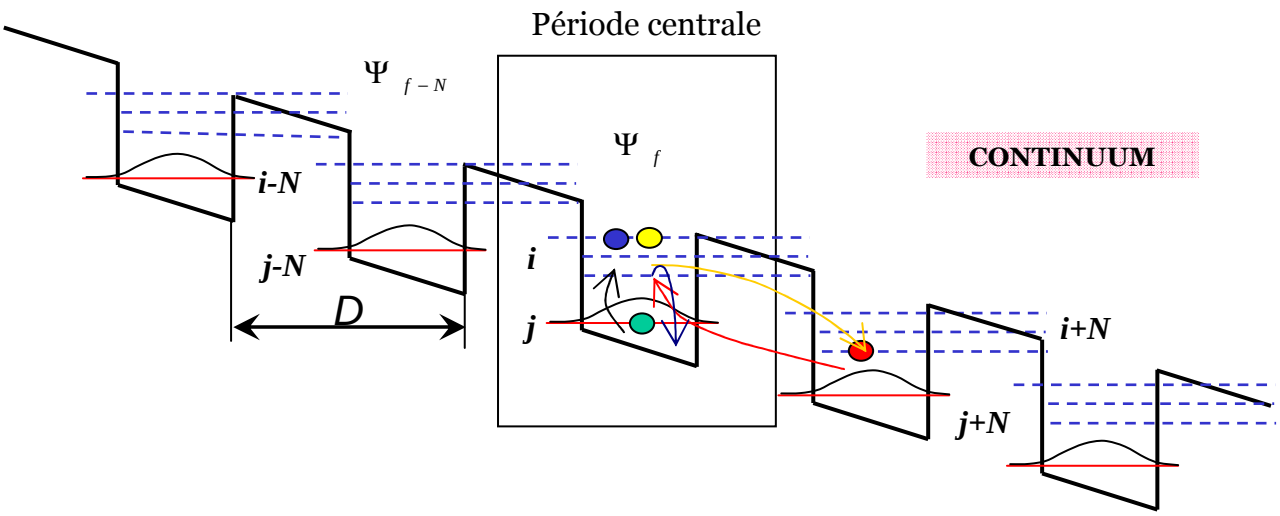


Fig.I.20: Représentation schématique d'un laser à cascade quantique et la manière dont on procède pour calculer le courant

La variation de population de cet état résulte de deux sortes de contributions :

1. Le gain en électrons qui contribue à l'augmentation de la population de l'état considéré. On va donc sommer sur toutes les possibilités de transition qui ont pour état final l'état i. Ces transitions sont de deux types : intra-période et qui donnent lieu à un terme de type $\sum_{j=1, j\neq i}^{N} \frac{n_j}{\tau_{j,i}}$ et des transitions inter-périodes (termes en $+\sum_{k=1}^{P}\sum_{j=1, j\neq 1}^{N}\left[n_j\left(\frac{1}{\tau_{j,i+kN}}+\frac{1}{\tau_{j+kN,i}}\right)\right]$)[4] qui ont lieu avec les états électroniques des périodes voisines. $\tau_{j,i}$ est donné par l'équation (I.40), n_j est la population de l'état j (dans nos calculs nous avons considéré une période de chaque côté de la période centrale, ce qui correspond à écrire P = 1 dans nos calculs).

2. De la même manière les pertes en électrons peuvent être calculées. Ce qui donne le terme en $-n_i \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \frac{1}{\tau_{i,j}}$ pour les transitions intra-périodes et $-\sum_{k=1}^{P}\sum_{j=1, j\neq 1}^{N}\left[n_i\left(\frac{1}{\tau_{i+kN,j}}+\frac{1}{\tau_{i,j+kN}}\right)\right]$ pour les transitions inter-périodes.

Finalement dans le cas général où l'on considère P périodes voisines, l'équation de variation de la population de l'état i s'écrit sous la forme suivante :

[4] Le terme de gain s'écrit en fait comme $\sum_{k=1}^{P}\sum_{j=1, j\neq 1}^{N}\left[n_j\left(\frac{1}{\tau_{j-kN,i}}+\frac{1}{\tau_{j+kN,i}}\right)\right]=\sum_{k=1}^{P}\sum_{j=1, j\neq 1}^{N}\left[n_j\left(\frac{1}{\tau_{j,i+kN}}+\frac{1}{\tau_{j+kN,i}}\right)\right]$ en utilisant la périodicité dans la structure.

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \frac{n_j}{\tau_{j,i}} - n_i \sum_{j=1, j\neq i}^{N} \frac{1}{\tau_{i,j}} + \sum_{k=1}^{P} \sum_{j=1, j\neq 1}^{N} \left[n_j \left(\frac{1}{\tau_{j,i+kN}} + \frac{1}{\tau_{j+kN,i}}\right) - n_i \left(\frac{1}{\tau_{i+kN,j}} + \frac{1}{\tau_{i,j+kN}}\right) \right] \quad \text{(I.43)}$$

Dans le régime stationnaire, $\frac{dn_i}{dt} = 0$, ce qui résulte en un système linéaire à N équations et N inconnues. Ces équations ne sont pas linéairement indépendantes. En rajoutant la condition qui traduit la neutralité électrique (la somme des populations des états d'une période de la structure doit être égale au dopage par période), le système d'équations admet forcément une solution. L'utilisation d'une distribution électronique de Maxwell-Boltzmann nous permet d'avoir un système d'équations linéaire qui se résout de manière matricielle. Nous renvoyons le lecteur à la référence [52] par exemple. C'est l'équipe de Paul Harrison de l'université de Leeds qui a introduit la première ce modèle pour la modélisation des LCQ [53]. Leur modèle qui suppose que les électrons ont une distribution de Fermi-Dirac dans les sous-bandes, nécessite une résolution par auto-cohérence et donc un temps de calcul beaucoup plus grand. Un bon accord entre théorie et expérience est obtenu pour le gain en dessous du seuil et pour le courant seuil avec ce genre de modèle comme indiqué dans [53]. Dans la figure.I.21, tirée de [52], sont tracés l'énergie de maximum du gain calculée et celle mesurée pour la structure à double phonon décrite dans la référence [33] en fonction du champ électrique appliqué à la structure. Un bon accord est obtenu là aussi entre calcul et expérience.

En résumé, le système d'équations (I.43) peut être vu comme une intégration de l'équation (I.35) en k. Cependant, il faut garder à l'esprit que l'hypothèse de la distribution thermale des électrons dans les sous-bandes, caractérisée par une température électronique constante, est nécessaire pour arriver à ce genre de résultat qui ne prend en compte que des grandeurs mésoscopiques.

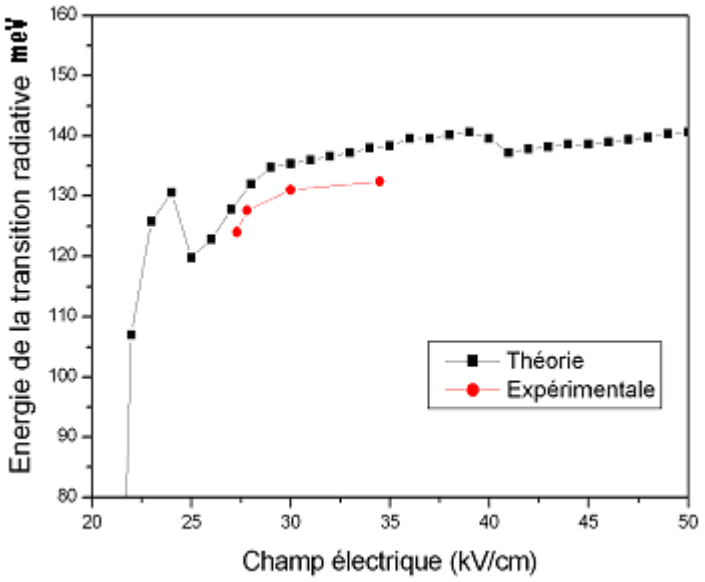


Fig.I.21: Comparaison entre l'énergie de maximum de gain calculée dans le modèle de saut des électrons entre états de Wannier-Stark et celle expérimentale pour une structure laser à 9 µm [52]

I.E.3. Effet tunnel séquentiel

On ne peut pas terminer cette section sur la simulation de transport dans les LCQ, sans décrire la méthode de calcul basée sur la matrice densité. Quand les états deviennent localisés et que le couplage entre eux est faible, les puits de la structure sont quasiment découplés. Dans ce cas les vecteurs de la base $\psi_n^\nu(\vec{r},z)=\psi_n^\nu(z).\frac{e^{i\vec{k}.\vec{r}}}{\sqrt{A}}$ (où $\psi_n^\nu(z)$ est le $\nu^{\text{ème}}$ état dans le puits et possédant une énergie $E = E^\nu+E_k-eFd$) seront constitués par des fonctions appelées des fonctions de Wannier et qui peuvent être obtenues par superposition des états de Bloch de la mini-bande. Ces fonctions dépendent de la phase des fonctions de Bloch choisies pour les construire. Ce point est résolu en utilisant le fait que ces fonctions d'onde de Wannier doivent être les plus localisées possible dans la période. Le lecteur pourra se référer à la référence [54] pour avoir plus de détail sur la façon dont on peut procéder de manière pratique pour résoudre cette ambiguïté. D'autres types de bases peuvent être utilisés dans cette approche. Le point commun entre tous ces choix est que les fonctions d'onde de la base doivent être localisées. La figure.I.22 tirée de [55] représente un exemple de base qui peut être utilisée dans ce cas pour une structure laser émettant à 8 µm. On remarquera par comparaison à la figure.I.16 que, ces états sont plus localisés dans la période. Deux types de fonctions d'onde correspondant aux deux sous-périodes d'un LCQ peuvent être distinguées : il y a celles qui sont localisées dans la région active (l'état haut du laser, l'état bas, et les deux états d'extraction phonon) et celles qui sont localisées dans la partie injecteur. Le couplage entre ces fonctions d'ondes se fait à travers les barrières d'injection et d'extraction.
Dans cette approche le point clef est de résoudre la variation de la matrice densité d'une particule $\rho_{i,j}=\langle a_i^+ a_j\rangle$ intégrée dans la direction *(x,y)*, donnée par l'équation suivante :

$$\frac{d}{dt}(\rho_{i,j})=\frac{i}{\hbar}.[\rho,H]_{i,j}+\sum_{fg}R_{fgij}\rho_{ij} \qquad \text{(I.44)}$$

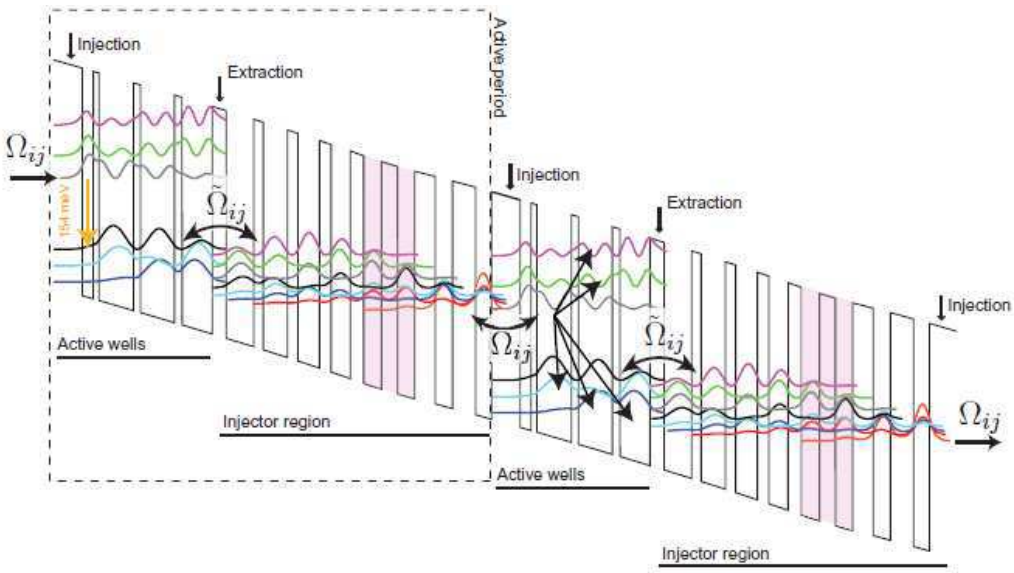


Fig.I.22 : Représentation des états de bases pour le traitement de la matrice densité [55]

Dans cette équation, les $\rho_{i,i}$ correspondant aux éléments diagonaux de la matrice densité sont les populations des états, et les $\rho_{i,j}$ décrivent la cohérence entre les électrons des états *i*,*j*. Comme précisé précédemment, le couplage $\hbar.\Omega_{ij}$ faible entre les états de la structure contribue au transfert d'électrons entre les états de la structure. Il a été démontré [12, 56, 57] que, dans le cas des hétérostructures et plus particulièrement des LCQ, pour bien décrire le comportement et le transport dans les LCQ, il est important d'introduire des contributions de « second-ordre » c.à.d. des termes en $(\hbar.\Omega_{ij})^4$ pour avoir un bon accord théorie expérience. En effet, si on ne se contente que du premier ordre et donc des termes en $(\hbar.\Omega_{ij})^2$, lors de transfert des électrons par effet tunnel vers un autre état il y a conservation du vecteur d'onde k au lieu d'une conservation de l'énergie [12]. Les équations (I.44) se réduisent aux deux équations types suivantes [55] :

$$\frac{dn_i}{dt} = \frac{d\,\rho_{ii}}{dt} = \sum_k R_{ik}.n_k + \sum_{k\neq i} i.\Omega_{ik}(\rho_{ik} - \rho_{ki}) \tag{I.45}$$

$$\frac{d\rho_{ij}}{dt} = i.\Omega_{ij}.(\sigma_{ij}.n_i - \sigma_{ji}.n_j) - (i.\Delta_{ij} + \tau_{\|,ij}^{-1}).\rho_{ij} \tag{I.46}$$

où $\hbar.\Delta_{il} = \varepsilon_i - \varepsilon_l$ est la différence en énergie entre l'état *i* et *l*, $\tau_{\|,ij}$ est le temps de déphasage et σ_{ij} est le terme qui rendra compte de la conservation en énergie lors du transfert par effet tunnel des électrons au lieu d'une conservation en k.

Dans le régime stationnaire, ces équations peuvent être réécrites comme suit [55, 58] :

$$0 = \sum_k \Re_{ik}.n_k \tag{I.47}$$

où

$$\Re_{ik} = R_{ik} + r_{ik} = R_{ik} + \frac{2.\Omega_{ik}^2.\tau_{\|,ik}}{1+\Delta_{ik}^2.\tau_{\|,ik}^2}.\sigma_{ik} \tag{I.48}$$

R_{ik} est le taux de diffusion d'un état i vers l'état j donné par une équation de type (I.33).
On notera aussi la similitude entre l'équation (I.43) et (I.47), la différence majeure réside dans l'introduction du terme qui rend compte du couplage entre les états à travers les barrières de couplage.
Dans les lasers à cascade quantique deux barrières de couplage importantes sont utilisées qui sont la barrière d'injection et celle d'extraction. Le courant dans ce dernier cas est calculé au plan qui sépare la barrière d'injection de la période précédente (voir figure.I.22). Dans la représentation simple d'un LCQ en un laser à 3 niveaux, supposons qu'une faible densité électronique peuple les sous-bandes et que les électrons sont caractérisés par une température électronique unique. Dans ce cas le courant est donné par la formule suivante [57, 59, 58, 60] :

$$J = q.n_s.\frac{\Omega^2.2.\tau_{\parallel}\ .\ln(1+e^{-\frac{\hbar.|\Delta|}{k.Te}})}{1+\Delta^2\tau_{\parallel}^2+4.\Omega^2.\tau_3.\tau_{\parallel}\ .\ln(1+e^{-\frac{\hbar.|\Delta|}{k.Te}})} \tag{I.49}$$

Δ est defini telque $\hbar.\Delta$ reperésente l'écart en énergie entre le niveau injecteur et le niveau haut du laser qui sont séparés par la barrière d'injection. Le couplage entre ces deux états est donné par $\hbar\Omega$. T_e est la température électronique dans la bande.
D'après l'équation (I.49), le courant autour de la résonance prend une forme lorentzienne dont la largeur est donnée par l'équation suivante :

$$\Delta E = \hbar.[4.\pi.\Omega^2.\tau_{\parallel}\ .\ln(1+e^{-\frac{\hbar.|\Delta|}{k.Te}})]^{1/2} \tag{I.50}$$

On voit ici que cette largeur diminue si l'écart Δ entre les deux états en résonance augmente. Ceci revient à dire que la forme du courant donnée par l'équation (I.49) n'est pertinente que pour des écarts à la résonance faible, chose qui est assurée par le choix de la base comme c'est expliqué au début de ce paragraphe. Ainsi R. Terazzi et al [55], ont trouvé que les courants incohérents dans cette base ne dépassent pas 1-3 % du courant total. Dans ce cas le transport électronique est assuré par des mécanismes cohérents entre paquets d'onde et les mécanismes de diffusion ne font que redistribuer les électrons dans les sous-bandes sans qu'en moyenne il y ait un transfert de charge dû à la diffusion.
Essayons maintenant de faire le rapprochement avec la méthode de saut d'électrons entre états de Wannier-Stark. Les dernières remarques impliquent que les courants cohérents n'auront d'importance entre les états que si la différence d'énergie est faible devant l'élargissement dû au déphasage $\hbar.\tau_{\parallel,ij}^{-1}$ comme le montre l'équation (I.46) qu'on peut réécrire comme suit :

$$\rho_{ij} = \frac{i.\Omega_{ij}.(\sigma_{ij}.n_i - \sigma_{ji}.n_j)}{(i.\Delta_{ij} + \tau_{\parallel,ij}^{-1})} \tag{I.51}$$

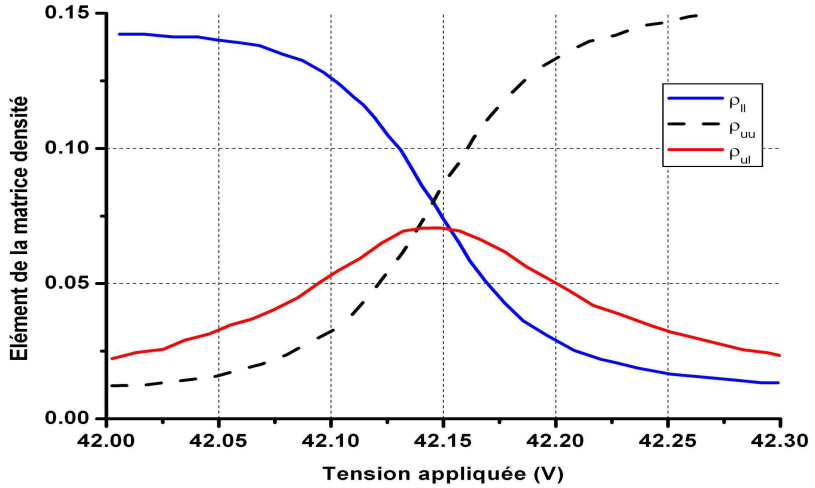


Fig.I.23: Variation des éléments de la matrice densité en fonction du champ appliqué à la structure pour deux états qui s'anti-croisent à V = 42,15 V [61]. On notera que l'élément non diagonal est non négligeable à l'anti-croisement

La figure.I.23 tirée de [61] montre la variation en fonction de la tension appliquée à la structure des différents éléments de la matrice densité dans la base de système de deux états qui s'anti-croisent. Comme le montre le graphe, on a $\rho_{ij} \approx 0$ sauf pour les tensions ou les états i et j s'anti-croisent. Il en découle que tant que la différence d'énergie entre les états dans la structure Δ est supérieure aux élargissements intrinsèques, la règle d'or de Fermi est valable pour le calcul des temps de diffusions des électrons. Le modèle diffusif décrit par la méthode de saut entre états de Wannier-Stark est donc applicable. Cependant, à l'anti-croisement ce modèle n'est plus satisfaisant. Des pics non-physiques de courant apparaissent alors dans les calculs.
Lee et al apportent aussi un autre élément de réponse quant à la relation entre les deux approches diffusives et cohérentes dans la ref [62]. Ils expliquent que dans la méthode de calcul de transport entre états de Wannier-Stark, bien qu'elle semble ne contenir que des termes incohérents, les éléments diagonaux dans une approximation de premier ordre contiennent des termes non diagonaux de la matrice densité ce qui explique l'équivalence des deux approches.

Dans notre cas nous avons choisi d'utiliser le modèle diffusif dans la mesure où il demande beaucoup moins de temps de calcul que les autres méthodes. Les cas d'anti-croisement entre états où un calcul plus élaboré est nécessaire ne sont pas calculés.

I.F. Calcul des temps de transition et différents mécanismes de diffusion

Dans tous ces modèles décrits dans le paragraphe précédent, la connaissance des mécanismes qui sont responsables des transitions électroniques est nécessaire pour décrire le composant étudié. En plus de l'émission spontanée, les mécanismes suivants ont été pris en compte dans notre cas: l'absorption et l'émission des phonons longitudinaux optiques qui sont des mécanismes inélastiques qui ne conservent pas l'énergie lors de la transition. Les autres mécanismes considérés sont le désordre d'alliage, la rugosité, la diffusion par les impuretés et la diffusion par les phonons longitudinaux acoustiques ; ces mécanismes sont élastiques ou quasi-élastiques.
L'effet principal des interactions électrons/électrons est l'homogénéisation de la température à l'intérieur des sous-bandes. On fait l'hypothèse de négliger l'impact net des interactions électron-électron sur les échanges entre sous-bandes. Ceci nous permet d'éviter de les calculer et de diminuer ainsi notablement les temps de calcul. Les travaux de P.Harrison et al [51] montrent que les taux de transition entre sous bandes associés à l'interaction électron-électron, sont toujours plus petits que ceux associés à l'interaction électron-phonon. L'approximation reste donc acceptable.
Enfin, l'absorption et l'émission stimulée des photons feront l'objet du chapitre III de ce manuscrit.
Le temps de vie par mécanisme est donné par la règle d'or de Fermi selon la formule (I.33). Dans cette équation apparaît l'hamiltonien de diffusion entre états H^{scatt}. Cet hamiltonien s'écrit comme suit :

$$H^{scat} = H^{émission\ phonon} + H^{absorption\ phonon} + H^{alliage} + H^{rugosité} + H^{phonon\ LA} \qquad \text{(I.52)}$$

Le temps de transition d'un état *i* vers un état *f* de la structure s'obtient selon la formule suivante en sommant sur tous les mécanismes de diffusion pris en compte :

$$\frac{1}{\tau_{i,f}} = \frac{1}{\tau_{i,f}^{émission\quad phonon}} + \frac{1}{\tau_{i,f}^{absorption\quad phonon}} + \frac{1}{\tau_{i,f}^{alliage}} + \frac{1}{\tau_{i,f}^{rugosité}} + \frac{1}{\tau_{i,f}^{phonon\quad LA}} \qquad \text{(I.53)}$$

On s'est basé sur les références G. Bastard [38], R.Ferreira et al [63] et Unuma et al [64] pour déterminer les hamiltoniens d'interactions par mécanisme et les hypothèses simplificatrices des formules de types (I.40). Nous allons décrire dans ce qui suit les différentes hypothèses faites et donner les formules des temps de diffusion qui en résultent pour chaque mécanisme.

I.F.1. Emission et absorption des phonons

L'hamiltonien d'interaction électron-phonon est donné par la somme des hamiltoniens correspondant aux différents modes de phonons de vecteur d'onde $\vec{q}$. Il s'écrit :

$$H^{\text{phonon}} = \sum_{\vec{q}} \alpha(\vec{q}).e^{-i.\vec{q}.\vec{r}}.b_q^+ + \alpha^*(\vec{q}).e^{i.\vec{q}.\vec{r}} b_q^- \qquad \text{(I.54)}$$

où $\alpha(\vec{q})$ est l'interaction entre électron et phonon LO, b_q^+ (respectivement b_q^-) est l'opérateur création des phonons (resp. annihilation des phonons) , $\vec{r}(x,y,z)$ est le vecteur position

I.F.1.a. Phonon LO

Dans le cas des phonons LO le terme $\alpha(\vec{q})$ est déterminé de telle façon que $|\alpha(\vec{q})|^2 = 2.\pi.\hbar.\omega_{LO} \dfrac{e^2}{\varepsilon_p.V.q^2}$, V étant le volume du système, $\hbar.\omega_{LO}$ est l'énergie du phonon de vecteur d'onde q et finalement $\varepsilon_p^{-1} = \varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_0^{-1}$, ε_∞ et ε_0 sont les permittivités à haute fréquence et statique de l'hétérostructure. Nous allons supposer que la dispersion des fréquences des phonons est plate dans ce qui suit: tous les phonons LO ont la même fréquence correspondant à $q = 0$.

En utilisant l'équation (I.33) et (I.54), le temps de transition entre l'état $|i,\vec{k}_i\rangle$, vers un état $|f,\vec{k}_f\rangle$ à température de réseau T = 0, est donné par l'équation suivante [63] :

$$\frac{1}{\tau_{i,f}^{LO}} = \frac{m^* e^2 \omega_{LO}}{2\hbar\varepsilon_p}.\int_0^{2\pi} d\theta \frac{I^{if}(Q)}{Q} \qquad \text{(I.55)}$$

où m^* est la masse effective dans la bande de départ (les bandes d'énergie sont supposées être paraboliques dans ce calcul).

$Q = |\vec{k}_f - \vec{k}_i| = \sqrt{k_i^2 + k_f^2 - 2.k_i.k_f.\cos\theta}$ est le module de la différence entre les vecteurs d'onde de l'état initial et celui de l'état final, $k_f^2 = k_i^2 + \dfrac{2.m^*}{\hbar^2}.(\varepsilon_i - \varepsilon_f - \hbar.\omega_{LO})$, et I^{ij} est le facteur défini par $I^{if} = \int dz \int dz'.\psi_i(z).\psi_f(z).e^{-Q|z-z'|}.\psi_i(z').\psi_f(z')$, ψ_i (resp. ψ_f) est la fonction enveloppe de l'électron dans l'état i (resp. dans l'état f) et z désigne l'axe de

croissance des matériaux. Dans l'approximation $\vec{k}.\vec{p}$ à 3 bandes, la fonction d'onde ψ_i est un vecteur à trois composantes. Dans ce cas, le facteur de forme I^{ij} s'écrit comme suit en utilisant l'équation (I.15) :

$$I^{if} = \int dz \int dz'.(\phi_{c,i}(z).\phi_{c,f}(z) + \phi_{lh,i}(z).\phi_{lh,f}(z) + \phi_{so,i}(z).\phi_{so,f}(z)).e^{-Q|z-z'|} \\ (\phi_{c,i}(z').\phi_{c,f}(z') + \phi_{lh,i}(z').\phi_{lh,f}(z') + \phi_{so,i}(z').\phi_{so,f}(z')) \tag{I.56}$$

Cette intégrale vaut δ_{if} lorsque $Q = 0$ et décroît comme Q^{-1} pour les grandes valeurs de Q. Le taux de transition total à une température différente de zéro, dans la mesure où la dispersion des phonons-LO a été négligée, est obtenu simplement en multipliant la formule (I.55), par un terme égal à ***(n+1)*** où ***n*** est donnée par la loi de Bose-Einstein :

$$n = \frac{1}{\exp(\frac{\hbar\omega_{LO}}{kT_{réseau}}) - 1} \tag{I.57}$$

le cas de l'absorption des phonons LO est conduit de la même manière que pour l'émission, et le résultat est similaire à celui pour l'émission en changeant $-\hbar\omega_{LO}$ en $\hbar\omega_{LO}$ et en multipliant par ***n*** au lieu de ***n+1***.

Considérons deux sous bandes séparées par l'énergie d'un phonon-LO (dans la structure étudiée ici $\hbar\omega_{LO} = 32meV$). Le graphe de la figure.I.24 représente le taux de transition vers l'état de plus basse énergie par émission d'un phonon-LO en fonction de l'énergie initiale de l'électron dans la sous bande supérieure (E_i = 0 eV correspond à k = 0). On voit que le taux maximal correspond à la transition pour les électrons qui sont en bas de bande. Puis plus l'énergie initiale est grande, plus le taux d'émission phonon est faible. Ce résultat est général pour toutes les transitions entre les sous bandes qui ont une énergie de séparation supérieure ou égale à l'énergie d'un phonon LO.

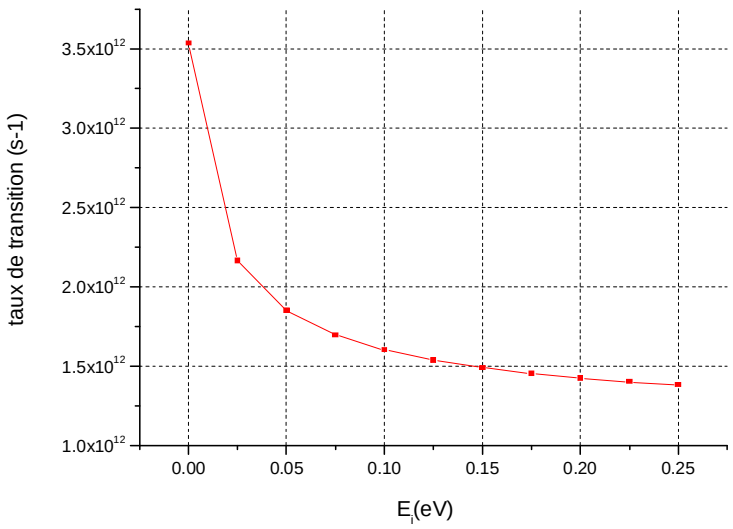


Fig.I.24 : Taux de transitions par émission de phonon LO pour un électron qui transite entre le niveau bas du laser et le premier niveau phonon en fonction de l'énergie en excès dans la sous bande supérieure

I.F.1.b. Phonon LA

Les phonons acoustiques sont l'autre type de phonon qui existe dans les matériaux. Nous ferons l'hypothèse que les branches acoustiques sont isotropes. Ceci nous permet de définir la vélocité c_s du son dans le matériau. Le vecteur d'onde d'un phonon acoustique sera noté $q=(q_{\parallel}, q_z)$, où $q_{\parallel}$ est la composante dans le plan parallèle au couches de l'hétérostructure et q_z celle dans la direction de croissance. L'interaction électrons-phonons acoustiques dans l'hamiltonien (I.54), $\alpha(\vec{q})$, est donnée dans l'approximation de potentiel de déformation[5] par la formule suivante :

$$|\alpha(\vec{q})|^2 = \frac{D^2}{2.\rho.c_s^2.V}.\hbar.\omega = \frac{D^2}{2.c_s.V}.\hbar.\sqrt{(q_{\parallel}^2 + |k_i - k_f|^2} \qquad \text{(I.58)}$$

On note que la conservation du vecteur d'onde lors de la transition d'un état $|i,\vec{k}_i\rangle$ vers un état $|f,\vec{k}_f\rangle$ impose que $|q_z|^2 = |k_i - k_f|^2$. D est le potentiel de déformation, ρ est la densité du matériau.
Dans ce cas le temps de diffusion d'un électron par émission d'un phonon LA est donné par la formule suivante [50, 63] :

$$\frac{1}{\tau_{i,f}^{LA}} = \frac{D^2}{8.\hbar.\rho.c_s^2.\pi^2}.\int_{-\infty}^{+\infty} dq_z.|f(q_z)|^2.\int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{+\infty} dk_f.k_f.\hbar.\omega.(1+n).\delta(E_i - E_f - \hbar\omega + \frac{\hbar^2}{2.m^*}.(k_i^2 - k_f^2)) \qquad \text{(I.59)}$$

$f(q_z) = \int \psi_i(z).e^{-i.q_z.z}\psi_f(z).dz$ est le facteur de forme de la transition, n est le facteur d'occupation des phonons LA donné par la loi de Bose-Einstein (I.57). Le temps correspondant à l'absorption de phonons acoustiques est obtenu en remplaçant (1+n) dans la formule (I.59) par n.
Etant donné que la contribution en énergie des phonons acoustiques (par rapport à un phonon LO par exemple) est très faible ~ 1meV, la diffusion due à ce type de phonon sera considérée comme quasi-élastique ($E_f \approx E_i$). On peut montrer que dans ce cas le taux de transition inter sous bandes correspondant est donné par l'équation suivante [64] :

$$\frac{1}{\tau_{i,f}^{LA}} = \frac{m^* k_B T D^2}{\pi\hbar^2 c_l}\int_0^{\pi} d\theta \int dz.[\psi_i(z).\psi_f(z)]^2 \qquad \text{(I.60)}$$

Dans cette formule m^* est la masse de l'état final, et c_l est la constante longitudinale élastique définie par $c_s = \sqrt{\frac{c_l}{\rho}}$ où c_s est la vitesse longitudinale du son dans le matériau.

Dans l'approximation $\vec{k}.\vec{p}$ à 3 bandes, le temps de transition donné par l'équation (I.60) s'écrit comme suit :

[5] Les phonons acoustiques induisent une contrainte et donc un changement dans la structure des bandes. Ceci se traduit par un potentiel d'interaction qui couple les phonons aux électrons et qui est proportionnel à la déformation induite en première approximation pour les petites déformations.

$$\frac{1}{\tau_{i,f}^{LA}} = \frac{m^* k_b T D^2}{\pi \hbar^2 c_l} \int_0^{\pi} d\theta . \int dz . [\phi_{i,c}(z).\phi_{f,c}(z) + \phi_{i,lh}(z).\phi_{f,lh}(z) + \phi_{i,so}(z).\phi_{f,so}(z)]^2 \quad \text{(I.61)}$$

Deux cas sont à prendre en compte dans le calcul de taux de transition d'un état à un autre par diffusion de phonon LA :

1. le bas de bande de l'état initial est plus haut en énergie que celui de l'état final et dans ce cas le taux de transition est donné directement par la formule précédente
2. Dans le cas contraire ne seront concernés que les électrons qui ont une énergie totale ($\varepsilon_i = E_i + E_c = E_i + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$) dans la bande initiale plus grande que celle de l'état final et dans ce cas on doit multiplier la formule précédente par un terme d'occupation exponentiel ce qui donne la formule :

$$\frac{1}{\tau_{i,f}^{LA}} = [\frac{m^* k_b T D^2}{\pi \hbar^2 c_l} \int_0^{\pi} d\theta \int dz . [\phi_{i,c}(z).\phi_{f,c}(z) + \phi_{i,lh}(z).\phi_{f,lh}(z) + \phi_{i,so}(z).\phi_{f,so}(z)]^2 * \exp(\frac{E_i - E_j}{kTe}) \quad \text{(I.62)}$$

Le temps de diffusion de l'électron par phonon-LA diminue d'un facteur 10 pour des températures qui augmentent de 0 à 300 K. Donc en pratique, la contribution des phonons-LA est négligeable comparée à celle des phonons-LO à basse température. En revanche, à haute température sa contribution augmente et elle ne peut plus être négligée.

I.F.2. Désordre d'alliage

Quand un semi-conducteur cubique à faces centrées est un alliage de la forme $A_x B_{1-x} C$, l'atome C occupe un site fixe dans l'une des mailles cubiques faces centrées constituant le cristal. Les autres atomes (A et B) sont distribués d'une façon aléatoire sur les autres sites de l'autre maille face centrée. Le potentiel cristallin n'est donc plus périodique et il n'y a plus d'onde de Bloch qui traverse la structure. Pour résoudre cette difficulté, l'approximation du cristal virtuel est généralement utilisée [38]. Dans ce cas le potentiel réel du cristal est remplacé par un potentiel virtuel périodique qui s'écrit $V_{eff} = x.V_A + (1-x).V_B + V_c$. Sous cette hypothèse, la présence de couches qui ont une composition de la forme $A_x B_{1-x} C$ (par exemple $Al_x Ga_{1-x} As$ ou $In_x Ga_{1-x} As$) introduit un désordre dans l'énergie de la bande de conduction qui se traduit par un potentiel de diffusion des électrons.
L'hamiltonien d'interaction par désordre d'alliage s'écrit comme suit [38, 65] :

$$H^{\text{alliage}} = \delta E . \delta x(r) \quad \text{(I.63)}$$

$\delta x(r)$ est l'écart à la composition à la position r et δE l'amplitude maximale du changement de potentiel qui en résulte. La fonction de corrélation de $\delta x(r)$ prend la forme suivante [38, 65] :

$$\langle \delta x(r) . \delta x(r') \rangle = \frac{a^3}{4} . x . (1 - x) . \delta (r - r') \quad \text{(I.64)}$$

La fonction de Dirac dans la formule précédente suppose qu'il n'y a pas de corrélation entre cations appartenant à des sites différents.
Sous ces hypothèses on montre que le temps de transition dû à la diffusion par le désordre d'alliage est donné par la formule suivante :

$$\frac{1}{\tau_{i,f}^{allia}} = \frac{m^* a^3 (\delta E)^2.x.(1-x)}{4\pi\hbar^2} \int_0^{\pi} d\theta \int dz [\psi_i(z).\psi_f(z)]^2 \qquad \text{(I.65)}$$

a dans cette formule est le paramètre de maille. Dans l'approximation $\vec{k}.\vec{p}$ à 3 bandes, l'équation (I.65) s'écrit comme suit :

$$\frac{1}{\tau_{i,f}^{allia}} = \frac{m^* a^3 (\delta E)^2.x.(1-x)}{4.\pi\hbar^2} \int_0^{\pi} d\theta \int dz.[\phi_{i,c}(z).\phi_{f,c}(z) + \phi_{i,lh}(z).\phi_{f,lh}(z) + \phi_{i,so}(z).\phi_{f,so}(z)]^2 \qquad \text{(I.66)}$$

Dans cette expression δE est pris comme la différence entre les énergies de la bande de conduction des matériaux AC et BC (exemple entre $InAs$ et $GaAs$ dans le cas des lasers cascades de type $InGaAs/AlInAs$) [38]. Certains auteurs le prennent comme un paramètre de fit.

I.F.3. Diffusion par la rugosité d'interface

Il est communément admis que les lasers fabriqués présentent des interfaces non lisses. La figure.I.25 présente une image prise par microscopie de l'interface entre deux puits quantiques dans une structure QCLs. En effet, on voit que des îlots sont formés à l'interface entre puits et barrière qui sont à l'origine d'un potentiel de diffusion des électrons.

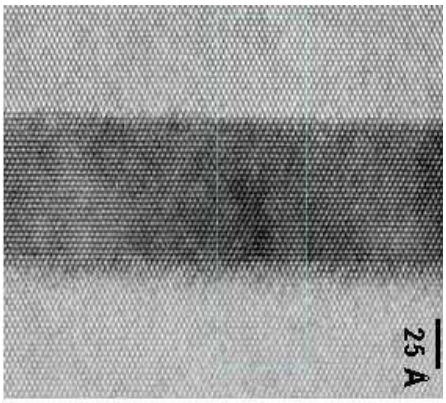


Fig.I.25 : Rugosité à l'interface InGaAs-AlInAs [52]

La forme et la répartition des îlots est difficile à connaître précisément. Deux types de répartitions sont utilisés dans la littérature : la répartition gaussienne ou exponentielle. Il a été démontré dans la référence [52] que ces deux répartitions donnent des résultats semblables. Dans notre modèle nous avons choisi la répartition gaussienne. Dans ce cas, deux paramètres sont utilisés dans le modèle pour décrire l'effet de la rugosité dans la structure : la hauteur des défauts Δ et leur longueur de corrélation Λ [64] . L'hamiltonien de diffusion par la rugosité s'écrit donc comme suit :

$$H^{\text{rugo}} = V_b.\delta(z - z_{\text{interface}}).\Delta(\text{r}) \tag{I.67}$$

V_b est la discontinuité de bande de conduction entre le matériau puits et barrière dans la structure, et

$$\langle \Delta(\text{r}).\Delta(\text{r}') \rangle = \Delta^2.e^{-\frac{|r-r'|^2}{\Lambda^2}} \tag{I.68}$$

En utilisant les équations (I.67)et (I.68), on peut démontrer que le temps de transition par diffusion dans le cas d'une distribution gaussienne peut s'écrire sous la forme suivante [64]:

$$\frac{1}{\tau_{i,f}{}^{rugo}} = \frac{m^*\Delta^2\Lambda^2}{\hbar^2} F_{i,f}^2 \int_0^{\pi} d\theta e^{-\tilde{q}^2\Lambda^2/4} \tag{I.69}$$

$\tilde{q}$ est la différence en module entre le vecteur d'onde dans l'état de départ et celui de l'arrivée et $F_{i,f} = V_b.\psi_i(-\frac{L}{2}).\psi_f(-\frac{L}{2})$ où $\psi_i(-\frac{L}{2})$ (resp. $\psi_f(-\frac{L}{2})$) la valeur de la fonction enveloppe de l'état initial i (resp. final f) à l'interface. Toujours dans l'approximation $\vec{k}.\vec{p}$ à 3 bandes, la formule (I.69) s'écrit comme suit :

$$\frac{1}{\tau_{i,f}{}^{rugo}} = \frac{m^*\Delta^2\Lambda^2}{\hbar^2}.V_b^2.\left(\phi_{i,c}.\phi_{f,c} + \phi_{i,lh}.\phi_{f,lh} + \phi_{i,so}.\phi_{f,so}\right)^2 \int_0^{\pi} d\theta e^{-\tilde{q}^2\Lambda^2/4} \tag{I.70}$$

I.F.4. Diffusion par les impuretés

Les électrons dans les sous-bandes peuvent être diffusés par le potentiel coulombien des donneurs ionisés dans la structure laser. Le temps de diffusion d'un état $|i,\vec{k}_i\rangle$ vers un état $|f,\vec{k}_f\rangle$ s'écrit dans ce cas comme suit [63, 64] :

$$\frac{1}{\tau_{i,f}{}^{imp}} = \frac{m^*.e^4}{4.\pi\hbar^2\varepsilon_0^2.\hbar^2} \int dz.N(z) \int_0^{\pi} d\theta. \left[\frac{1}{\tilde{q}} \int dz.\psi_i(z).\psi_f(z)\right]^2 \tag{I.71}$$

Dans cette équation, m^* est la masse effective de l'électron, e est la charge élémentaire, ε_0 est la permittivité statique du milieu, $N(z)$ est la densité d'impuretés en z et $\psi_i(z)$ (resp. $\psi_j(z)$) est la fonction d'onde enveloppe de l'état i (resp. l'état f) et $\tilde{q} = |\vec{k}_f - \vec{k}_i|$.

Dans le modèle $\vec{k}.\vec{p}$ à 3 bandes à trois bandes, la formule (I.71) peut être réécrite :

$$\frac{1}{\tau_{i,f}^{imp}} = \frac{m^*.e^4}{4.\pi\hbar^2\varepsilon_0^2.\hbar^2}\int dz.N(z)\int_0^{\pi} d\theta.\left[\frac{1}{\tilde{q}}\int dz.(\phi_{i,c}(z).\phi_{f,c}(z)+\phi_{i,lh}(z).\phi_{f,lh}(z)+\phi_{i,so}(z).\phi_{f,so}(z)\right]^2 \quad \text{(I.72)}$$

La figure.I.26 montre le résultat de deux calculs différents des caractéristiques courant-tension du laser en GaInAs/AlInAs étudié ici. La courbe en noir est celle obtenue en ne prenant en compte que les cinq mécanismes de diffusion décrits si dessus, alors que la courbe rouge est celle obtenue en prenant en compte en plus la diffusion des électrons par les impuretés à travers l'équation (I.71). La densité de dopage utilisée pour ces simulations est égale à 1.10^{11} cm^{-2}.

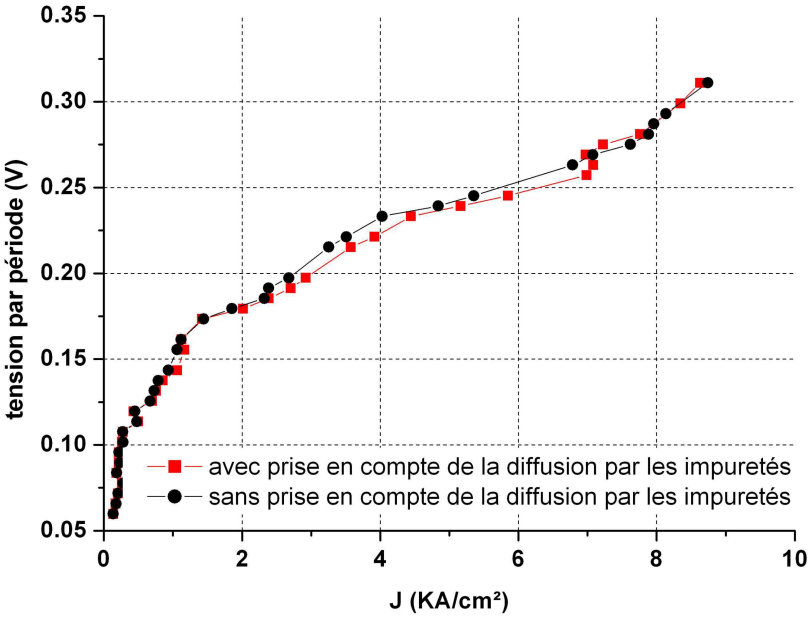


Fig.I.26 : Effet de la prise en compte de la diffusion par les impuretés (laser émettant à 9µm tirée de la référence [33])

De cette comparaison il ressort que l'effet des impuretés est négligeable sur le courant de sortie du laser.

I.F.5. Schrödinger-Poisson

Comme nous l'avons précisé, les lasers à cascade quantique sont intentionnellement et périodiquement dopés. La prise en compte de l'existence des donneurs ionisés dans notre modèle peut être faite au moment de la résolution des fonctions d'onde en ajoutant l'effet de ces impuretés sur le potentiel vu par les électrons.
L'application du théorème de Gauss sur une période du laser montre que l'existence des charges localisées dans l'espace va influer localement sur la tension appliquée à la structure. Dans le modèle que nous utilisons ici pour modéliser les LCQ, l'équation de Schrödinger (I.14) du premier chapitre, sera couplée à l'équation de Poisson qui s'écrit comme suit :

$$\frac{d}{dz}\left(\varepsilon(z).\frac{d}{dz}\right).V(z) = -e\left[N_D(z) - n(z)\right] \tag{I.73}$$

Dans cette équation ε est la permittivité du matériau, V(z) le potentiel électrostatique, N_d la densité de donneur à la position z, n est la densité d'électrons à la position z et qui sont liées à la densité de dopage par l'équation suivante valable dans le régime de haute température où l'on peut considérer que tous les donneurs sont ionisés :

$$N_s = \sum_i n_i = \int_0^{L_p} N_D(z).dz \tag{I.74}$$

La prise en compte de cet effet rend le modèle plus coûteux numériquement. Les deux graphes de la figure.I.27 montrent une comparaison entre les résultats des calculs de la caractéristique courant-tension selon qu'on prend en compte l'équation de Poisson (courbes noires) ou non (courbes rouges). A partir de ces courbes, on voit que les effets des impuretés ionisés localisées sont négligeables au premier ordre. En effet la variation maximale du courant pour une tension fixe entre les deux courbes ne dépasse pas les 10 %. De plus, la courbe de la température électronique en fonction du courant prouve aussi que la température électronique reste au premier ordre inchangée entre les deux approches.
Donc en conclusion, la prise en compte de l'équation de Poisson couplée à l'équation de Schrödinger n'est pas nécessaire, car les densités de dopage sont trop faibles pour avoir une influence sur le potentiel de la structure. Dans la suite, nous négligerons donc cet effet et nous ne prendrons en compte que l'équation de Schrödinger dans notre modèle.

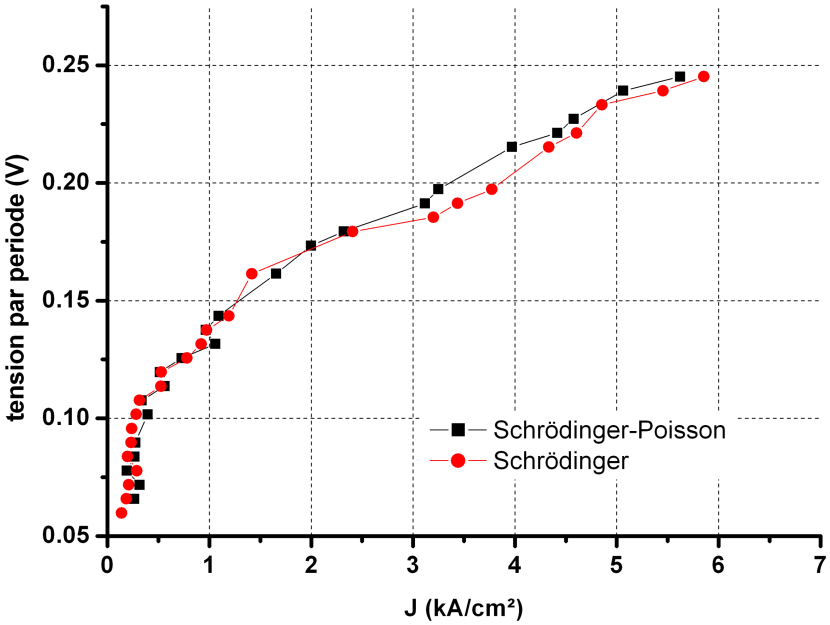


Fig.I.27 : Effet de la prise en compte de l'équation de Poisson sur le calcul du courant qui traverse la structure (laser émettant à 9µm tirée de la référence [33])

I.G. Conclusion

Dans ce chapitre, après une description générale des lasers à cascade quantique et de leurs principaux domaines d'utilisations, nous avons mis l'accent sur les différents modèles de calculs des caractéristiques des LCQ. Dans un premier temps, un modèle simple à trois états a été utilisé. Bien que très simple, il permet de fixer les idées en termes de fonctionnement du laser. Néanmoins, pour aller plus loin et comprendre l'effet de certains paramètres sur les performances des lasers, des modèles plus élaborés doivent être utilisés. C'est ce qui a fait l'objet des sections I.D à I.E de ce chapitre. Nous avons en particulier comparé les trois modèles utilisés pour la description du transport électronique dans ces composants. Nous avons choisi d'utiliser un modèle d'équations bilans qui permet de bien décrire le composant dans un état stationnaire. La dernière partie de ce chapitre est un résumé des différents mécanismes de transitions pris en compte dans notre modèle. Nous avons aussi mis l'accent lors de cette revue bibliographique sur l'importance de la prise en compte de la température électronique dans notre modèle pour espérer reproduire les performances obtenues réellement avec ce type de composant. Une étude plus détaillée sur ce dernier point fait l'objet du chapitre suivant.

Références Bibliographiques

[1] Eric B. Takeuchi, Timothy Rayner, Miles Weida, Salvatore Crivello, and Timothy Day. Standoff detection of explosives and chemical agents using broadly tuned external-cavity quantum cascade lasers (ec-qcls). In Colin Lewis, editor, *SPIE*, volume 6741, page 674104. SPIE, 2007.

[2] A. R. Adams. Band-structure engineering for low-threshold high-efficiency semiconductor lasers. *IEEE Electron.Lett*, 22:249, 1986.

[3] E.Rosencher and B.Vinter. *Optoélectronique*. DUNOD, 2002.

[4] T. Ashley. Type-I InSb-based mid-infrared diode lasers. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, 359:475, 2001.

[5] J. R. Meyer, C. A. Hoffman, and F. J. Bartoli. Type-II quantum-well lasers for the mid-wavelength infrared. *Applied Physics Letters*, 67:3160, 1995.

[6] C. L. Canedy, W. W. Bewley, J. R. Lindle, I. Vurgaftman, C. S. Kim, M. Kim, and J. R. Meyer. Continuous-wave operation of λ=3.25 µm broadened-waveguide w quantum-well diode lasers up to T=195k. *Applied Physics Letters*, 86:211105, 2005.

[7] R.F.Kazarinov and R.A.Suris. Possibility of amplification of electromagnetic waves in a semiconductor with a superlattice. *Fizika i Tekhnika Poluprovodnikov*, 5(4):797, 1971.

[8] K. K. Choi, B. F. Levine, R. J. Malik, J. Walker, and C. G. Bethea. Periodic negative conductance by sequential resonant tunneling through an expanding high-field superlattice domain. *Phys. Rev. B*, 35(8):4172, 1987.

[9] J. Faist, F. Capasso, D.L. Sivco, C. Sirtori, A.L. Hutchinson, and A.Y. Cho. Quantum cascade lasers. *Science*, 264(5158):553, 1994.

[10] X. J. Wang, J. Y. Fan, T. Tanbun-Ek, and F.-S. Choa. Low threshold quantum-cascade lasers of room temperature continuous-wave operation grown by metal-organic chemical-vapor deposition. *Appl. Phys. Lett*, 90:211103, 2007.

[11] P. Harrison and R. A. Soref. Population-inversion and gain estimates for a semiconductor Taser. *IEEE J. Quantum. Electron*, 37(1):153, 2001.

[12] A. Wacker. *Semiconductor Superlattices : A model system for non linear transport*. Physics Reports, 2001.

[13] J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori, D. L. Sivco, A. L. Hutchinson, and A. Y. Cho. Vertical transition quantum cascade laser with bragg confined excited state. *Appl. Phys. Lett*, 66:538–540, 1995.

[14] K. J. Franz, J. J.J. Raftery, P.Q. Liu, A.J. Hoffman, M.D. Escarra, S.S. Howard, Y.Dikmelik, J. B. Khurgin, X. Wang, J. Fan, and C.Gmachl. Negative differential resistance and pulse instabilities in minimalized quantum cascade laser structures. In *CLEO*, 2008.

[15] C. Faugeras, S. Forget, E. Boer-Duchemin, H. Page, J.-Y. Bengloan, O. Parillaud, M. Calligaro, C. Sirtori, M. Giovannini, and J. Faist. High-power room temperature emission quantum cascade lasers at λ=9 µm. *IEEE J. Quantum. Electron*, 41(12):1430, 2005.

[16] R. P. Green, A. Krysa, J. S. Roberts, D. G. Revin, L. R. Wilson, E. A. Zibik, W. H. Ng, and J. W. Cockburn. Room-temperature operation of InGaAs/AlInAs quantum cascade lasers grown by metalorganic vapor phase epitaxy. *Applied Physics Letters*, 83(10):1921, 2003.

[17] S. R. Darvish, S. Slivken, A. Evans, J. S. Yu, and M. Razeghi. Room-temperature, high-power, and continuous-wave operation of distributed-feedback quantum-cascade lasers at lambda 9.6 um. *Applied Physics Letters*, 88(20):201114, 2006.

[18] K. Fujita, S. Furuta, A. Sugiyama, T. Ochiai, T. Edamura, N. Akikusa, M. Yamanishi, and H. Kan. Room temperature, continuous-wave operation of quantum cascade lasers with

single phonon resonance-continuum depopulation structures grown by metal organic vapor-phase epitaxy. *Applied Physics Letters*, 91(14):141121, 2007.
[19] Q.J. Wang, C. Pflügl, L. Diehl, F. Capasso, T. Edamura, S. Furuta, M. Yamanishi, and H.Kan. High performance quantum cascade lasers based on three-phonon-resonance design. *Applied Physics Letters*, 94:011103, 2009.
[20] A. Evans, J. Nguyen, S. Slivken, J. S. Yu, S. R. Darvish, and M. Razeghi. Quantum-cascade lasers operating in continuous-wave mode above 90 °C at lambda 5.25 um. *Applied Physics Letters*, 88(5):051105, 2006.
[21] J. S. Yu, S. Slivken, S. R. Darvish, A. Evans, B. Gokden, and M. Razeghi. High-power, room-temperature, and continuous-wave operation of distributed-feedback quantum-cascade lasers at lambda 4.8 um. *Applied Physics Letters*, 87(4):041104, 2005.
[22] J. S. Yu, A. Evans, S. Slivken, S. R. Darvish, and M. Razeghi. Temperature dependent characteristics of lambda 3.8 um room-temperature continuous-wave quantum-cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 88(25):251118, 2006.
[23] J. S. Yu, S. R. Darvish, A. Evans, J. Nguyen, S. Slivken, and M. Razeghi. Room-temperature continuous-wave operation of quantum-cascade lasers at lambda 4 um. *Applied Physics Letters*, 88(4):041111, 2006.
[24] A. Evans, S. R. Darvish, S. Slivken, J. Nguyen, Y. Bai, and M. Razeghi. Buried heterostructure quantum cascade lasers with high continuous-wave wall plug efficiency. *Applied Physics Letters*, 91(7):071101, 2007.
[25] Y. Bai, S. Slivken, S. R. Darvish, and M. Razeghi. Room temperature continuous wave operation of quantum cascade lasers with 12.5% wall plug efficiency. *Appl. Phys. Lett*, 93:021103, 2008.
[26] D. G. Revin, M. R. Soulby, J. W. Cockburn, Q. Yang, C. Manz, and J. Wagner. Dispersive gain and loss in midinfrared quantum cascade laser. *Applied Physics Letters*, 92(8):081110, 2008.
[27] D. G. Revin, L. R. Wilson, E. A. Zibik, R. P. Green, J. W. Cockburn, M. J. Steer, R. J. Airey, and M. Hopkinson. InGaAs/AlAsSb quantum cascade lasers, 2004.
[28] Q. Yang, C. Manz, W. Bronner, L. Kirste, K. Kohler, and J. Wagner. GaInAs/AlGaAsSb quantum-cascade lasers, 2005.
[29] A. Lyakh, R. Maulini, A. Tsekoun, R. Go, C. Pflügl, L. Diehl, Q. J. Wang, F.Capasso, and C. Kumar N. Patel. 3 W continuous-wave room temperature single-facet emission from quantum cascade lasers based on nonresonant extraction design approach. *Applied Physics Letters*, 95:141113, 2009.
[30] J.Faist. Wallplug efficiency of quantum cascade lasers: Critical parameters and fundamental limits. *Appl. Phys. Lett*, 90:253512, 2007.
[31] G. Sun and J. B. Khurgin. Optically pumped four-level infrared laser based on intersubband transitions in multiple quantum wells: Feasibility study. *IEEE J. Quantum. Electron*, 29:1104, 1993.
[32] S.S. Howard, and K. Franz D.P. Howard, A.Hoffman, D.L. Sivco, and C.F. Gmachl. The effect of injector barrier thickness and doping level on current transport and optical transition width in a lambda = 8.0 µm quantum cascade structure. *Applied Physics Letters*, 93:191107, 2008.
[33] J. Faist, D. Hofstetter, M. Beck, T. Aellen, M.Rochat, and A. Blaser. Bound-to-continuum and two-phonon resonance, quantum-cascade lasers for high duty cycle, high-temperature operation. *IEEE J. Quantum. Electron.*, 38:533, 2002.
[34] G. Scamarcio, F. Capasso, C. Sirtori, J. Faist, A.L. Hutchinson, D.L. Sivco, and A.Y. Cho. High-Power Infrared (8-Micrometer Wavelength) Superlattice Lasers. *Science*, 276(5313):773, 1997.

[35] A. Tredicucci, F. Capasso, C. Gmachl, D.L. Sivco, A. L. Hutchinson, and A.Y. Cho. High performance interminiband quantum cascade lasers with graded superlattices. *Applied Physics Letters*, 73(15):2101–2103, 1998.
[36] A. Tahraoui, A. Matlis, S. Slivken, J. Diaz, and M. Razeghi. High-performance quantum cascade lasers (lambda 11 um) operating at high temperature (T >= 425 k). *Applied Physics Letters*, 78(4):416, 2001.
[37] A. Friedrich, G. Boehm, and M.C. Amann. Low-threshold injectorless quantum cascade laser with four material compositions. *Electronics Letters*, 44(9):580, 2008.
[38] G.Bastard. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. Les éditions de physique, 1992.
[39] C. Sirtori, F. Capasso, J. Faist, and S. Scandolo. Nonparabolicity and a sum rule associated with bound-to-bound and bound-to-continuum intersubband transitions in quantum wells. *Phys. Rev. B*, 50(12):8663, 1994.
[40] Y. Bai, S. Slivken, S. Kuboya, S.R Darvish, and M. Razeghi. Quantum cascade lasers that emit more light than heat. *Nat Photon*, 4(2):99, 2010.
[41] H. Page, C. Becker, A. Robertson, G. Glastre, V. Ortiz, and C. Sirtori. 300 K operation of a GaAs-based quantum-cascade laser at lambda 9 µm. *Applied Physics Letters*, 78(22):3529, 2001.
[42] C. Becker. *Lasers à cascade quantique : Etude physique et ingénierie de la structure quantique*. PhD thesis, Ecole Polytechnique, December 2002.
[43] G.L. Bir and G.E.Pikus. *Symmetry and strain-induced effects in semiconductors*. Wiley, 1974.
[44] Chris G. Van de Walle. Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory. *Phys. Rev. B*, 39(3):1871, January 1989.
[45] A. Nedelcu. Semi-conducteur III-V massif contraint méthode kp. Technical report, Thales-Alcatel III-V LAB, Fevrier 2007.
[46] H. Landolt and R. Börnstein. *Semi-Conductors Basic Data*. Springer 96, 1991.
[47] S. Adachi. *Physical Properties of III-V semiconductor compounds, InP,InAs, GaAs, GaP, InGaAs and InGaAsP*. John Wiley&Sons, 1992.
[48] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan. Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, 89(11):5815–5875, 2001.
[49] R.C. Iotti and F. Rossi. Nature of charge transport in quantum-cascade lasers. *Phys. Rev. Lett.*, 87(14):146603, 2001.
[50] P. Harrison. *Quantum Wells, Wires and Dots*. Wiley, 2005.
[51] P. Harrison. The nature of the electron distribution functions in quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 75(18):2800–2802, 1999.
[52] A. Leuliet. *Simulation du Transport dans les Lasers à Cascade Quantiques*. PhD thesis, Université Paris 7, 2010.
[53] D. Indjin, P. Harrison, R. W. Kelsall, and Z. Ikonic. Self-consistent scattering theory of transport and output characteristics of quantum cascade lasers. *Journal of Applied Physics*, 91(11):9019, 2002.
[54] S.-C. Lee and A. Wacker. Nonequilibrium green's function theory for transport and gain properties of quantum cascade structures. *Phys. Rev. B*, 66(24):245314, 2002.
[55] R. Terazzi and J. Faist. A density matrix model of transport and radiation in quantum cascade lasers. *New Journal of Physics*, 12(3):033045, 2010.
[56] H. Willenberg, G. H. Döhler, and J. Faist. Intersubband gain in a bloch oscillator and quantum cascade laser. *Phys. Rev. B*, 67(8):085315, 2003.
[57] R. Terazzi, T. Gresch, A. Wittmann, and J. Faist. Sequential resonant tunneling in quantum cascade lasers. *Phys. Rev. B*, 78(15):155328, 2008.

[58] H. Callebaut and Q. Hu. Importance of coherence for electron transport in terahertz quantum cascade lasers. *Journal of Applied Physics*, 98(10):104505, 2005.
[59] C. Sirtori, F. Capasso, J. Faist, A.L. Hutchinson, D.L. Sivco, and A.Y. Cho. Resonant tunneling in quantum cascade lasers. *IEEE J. Quantum. Electron*, 34(9):1722–1729, 1998.
[60] A. Buffaz, M. Carras, L. Doyennette, V. Trinité, X. Marcadet, and V. Berger. Long range resonant tunneling in quantum cascade structures. *Applied Physics Letters*, 96(16):162103, 2010.
[61] A. Gordon and D. Majer. Coherent transport in semiconductor heterostructures: A phenomenological approach. *Phys. Rev. B*, 80(19):195317, 2009.
[62] S.-C. Lee, F. Banit, M. Woerner, and A. Wacker. Quantum mechanical wavepacket transport in quantum cascade laser structures. *Phys. Rev. B*, 73(24):245320, 2006.
[63] R. Ferreira and G. Bastard. Evaluation of some scattering times for electrons in unbiased and biased single- and multiple-quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, 40(2):1074, 1989.
[64] T. Unuma, M. Yoshita, T. Noda, H. Sakaki, and H. Akiyama. Intersubband absorption linewidth in GaAs quantum wells due to scattering by interface roughness, phonons, alloy disorder, and impurities. *Journal of Applied Physics*, 93(3):1586, 2003.
[65] F. Chevoir and B. Vinter. Scattering-assisted tunneling in double-barrier diodes: Scattering rates and valley current. *Phys. Rev. B*, 47(12):7260, 1993.
[66] L. Diehl, D. Bour, S. Corzine, J. Zhu, G. Hofler, M. Loncar, M. Troccoli, and Federico Capasso. High-power quantum cascade lasers grown by low-pressure metal organic vapor-phase epitaxy operating in continuous wave above 400 K. *Applied Physics Letters*, 88(20):201115, 2006.
[67] J. Chen, O. Malis, A. M. Sergent, D. L. Sivco, N. Weimann, and A. Y. Cho. $In_{0.68}Ga_{0.32}As/Al_{0.64}In_{0.36}As/InP$ 4.5 µm quantum cascade lasers grown by solid phosphorus molecular beam epitaxy.
[68] L. Diehl, D. Bour, S. Corzine, J. Zhu, G. Hofler, M. LonCar, M. Troccoli, and Federico Capasso. High-temperature continuous wave operation of strain-balanced quantum cascade lasers grown by metal organic vapor-phase epitaxy. *Applied Physics Letters*, 89(8):081101, 2006.
[69] X. J. Wang, J. Y. Fan, T. Tanbun-Ek, and F.-S. Choa. Low threshold quantum-cascade lasers of room temperature continuous-wave operation grown by metal-organic chemical-vapor deposition. *Applied Physics Letters*, 90(21):211103, 2007.
[70] K. Ohtani, K. Fujita, and H. Ohno. Mid-infrared InAs/AlGaSb superlattice quantum-cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 87(21):211113, 2005.

Chapitre II : Température électronique dans les lasers à cascade quantique

L'application d'un champ électrique à la structure augmente l'énergie des électrons dans le composant, ceci modifie la distribution énergétique des électrons dans les sous-bandes. L'excès en énergie sera progressivement dissipé vers le réservoir thermique que constitue le réseau aux alentours. Le retour vers une situation d'un quasi-équilibre est fortement dépendant des processus de diffusion mis en jeu. Si l'énergie moyenne des électrons à l'équilibre est plus grande que celle du réseau, on parle d'électrons chauds. Hormis quelques applications pratiques du phénomène d'électrons chauds (diode Gunn par exemple), dans la plupart des cas son existence dans le composant va dégrader ses performances et peut causer sa détérioration.
Il devient alors important de comprendre ce phénomène pour en limiter les effets. Pour traiter le problème, nous faisons l'approximation que les distributions électroniques dans les sous-bandes des LCQ sont bien représentées par une distribution de Maxwell-Boltzmann décrite par une température électronique unique dans toute la structure. Dans une première section, nous utiliserons une approche macroscopique de ce problème. Bien que cette approche ne permette pas de comprendre ce qui ce passe lors du retour des électrons vers l'équilibre, elle permet néanmoins de voir les ordres de grandeurs que peuvent atteindre les températures électroniques. Ensuite, pour comprendre les mécanismes de diffusions impliqués, une approche microscopique est utilisée. Nous verrons en particulier que le comportement des électrons dans l'hétérostructure est très semblable à celui d'un matériau en volume dont les paramètres caractéristiques sont donnés par ceux du matériau puits de l'hétérostructure.

II.A. Approche macroscopique du problème

La forme de la distribution électronique est obtenue en résolvant l'équation (I.31). Elle est généralement dépendante du temps, du champ appliqué à la structure et aussi de la position, donc sa détermination est coûteuse numériquement. Des approximations sont souvent faites dans ce genre de problèmes pour donner une forme simple à la fonction de distribution. Dans la plupart des cas, ces hypothèses sont bien appropriées au problème étudié et donnent des résultats en bon accord avec la réalité. Ainsi, on fait l'hypothèse que les collisions électroniques auront pour effet de restaurer l'équilibre dans le système et donc la forme de la fonction de distribution. Par exemple, on peut supposer que la relaxation de la perturbation se fait d'une manière exponentielle vers l'équilibre. Le terme $(\frac{\partial f}{\partial t})_{scatt}$ de l'équation (I.32) est donc simplifié suivant la forme suivante (voir [1] et [2]) :

$$(\frac{\partial f}{\partial t})_{scatt} = \frac{f(r,k,t) - f_{equi}(r,k,t)}{\tau(E(k))} \qquad \text{(II.1)}$$

Cependant, cette approximation n'est pas très réaliste. En effet, le temps de relaxation des différents paramètres caractéristiques du composant n'est pas forcément le même. Ainsi, le moment moyen $\langle P \rangle$ a un temps de relaxation τ_m plus rapide que celui de l'énergie moyenne $\langle E \rangle$ noté τ_E [2]. En effet, le moment relaxe par des mécanismes qui ne font intervenir que des interactions élastiques contrairement à la relaxation de l'énergie qui fait

intervenir aussi des interactions inélastiques qui requièrent l'émission ou l'absorption de phonons.
Dans le cas particulier des lasers à cascade quantique, il a été démontré expérimentalement [3] et théoriquement [4, 5, 6], que la distribution des électrons dans les sous-bandes de la structure est une distribution thermale c.à.d qu'elle peut être représentée par une fonction de distribution de Fermi-Dirac (ou de Maxwell-Boltzmann) avec une température électronique unique. En effet, avec les concentrations de dopage généralement utilisées (~10^{11} cm^{-2}), l'interaction électrons-électrons domine les transitions intra-sous-bandes. Ceci a pour effet de restaurer l'équilibre dans le gaz d'électrons et d'homogénéiser la température électronique dans la structure.
Dans une première vision simplifiée de ce qui se passe, appliquons le théorème de la conservation du moment et de l'énergie pour un électron dans la structure :

$$\frac{d(m^* v)}{dt} = e.F - \frac{m^* v}{\tau_m} \tag{II.2}$$

$$\frac{d(\varepsilon)}{dt} = e.F.v - \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\tau_E} \tag{II.3}$$

où m^* est la masse effective de l'électron, v est la vitesse moyenne des électrons dans la structure, F est le champ appliqué à la structure, ε est l'énergie de l'électron, ε_0 est l'énergie de l'électron à champ électrique nul, τ_m et τ_E sont respectivement les temps de dissipation du moment et de l'énergie. Ces deux équations sont couplées à travers la vitesse de l'électron et la dépendance en énergie de la masse effective de l'électron (non parabolicité).

Dans un régime stationnaire la vitesse de l'électron et son énergie s'écriront comme suit :

$$v = \frac{e.F.\tau_m}{m^*} = \mu.F \tag{II.4}$$

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + e.F.v\tau_E = \varepsilon_0 + \frac{(e.F)^2.\tau_m.\tau_E}{m^*} \tag{II.5}$$

Une première approximation du champ à partir duquel l'excès d'énergie $e.F.v\tau_E$ devient du même ordre de grandeur que l'énergie thermique ε_0 associée à la température du réseau est donnée par la formule suivante :

$$\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu.e.\tau_E}} = F_0 \tag{II.6}$$

On obtient typiquement un champ de l'ordre de 20 kV/cm, pour des mobilités de l'ordre de 1 m^2/Vs, un temps de relaxation de l'énergie τ_E de l'ordre de 0,01 ps (le temps de transition est piloté par l'interaction électron-phonon LO) et une énergie thermique initiale de ε_0 = 25 meV (T_0 = 300 K). La température des électrons dans ce cas est donnée par la formule suivante :

$$T = T_0 + \frac{2}{3}\frac{\tau_E.\tau_m}{k_B.m^*}.(e.F)^2 \tag{II.7}$$

où k_B est la constante de Boltzmann. Avec ce calcul simple et en utilisant les valeurs numériques utilisées précédemment, on trouve que pour $F>F_0$, la température des électrons est de l'ordre de 600 K pour une température de réseau de l'ordre de 300 K.
A partir des équations (II.5) et (II.7), on remarque que l'énergie en excès des électrons (et donc la température de la sous-bande) a une dépendance au carré du champ électrique appliquée F^2. Ceci n'est qu'une traduction en termes d'énergie électronique de l'effet Joule dans le régime linéaire. La réponse du composant au champ appliqué pendant ce régime est donné par la loi d'ohm. L'équation (II.7), peut être réécrite en introduisant la densité de courant qui traverse la structure $J = n.e.v$, où n est la densité volumique de dopage et v est la vitesse des électrons donnée par (II.4). Le résultat est donné dans ce qui suit :

$$T = T_0 + \frac{2}{3}\frac{\tau_E}{k_B.n}.F.J = T_0 + \frac{\alpha_0}{n}.F.J \qquad \text{(II.8)}$$

La prise en compte de la géométrie du composant nous permet d'écrire l'équation précédente en fonction du courant qui traverse la structure et de la tension qui lui est appliquée :

$$T = T_0 + \frac{\alpha_0}{n}.F.J = T_0 + \frac{\alpha_0}{n.d.L.w}.V.I = T0 + R_{the}.V.I \qquad \text{(II.9)}$$

L est longueur de la cavité, d la taille de la zone active, w est la taille du ruban laser.
Cette forme est celle communément utilisée pour calculer la température électronique dans le cadre des LCQ. Elle montre que le temps pertinent dans ce type de mécanisme est le temps de dissipation de l'énergie. Sachant que ce temps est inversement proportionnel à la racine carrée de la masse effective de l'électron ($\tau_E \; \alpha \frac{1}{\sqrt{m*}}$), pour une même puissance électrique dissipée dans la structure, les dessins qui utilisent des matériaux ayant des masses électroniques effectives plus grandes donneront une température électronique moins élevée.

II.B. Approche microscopique du problème

Dans le paragraphe précédent, nous avons montré avec un raisonnement simple que les électrons ont des températures qui peuvent être de quelques centaines de Kelvin plus grandes que celles du réseau cristallin. Nous avons montré que l'excès en température est proportionnel à la puissance dissipée à l'intérieur de la structure. Avec un temps de dissipation de l'énergie de l'ordre de 0,015 ps, le facteur de proportionnalité R_{the} est de l'ordre de 36 K/W (dopage de 1.10^{15} m^{-2}, longueur de cavité de 2mm épaisseur de la zone active est de 1,8 µm et une taille de ruban de 10 µm). Bien que ce raisonnement soit utile dans le sens où il permet de fixer les ordres de grandeur, il ne nous permet pas d'avoir une vision précise de ce qui ce passe lors de la relaxation du gaz électronique dans la sous-bande. Dans ce qui suit nous proposons alors un modèle plus détaillé qui nous permettra de rendre compte de l'effet de chacun des mécanismes de relaxation mis en jeu dans le retour à l'équilibre thermique des électrons dans les sous-bandes. Ce modèle nous permettra de voir en détail les effets de certains paramètres caractéristiques de la structure sur la température électronique et nous verrons que l'excès de température électronique ne dépend plus linéairement de la puissance dissipée.

II.B.1. Bilan énergétique

Précisons au début de ce paragraphe deux notions nécessaires pour la suite du raisonnement (voir la figure.II.3). L'énergie d'un électron dans un état $\left|\alpha,\vec{k}\right\rangle$ dans une sous-bande s'écrit comme suit :

$$\varepsilon_\alpha = \underbrace{E_i}_{energie\ potentielle} + \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*}}_{énergie\ cinétique} \qquad \text{(II.10)}$$

Lors des transitions, les électrons transfèrent de l'énergie cinétique de la sous-bande initiale vers la sous-bande finale. De même que dans le paragraphe précédent on fait l'hypothèse que la distribution des électrons est thermalisée. L'excès en énergie cinétique est rapidement redistribué entre les sous-bandes de telle façon qu'on peut définir une température électronique unique dans toutes les sous-bandes [3, 4, 5, 6].
Pour calculer le taux de perte d'énergie vers le réseau, il est nécessaire de faire un bilan énergétique en sommant sur tous les processus qui transforment une partie de l'énergie potentielle de l'électron en énergie cinétique et réciproquement. La figure.II.1 schématise les différents cas de transitions électroniques qui peuvent avoir lieu dans la structure pour deux états ***i*** et ***f***. Ces transitions sont dites inter-sous-bandes si l'état initial et final n'appartiennent pas à la même sous-bande. Elles sont appelées intra-sous-bandes dans le cas contraire.

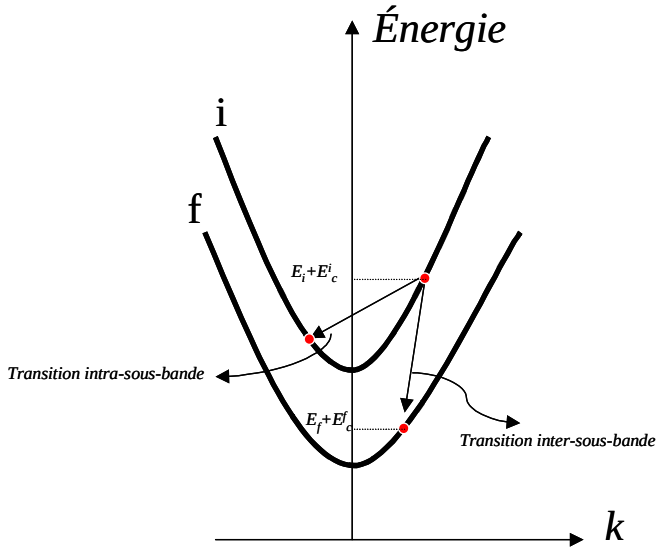


Fig.II.1 : Différents cas de transitions intra et inter sous-bandes pour un électron initialement sur la bande i. E_i^k (resp. E_f^k) est l'énergie cinétique de l'état i (resp. de l'état f), E_i (resp. E_f) est l'énergie en bas de sous bande de l'état i (resp. état f) (d'après [12])

Dans le modèle de saut entre états de Wannier-Stark que nous avons choisi, ces transitions sont assistées par des mécanismes de diffusion que nous avons décrits au paragraphe I.F du premier chapitre. Nous prendrons donc en compte cinq mécanismes essentiels qui sont l'absorption et l'émission de phonons longitudinaux optique, diffusion par la rugosité d'interfaces, par le désordre d'alliage et enfin par les phonons acoustiques. Lors de ces

transitions, l'énergie de l'électron change. La variation de son énergie cinétique qui résulte d'une transition d'un état ***i*** vers état ***f*** s'écrit sous la forme suivante :

$$\Delta E_k = E_k^f - E_k^i = E_i - E_f + \delta E \qquad \text{(II.11)}$$

δE est l'apport en énergie du mécanisme par lequel l'électron à été diffusé de son état initial vers son état final:

- $\delta E = 0$ pour les mécanismes élastiques ou quasi-élastiques (désordre d'alliage, rugosité et phonon acoustique)
- $\delta E = \pm\hbar\omega_0$ (soit l'énergie d'un phonon LO) selon qu'on ait un mécanisme d'absorption (signe +) ou d'émission (signe -) d'un phonon LO

Les mécanismes élastiques ne changent pas l'énergie de l'électron si celui-ci subit une transition intra-sous-bande. Ils n'auront d'effet que lors des transitions inter-sous-bandes. On fera l'hypothèse (qu'on vérifiera par la suite dans nos calculs) que ces mécanismes peuvent être regroupés dans les termes sources de l'énergie. Le gaz d'électron communiquera avec le réseau extérieur à travers les mécanismes d'absorption et d'émission de phonon optique. Nous ne prenons en compte que les interactions électrons phonons de type Fröhlich, les autres interactions électrons phonons à travers les potentiels de déformation seront négligée et ne sont à prendre en compte que lorsqu'il y transfert des électron entre différentes vallée. Ceci nous permet de simplifier le problème considéré et de le ramener à un problème de transfert d'énergie entre réservoir d'énergie (gaz d'électrons et réseau). Ceci est illustré dans la figure.II.2 qui schématise le problème étudié.

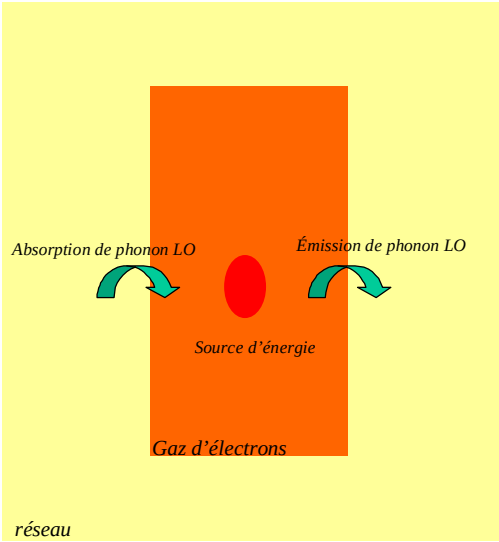


Fig.II.2: Représentation schématique de transfert d'énergie entre le gaz d'électron et le réseau.
Cette représentation simpliste du problème a l'avantage de mettre en valeur les éléments importants qui entrent en jeu lors de ce transfert

La différence entre le taux de transition de l'électron par absorption d'un phonon LO et celui par émission d'un phonon LO, multipliée par $\hbar.\omega_0$, correspond au taux de transfert d'énergie entre l'électron et le réseau dû aux phonons LO. Dans le cas d'un matériau bulk, ce taux de variation de l'énergie par interaction avec les phonons est donné par l'équation suivante [8] :

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = -\frac{2.\alpha.\hbar.\omega_0}{(2.m^*.\varepsilon)^{1/2}}\left[(N_q+1).\sinh^{-1}(\frac{\varepsilon-\hbar.\omega_0}{\hbar.\omega_0})^{1/2} - N_q.\sinh^{-1}(\frac{\varepsilon}{\hbar.\omega_0})^{1/2}\right] \qquad \text{(II.12)}$$

ε est l'énergie cinétique de l'électron, N_q est le nombre de phonons et α est le terme Fröhlich $\alpha = (\frac{m^* e^2.\hbar.\omega_0}{\hbar^2}).(\frac{1}{\varepsilon_0.\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0.\varepsilon_{stat}})$. Le tracé de l'équation (II.12) en fonction de l'énergie ε donnée dans la figure.II.3 (calcul fait pour le GaInAs), montre que $\frac{d\varepsilon}{dt} > 0$ pour les faibles énergies. Si on augmente l'énergie $\frac{d\varepsilon}{dt}$ diminue et devient négative au dessus de $\varepsilon \sim \hbar\omega_0$, le taux de variation de l'énergie continue à diminuer jusqu'à une énergie de l'ordre de $\varepsilon \sim 4.\hbar\omega_0$ où ce taux atteint un minimum. Au-delà, $\frac{d\varepsilon}{dt}$ augmente mais de façon très lente.

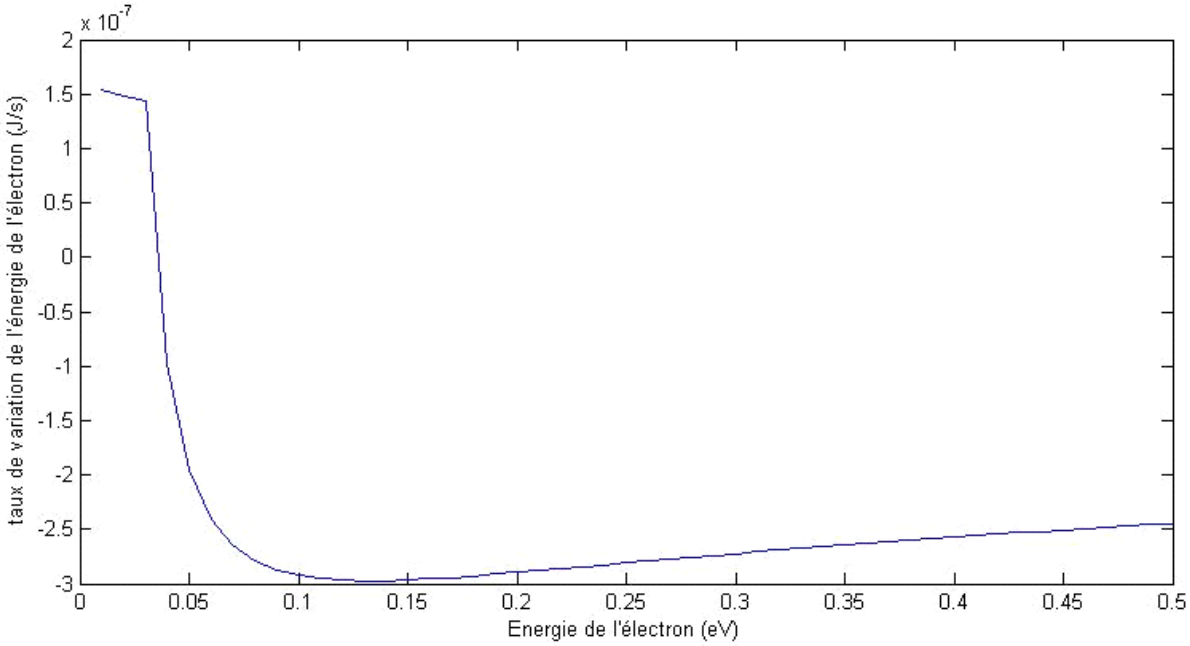


Fig.II.3: Le taux de variation de l'énergie en fonction de l'énergie de l'électron dans la sous-bande. Deux régimes y sont visibles : une décroissance rapide jusqu'as $\varepsilon \sim 4\hbar\omega_0$ puis au-delà une croissance lente

La dissipation moyenne de l'énergie par électron est donnée en moyennant l'équation (II.12) sur la distribution électronique. Ceci donne, dans le cas d'une distribution électronique de Maxwell-Boltzmann avec une température T_e, l'équation suivante [8] :

$$\left\langle \frac{d\varepsilon}{dt} \right\rangle_{loss} = -\frac{3}{2}.\left(\frac{2.\hbar.\omega_0}{\pi.m^*}\right)^{1/2}.\alpha.\frac{e^{\frac{\hbar\omega}{k_0}.(\frac{1}{T_0}-\frac{1}{T_e})}-1}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_0}.\frac{1}{T_0}}-1}.\sqrt{\frac{\hbar\omega_0}{k_0}.\frac{1}{Te}}.e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_0}.\frac{1}{2.T_e}}.K_0(\frac{\hbar\omega_0}{2.k_0}.\frac{1}{T_e}) \qquad \text{(II.13)}$$

k_B est la constante de Boltzmann, T_0 la température du réseau et K_0 est la fonction de Bessel modifiée.

D'autre part, d'un point de vue macroscopique, l'énergie gagnée par un électron suite à l'application d'un champ F à la structure (ou le terme source) est donnée par :

$$\left\langle \frac{d\varepsilon}{dt} \right\rangle_{gain} = \frac{J.F}{n} \qquad \text{(II.14)}$$

Avec les mêmes définitions de J et n que pour la section précédente.
Dans l'hypothèse du régime stationnaire, l'énergie totale des électrons ne varie pas et donc on obtient l'équation suivante :

$$\left\langle \frac{d\varepsilon}{dt} \right\rangle = \left\langle \frac{d\varepsilon}{dt} \right\rangle_{gain} + \left\langle \frac{d\varepsilon}{dt} \right\rangle_{loss} = 0 \qquad \text{(II.15)}$$

Ce qui nous donne une expression analytique de la température électronique dans la structure en résolvant l'équation suivante :

$$\frac{3}{2}.\left(\frac{2.\hbar.\omega_0}{\pi.m}\right)^{1/2}.\alpha.\frac{e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B}.(\frac{1}{T_0}-\frac{1}{T_e})}-1}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B}.\frac{1}{T_0}}-1}.\sqrt{\frac{\hbar\omega_0}{k_B}.\frac{1}{Te}}.e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B}.\frac{1}{2.T_e}}.K_0(\frac{\hbar\omega_0}{2.k_B}.\frac{1}{T_e}) = \frac{J.F}{n} \qquad \text{(II.16)}$$

Pour simplifier l'interprétation physique de cette égalité, réécrivons l'équation (II.16) de façon à découpler les termes qui contiennent la température électronique de ceux qui ne contiennent que des paramètres caractéristiques du matériau :

$$(e^{\frac{\hbar\omega}{k_0}.(\frac{1}{T_0}-\frac{1}{T_e})}-1).\sqrt{\frac{1}{Te}}.e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_0}.\frac{1}{2.T_e}}.K_0(\frac{\hbar\omega_0}{2.k_0}.\frac{1}{T_e}) = \frac{J.F}{n}.\frac{1}{\alpha_{eff}.(\frac{2.m^*}{\pi})^{1/2}.N_0.(\hbar.\omega_0)^{3/2}.\sqrt{\frac{\hbar\omega_0}{k_0}}} \qquad \text{(II.17)}$$

Dans cette équation $\alpha_{eff} = \frac{3}{2}.\left(\frac{e}{\hbar}\right)^2.(\frac{1}{\varepsilon_0.\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0.\varepsilon_{stat}})$, $N_0 = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_0}{k_B}.\frac{1}{T_0}}-1}$.

La figure.II.4 montre la variation du taux de dissipation de l'énergie $\left|\left\langle \frac{d\varepsilon}{dt} \right\rangle_{loss}\right|$ en fonction de la différence de température entre le réseau et les électrons $\Delta T = T_e - T_0$, pour le matériau GaInAs ($\hbar\omega_0$ = 0,034 eV, m* = 0,04 m_0). Cette figure montre bien que deux régimes de dissipation de l'énergie en excès existent : un régime linéaire pour les faibles différences de température (~100 K) suivi d'un régime non linéaire dès que la température électronique devient sensiblement plus grande que celle du réseau qui l'entoure.

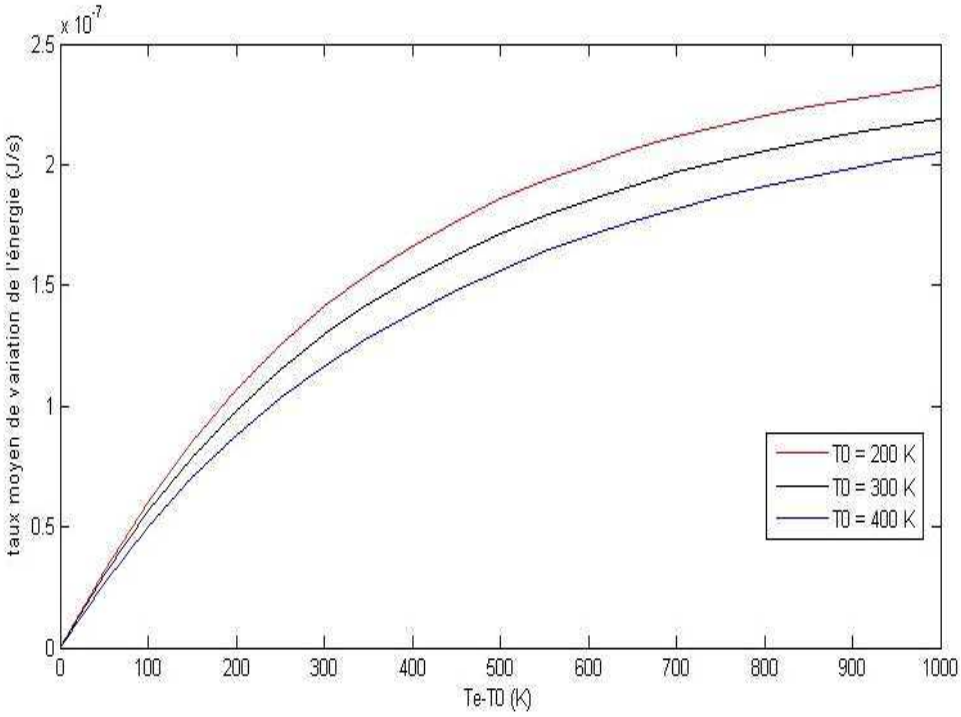


Fig.II.4: Variation du taux de dissipation de l'énergie $\left\langle \frac{d\varepsilon}{dt} \right\rangle_{loss}$ en fonction de la différence de température $\Delta T = T_e - T_0$ allant de 0 à 1000 K Un régime linéaire y est visible au début de la courbe et ensuite le comportement devient non linéaire (dans ces calculs $\hbar.\omega_0$ =34 meV). Le calcul est fait pour trois températures de réseau différentes

II.B.1.a. Limite basses températures électroniques

Dans la limite d'une différence de température $\Delta T = T_e - T_0$ petite devant la température de réseau, l'équation (II.17) peut être simplifiée par linéarisation de l'exponentielle :

$$k_B.\Delta T.e^{\frac{\hbar.\omega_0}{k_B}.\frac{1}{2.T_e}}.K_0(\frac{\hbar\omega_0}{2.k_0}.\frac{1}{T_e}) = \frac{J.F}{n}.\frac{1}{\alpha_{eff}.(\frac{2.m^*}{\pi})^{1/2}.(k_B.T_0)^{1/2}.N_0.(\frac{\hbar.\omega_0}{k_B.T_0})^3} \qquad \text{(II.18)}$$

Ce qui nous permet de déterminer une expression de $\Delta T = T_e - T_0$ dans le cas où une faible puissance est dissipée dans la structure :

$$\boxed{\Delta T = \frac{J.F}{n}.\frac{1}{\alpha_{eff}.(\frac{2.m^*}{\pi})^{1/2}.(k_B.T_0)^{1/2}.k_B.N_0.(\frac{\hbar.\omega_0}{k_B.T_0})^3.K_0(\frac{\hbar\omega_0}{2.k_0}.\frac{1}{T_0}).e^{\frac{\hbar.\omega_0}{k_B}.\frac{1}{2.T_0}}}} \qquad \text{(II.19)}$$

En prenant en compte la géométrie réelle du composant cette équation s'écrit alors :

$$\Delta T = \frac{I.V}{n.L.d.w}.\frac{1}{\alpha_{eff}.(\frac{2.m^*}{\pi})^{1/2}.(k_B.T_0)^{1/2}.k_B.N_0.(\frac{\hbar.\omega_0}{k_B.T_0})^3.K_0(\frac{\hbar\omega_0}{2.k_0}.\frac{1}{T_0}).e^{\frac{\hbar.\omega_0}{k_B}.\frac{1}{2.T_0}}} \quad \text{(II.20)}$$

Nous retrouvons donc une variation linéaire de la température en fonction de la puissance dissipée dans la structure. Nous remarquons aussi que la pente a une dépendance en $\frac{1}{\sqrt{m^*}}$.
Ceci nous rappelle l'équation (II.8) que nous avons déterminée en utilisant un raisonnement macroscopique beaucoup plus simple. Cependant, ce calcul plus complet nous a permis de déterminer le domaine de validité d'une telle variation linéaire. C'est un modèle qui ne s'applique que dans le cas où la température des électrons dans les sous bandes n'est pas différente de celle du réseau de plus d'environ 100 K.
L'équation (II.19) montre aussi que plus la température du réseau est grande plus l'excés de température électronique est élevé et par conséquence plus les performances du composant vont être dégradées. La figure.II.4 montre aussi la variation du taux moyen de dissipation de l'énergie de l'électron en fonction de la différence de température T_e-T_0 pour des températures de réseau différentes de T_0 = 200 K, 300 K et 400 K. On remarque que plus cette température est grande moins la dissipation d'énergie est efficace.
Le calcul de la température électronique en fonction de la puissance en utilisant la formule (II.19) donne un facteur de proportionnalité de l'ordre de 40 K/W pour un dopage de 1.10^{15} m^{-2} pour une cavité de 2 mm de largeur de cavité 10 µm. En utilisant l'approche macroscopique donnée par la formule (II.8), nous pouvons déterminer une expression du temps de relaxation de l'énergie dans le matériau dans ce régime particulier :

$$\tau_E = \frac{3}{2}\frac{k_0}{\alpha_{eff}.(\frac{2.m^*}{\pi})^{1/2}.(k_B.T_0)^{1/2}.k_B.N_0.(\frac{\hbar.\omega_0}{k_B.T_0})^3.K_0(\frac{\hbar\omega_0}{2.k_0}.\frac{1}{T_0}).e^{\frac{\hbar.\omega_0}{k_B}.\frac{1}{2.T_0}}} \quad \text{(II.21)}$$

Le calcul en utilisant cette formule du temps de relaxation de l'énergie donne un temps de relaxation de l'ordre de 0,017 ps pour le GaAs à température ambiante.

II.B.1.b. Limite hautes températures électroniques

L'équation (II.17) montre bien que dans le cas le plus général, la température électronique dépend d'une façon non linéaire de la puissance dissipée dans la structure. Dans la limite de très haute température électronique $\frac{\hbar\omega_0}{k_0}.\frac{1}{T_e} << 1$, le membre à droite va tendre vers zéro[6], ceci laisse suggérer que le taux moyen de dissipation de l'énergie passe par un maximum. La figure.II.5 montre la variation de $\left|\left\langle\frac{d\varepsilon}{dt}\right\rangle_{loss}\right|$ pour une différence de température allant de 0 à 5000 K. Le tracé de l'équation (II.13) montre que ce maximum est atteint pour des différences de température de l'ordre de 2000 K pour le GaInAs à température de réseau de T_0 = 300 K (le calcul montre que ce maximum diminue si T_0 diminue aussi) soit des énergies

[6] En fait la fonction de Bessel K0(x)~-ln(x) en zéro et donc le membre de gauche de l'équation (II.16) aura comme forme -x*ln(x) qui tend aussi vers zéro en zéro.

électroniques de l'ordre de 0,2 eV. Ces grandes énergies représentent les limites d'application de notre modèle. En effet, il est important de prendre en compte les fuites électroniques vers les autres vallées de la structure quand les énergies des électrons sont élevées. Pour cela, il faudrait introduire dans notre modèle les interactions électron phonon par potentiel de déformations [8].

Nous remarquons aussi à travers les équations précédentes que ces régimes vont dépendre fortement des matériaux utilisés dans le dessin de la structure active. La figure.II.6 montre la dépendance de la dissipation de l'énergie dans le type du matériau. Cette dépendance peut être caractérisée par deux paramètres essentiels de la structure : l'énergie du phonon et la masse de l'électron dans la bande d'énergie. Le choix d'une combinaison efficace de matériaux sera celui qui minimisera la température électronique dans la structure tout en assurant un minimum de perte d'électrons par le continuum.

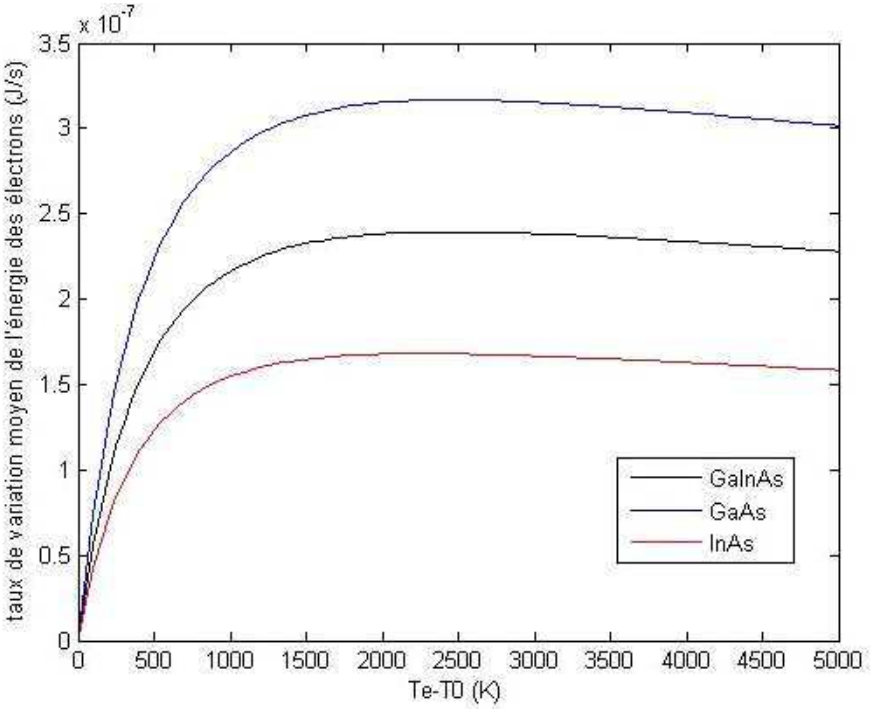


Fig.II.5 : Variation du taux de dissipation de l'énergie $\left|\left\langle \frac{d\varepsilon}{dt} \right\rangle_{loss}\right|$ en fonction de la différence de température $\Delta T = T_e - T_0$ allant de 0 à 5000 K pour plusieurs matériaux. La courbe passe par un maximum qui dépend du matériau

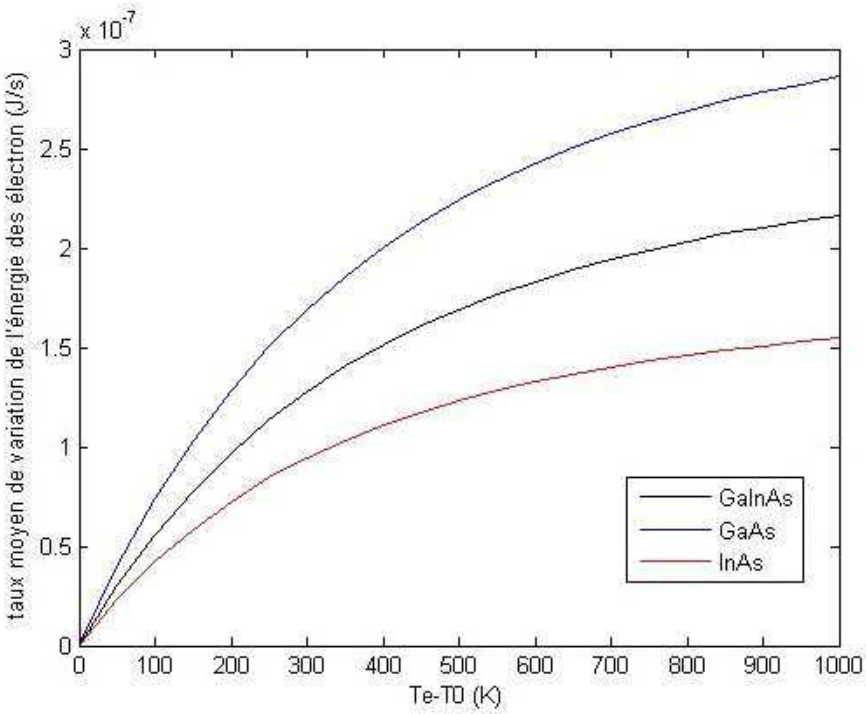


Fig.II.6 : Variation du taux de dissipation de l'énergie $\left|\left\langle \frac{d\varepsilon}{dt} \right\rangle_{loss}\right|$ en fonction de la différence de température $\Delta T = T_e - T_0$ allant de 0 à 1000 K pour plusieurs matériaux. Plus la masse électronique est élevée plus le taux de variation moyen de l'énergie est grand. Ceci se traduit par une température électronique plus petite

II.B.2. Calcul de la température électronique dans les hétérostructures complexes

L'application directe pour les hétérostructures des équations (II.12) à (II.19), écrites pour des matériaux en volume, comme nous l'avons fait n'est pas totalement évidente. Dans ce qui suit, nous allons reprendre ces équations pour les adapter à notre problème de calcul de la température électronique dans les LCQ.

II.B.2.a. Hypothèses

Nous nous sommes basés pour cela sur la même approche que pour le calcul du transport que nous avons décrit dans le paragraphe I.E.2. Etant donné que la probabilité de présence des électrons est beaucoup plus grande dans le matériau puits de l'hétérostructure que dans le matériau barrière, nous ferons l'hypothèse que les paramètres matériaux qui entrent en jeu dans l'équation (II.16) sont les paramètres du matériau puits de la structure du laser. Nous supposons aussi que les propriétés des phonons dans l'héterostructure restent en trois dimensions. Bien que le spectre de l'hétérostructure soit beaucoup plus complexe que celui d'un matériau en volume (en particulier il y a apparition de modes de phonon optique d'interface [9]), il a été démontré que l'utilisation d'un phonon en volume ne change pas le résultat final en termes d'interaction électron phonon [10]. L'autre point à relever ici est que le membre de gauche de l'équation (II.17) dépend fortement de la température électronique. La figure.II.7 montre l'évolution des courbes tension-courant d'un LCQ avec les températures

électroniques fixes (de 300 à 700 K). On remarque une forte variation du courant qui traverse la structure en fonction de la température électronique. De façon pratique, la résolution de l'équation (II.12) se fera donc par une méthode auto-cohérente.

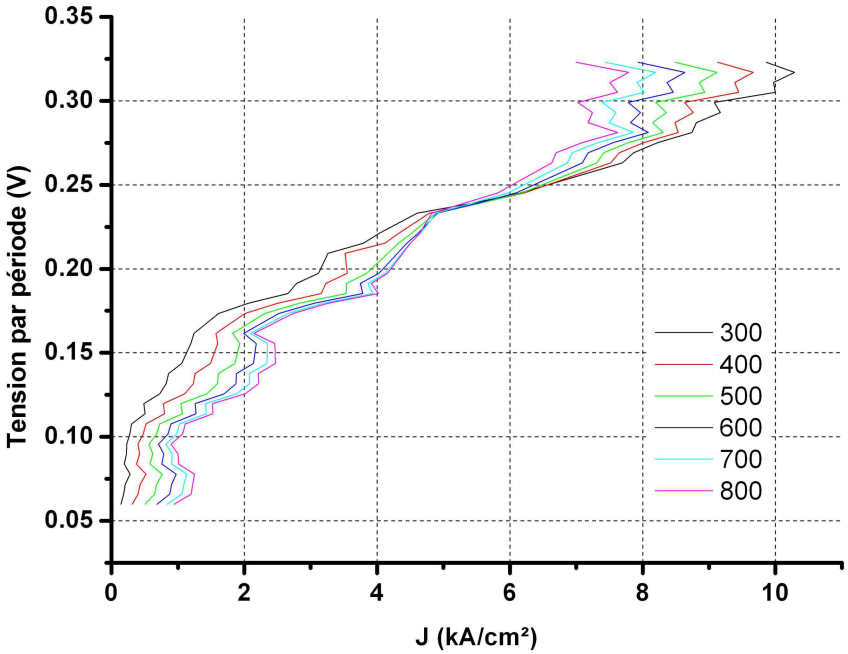


Fig.II.7 : Effet de la température électronique sur les courbes Courant-Tension calculé pour une structure à double phonon émettant à 9 µm T_0 = 300 K pour une température électronique variant entre 300 K et 800 K. Les détails de la région active peuvent être trouvés dans la référence [33]

II.B.2.b. Equations bilans discrétisées

Le raisonnement reste le même que pour obtenir l'équation (II.12) [11] : l'énergie gagnée par les électrons lors des transitions entre les états de la structure sera dissipée vers le réseau par différents mécanismes d'interaction. Prenons deux sous-bandes de la structure laser qui seront noté *i* et *f*. On suppose que les électrons dans ces sous-bandes sont bien décrits par une distribution de Maxwell-Boltzmann avec une température électronique unique T_e. Lors de la transition de *i* vers *f*, on peut définir deux taux de transfert de l'énergie cinétique $w_{i,f}^{+}$ et $w_{i,f}^{-}$. $w_{i,f}^{+}$ représente le taux d'augmentation de l'énergie cinétique de l'état final *f* lors de cette transition et $w_{i,f}^{-}$ représente le taux de perte de l'énergie cinétique de l'état initial *i*. Soit un électron qui est sur l'état *(i,k)* de la sous-bande i qui arrive sur la sous-bande *f*. Le taux de gain de l'énergie cinétique de la sous bande d'arrivée est égal au produit de l'énergie cinétique apportée par le taux de transition $\frac{1}{\tau_{i,f}}$ (dont la formule est donnée par l'équation (I.40)) qui correspond à ces deux états. Il est donné par la formule suivante :

$$\Omega^{+}_{i,f} = E^{k}_{f} . \frac{1}{\tau_{i,f}} \tag{II.22}$$

Ainsi $w^{+}_{i,f}$ est obtenue en moyennant sur la distribution électronique à l'intérieur de la sous bande *i* (en faisant l'hypothèse d'une température électronique unique pour la sous bande) :

$$w^{+}_{i,f} = \left\langle \Omega^{+}_{i,f} \right\rangle = \frac{\int \Omega^{+}_{i,f} . f(E^{k}_{i}, T_e).dE^{k}_{i}}{\int f(E^{k}_{i}, T_e).dE^{k}_{i}} = \int \Omega^{+}_{i,f} . f(E^{k}_{i}, T_e).dE^{k}_{i} \tag{II.23}$$

où E^{k}_{i} est l'énergie de l'état de départ.

De même, lors de cette même transition (*i->f*), l'énergie cinétique de l'état de départ diminue avec un débit sortant d'énergie par électron qui s'écrit comme suit :

$$\Omega^{-}_{i,f} = E^{k}_{i} . \frac{1}{\tau_{i,f}} \tag{II.24}$$

Et en moyennant toujours sur la distribution électronique de l'état *i*, on obtient la formule du taux moyen de pertes d'énergie par transition $w^{-}_{i,f}$:

$$w^{-}_{i,f} = \left\langle \Omega^{-}_{i,f} \right\rangle = \frac{\int \Omega^{-}_{i,f} . f(E^{k}_{i}, T_e).dE^{k}_{i}}{\int f(E^{k}_{i}, T_e).dE^{k}_{i}} = \int \Omega^{-}_{i,f} . f(E^{k}_{i}, T_e).dE^{k}_{i} \tag{II.25}$$

En remplaçant l'énergie cinétique de l'électron qui figure dans les équations (II.23) et (II.25) par la formule donnée par l'équation (II.11), on peut démontrer que ces deux taux de transfert d énergie $w^{+}_{i,f}$ et $w^{-}_{i,f}$ sont liés par l'équation suivante :

$$w^{+}_{i,f} = \frac{(E_i - E_f + \delta E)}{\tau_{i,f}} + w^{-}_{i,f} \tag{II.26}$$

où l'on rappelle que δE est l'apport en énergie au gaz d'électrons associé au mécanisme considéré.
Notons n_i (resp. n_f) le nombre d'électrons sur la sous-bande de départ *i* (resp. d'arrivée *f*).
Deux termes contribuent à la variation de l'énergie de l'état final ***f*** :

1. L'apport en énergie suite aux transitions qui ont l'état ***f*** pour état d'arrivée. Ce terme sera proportionnel à la population de l'état de départ et donc s'écrira $\sum_i n_i w^{+}_{i,f}$ en sommant sur tout les états de départ possibles dans la structure LCQ (**P**.N dans notre cas : la structure est supposée périodique avec un nombre **P** de périodes voisines avec lesquelles des interactions électroniques existent)

2. Les pertes qui sont dues aux transitions des électrons de l'état ***f*** lui-même vers d'autres sous bandes. Ce terme s'écrit $n_f \sum_i w_{f,i}^-$.

L'équation qui gère la variation d'énergie de l'état f s'écrit donc sous la forme (en se plaçant dans l'hypothèse stationnaire où gain et pertes se compensent, et donc l'énergie cinétique totale de l'état considéré reste inchangée) :

$$\frac{d\varepsilon_f}{dt} = \sum_i n_i w_{i,f}^+ - n_f \sum_i w_{f,i}^- = 0 \qquad \text{(II.27)}$$

L'équation (II.27) précédente peut être écrite sous une nouvelle forme :

$$\frac{d\varepsilon_f}{dt} = \sum_{i=0}^{N} n_i w_{i,f}^+ - n_f \sum_{i=0}^{N} w_{f,i}^- + \sum_{k=0}^{P}\sum_{i=0}^{N}[n_i(w_{i,f+kN}^+ + w_{i+kN,f}^+) - n_f(w_{f+kN,i}^- + w_{f,i+kN}^-)] = 0 \qquad \text{(II.28)}$$

L'hypothèse de la température électronique unique dans les sous-bandes, nous permet en sommant l'équation (II.28) sur tous les états de la structure de déterminer une quantité invariante du système étudié. Elle représente le taux total de génération d'énergie cinétique à l'intérieur de la structure noté Δ. Ce terme doit être nul dans le régime stationnaire et est donné par l'équation suivante dans le cas où l'on prend **P** = 1 :

$$\boxed{\Delta = \sum_f \sum_i n_i.(E_i - E_f + \delta E).\frac{1}{\tau_{i,f}} + \sum_f \sum_i n_i.\left[(E_i - E_f + \delta E - \Delta V).\frac{1}{\tau_{i,f+N}} + (E_i - E_f + \delta E + \Delta V).\frac{1}{\tau_{i+N,f}}\right] = 0} \qquad \text{(II.29)}$$

ΔV dans cette expression correspond à la tension par période appliquée à la structure.
Ce taux de génération Δ se décompose en deux termes essentiels :

1. $\sum_f \sum_{i,période} n_i(E_i - E_f + \delta E)\frac{1}{\tau_{i,f}}$ est le terme de génération intra-période. il représente la contribution des états de la même période.
2. $\sum_f \sum_{i,période} n_i\left[(E_i - E_f + \delta E - \Delta V)\frac{1}{\tau_{i,f+N}} + (E_i - E_f + \delta E + \Delta V)\frac{1}{\tau_{i+N,f}}\right]$ est la contribution inter-période c.à.d la contribution des transitions qui se font entre des états de périodes différentes. On remarque les termes en $\Delta V \frac{1}{\tau_{i,f+N}}$ et $\Delta V \frac{1}{\tau_{i+N,f}}$ qui jouent le rôle de termes sources pour la génération d'énergie.

L'équation (II.29) peut être récrite en réarrangeant les termes de telle manière à faire sortir quelques caractéristiques de la structure étudiée. On peut ainsi l'écrire comme suit :

$$\Delta = \sum_f \sum_i n_i.(E_i - E_f + \delta E).\left[\frac{1}{\tau_{i,f}} + \frac{1}{\tau_{i,f+N}} + \frac{1}{\tau_{i+N,f}}\right] + \Delta V.\sum_f \sum_i n_i\left(\frac{1}{\tau_{i+N,f}} - \frac{1}{\tau_{i,f+N}}\right) = 0 \qquad \text{(II.30)}$$

Dans le second terme de cette égalité la somme représente le courant qui traverse la structure lasers :

$$\sum_f \sum_i n_i \left(\frac{1}{\tau_{i+N,f}} - \frac{1}{\tau_{i,f+N}}\right) = \frac{J}{e} \tag{II.31}$$

Et donc le deuxième terme de l'équation (II.30) n'est autre que la puissance dissipée dans le laser pendant son fonctionnement. Ainsi cette équation peut être simplifiée et prend la forme suivante :

$$\boxed{\sum_{f=0}^{N} \sum_{i=0}^{N} n_i.(E_i - E_f + \delta E).\left[\frac{1}{\tau_{i,f}} + \frac{1}{\tau_{i,f+N}} + \frac{1}{\tau_{i+N,f}}\right] = -\frac{J}{e}.\Delta V} \tag{II.32}$$

Ecrite sous cette forme, l'équation de transfert d'énergie de l'hétérostructure ressemble fortement à celle obtenue pour un matériau en volume. La différence principale réside dans la prise en compte dans l'équation (II.32) des mécanismes de diffusion élastique en plus de ceux par des phonons- LO. Ces temps de transitions sont deux à trois fois plus grands que ceux intra-période. Dans le paragraphe suivant nous allons voir la contribution de chaque mécanisme de diffusion des électrons dans le nombre de gauche (II.32). On montrera en particulier l'influence de la prise en compte des mécanismes élastiques et l'équivalence avec la méthode développée pour un matériau en volume dans le paragraphe II.A.1.

De façon pratique cette équation est couplée à l'équation de transport (I.43). Elles sont résolues d'une manière auto-cohérente. On fixe le voltage et le courant est calculé pour une température électronique donnée. Le taux de génération d'énergie moyen Δ est déterminé. Ce calcul est réitéré en changeant la température électronique jusqu'a ce que l'équation (II.29) soit satisfaite. La température électronique est obtenue quand $\Delta = 0$. Nous passons ensuite à l'étape suivante en changeant la tension de départ.

II.B.3. Effet des mécanismes de diffusion des électrons

Dans l'équation (II.32), δE est non nulle uniquement dans le cas des interactions électron-phonon LO, cette remarque nous permet de récrire cette équation comme suit :

$$\begin{aligned}&\sum_f \sum_i n_i.(E_i - E_f).\left[\frac{1}{\tau_{i,f}} + \frac{1}{\tau_{i,f+N}} + \frac{1}{\tau_{i+N,f}}\right] \\ &+\hbar.\omega_0.\sum_f \sum_i n_i.\left(\frac{1}{\tau_{i,f}^{abs_ph}} + \frac{1}{\tau_{i,f+N}^{abs_ph}} + \frac{1}{\tau_{i+N,f}^{abs_ph}} - \frac{1}{\tau_{i,f}^{eme_ph}} - \frac{1}{\tau_{i,f+N}^{eme_ph}} - \frac{1}{\tau_{i+N,f}^{eme_ph}}\right) = -\frac{J}{e}.\Delta V\end{aligned} \tag{II.33}$$

Nous pouvons montrer que le premier terme de cette égalité est nul dans le cas d'un régime stationnaire. L'équation (II.33) se simplifie donc et on obtient l'égalité suivante :

$$\boxed{\hbar.\omega_0.\sum_f \sum_i n_i.\left(\frac{1}{\tau_{i,f}^{abs_ph}} + \frac{1}{\tau_{i,f+N}^{abs_ph}} + \frac{1}{\tau_{i+N,f}^{abs_ph}} - \frac{1}{\tau_{i,f}^{eme_ph}} - \frac{1}{\tau_{i,f+N}^{eme_ph}} - \frac{1}{\tau_{i+N,f}^{eme_ph}}\right) = -\frac{J}{e}.\Delta V} \tag{II.34}$$

Dans cette équation et contrairement à celle précédente n'apparaît que le mécanisme de diffusion par phonon LO (émission et absorption). On retrouve ainsi une équation semblable à (II.16) obtenue pour un matériau en volume. Cette formule apparaît comme la discrétisation de l'équation (II.16) obtenue pour des matériaux en volume. Il faut cependant garder à l'esprit

que même s'ils n'apparaissent pas dans l'équation finale obtenue, les mécanismes élastiques jouent un rôle important et sont cachés dans le terme $\frac{J}{e}.\Delta V$ qui représente la puissance dissipée dans le laser et donc joue le rôle d'un terme source d'énergie. Ceci explique d'ailleurs la différence de l'ordre de 50 % observée entre les résultats de Harrison et al [11] et ceux de Jovanovic et al [12]. Dans le premier article, la non prise en compte des mécanismes élastiques que ce soit sous la forme de l'équation de temps de diffusion dans l'équation (II.29) ou de termes sources $\frac{J}{e}.\Delta V$ dans la forme (II.32) a donné des températures électroniques plus petites que dans la réalité.

La figure.II.8 montre comment on procède de façon pratique pour calculer la température électronique dans les structures étudiées. Le terme Δ de l'équation (II.29) est calculé en fonction de la température électronique. La valeur qui l'annule correspond à la température électronique théorique de la structure aux conditions de fonctionnement de la simulation (champ appliqué et température réseau T_0 = 300 K)

En conclusion, le gaz d'électrons communique son énergie en excès au réseau qui l'entoure par interaction avec les phonons-LO. Les autres interactions qualifiées d'élastique redistribuent les électrons dans les sous-bandes et jouent le rôle de source d'énergie. La figure.II.9 montre les températures électroniques obtenues en utilisant l'équation (II.29). Dans cette figure la température est tracée en fonction de la puissance dissipée dans la cavité laser $P = I.V$ où I est le courant qui traverse la structure et V est la tension appliquée sur le laser.

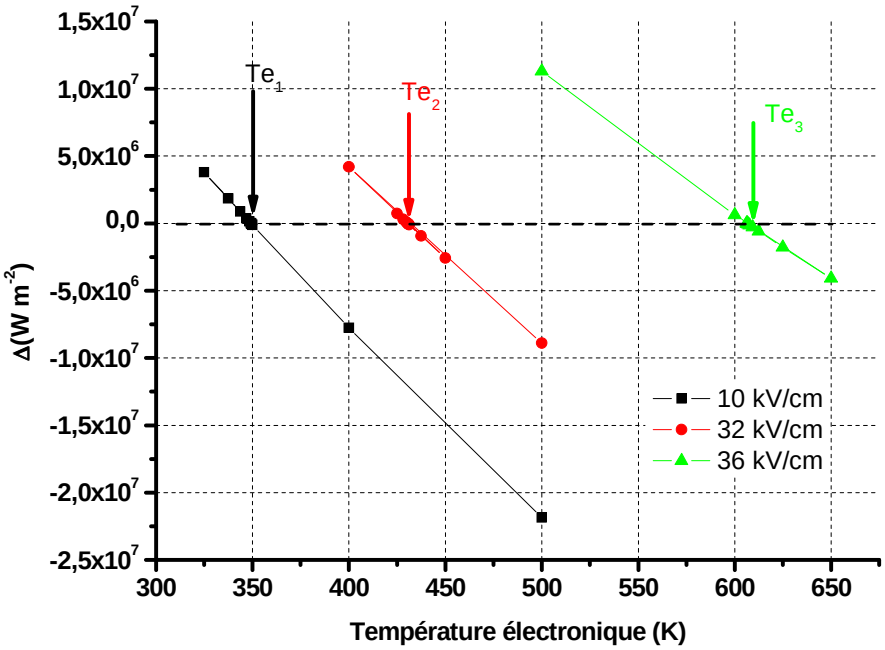


Fig.II.8: Le taux de génération de l'énergie cinétique dans la structure en fonction de la température électronique pour trois valeurs du champ électrique appliqué. Les calculs sont faits pour une structure LCQ basée sur GaInAs/AlInAs/InP [15]. Le laser est constitué de 35 périodes.

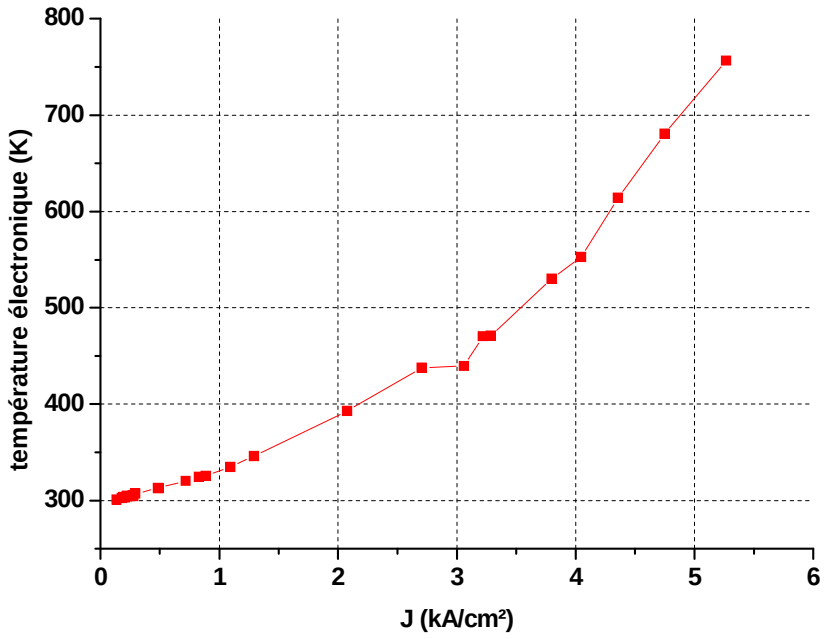


Fig.II.9: Calcul de la température électronique en fonction de la densité de courant pour la même structure que la figure.II.8

II.B.3.a. Apport énergétique par mécanisme

Nous détaillons ici la contribution de chacun des mécanismes de diffusion individuellement au bilan énergétique fait ci dessus.

1. Phonons

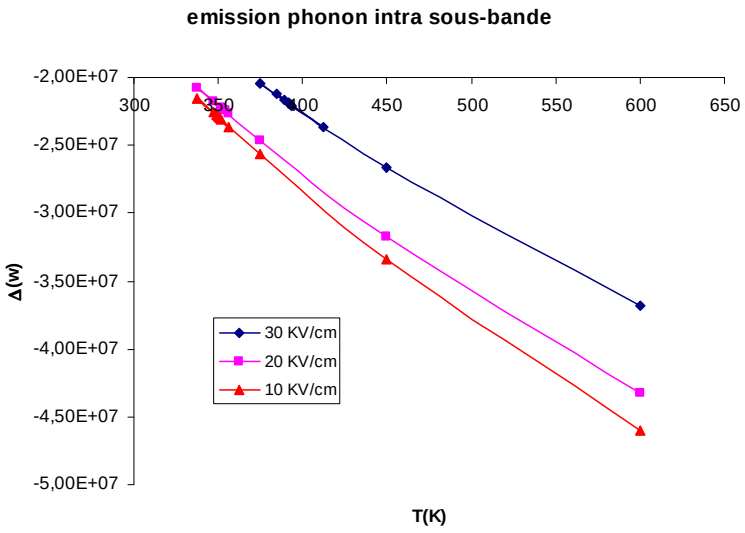
Les figures.II.10.a et.b comparent la contribution au transfert d'énergie des transitions intra-sous-bande et celles inter-sous-bandes dans le cas de diffusion assistée par l'émission d'un phonon LO. Cette comparaison montre clairement que le transfert énergétique intra-sous-bandes est un ordre de grandeur plus grand que celui inter-sous-bandes. Ainsi, les électrons se mettent à l'équilibre à l'intérieur de la sous bande avant que le transfert de l'énergie inter-sous-bandes ne s'instaure. Ce qui valide l'hypothèse que la distribution électronique dans la sous-bande est caractérisée par une température électronique. On remarque aussi que l'émission phonon-LO a toujours une contribution négative comme on s'y attendait car elle fait perdre de l'énergie au système électronique.

2. Mécanismes élastiques

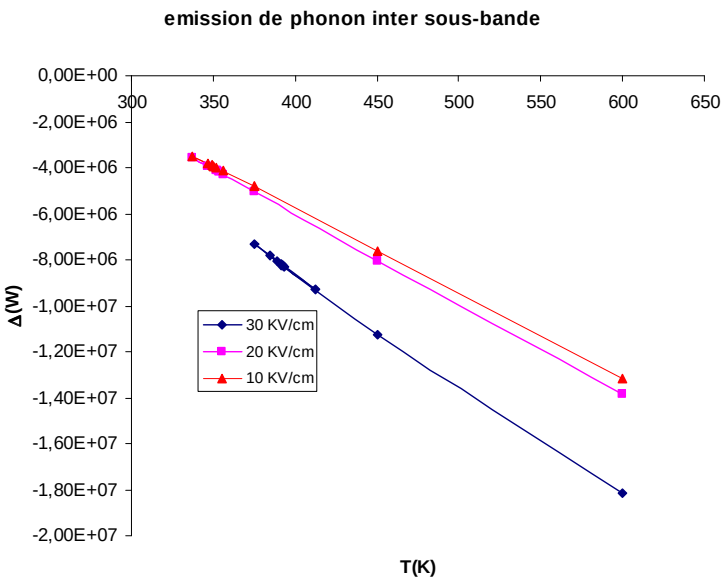
La figure.II.10.c montre la contribution des mécanismes élastiques de diffusion inter-sous-bande au taux moyen de génération d'énergie dans la structure. On remarque que cette

contribution est toujours positive. Ce qui montre bien que ces mécanismes jouent le rôle de terme source d'énergie.
Enfin, en comparant ces graphes, on remarque que le taux de variation de l'énergie cinétique dû à l'émission phonon est au minimum 10 fois plus grand que celui dû aux mécanismes élastiques. Ceci montre que les mécanismes de diffusion qui font intervenir les phonons sont les plus efficaces pour la redistribution de l'énergie cinétique dans la structure.

a)



b)



c)

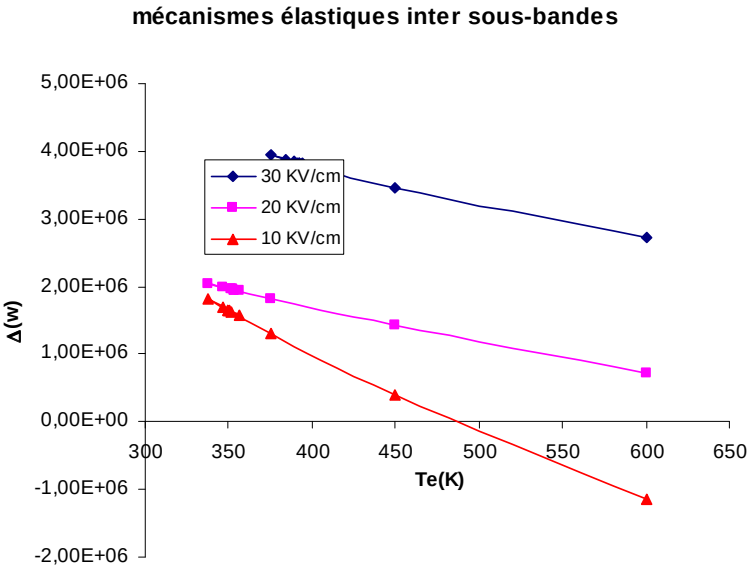


Fig. II.10 : Contribution des différents mécanismes de diffusion à la variation de l'énergie cinétique dans la structure : émission phonon-LO intra et inter sous-bande (a et b), mécanismes élastiques inter - sous-bandes (c)

II.B.3.b. Application au calcul de la température électronique

Dans la figure.II.11, la température électronique est représentée en fonction de la puissance qui traverse la structure.

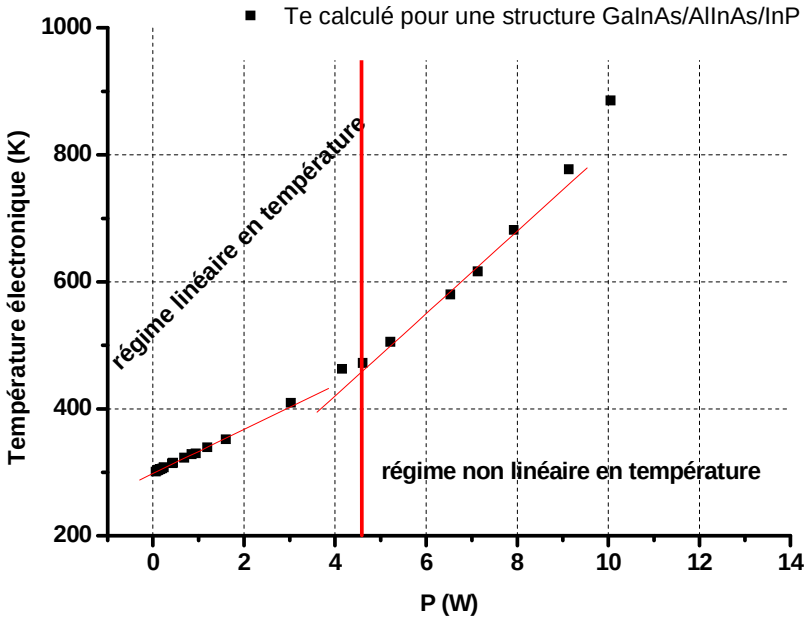


Fig.II.11 : Variation de la température électronique en fonction de la puissance dissipée dans la structure laser. le même laser du paragraphe précédent et une température de réseau de 300 K

Ce graphique montre que la variation de la température électronique n'est pas linéaire en fonction de la puissance P (nous avons positionné sur le graphe de cette figure ces deux régimes). En effet, il existe deux régimes de variation. Une variation linéaire de la température, de même type que l'équation (II.8) ($T = T_0 + \alpha P$) avec T_0 = 300 K et α = 34,4 K/W, est obtenue à basse puissance. Dans ce cas, la température électronique reste proche de celle du réseau $\Delta T = T_e - T_0$. Après ce régime, une variation de la température surlinéaire s'instaure. La température électronique peut devenir très grande devant celle du réseau. Ainsi comme le montre la figure.II.11, elle peut atteindre des valeurs de l'ordre de 800 K pour une température de réseau de 300 K. Nous retrouvons ainsi un résultat proche de la figure.II.5 que nous avons précédemment obtenue en discutant le sens physique de l'équation (II.18) en accord avec le comportement dans un matériau en volume. Les coefficients de proportionnalité obtenus par les deux approches pour les faibles puissances dissipées sont en très bon accord. Ceci montre que la dissipation de l'énergie en excès des électrons se fait en volume. Elle fait intervenir les phonons optiques qui gardent leurs propriétés 3D et dont les propriétés sont peu changées par l'hétérostructure. La figure.II.12 montre le temps de transition de l'état haut vers l'état bas du laser par interaction avec les phonons LO en fonction de l'énergie cinétique de l'électron dans la sous-bande de départ. D'après cette figure, le taux de relaxation de l'énergie par interaction avec les phonons LO est de plus en plus petit lorsque l'énergie cinétique de l'électron augmente. Ceci explique donc que le transfert en énergie devient de moins en moins efficace lorsque la température électronique

augmente dans la structure car plus cette dernière est grande plus les électrons sont situés haut dans la sous-bande.

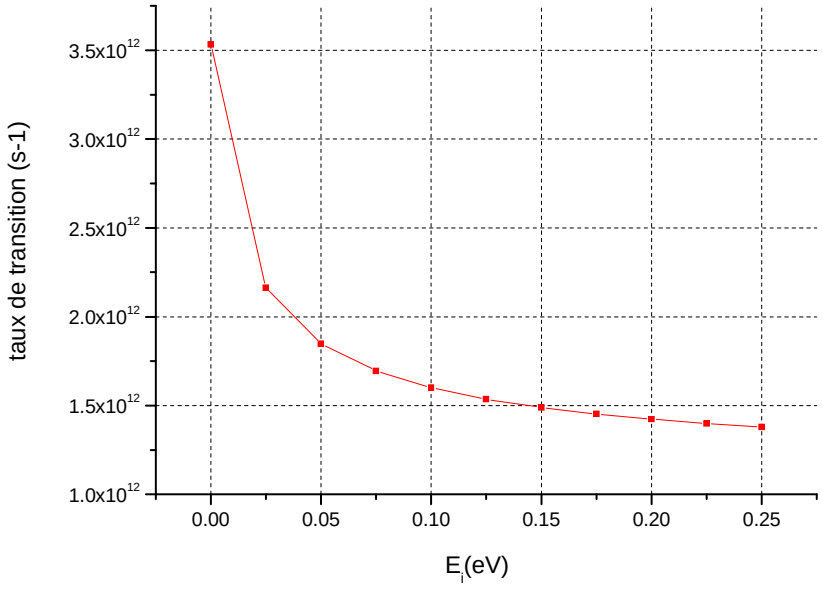


Figure.II.12 : Taux de transitions par émission de phonon LO pour un électron qui transite entre le niveau bas du laser et le premier niveau phonon en fonction de l'énergie en excès dans la sous-bande supérieure

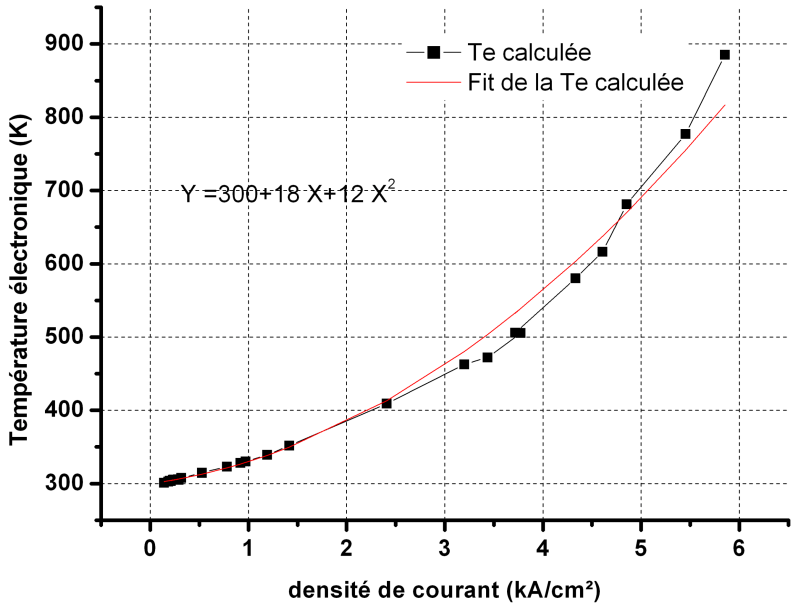


Fig.II.13 : Variation de la température électronique en fonction de la densité de courant qui traverse la structure

Le graphe de la figure.II.13 représente la variation de la température électronique calculée précédemment mais cette fois ci en fonction de la densité de courant qui traverse la structure. La courbe en rouge représente le résultat de l'approximation du calcul par un polynôme d'ordre deux des résultats de calculs comme cela a été fait dans un travail théorique par par Jovanovic et al [12] dont les simulations ont été faites pour un laser en GaAs/AlGaAs [13]

$$T = T_0 + A.J^2 + B.J \qquad \text{(II.35)}$$

La figure.II.11 montre une grande dépendance de la température électronique dans la puissance dissipée dans le composant. Dans notre modèle, nous utiliserons une variation de la forme :

$$\boxed{T = T_0 + \alpha_1.F.J + \alpha_2.J} \qquad \text{(II.36)}$$

avec $P = J.F$ est la puissance volumique dissipée dans le composant.
En prenant en compte la géométrie du composant, cette équation s'écrit :

$$\boxed{T = T_0 + R_{the}.I.V + \frac{\alpha_{ej}}{L.w}.I} \qquad \text{(II.37)}$$

Cette forme de variation de la température électronique du courant qui traverse la structure et de la puissance dissipée est celle qui a été déterminée expérimentalement par des mesures de photoluminescence en dessous du seuil laser par Spagnolo et al [14].

La forme de l'équation (II.37) fait ressortir deux paramètres essentiels pour la description de la température électronique dans le laser à cascade quantique. R_{the} est appelé par analogie la résistance thermique électronique du matériau, α_{ej} est le coefficient de couplage courant température électronique.

En conclusion, nous avons vu que l'interaction électron-phonon est le principal canal de transfert de l'énergie en excès des électrons vers le réseau atomique. Les autres mécanismes d'interactions élastiques agissent comme source d'énergie. Nous avons montré la proximité des équations gouvernant la variation de la température électronique dans le LCQ et celle d'un matériau en volume. Il apparaît donc que l'hétérostructure d'un point de vue de ce transfert énergétique se comporte comme un matériau en volume. Les paramètres caractéristiques de ce matériau effectif peuvent être déterminés à partir de ceux des matériaux constituant l'hétérostructure. Nous avons montré que l'approximation d'une variation linéaire de la température électronique en fonction de la puissance n'est valable que pour le régime de faible $\Delta T = T_e - T_0$ c.à.d à faible puissance dissipée.

II.B.4. Comparaison expérience-calcul

Nous allons maintenant comparer les températures électroniques théoriques à celles trouvées expérimentalement. Ensuite nous regarderons l'influence de certains paramètres sur la température électronique tels que le type de matériau utilisé dans le dessin de la zone active, la densité du dopage utilisé ainsi que la longueur d'onde d'émission du laser.

Le tableau suivant résume les principaux paramètres des dessins que nous avons pris en compte lors de nos modélisations

Matériaux	Longueur d'onde (µm)	Type de dessin	Dopage (cm^{-2})	référence	Nom
$In_{0.53}Ga_{0.47}As/Al_{0.48}In_{0.52}As/InP$	9	DP	1.10^{11}	[15]	LCQ1
$In_{0.322}Ga_{0.678}As/Al_{0.635}In_{0.365}As/InP$	4,3	DP	1.10^{11}	III-V Lab	LCQ2
$GaAs/Al_{0.45}Al_{0.55}As/GaAs$	9	SP	-	[13]	LCQ3
$GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As$ /GaAs	11	SP	-	[16]	LCQ4

DP = double résonance phonon
SP = simple résonance phonon

Tableau.II.1 : Tableau récapitulatif des principaux paramètres des dessins pris en compte lors des calculs de la température électronique.

Pour valider les calculs de la température électronique, nous avons comparé les résultats obtenus par le modèle théorique à ceux obtenus expérimentalement par Spagnolo et al [14]. Le laser utilisé est LCQ3 (voir tableau.II.1). Il émet à 9µm à température ambiante et sa région active est constituée de GaAs comme matériau puits et $Al_{0.45}$ $Ga_{0.55}As$ comme matériau barrière. Les détails de la région active peuvent être trouvés dans la référence [13]. L'expérience consiste en une expérience par pompe sonde suivie par des mesures de photoluminescence. Ces mesures permettent de remonter à la température électronique en mesurant le décalage du maximum du spectre obtenu par rapport à celui obtenu à courant nul et donc sans chauffage. Ces expériences ont été faites en dessous du seuil à deux températures de réseau différentes T_R = 140 K et T_R = 243 K.
La superposition de la courbe courant tension calculée pour un dopage de 3.,8.10^{11} cm^{-2} et celle expérimentale montre que le courant calculé est ~2 fois plus grand que celui obtenu expérimentalement. Plusieurs causes peuvent être à l'origine de cette dispersion telles que l'existence d'une résistance parasite dans le composant réel. Cette résistance est de l'ordre est d'ordre de 0,5 à 1 Ω. Il y aussi la différence constatée généralement entre le dopage optimal voulu et celui obtenue dans le composant. Cette différence peut atteindre un facteur 3 à 4 [17]. On a fait l'hypothèse que la différence constatée entre les calculs et l'expérience est due justement au dopage.
Dans la figure.II.14 nous avons tracé la température électronique obtenue par les calculs en fonction de la puissance électrique en dessous du seuil laser (P< 7 W). Les calculs sont faits pour deux températures de réseau T = 140 K et T = 243 K. Comme le montre bien cette figure, la température électronique suit une variation linéaire en fonction de la puissance *P*. Les coefficients linéaires calculés α sont égaux à 15,5 K/W à 140 K et 16 K/W à 243 K. Ces résultats sont en bon accord avec ceux qui sont déterminés expérimentalement égaux à 15,1 K/W à 140 K et 17,1 K/W à 243K.
Nous insistons ici sur le fait que cette méthode de calcul de la température électronique ne fait intervenir aucun paramètre ajustable.

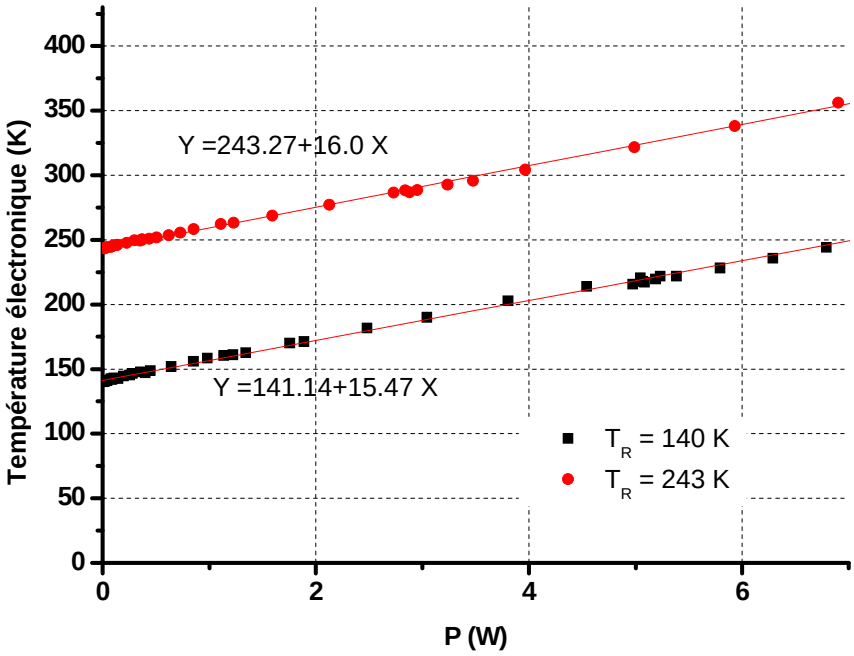


Fig.II.14 : Température électronique calculée pour le laser de la référence [13] (GaAs/AlGaAs à 9µm et Dopage = 2 10^{11} cm^{-2}), T_R est la température du réseau

II.B.5. Comparaison InGaAs-AlGaAs

Maintenant que nous avons montré que les calculs donnent des résultats qui sont en accord avec l'expérience, nous allons regarder l'effet du matériau utilisé dans le dessin de la zone active sur la température électronique.

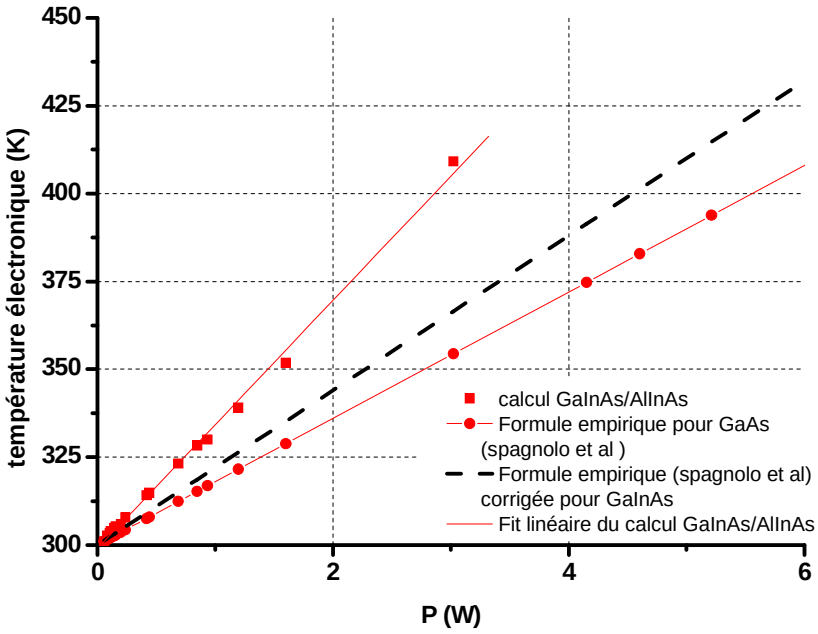


Fig.II.15 : Comparaison des différentes approches pour le calcul de la température électronique : carré rouge, calcul total pour le cas du GaInAs/AlInAs. Point rouge loi empirique pour le cas de GaAs/AlGaAs. Ligne en tiret calcul empirique en corrigeant seulement la masse effective

Pour cela, nous nous sommes basés sur les deux lasers que nous avons étudiés jusqu'à maintenant : LCQ1 basé sur InGaAs/AlInAs [15] et LCQ3 (GaAs/AlGaAs). Nous avons tracé sur le même graphique, comme le montre la figure.II.15, les résultats du calcul complet pour le laser en GaInAs/ AlInAs (carré rouge) (longueur 2mm, largeur 10µm et nombre de période de 35), le calcul d'après la formule (II.8) pour le cas du laser basé sur GaAs/AlGaAs (α_0 est pris égal à 18 K/W pour T = 300 K). Enfin la ligne en tirets représente le calcul obtenu selon la formule (II.8) adapté au GaInAs en utilisant l'équation suivante :

$$\alpha(GaInAs) = \alpha(GaAs).\sqrt{\frac{m^*_{GaAs}}{m^*_{InGaAs}}} \qquad \text{(II.38)}$$

Ainsi on voit que comme on l'attendait en se basant sur la masse effective, les électrons dans le laser basé sur GaInAs/AlInAs sont plus chauds que ceux dans le dessin basé sur GaAs/AlGaAs. Pour une même puissance qui traverse la structure, la différence entre les températures des électrons dans les deux dessins peut atteindre 100 K. Sur la figure.II.15, nous avons tracé aussi la droite qui approche le mieux les résultats de calcul de la température électronique dans le cas de GaInAs. La pente de cette droite est plus grande que celle obtenue en utilisant les équations (II.8) et (II.38). La différence de température ne pourra donc pas s'expliquer seulement par la différence de masse effective des électrons qui existe entre les deux systèmes de matériaux constituant les dessins de la région active. En d'autres termes, l'équation (II.38) est une mauvaise approximation. Le rapport de la résistance thermique électronique du dessin basé sur GaInAs à celle du dessin basé sur GaAs, plus grand que celui donné par l'équation (II.38), peut être expliqué par l'équation (II.19) obtenue pour un matériau en volume. En effet, le rapport calculé selon la formule (II.19) (r = 1,7) est en très bon accord avec celui obtenu en faisant le calcul total (r = 1,8). De façon générale c'est l'interaction de l'électron avec le phonon représenté par le terme de Fröhlich (plus grand dans le GaAs) qui contrôle la dissipation de l'énergie en excès des électrons.

II.B.6. Influence de la longueur d'onde et de la discontinuité de bande sur la température électronique

Dans la partie précédente nous avons montré que le calcul de la température électronique suit une équation simple de la forme (II.36) et que l'accord théorie expérience est bon. Dans ce qui suit nous essaierons d'appliquer ce genre de calculs à différents cas de figure. En premier lieu nous verrons la comparaison entre deux lasers qui émettent dans deux longueurs d'onde différentes (l'un en bande II et l'autre en bande III) basés sur le même type de matériau (les deux premiers lasers du tableau II.1). La discontinuité de bande, entre les matériaux puits et barrière qui constituent les lasers, joue aussi un rôle important dans les performances du laser. Pour cela nous traiterons deux lasers qui émettent dans la même bande spectrale mais ayant des discontinuités de bandes différentes (deux derniers lasers du tableau II.1).

II.B.6.a. Effet de la longueur d'onde (GaInAs/InAlAs)

Le graphe de la figure.II.16 montre les tracés sur le même graphe des courbes de variations de la température électronique calculées pour les deux premiers lasers du tableau précédent. Les deux dessins de régions actives sont basés sur un schéma en double résonance phonon. Les simulations sont faites pour la même densité surfacique d'électrons par période = 1.10^{11} cm^{-2}. La première remarque qui peut être faite est que nous retrouvons la variation typique de la

température électronique en fonction du courant donnée par la formule (II.36) pour les deux lasers. A courant constant, la température électronique dans le laser à contraintes compensées est plus grande que celle du laser adapté en maille. La figure.II.17 montre les courbes de courant-tension calculées de ces deux lasers. Les tensions de fonctionnement du laser qui émet à 4 µm sont plus grandes que celles de l'autre laser. Ceci est dû au fait que le défaut de tension nécessaire à faire fonctionner le laser est plus grand dans le premier cas (de l'ordre de 3 V soit 0,1 eV par période). Le terme source d'énergie sera donc plus grand. La température électronique sera plus grande dans le cas du laser à contraintes compensées.

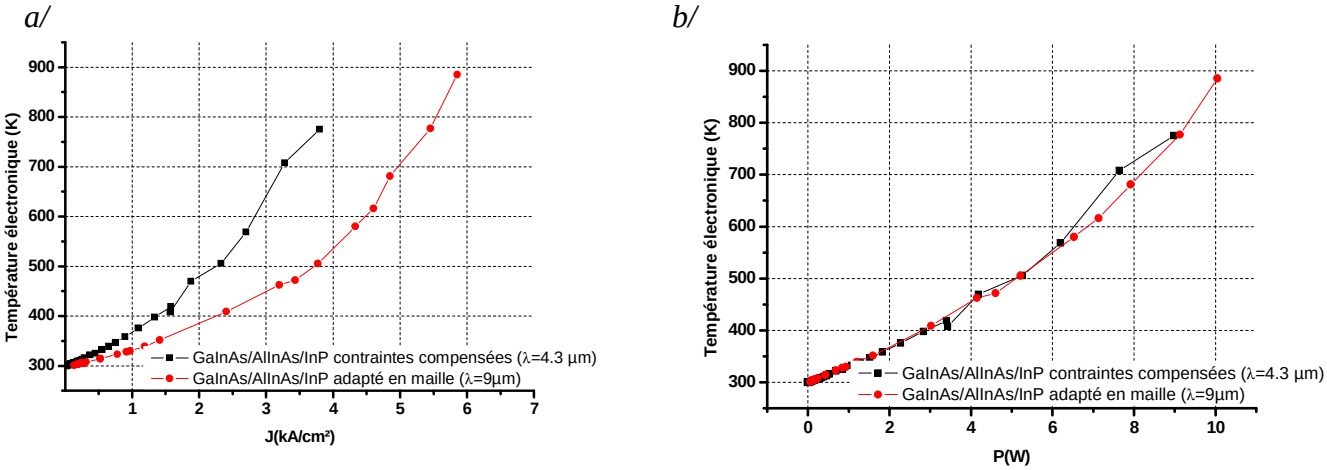


Fig.II.16 : Comparaison entre la température électronique du laser émettant à 4.3µm et celui émettant à 9 µm. a : tracé en fonction de la densité de courant. b : tracé en fonction de la puissance dissipée dans la structure

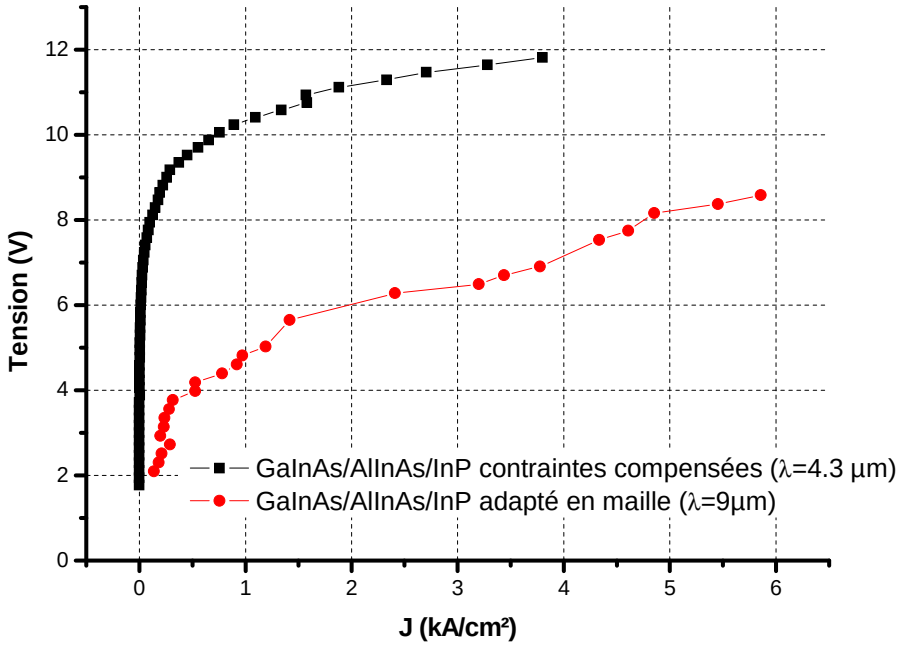


Fig.II.17: Courbe courant-tension calculée pour les deux lasers

Le tracé de la température en fonction de la puissance donnée dans la figure.II.16.b illustre nos propos. Il montre que les courbes de la température électronique en fonction de la puissance dissipée dans la structure sont superposables pour les deux structures. En d'autre terme, à même puissance dissipée dans le laser, la température électronique est identique dans les deux lasers. Ceci montre bien que le mécanisme de dissipation de l'énergie en excès des électrons est le même dans les deux structures : l'interaction électrons phonons LO et que la dissipation de l'énergie en excès des électrons fait appel à des propriétés en volume du matériau. La structure exacte de l'hétérostructure importe peu du moment que l'on connaît le spectre photonique du matériau constituant le puits.

II.B.6.b. Cas du GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$

L'étude de l'effet de la discontinuité de bande entre les matériaux qui constituent les couches du dessin sur les performances du LCQ à fait l'objet de plusieurs travaux. Le système GaAs/Al_xGa_xAs/GaAs présente la particularité que quelque soit la fraction de l'aluminium x dans le matériau, celui-ci est toujours adapté en maille sur le GaAs. La fraction de Al va influer uniquement sur la discontinuité de la bande. Dans la référence [13], l'étude montre que la composition en aluminium du matériau barrière a une influence notable sur les performances du LCQ étudié. L'augmentation du pourcentage de l'aluminium de la barrière diminue les fuites vers le continuum.

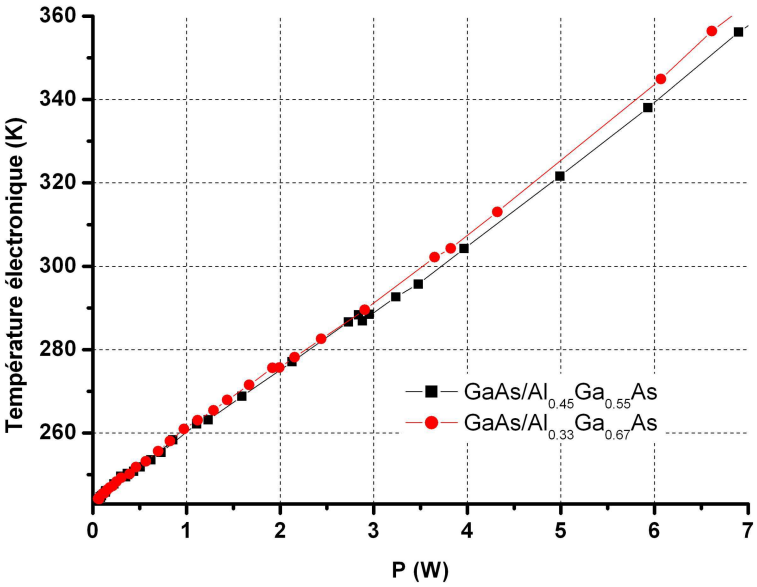


Fig.II.18 : Comparaison entre la température électronique du laser émettant à 9µm : effet de la discontinuité de barrière

Dans ce paragraphe nous avons utilisé les lasers LCQ3 et LCQ4. La région active du premier laser est en GaAs/$Al_{0.45}Ga_{0.55}As$ et celle du deuxième est en GaAs/$Al_{0.33}Ga_{0.67}As$. La figure.II.18 donne le résultat de calcul des températures électroniques en fonction de la puissance pour ces deux lasers. Le calcul est fait a une température de réseau de 243 K. Nous remarquons que les deux dessins ont des températures électroniques très proches (ΔT_{max}~7 K). Résultats attendu de parts les hypothèses que nous avons faites au départ pour notre modèle et qui consiste à prendre que les caractéristiques phonons du matériau puits en compte et il se trouve que ce dernier est le même dans les deux dessins : le GaAs. Ceci laisse prédire que

l'effet de la discontinuité de bande sur la température électronique est négligeable. Spagnolo et al [18], a étudié expérimentalement deux LCQ basés sur GaAs/$Al_{0.45}Ga_{0.55}As$ et GaAs/AlAs. Il a montré que la dépendance en la discontinuité de bande de la température électronique est beaucoup plus marquée que ce que suggèrent nos calculs. Cette différence avec nos résultats calculés est probablement due à notre modèle qui ne prend pas en compte les pertes des électrons vers le continuum. En effet le calcul des fonctions d'onde de continuum n'est pas trivial. Or en changeant la discontinuité de bande on influe directement sur ces pertes. Ceci représente donc une limitation de notre modèle.

II.B.7. Effet de la densité de dopage

Comme nous l'avons montré, la température électronique dépend de manière non linéaire du courant électrique qui traverse la structure. Dans le premier chapitre nous avons aussi montré que sous certaines hypothèses nous pouvons supposer que le courant est proportionnel au dopage de la région active. Dans ce que suit nous allons voir l'effet du changement de dopage sur l'excès de température des électrons dans les sous-bandes. Nous négligerons les effets à N corps dans nos traitements. Nous prendrons uniquement en compte les mécanismes que nous avons décrits dans le premier chapitre. La diffusion par les impuretés sera négligée. La figure.II.19 représente les résultats du calcul de la température électronique en dessous du seuil pour la structure laser LCQ3 basée sur GaAs/AlGaAs, pour trois dopages différents N = 1.10^{11} cm^{-2}, 2.10^{11} cm^{-2}, 3.10^{11} cm^{-2}. Cette figure montre que la température électronique dépend du dopage. Pour un courant fixe la température électronique diminue lorsque le dopage augmente. Ceci peut être expliqué par le fait que pour un courant de sortie fixe, la puissance électrique totale dissipée à l'intérieur du composant diminue en augmentant le dopage. En effet pour avoir le même courant, la tension appliquée est plus petite pour un dopage plus grand. Les électrons seront moins hauts en énergie dans les sous-bandes et auront ainsi une température électronique plus petite. Comme nous l'avons remarqué plus haut, l'émission de phonon LO est plus efficace quand l'énergie des électrons dans la sous-bande est plus faible. Donc la dissipation de l'énergie en excès sera aussi plus efficace. Sur la figure.II.20 nous avons tracé la température électronique en fonction de la quantité $\frac{P}{N_s}$ où P est la puissance électrique dissipée dans la structure, et N_s est la densité surfacique d'électron par période.

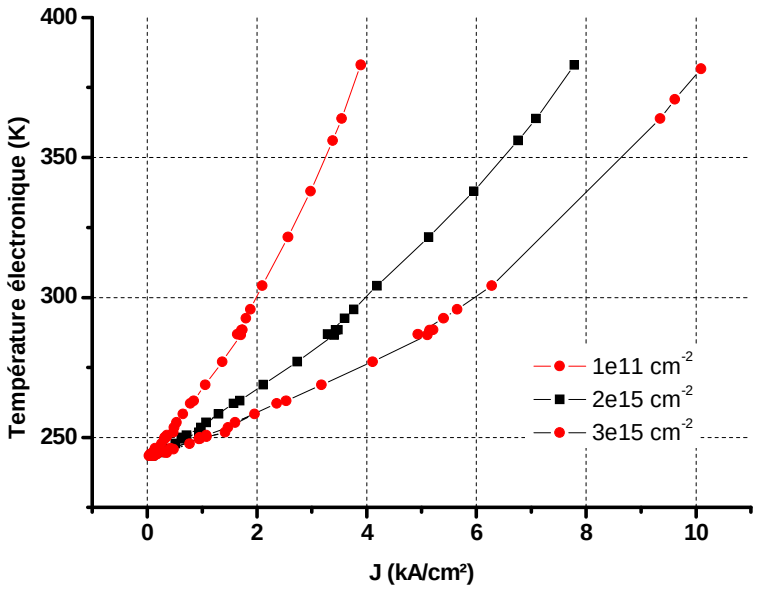


Fig.II.19 : Effet du dopage sur la température électronique. Trois dopages sont utilisées dans notre cas N= 1.10^{11} cm^{-2}, 2.10^{11} cm^{-2} et $3.10^{11}cm^{-2}$

.

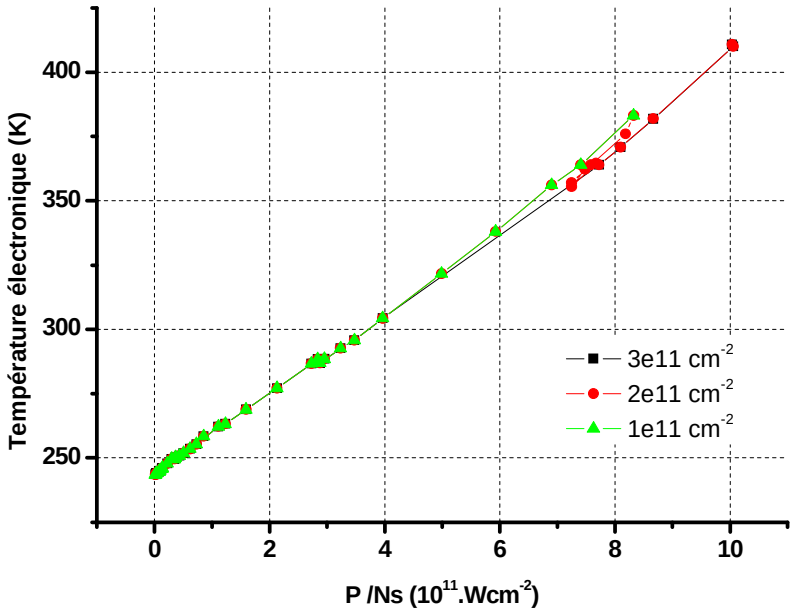


Fig.II.20 : La température électronique en fonction de P/Ns pour trois dopages différents

Ce graphe montre que les trois courbes correspondant aux différents dopages sont parfaitement superposées, ce qui confirme notre analyse.

II.C. Conclusion

En résumé, le calcul de la température électronique dans les lasers à cascade quantique montre que l'interaction électrons phonons–LO est le seul mécanisme avec lequel le gaz d'électrons peut transférer son énergie vers le réseau. Les mécanismes élastiques d'interaction représentent les sources d'énergie pour le gaz d'électrons. Les aspects physiques de la température électronique sont gérés par les propriétés 3D des matériaux utilisés dans le dessin. L'influence des différents paramètres du dessin tel que le type de matériau utilisé, la discontinuité de bande dans l'hétérostructure, et le dopage a été étudiée. Cette étude montre que la température électronique prend une forme simple donnée par l'équation (II.35). On peut ainsi faire ressortir un paramètre caractéristique de la structure qui est la résistance thermique électronique R_{the} et le coefficient de couplage courant température électronique. Dans la suite nous utiliserons dans la mesure de possible la formule (II.36) directement pour notre modèle de LCQ. Le modèle total qui demande beaucoup plus de temps de calcul ne sera utilisé que pour validation et vérification de résultats.
L'étape suivante dans ce modèle est la comparaison entre les calculs et l'expérience. Ce ne sera possible qu'en prenant en compte les propriétés optiques du laser et de la cavité optique qui entoure la zone active du laser. Ceci fait l'objet des deux chapitres suivants.

Références Bibliographiques

[1] E.Rosencher and B.Vinter. *Optoélectronique*. DUNOD, 2002.
[2] A. Wacker. *Semiconductor Superlattices : A model system for non linear transport*. Physics Reports, 2001.
[3] M. Troccoli, G. Scamarcio, V. Spagnolo, A. Tredicucci, C. Gmachl, F. Capasso, D. L. Sivco, A. Y. Cho, and M. Striccoli. Electronic distribution in superlattice quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 77(8):1088, 2000.
[4] V.B. Gorfinkel, S. Luryi, and B. Gelmont. Theory of gain spectra for quantum cascade lasers and temperature dependence of their characteristics at low and moderate carrier concentrations. *IEEE J. Quantum. Electron.* , 32(11):1995, 1996.
[5] P. Harrison. The nature of the electron distribution functions in quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 75(18):2800, 1999.
[6] R. Claudia Iotti and F. Rossi. Carrier thermalization versus phonon-assisted relaxation in quantum-cascade lasers: A monte carlo approach. *Applied Physics Letters*, 78(19):2902, 2001.
[7] H. Choi, T. B. Norris, T. Gresch, M. Giovannini, J. Faist, L. Diehl, and F. Capasso. Femtosecond dynamics of resonant tunneling and superlattice relaxation in quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 92(12):122114, 2008.
[8] E.M. Conwell and M.O. Vassell. High-field distribution function in gaas , *IEEE Transactions. Electron Devices*-, 13(1):22, 1966.
[9] G. Xu and A. Li. Interface phonons in the active region of a quantum cascade laser. *Phys. Rev. B*, 71(23):235304,2005.
[10] I.Lee, S.M. Goodnick, M. Gulia, E. Molinari, and P. Lugli. Microscopic calculation of the electron-optical-phonon interaction in ultrathin GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ alloy quantum-well systems. *Phys. Rev. B*, 51(11):7046,1995.
[11] P. Harrison, D. Indjin, and R. W. Kelsall. Electron temperature and mechanisms of hot carrier generation in quantum cascade lasers. *Journal of Applied Physics*, 92(11):6921, 2002.
[12] V. D. Jovanovic, S. Hofling, D. Indjin, N. Vukmirovic, Z. Ikonic, P. Harrison, J. P. Reithmaier, and A. Forchel. Influence of doping density on electron dynamics in GaAs/AlGaAs quantum cascade lasers. *Journal of Applied Physics*, 99(10):103106, 2006.
[13] H. Page, C. Becker, A. Robertson, G. Glastre, V. Ortiz, and C. Sirtori. 300 K operation of a GaAs-based quantum-cascade laser at lambda 9 µm. *Applied Physics Letters*, 78(22):3529, 2001.
[14] V. Spagnolo, G. Scamarcio, H. Page, and C. Sirtori. Simultaneous measurement of the electronic and lattice temperatures in GaAs/$Al_{0.45}Ga_{0.55}As$ quantum-cascade lasers: Influence on the optical performance. *Applied Physics Letters*, 84(18):3690, 2004.
[15] J. Faist, D. Hofstetter, M. Beck, T. Aellen, M.Rochat, and A. Blaser. Bound-to-continuum and two-phonon resonance, quantum-cascade lasers for high duty cycle, high-temperature operation. *IEEE J. Quantum. Electron.*, 38:533, 2002.
[16] C. Sirtori, P. Kruck, S. Barbieri, Ph. Collot, J. Nagle, M. Beck, J. Faist, and U. Oesterle. GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 73(24):3486, 1998.
[17] A. Leuliet. *Simulation du Transport dans les Lasers à Cascade Quantiques*. PhD thesis, Université Paris 7, 2010.
[18] S. Vincenzo, G. Scamarcio, W. Schrenk, and G. Strasser. Influence of the band-offset on the electronic temperature of GaAs/AlGaAs superlattice quantum cascade lasers. *Semiconductor Science and Technology*, 19(4):S110, 2004.

[19] R. Ferreira and G. Bastard. Evaluation of some scattering times for electrons in unbiased and biased single- and multiple-quantum-well structures. *Phys. Rev. B*, 40(2):1074, 1989.
[20] T. Unuma, M. Yoshita, T. Noda, H. Sakaki, and H. Akiyama. Intersubband absorption linewidth in gaas quantum wells due to scattering by interface roughness, phonons, alloy disorder, and impurities. *Journal of Applied Physics*, 93(3):1586–1597, 2003.

Chapitre III : Propriétés optiques des lasers à cascade quantique

Dans ce chapitre nous aborderons les propriétés optiques des lasers à cascades quantiques. Nous nous intéresserons en particulier au calcul du gain optique (ou absorption optique) du milieu et de la puissance de sortie du laser.
On présentera le modèle de calcul des absorptions intra-sous-bandes et inter-sous-bandes avec un traitement du couplage photons-porteurs adapté au laser à cascade quantique. Une comparaison entre des spectres de photocourant expérimentaux et calculés sera présentée. Nous mettrons ensuite l'accent plus particulièrement sur la saturation de gain dans les LCQ en montrant qu'une expression approchée du coefficient de saturation de gain peut être déduite en utilisant un modèle simple du laser à trois niveaux. Nous appliquons ensuite notre modèle au calcul de la puissance dans les lasers à cascade quantique. Nous finirons ce chapitre par la détermination d'une figure de mérite dont l'optimisation permettra d'améliorer les performances du laser en termes de courant et de puissance de sortie.

III.A. Calcul des propriétés optiques linéaires des LCQ

Dans le cas des lasers à cascade quantique, les transitions optiques qui nous intéressent (et qui font d'ailleurs la particularité d'un tel composant) sont des transitions inter-sous-bandes. Elles ont lieu dans la bande de conduction (ou plus rarement dans la bande de valence cela dépend du type de dessin). Comme nous l'avons montré dans le paragraphe (I.D) du premier chapitre, en utilisant l'approche $\vec{k}.\vec{p}$, l'électron peut être vu comme une particule ayant une masse effective notée *m**. Suivant le même raisonnement, l'interaction entre une onde électromagnétique et l'électron va être modélisée par un hamiltonien effectif que nous donnons un peu plus loin dans ce paragraphe. Les fonctions d'onde des états impliqués dans ce couplage prennent la forme suivante :

$$\Psi_i(r) = \psi_{i,k}(r).u_{i,c}(r) \qquad \text{(III.1)}$$

$$\psi_{i,k}(r) = \frac{1}{\sqrt{A}}.\exp(i.\vec{k}_{\parallel}.\vec{r}_{\parallel}).\psi_i(z) \qquad \text{(III.2)}$$

Dans la plupart des expériences portant sur les LCQ, l'onde électromagnétique se propage dans les plans des couches de l'hétorostructure *(x,y)*. Considérons une onde électromagnétique caractérisée par une pulsation ω et un vecteur de propagation q ($\omega = c/n.q$). Le champ électrique dans ce cas va s'écrire comme suit :

$$F_{e.m}(r.t) = F.\vec{e}.\cos(\omega.t - \vec{q}.\vec{r}) \qquad \text{(III.3)}$$

Dans cette équation $\vec{e}$ est le vecteur de polarisation perpendiculaire à la direction de propagation de l'onde électromagnétique. Dans le cas qui nous intéresse le vecteur de polarisation est dans la direction z perpendiculaire au plan des couches.

Le potentiel vecteur $\vec{A}_{e,m}$ tel que $\vec{F}_{e,m} = -\frac{\partial \vec{A}_{e,m}}{\partial t}$ dans la jauge de Coulomb ($\vec{\nabla}.\vec{A}_{e,m} = 0$) est donné par la forme suivante :

$$\vec{A}_{e.m}(r.t) = -\frac{\vec{e}_z.F}{2.i.\omega}\{\exp[i(\omega.t - \vec{q}.\vec{r})] - \exp[-i(\omega.t - \vec{q}.\vec{r})]\} \qquad \text{(III.4)}$$

La présence du potentiel vecteur $A_{e,m}$ fait que le moment de l'électron $\vec{p}$ doit être remplacé par $\vec{p} - q_0.\vec{A}_{e,m}$ dans l'équation du mouvement (q_0 étant la charge élémentaire). L'hamiltonien d'interaction entre les modes optiques et les porteurs a la forme suivante :

$$H_0 + H_{\text{int}} = \frac{(\vec{p} - q_0.\vec{A}_{e,m})^2}{2.m*} + V(r) \qquad \text{(III.5)}$$

où H_0 est l'hamiltonien de l'hétérostructure en l'absence de l'onde électromagnétique, V(r) est le potentiel statique dû à l'hétérostructure. L'hamiltonien décrivant les électrons dans l'hétérostructures s'écrit comme suit en négligeant les termes en $(A_{e,m})^2$ ainsi que les termes harmoniques antirésonants (approximation circulaire) :

$$H_0 + H_{\text{int}} = \frac{p^2}{2.m*} + V(r) + \frac{q_0}{2.m*}.\vec{p}.\vec{A}_{e,m} \qquad \text{(III.6)}$$

avec :

$$H_{\text{int}} = \frac{q_0}{2.m*}.\vec{p}.\vec{A}_{e,m} \qquad \text{(III.7)}$$

III.A.1. Temps de vie stimulé :

Cette perturbation électromagnétique est dépendante du temps. Elle va induire des transitions entre états. La probabilité par unité de temps $\tilde{P}_{i,f}$ d'une transition, par absorption d'un photon d'un état $|\Psi_i\rangle$ occupé, d'énergie E_i vers un état $|\Psi_f\rangle$ libre, d'énergie E_f est exprimée à l'aide de la règle d'or de Fermi comme suit :

$$\tilde{P}_{i,f}(\omega) = \frac{2.\pi}{\hbar}.\left|\langle.\Psi_i|V|\Psi_f\rangle\right|^2.\delta(E_f - E_i - \hbar.\omega) \qquad \text{(III.8)}$$

Dans cette équation $V = \frac{i.q_0.F}{2.m*.\omega}.\vec{e}.\vec{p}$, $\delta(E)$ est la distribution de Dirac qui traduit la conservation de l'énergie.

Le calcul de l'élément de matrice dans l'équation précédente conduit à l'équation suivante en utilisant l'approximation fonctions enveloppe (en utilisant les formes des fonctions d'onde données dans (III.1) et (III.2)) :

$$\langle.\Psi_i|V|\Psi_f\rangle = \langle\psi_{i,k}.u_{i,c}|V|\psi_{f,k}.u_{f,c}\rangle = \langle\psi_{i,k}|V|\psi_{f,k}\rangle.\langle u_{i,c}|u_{f,c}\rangle + \langle\psi_{i,k}|\psi_{f,k}\rangle.\langle u_{i,c}|V|u_{f,c}\rangle \qquad \text{(III.9)}$$

Etant donné que les transitions ont lieu dans la bande de conduction et en supposant que la partie périodique de la bande de Bloch est la même pour les deux états $u_{f,c} = u_{i,c,}$, on a $\langle u_{i,c}|u_{f,c}\rangle = 1$ et $\langle u_{i,c}|V|u_{f,c}\rangle = 0$. L'équation (III.9) se simplifie et s'écrit donc comme suit ;

$$\langle \Psi_i | V | \Psi_f \rangle = \langle \psi_{i,k}.u_{i,c} | V | \psi_{f,k}.u_{f,c} \rangle = \langle \psi_{i,k} | V | \psi_{f,k} \rangle. = \langle \psi_i | V_z | \psi_f \rangle \text{[7]} \qquad \text{(III.10)}$$

Dans cette équation, il faut prendre en compte le fait que la transition ne peut avoir lieu que si l'état de départ est occupé et celui d'arrivée est vide. On introduit donc la probabilité de d'occupation d'un état $|\psi_i\rangle$ et d'énergie E_i $f(E_i)$, $P_{i,f}$ prend ainsi la forme suivante :

$$P_{i,f}(\omega) = \tilde{P}_{i,f}(\omega).f(E_i).[1-f(E_f)] = \frac{2.\pi}{\hbar}.\left|\langle \psi_i | V_z | \psi_f \rangle\right|^2.\delta(E_f - E_i - \hbar.\omega).f(E_i).[1-f(E_f)] \qquad \text{(III.11)}$$

Etant donné que la longueur d'onde du photon est beaucoup plus grande que les dimensions atomiques, on peut négliger la dépendance spatiale du vecteur potentiel dans le terme $\left|\langle \psi_i | V | \psi_f \rangle\right|$. On retrouve ainsi la forme communément utilisée :

$$P_{i,f}(\omega) = \frac{2.\pi}{\hbar}.\frac{q_0{}^2.F^2}{4.(m^*)^2.\omega^2}.\left|\langle \psi_i | \vec{P}_z | \psi_f \rangle\right|^2.\delta(E_f - E_i - \hbar.\omega).f(E_i).[1-f(E_f)] \qquad \text{(III.12)}$$

Le traitement exact de l'influence de la densité totale de photons et du nombre de modes passe par l'introduction de la quantification de la lumière et ne sera pas repris ici. On renvoie le lecteur aux références [1, 2] pour une introduction à ce type de problème. Nous reprenons ici les principaux résultats qui nous serviront par la suite. La probabilité totale de transition d'un état i vers un état f par émission d'un photon d'énergie $\hbar.\omega$ s'obtient en multipliant l'équation (III.12) par $(n_{\hbar.\omega}+1)$ où $n_{\hbar.\omega}$ est le nombre de photons d'énergie $\hbar.\omega$. On obtient la formule suivante :

$$P_{i,f}(\omega) = \frac{2.\pi}{\hbar}.\frac{q_0{}^2.F^2}{4.(m^*)^2.\omega^2}.(n_{\hbar.\omega}+1).\left|\langle \psi_i | \vec{P}_z | \psi_f \rangle\right|^2.\delta(E_f - E_i - \hbar.\omega).f(E_i).[1-f(E_f)] \qquad \text{(III.13)}$$

Le terme proportionnel au nombre de photons dans l'équation précédente représente l'émission stimulée, l'autre terme n'est que le taux d'émission spontanée qui s'écrit pour un mode donné par une équation de type (III.12). Par intégration de ce terme sur tous les modes de la cavité on retrouve le temps moyen d'émission spontanée [2] :

$$\frac{1}{t_{spont}} = \left|\langle .\psi_i | z | \psi_f \rangle\right|^2.\frac{q_0{}^2.\omega_0^2.n_{op}}{3.\pi.c^3.\hbar.\varepsilon_0} \qquad \text{(III.14)}$$

L'émission spontanée est très importante dans le fonctionnement d'un laser. C'est à partir des photons émis de façon spontanée que se construit l'émission stimulée. Dans l'utilisation de cette formule lors de la modélisation d'un LCQ, on verra qu'une quantité importante est la probabilité pour qu'un photon émis de façon spontanée, le soit vers le mode laser. On définira ainsi le facteur de recouplage de l'émission spontanée dans le mode guidé B_ω. Le lecteur pourra trouver une expression de ce facteur dans la référence [1]. De façon pratique, la probabilité d'émission vers le mode guidé est peu dépendante de l'environnement optique

---

[7] Le calcul complet donne :

$$\langle \Psi_i | V | \Psi_f \rangle = \langle \psi_{i,k}.u_{i,c} | V | \psi_{f,k}.u_{f,c} \rangle = \langle \psi_{i,k} | V | \psi_{f,k} \rangle. = \langle \psi_i | V_z | \psi_f \rangle.\delta_{k'_\parallel,k_\parallel} + (\vec{e}_x.\hbar.k_x + \vec{e}_y.\hbar.k_y).\delta_{ni,nf}.\delta_{k'_\parallel,k_\parallel}$$

précis autour de la zone d'émission. Il en est de même pour le taux total d'émission spontanée pourvu que l'on compare des structures optiques ayant le même indice effectif [2].
La probabilité de transition par absorption est donnée par la même formule que celle de l'émission stimulée en changeant le terme de conservation de l'énergie dans cette équation représenté par la fonction δ par le terme $\delta(E_i - E_f + \hbar\omega)$ et $n_{\hbar\omega}+1$ par $n_{\hbar\omega}$.

III.A.2. Absorption et gain linéaire

On déduit de l'équation (III.12) le taux net de pertes d'énergie de l'onde électromagnétique en faisant un bilan entre la puissance absorbée et celle émise par le matériau :

$$P(\omega) = \hbar.\omega.\sum_{i,f}(P_{i,f}(\omega) - P_{f,i}(\omega)) \qquad \text{(III.15)}$$

Le coefficient d'absorption ou de gain du matériau est alors donné par la formule suivante :

$$\alpha(\omega) = \frac{1}{\langle P(\omega)\rangle}\frac{\partial\langle P(\omega)\rangle}{\partial z} = -g(\omega) \qquad \text{(III.16)}$$

Tout calcul fait, on trouve, la formule suivante pour le coefficient d'absorption [3] :

$$\alpha(\omega) = A.\sum_{i,f}\frac{1}{m^*}.\left|\langle\psi_i|\vec{P}_z|\psi_f\rangle\right|^2.\left[f(E_i) - f(E_f)\right].\delta(E_f - E_i - \hbar.\omega) \qquad \text{(III.17)}$$

Dans cette équation $A = \frac{2.\pi.q_0{}^2}{\varepsilon_0.n.c.m^*.\omega.V_0}$ et V_0 est le volume du matériau. A admet la dimension de l'inverse d'une longueur $[L]^{-1}$. Le terme $\left|\langle\psi_i|\vec{P}_z|\psi_f\rangle\right|$ gouvernera les règles de sélection des transitions optiques autorisées.

Dans notre modèle des lasers à cascade quantique, nous ne nous intéressons qu'aux états confinés. Ces états sont localisés spatialement. Dans ce cas, les éléments de matrice de l'opérateur position et quantité de mouvement sont reliés l'un à l'autre par l'équation suivante :

$$[z, p] = zp - pz = i.\hbar \qquad \text{(III.18)}$$

Cette formule nous permet de déterminer la relation suivante entre l'opérateur de position et celui de la quantité de mouvement (en supposant que les fonctions enveloppes restent orthogonales) :

$$\langle\psi_i|\vec{P}_z|\psi_f\rangle = i.m^*.\omega_{i,f}.\langle\psi_i|\vec{Z}|\psi_f\rangle \qquad \text{(III.19)}$$

Ainsi on peut réécrire l'équation (III.17) comme suit en introduisant l'élément de matrice position $z_{i,f} = \left|\langle\psi_i|z|\psi_f\rangle\right|$:

$$\alpha(\omega) = B.\sum_{i,f} .z_{i,f}^{2} .\left[f(E_i) - f(E_f)\right]\delta(E_f - E_i - \hbar.\omega) \qquad \text{(III.20)}$$

Dans cette équation $B = \dfrac{\pi.q_0{}^2.\omega}{\varepsilon_0.n.c.V_0}$.

III.A.2.a. Règles de sélection

Dans tous les cas, les transitions permises sont celles qui conservent le vecteur d'onde $k_{\parallel}$ de la fonction d'onde de l'électron.

Comme nous l'avons dit, le terme $\left|\langle\psi_i|\vec{P}_z|\psi_f\rangle\right|$ imposera les règles de sélection lors des transitions optiques. Comme le montre l'équation (III.10), seule la composante du champ électrique perpendiculaire aux couches peut être couplée aux transitions inter-sous-bandes. Le tableau.III.1 tiré de la référence [3] résume les différentes règles de sélection dans une hétérostructure idéale (les défauts peuvent lever l'interdiction des transitions non permises)

Polarisation	e_x	e_y	e_z
Propagation parallèle à z	Interdite si $\omega \neq 0$	Interdite si $\omega \neq 0$	impossible
Propagation parallèle à x	impossible	Interdite si $\omega \neq 0$	autorisée
Propagation parallèle à y	Interdite si $\omega \neq 0$	impossible	autorisée

Tableau.III.1 : Règles de sélection dans une hétérostructure idéale tirée de la référence [3]

Il a été démontré par Yang et al [4] en utilisant un modèle $\vec{k}.\vec{p}$ à 8 bandes plus élaboré que, dans le cas des hétérostructures, la polarisation TM est dominante entre des états de parité différente. Le rapport entre les éléments de matrice entre les polarisations TE et celle TM est donné par l'équation suivante :

$$\frac{M_{TE}}{M_{TB}} = \frac{1}{3}.\frac{(E_j - E_i).\Delta}{(E_j + E_g + \Delta).(E_i + E_g)} \qquad \text{(III.21)}$$

Dans cette équation l'état i est l'état de départ, l'état j est l'état d'arrivée, Δ est la différence d'énergie entre la bande de valence et la bande spin-orbite, E_g est l'énergie du gap du matériau. Ce rapport est très petit dans le cas de matériaux à grande énergie de gap comme pour les structures basées sur du GaAs. Pour une structure ayant un puits quantique en GaAs, ce rapport est égal à 0,004 pour une transition d'énergie 124 meV soit un rapport entre les coefficients optiques de 0,000016. Le rapport de la formule (III.21) est petit aussi pour les hétérostructures ayant une grande discontinuité de bande. Dans le cas d'une hétérostructure en $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ (accord de maille sur InP) d'une transition d'énergie 137 meV (soit λ = 9 µm), la formule (III.21) donne un rapport égal à 0,02. Donc le rapport du coefficient d'absorption de la polarisation TE à celui de la polarisation TM est égal à 0,0004. Ce rapport augmente légèrement en fonction du vecteur d'onde dans le plan des couches comme cela a été démontré dans la référence [4].

Ces règles de sélection ont pu être vérifiées expérimentalement dans de nombreux travaux. Par exemple H.C. Liu et al [5], ont montré grâce à des expériences portant sur des

photodétecteurs (QWIP), que l'absorption de la polarisation TE est plus petite que 0,2 % de celle de la polarisation TM.

III.A.2.b. Absorption linéaire

Dans l'équation (III.20) la somme sur les états i et f fait apparaître par passage à la limite continue une intégrale de la forme $S.\int \frac{d^2k_{\parallel}}{(2.\pi)^2}$ (S étant la surface du guide d'onde) de telle façon que cette dernière équation s'écrit comme suit :

$$\alpha(\omega) = \frac{\pi.q_0{}^2.\omega}{\varepsilon_0.n_{eff}.c.d}.\sum_{i,f}.z_{i,f}^2.\int \frac{d^2k_{\parallel}}{(2.\pi)^2}\left[f(E_i) - f(E_f)\right]\delta(E_f - E_i - \hbar.\omega) \qquad \text{(III.22)}$$

d est la dimension dans la direction de la croissance des couches de la zone active. L'intégrale $\int \frac{d^2k_{\parallel}}{(2.\pi)^2}\left[f(E_i) - f(E_f)\right]\delta(E_f - E_i - \hbar.\omega) = (n_i - n_f)\delta(E_f - E_i - \hbar.\omega)$, n_i (resp. n_f) est la densité surfacique de population de l'état i (resp. f) ayant une énergie en bas de bande E_i (resp. E_f). La somme est faite sur tous les états i, f dans la structure. Etant donné que nous faisons l'hypothèse que la structure LCQ est périodique avec un nombre N de périodes alors $\sum_{i,f} = N.\sum_{i_{periode}, f_{periode}}$. L'équation (III.22) se simplifie donc comme suit :

$$\alpha(\omega) = \frac{\pi.q_0{}^2.\omega}{\varepsilon_0.n_{eff}.c.Lp}.\sum_{i,f}.z_{i,f}^2.(n_i - n_f)\delta(E_f - E_i - \hbar.\omega) \qquad \text{(III.23)}$$

$L_p = \frac{d}{N}$ est la longueur de la période.

Cette forme simplifiée résulte du fait que nous avons supposé que les sous-bandes sont parallèles.

L'équation (III.23) montre que deux paramètres importants contrôlent l'absorption de l'hétérostructure : la force d'oscillateur donnée par la formule $f_{i,j} = \frac{2.m^*}{\hbar^2}.E_{i,j}.z_{i,j}^2$ et les élargissements des transitions optiques dans la structure. La prise en compte d'un élargissement non nul se fait en introduisant une fonction d'élargissement notée $L(\hbar.\omega - E_{i,f})$ à la place de la fonction δ.

On peut définir ici une quantité importante : la section efficace de la transition optique qui est le gain de la transition par unité de différence de populations et qui s'écrit comme suit :

$$\sigma_{i,f}(\omega) = \frac{2.\pi.q_0{}^2.z_{i,f}^2}{\varepsilon_0.n_{eff}.\lambda_p.Lp}.L(\hbar.\omega - E_{if}) \qquad \text{(III.24)}$$

Cette quantité nous sera utile dans la suite lors de l'étude de l'effet du couplage entre les porteurs et les photons dans la cavité.

Dans ce qui suit nous allons voir en détail les propriétés de l'un et l'autre de ces termes ainsi que les hypothèses faites dans le cadre de notre modèle pour le calcul de l'absorption linéaire de l'hétérostructure.

1. Force d'oscillateur et règle de somme

Ce terme va directement influencer la courbe d'absorption de l'hétérostructure. Dans un travail précédent [6] la lumière a été mise sur l'effet des matériaux utilisés dans l'hétérostructure ainsi que leurs masses effectives sur ce paramètre.
Dans un système atomique, il a été démontré qu'une règle de somme existe entre les différentes forces d'oscillateur des transitions mises en jeu dans le système. Ainsi on a la relation suivante [2] :

$$\sum_j f_{ij} = 1 \qquad \text{(III.25)}$$

Il est alors judicieux de se poser la question : qu'en sera-t-il pour les transitions optiques dans l'hétérostructure ?
Ehrenreich et Cohen [7] ont montré que la règle de somme reste valable dans le cas d'une hétérostructure. Elle prend la forme suivante dans ce cas :

$$\sum_j f_{ij} + \frac{m_e}{\hbar^2}\frac{\partial^2 E_i(k_z)}{\partial k_z^2} = 1 \qquad \text{(III.26)}$$

Ce qui peut s'écrire comme suit :

$$\sum_j f_{ij} = 1 - \frac{m_e}{m_{SL}^i} \qquad \text{(III.27)}$$

où m_e est la masse de l'électron dans la bande de conduction dans le matériau en volume, et m_{SL}^i est la masse effective de l'électron dans l'hétérostructure dans la sous-bande *i*. La figure III.1 représente la force de l'oscillateur de la transition 1 vers 2 dans une hétérostructure idéale constituée d'un simple puits quantque, tirée de la référence [8]. On remarque que la force d'oscillateur devient plus grande que 1 dans la deuxième moitié de la zone de Brillouin. L'origine physique de ce comportement vient du changement du signe de la masse effective dans cette zone qui devient négative.

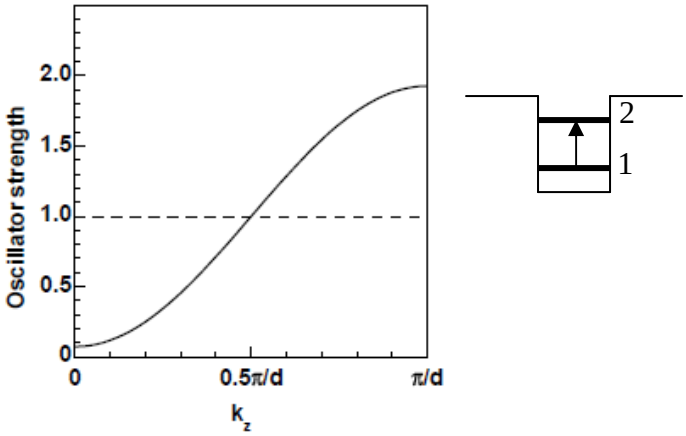


Fig.III.1 : Représentation de la force de l'oscillateur en fonction du vecteur d'onde k perpendiculaire au plan des couches tirée de la référence [8]

2. Quel type d'élargissement pour le gain linéaire ?

Le gain incluant la fonction de l'élargissmement s'éxprime comme suit :

$$g(\omega) = \frac{\pi . q_0{}^2 . \omega}{\varepsilon_0 . n_{eff} . c . Lp} . \sum_{i,f} . z_{i,f}^2 . (n_f - n_i) L(\hbar . \omega - E_{i,f}) \qquad \text{(III.28)}$$

Si la largeur à mi-hauteur de la fonction d'élargissement vaut γ, le maximum du gain sera proportionnel dans une première approximation à $1/\gamma$. Le type de l'élargissement et donc la forme de la fonction $L(\hbar.\omega - E_{i,f})$ est dépendante des mécanismes qui entrent en jeu dans de tels effets. Dans ce qui suit nous passons en revue les différents mécanismes qui vont déterminer la largeur de l'élargissement des transitions optiques.

1. Les mécanismes de relaxation en phase. Les transitions électroniques sont généralement accompagnées par des changements de la phase relative entre les deux états mis en jeu. L'ensemble des mécanismes de diffusion pris en compte dans le calcul du transport (voir chapitre I) contribue à ces déphasages. Le temps dit d'élargissement homogène correspond au temps associé à l'ensemble de ces mécanismes. Il représente l'échelle de temps de la décroissance de la polarisation inter-sous-bandes. Sa détermination expérimentale est très difficile. En effet, le challenge consiste à déterminer dans les mesures faites la contribution des mécanismes homogènes par rapport à celle des mécanismes inhomogènes. Les méthodes de spectroscopie non linéaire [9, 10, 11] sont le seul moyen qui rend possible la distinction des différentes contributions à l'élargissement avec une précision acceptable.

2. L'élargissement inhomogène. Lorsque les énergies des transitions inter-sous-bandes constituent une distribution (on peut faire le rapprochement avec le système atomique où le milieu sera formé d'un ensemble inhomogène de systèmes) on parle d'élargissement inhomogène. Il conduit à une décroissance de la polarisation macroscopique. La forme de la raie d'absorption est alors une moyenne d'ensemble de

l'absorption due aux transitions inter-sous-bandes dans le système étudié selon la formule suivante :

$$\overline{\alpha}(\omega) = \int_{\omega_i} \alpha(\omega_i).\rho(\omega_i).d\omega_i \qquad \text{(III.29)}$$

Dans cette équation, $\rho(\omega_i)$ est la densité des états liés à la valeur de k correspondant à la transition verticale.
Plusieurs mécanismes sont à l'origine de l'élargissement inhomogène des transitions inter-sous-bandes. Les fluctuations de la largeur du puits et de la composition du puits et de la barrière à des échelles plus grandes que la longueur de cohérence des électrons constituent l'origine principale de cet élargissement. La différence entre la masse effective des électrons dans le matériau puits et celle des électrons dans le matériau barrière dans l'hétérostructure est aussi une cause d'élargissement inhomogène des spectres d'absorption [12]. Les écarts aux modèles uniformes des effets du désordre tel que les fluctuations de largeur du puits et le désordre de la composition d'alliage peuvent aussi contribuer à l'élargissement inhomogène.

Il découle de cette discussion que contrairement au système atomique où l'élargissement homogène peut être facilement distingué de celui inhomogène, dans les lasers à cascade quantique, cette distinction est beaucoup moins évidente. Ces problèmes ont été discutés dans les références [13, 14]. En particulier, le mécanisme de diffusion par la rugosité d'interface peut être pris comme un contributeur de l'élargissement homogène [15, 16, 14]. La rugosité d'interface peut être aussi vue comme un contributeur à la fluctuation spatiale de l'épaisseur des puits et elle peut être considérée comme un élargissement inhomogène [17].

3. Calcul de la taille de l'élargissement

Dans notre cas, nous avons fait l'hypothèse que la fonction d'élargissement prend la forme d'une lorentzienne normalisée comme le montre l'équation suivante :

$$L(\hbar.\omega - E_{i,f}) = \frac{\frac{\gamma}{2.\pi}}{(E_f - E_f - \hbar.\omega)^2 + (\frac{\gamma}{2})^2} \qquad \text{(III.30)}$$

où γ est la largeur de la lorentzienne. Le gain total dans la structure est alors donné par la sommation sur toutes les transitions possibles dans la structure selon la formule (III.28). Une forme théoriquement satisfaisante du point de vue des approximations que nous faisons consiste à prendre en compte l'élargissement inhomogène par une convolution supplémentaire du spectre d'absorption (ou de gain) par une fonction gaussienne.
Dans le modèle d'élargissement lorentzien de gain, le paramètre essentiel est la taille à mi-hauteur de la lorentzienne γ. Unuma et al [16, 1464] ont proposé une méthode pour calculer ce paramètre dans laquelle la diffusion par la rugosité d'interface est traitée comme étant un mécanisme d'élargissement homogène. Dans cette approche l'élargissement d'une transition optique d'état initial i et d'état final j est ainsi dû à deux contributions essentielles. On trouve la contribution de la diffusion inter-sous-bande. Elle est donnée par le terme $\frac{\hbar}{\tau_{rugo,inter}}$ où

$\tau_{rugo,inter}$ est le temps de diffusion donné par l'équation (I.71) du premier chapitre et la contribution de la diffusion intra-sous-bande notée $\frac{\hbar}{\tau_{rugo,\text{intra}}}$ qui a pour expression dans le cas de plusieurs interfaces dans l'hétérostructure [16, 13, 15] :

$$\frac{\hbar}{\tau_{rugo,\text{intra}}}(E) = \frac{\pi.m^*.\Delta^2.\Lambda^2}{\hbar^2}.\sum_{l,m} c_{l,m}.F_l.F_m \qquad \text{(III.31)}$$

Δ est la taille moyenne des îlots de rugosité, Λ est la longueur de corrélation, m^* est la masse effective de l'électron (on fait l'approximation de sous bandes paraboliques), $c_{l,m}$ sont les coefficients de corrélation des interfaces, et F_l est un facteur de forme qui s'écrit comme suit [13] :

$$F_l = \delta U(\text{interface}).(|\psi_i(\text{interface})|^2 - |\psi_f(\text{interface})|^2) \qquad \text{(III.32)}$$

où δU(interface) est la valeur de la discontinuité de bande à l'interface et $\psi_i\,(resp.\psi_j)$ est la fonction d'onde de l'état initial (resp. final).
Avec l'utilisation de ce modèle d'élargissement dû à la rugosité d'interface les auteurs ont pu expliquer la différence entre les temps de vie obtenus à partir de la mobilité et ceux calculés à partir de la détermination de l'élargissement γ. Dans notre modèle, les interfaces sont prises non corrélées et donc $c_{ij} = \delta ij$. Nous avons pris en compte en plus de la rugosité, les différents mécanismes de diffusion qui interviennent dans notre modèle de simulation de transport décrit dans le premier chapitre (à savoir absorption et émission de phonon LO, le désordre d'alliage, les phonons LA). La contribution de ces mécanismes à l'élargissement sera notée γ_{oth}. L'élargissement optique total est alors donné par la formule suivante [15] :

$$2.\gamma = 2.(\gamma_{rugo} + \gamma_{oth}) = \hbar.\left(\frac{1}{\tau_{\text{inter}}} + \frac{1}{\tau_{\text{intra}}}\right) \qquad \text{(III.33)}$$

Pour valider ce modèle de calcul, Wittmann et al ont utilisé deux structures lasers émettant à 8.4 µm (une structure basée sur un dessin double phonon et une sur un dessin bound to continuum décrits dans le paragraphe I.C.1). Ils ont obtenu un bon accord entre l'élargissement expérimental obtenu à partir des courbes de photocourant et celui calculé selon la formule (III.33). Au premier abord, cet accord sans paramètre ajustable est surprenant car dans la formule de l'élargissement les mécanismes de diffusion par électron-électron devraient contribuer de façon non négligeable dans l'élargissement du gain étant donnée leur grande fréquence. Des études théoriques des effets de ce mécanisme de diffusion ont été menées dans les références [18] et [19]. Elles montrent que la contribution de ce mécanisme est de même ordre de grandeur que celle des phonons –LO (~3meV à 300 K). L'accord obtenu est probablement dû à une sous-estimation des temps $\tau_{rugo,\text{intra}}$, qui comme la formule (III.31) le montre dépend de la masse électronique m*, et des paramètres Δ et Λ décrivant la rugosité. L'incertitude expérimentale sur ces paramètres explique une telle sous-estimation.
En utilisant le modèle de saut entre états de Wannier-Stark, nous avons pu calculer en utilisant les équations (III.28) et (III.33), le spectre du gain de la structure laser à 4,6 µm pour 5 champs appliqués à la structure (60 kV/cm à 68 kV/cm par pas de 2 kV/cm). Ces calculs sont

faits sur trois périodes de la structure dans le cadre du modèle $\vec{k}.\vec{p}$ à 3 bandes décrit dans le premier chapitre. L'énergie du phonon LO est prise égale à 34 meV. Les paramètres Δ et Λ décrivant la rugosité d'interface sont pris respectivement égaux à 1 Å et 90 Å. Pour ce calcul, la température électronique est prise fixe et égale à celle du réseau ($T_R = 300\ K$). La figure.III.2 représente le résultat de ce calcul.
L'énergie du maximum du gain calculée d'après cette figure est de l'ordre de 280 meV soit une longueur d'onde d'émission de 4,4 µm. Expérimentalement, ce laser émet à 4,6 µm.
La figure.III.3 représente le calcul du gain pour la même structure en prenant en compte tous les mécanismes de diffusions (courbe en noir). La courbe en rouge est celle obtenue en calculant le gain sans prendre en compte la rugosité d'interface. Cette comparaison montre deux éléments importants. Le premier est que pour ce calcul trois transitions contribuent essentiellement au gain qui sont la transition radiative (282 meV), la transition entre le niveau bas de l'injecteur vers le niveau bas (278 meV) et finalement la transition de l'état juste au dessus de l'état haut du laser vers l'état bas du laser. Par ailleurs, la comparaison avec la courbe noire montre que la rugosité d'interface à un effet important sur la valeur de l'élargissement du gain dans les LCQ. Le mécanisme de diffusion par la rugosité d'interface est celui qui contribue le plus à l'élargissement du gain avec un élargissement moyen de l'ordre de 7 meV à 300 K (~2 fois celui des phonons). On voit ainsi l'importance majeure que peut avoir la qualité de croissance des couches dans les LCQ dans les performances finales des composants.

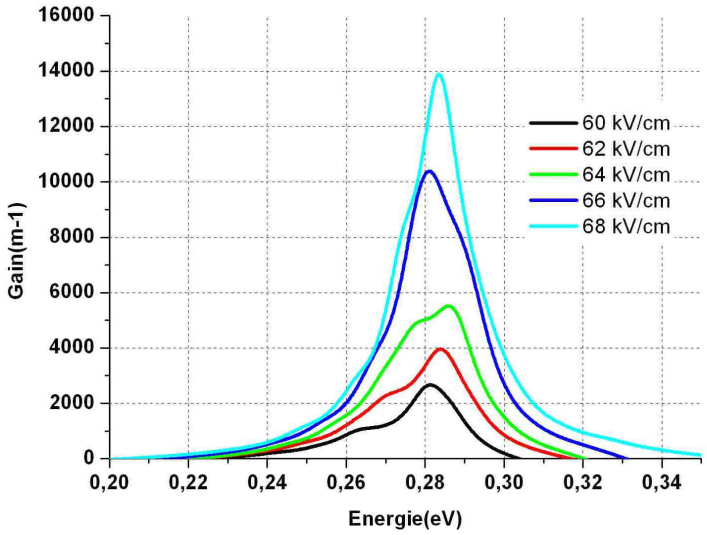


Fig.III.2 : Spectre de gain linéaire calculé pour une structure laser émettant à 4,6 µm. L'élargissement de la courbe de gain est calculé selon la formule (III.33). Pour les conditions de calcul voir le texte

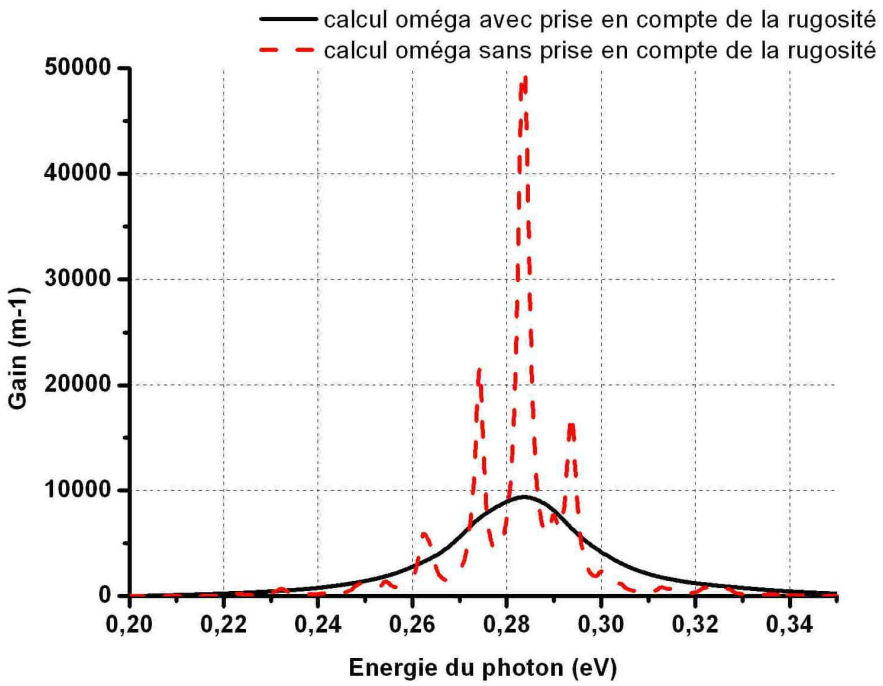


Fig.III.3 : Effet de la rugosité d'interface sur l'élargissement du gain optique : Comparaison du calcul du gain optique pour la structure à 4,6 µm à 66 kV/cm en prenant en compte tous les mécanismes de diffusion (courbe en trait plein) et sans prendre en compte la rugosité d'interface (courbe en tiretée)

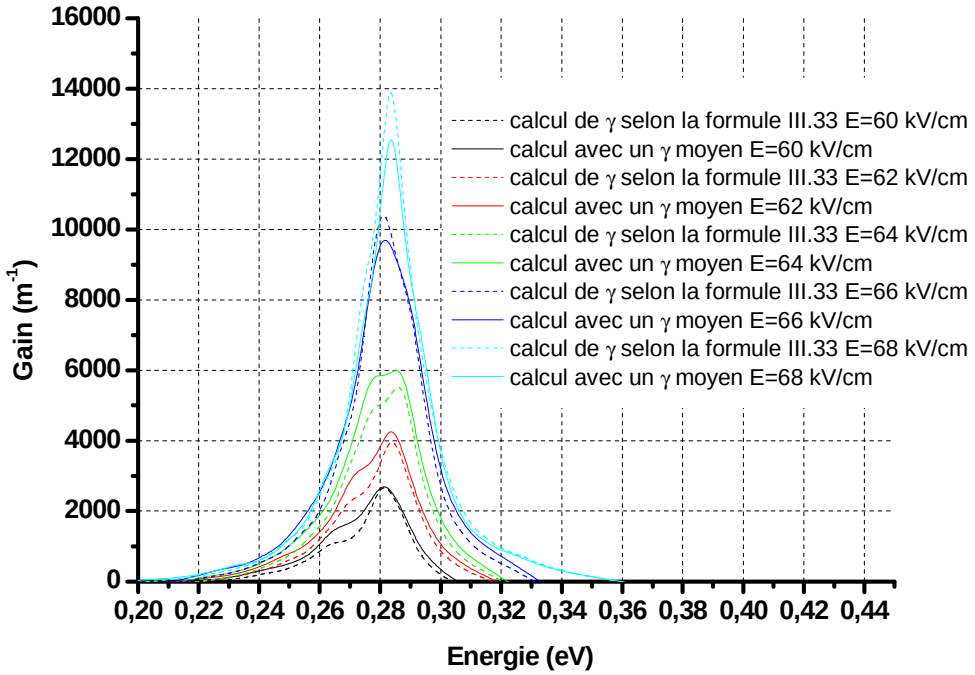


Fig.III.4 : Spectre de gain linéaire calculé pour une structure laser émettant à 4,6 µm. L'élargissement de la courbe de gain est calculé selon la formule (III.33). Pour les conditions de calcul voir le texte

La figure.III.4 représente la comparaison entre le calcul du gain de deux façons différentes : en calculant l'élargissement par utilisation de l'équation (III.33) (courbe en pointillés) et en prenant un élargissement moyen de transition fixe égal à 14 meV. On obtient un accord satisfaisant entre les deux calculs.

4. Elargissement apparent du gain

La figure.III.3 permet de montrer que le nombre de transitions qui contribuent au gain change en fonction du champ appliqué à la structure. En effet, il est visible sur ce graphe qu'en augmentant le champ appliqué, un pic qui correspond à la transition des électrons entre le niveau bas de l'injecteur vers l'état bas du laser apparaît. Cette transition a une contribution de plus en plus grande en fonction du champ. En augmentant le champ électrique appliqué à la structure, l'élément de matrice de la transition augmente. La contribution de la transition au gain est alors de plus en plus conséquente. Ceci a pour effet d'augmenter la largeur de la courbe de gain. A partir du moment où le niveau injecteur est au même niveau d'énergie que le niveau haut du laser (ce qui correspond au champ 64 kV/cm pour la structure étudiée), le gain continue d'augmenter car l'élément de matrice de la transition continue à augmenter ainsi que la différence de population entre le niveau haut et bas du laser. En même temps l'élargissement va diminuer car les contributions des transitions autres que celle de l'état haut vers l'état bas deviennent de plus en plus faibles. Sur la figure III.5 est reporté le tracé de la courbe d'élargissement en fonction du champ appliqué à la structure dans les mêmes conditions de calculs que la figure III.2. On voit que comme expliqué plus haut dans ce paragraphe, cette courbe passe par un maximum pour un champ électrique appliqué à la structure de 64 kV/cm.

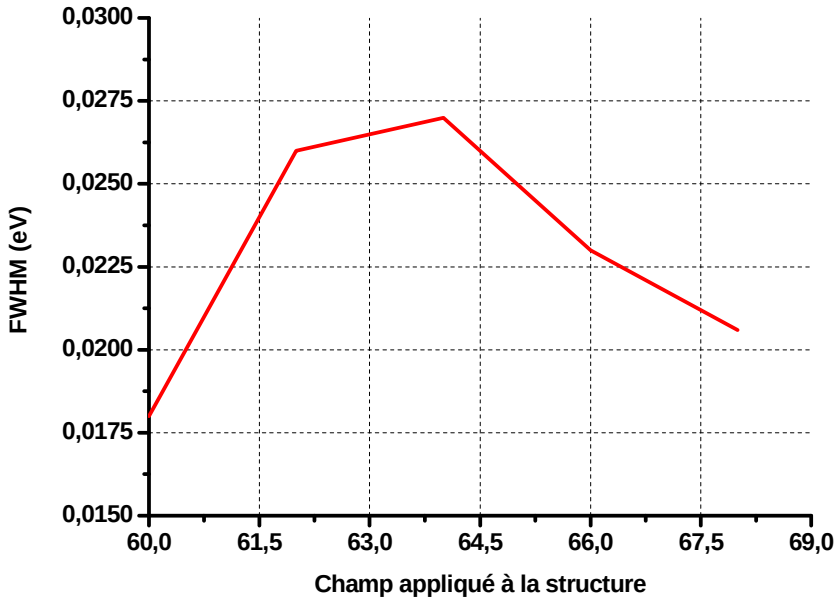


Fig.III.5 : La largeur à mi-hauteur du gain calculée en fonction du champ appliqué à la structure

Effet Stark

Dans ce paragraphe nous expliquerons les variations des énergies du maximum de gain ainsi que celles de la transition entre l'état bas de l'injecteur vers l'état bas du laser en fonction du champ appliqué à la structure. L'effet du champ électrique est pris en compte à travers un hamiltonien qui va s'écrire comme suit :

$$H = -q.F.z \qquad \text{(III.34)}$$

F est la valeur du champ électrique, z est la position dans l'hétérostructure et q est la charge élémentaire.
Dans le traitement perturbatif classique de ce problème, deux cas se présentent. Dans le cas de puits quantiques symétriques, le déplacement de la transition due à l'effet du champ électrique s'écrit sous la forme :

$$\Delta E_{12} = q^2.F^2.\frac{|z_{12}|^2}{E_1 - E_2} \qquad \text{(III.35)}$$

Dans cette équation z_{12} est l'élément de matrice de la transition et E_1 (resp.E_2) est l'énergie de l'état haut (resp. bas) du laser.
Dans le cas d'un puits asymétrique la variation de l'énergie de la transition radiative s'écrit :

$$\Delta E_{12} = q.F.\delta_{12} = q.F.(z_{11} - z_{22}) \qquad \text{(III.36)}$$

Dans cette équation z_{11} (resp.z_{22}) est la position moyenne du centre de la fonction d'onde de l'état haut (resp. état bas), δ_{12} est alors le déplacement de la position moyenne des électrons lors de leurs transitions de l'état 1 vers l'état 2.

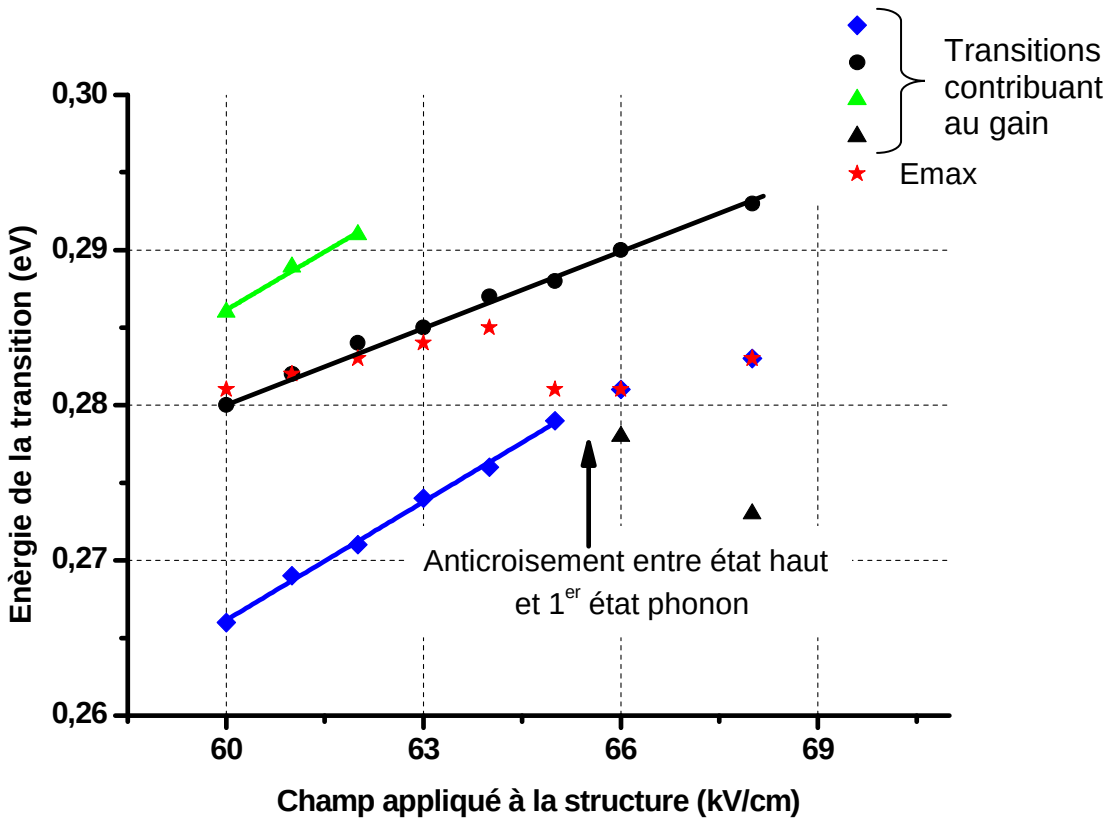


Fig.III.6 : Variation de l'énergie des transitions qui contribuent au gain et de l'énergie du maximum du gain de la structure en fonction de la tension appliquée à la structure

La figure.III.6 représente la variation des énergies des transitions qui contribuent au gain et de l'énergie correspondant au maximum du gain en fonction du champ appliqué à la structure. On voit que l'énergie de la transition augmente (blue shift) quand la tension appliquée à la structure augmente. D'après ce graphe deux régimes de variation de ces énergies sont visibles en fonction du champ électrique. Une variation linéaire est visible à bas champ appliqué à la structure ($F \leq 65\,kV/cm$). Cette variation est bien décrite par la formule du déplacement énergétique donnée par l'expression (III.36). La contribution asymétrique est plus grande que celle symétrique (environ deux ordres de grandeur de différence). Ceci s'explique par le fait que les fonctions d'onde sont délocalisées sur plusieurs puits. Le calcul du déplacement δ_{ij} de la position moyenne des électrons lors de leurs transitions de l'état initial vers l'état final donne pour la transition qui a la plus faible énergie (<0,280 eV) $\delta = 4$ Å, pour la transition radiative (dont l'énergie est la plus proche de celle du maximum du gain) $\delta = 2{,}5$ Å et enfin pour la transition qui a la plus grande énergie $\delta = 4$ Å.

Le deuxième régime apparaît à partir d'un champ électrique de l'ordre de 65 kV/cm. Dans ce régime, il y a un anticroisement entre l'état haut du laser et le premier état phonon de la période précédente. La figure III.7 présente la variation de l'élément de matrice z_{12} correspondant à la transition radiative (ayant la plus grande contribution au gain) en fonction du champ appliqué à la structure. Quand le champ augmente, les fonctions d'onde sont de plus en plus localisées et se concentrent vers la même barrière. L'élément de matrice va augmenter alors en augmentant le champ. C'est bien ce qu'on retrouve dans la courbe de la figure.III.7 jusqu'au champ F = 65 kV/cm. Au-delà, z_{12} diminue. Ceci est bien la signature de l'anticroisement de l'état haut du laser avec le premier état phonon de la période précédente.

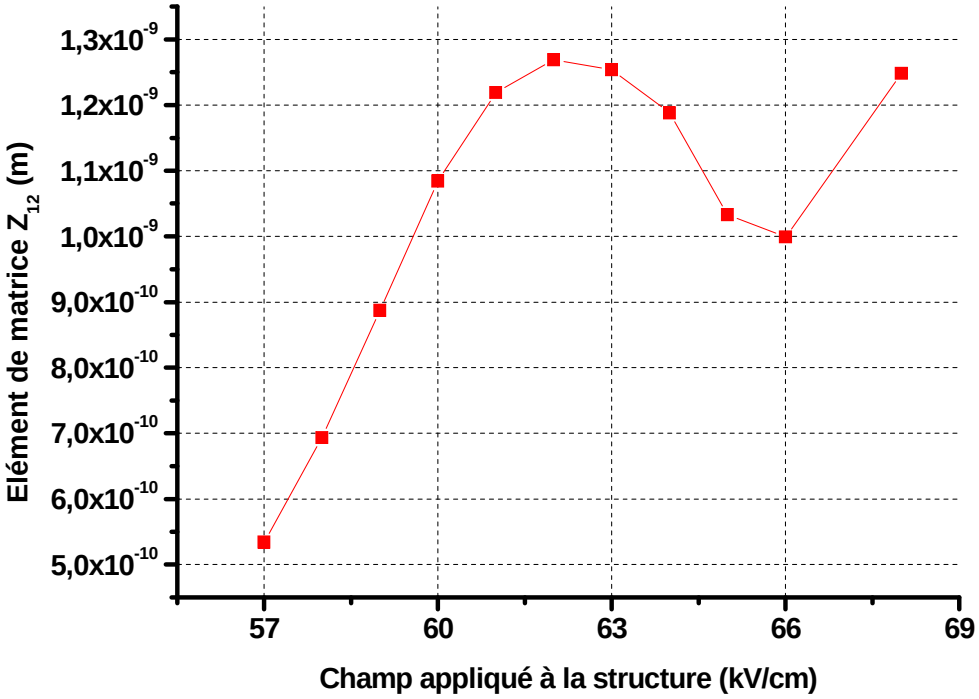


Fig.III.7 : Variation de l'élément de matrice de z_{12} en fonction du champ appliqué à la structure

5. Effet de la température

La figure.III.8 représente la variation de la largeur du gain toujours dans la même structure calculée selon la formule (III.33) en fonction de la température du réseau pour des champs appliqués à la structure égaux à 60 kV/cm, 62 kV/cm, 64 kV/cm et 68 kV/cm. Cette figure montre que l'élargissement augmente en fonction de la température quel que soit le champ électrique. Les seuls mécanismes contribuant à l'élargissement du gain et explicitement dépendants de la température de réseau sont les mécanismes de diffusion par phonon. Les temps de diffusion par ce type d'interaction diminuent en augmentant la température. Ceci explique l'augmentation de la largeur du gain en fonction de la température. La rugosité étant indépendante en premier de la température et étant donné que c'est le mécanisme de diffusion ayant la plus grande contribution à l'élargissement γ, l'augmentation de la largeur du gain en fonction de la température ne devrait pas être très rapide. C'est ce que nous obtenons avec les calculs. La variation du facteur d'élargissement est inférieure à 5 % pour une variation de température entre 200 K et 300 K. Dans ce qui suit nous négligerons la dépendance de l'élargissement optique de γ en fonction de la température. En anticipant sur le prochain chapitre (section IV.C.1), nous verrons que cette hypothèse est tout à fait valable. La comparaison entre le calcul par le modèle et l'expérience des courants seuils sur une grande plage de la température allant de 100 K à 300 K présente un très bon accord.

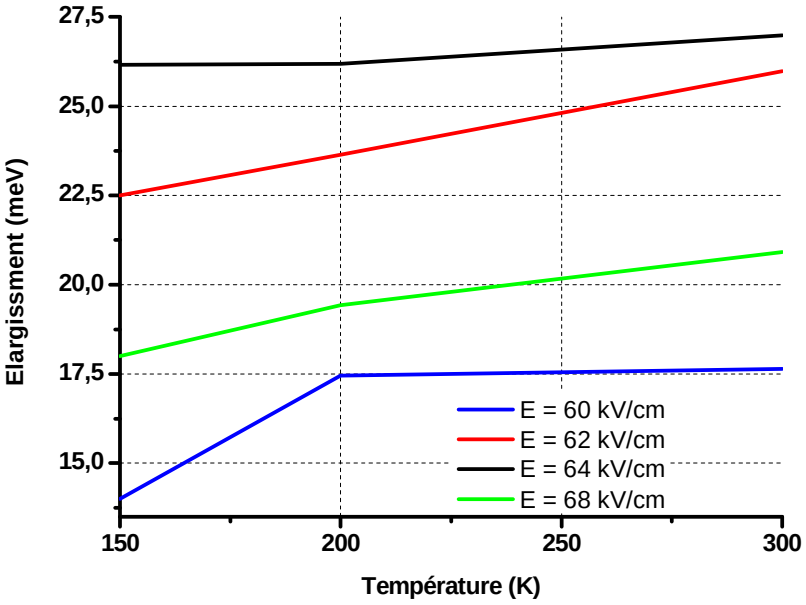


Fig.III.8 : Largeur à mi-hauteur du gain calculé en fonction de la température de fonctionnement

6. Discussion

En conclusion, le modèle adopté pour calculer l'absorption dans les LCQ fait ressortir un paramètre important dans la description de ces composants qui est le facteur d'élargissement. Comme nous l'avons montré, il est possible de calculer ce facteur en utilisant les temps de transition intra-sous-bande. Il s'avère que c'est la rugosité qui joue un rôle très important dans l'élargissement de la transition optique de la courbe d'absorption.
Le modèle de transport que nous avons retenu nous amène à calculer l'ensemble des temps d'élargissement associés à chaque mécanisme sauf l'interaction électron-électron. Etant donné la grande fréquence de ce type de collisions (électron-électron), celles-ci devraient être prises en compte pour évaluer de façon réaliste les élargissements homogènes dans notre modèle. En pratique, nous avons la plupart du temps choisi un élargissement lorentzien simple, dont le paramètre γ constitue un paramètre ajustable du modèle et dont la valeur exacte sera déterminée par un fit avec les résultats expérimentaux.

III.B. Guide d'onde dans l'infrarouge

Comme nous l'avons remarqué plus haut, quand l'absorption devient négative dans le milieu on parle d'un milieu à gain. Ceci est possible lorsque, dans les états impliqués dans la transition optique, la population de l'état énergétiquement le plus haut est plus grande que celle de l'état le plus bas. La présence de gain dans le milieu va permettre d'amplifier un signal optique ayant une énergie proche de l'énergie de la transition optique. La figure.III.2 montre qu'en augmentant la tension appliquée à la structure laser (en particulier celle étudiée dans ce chapitre), il est possible d'inverser la population et d'obtenir un milieu à gain.
Dans cette partie nous aborderons un autre élément très important dans le fonctionnement de notre composant qui est la cavité optique. En effet pour pouvoir faire fonctionner en laser un milieu à gain, il doit y avoir une contre réaction sur le signal amplifié. Le rôle de la cavité optique est d'augmenter l'interaction entre les porteurs et la lumière par confinement du champ électromagnétique. La figure.III.9 montre la disposition des couches épitaxiales dans

un laser semiconducteur. La géométrie parallélépipédique permet de découpler le champ électrique selon les différents axes du guide.

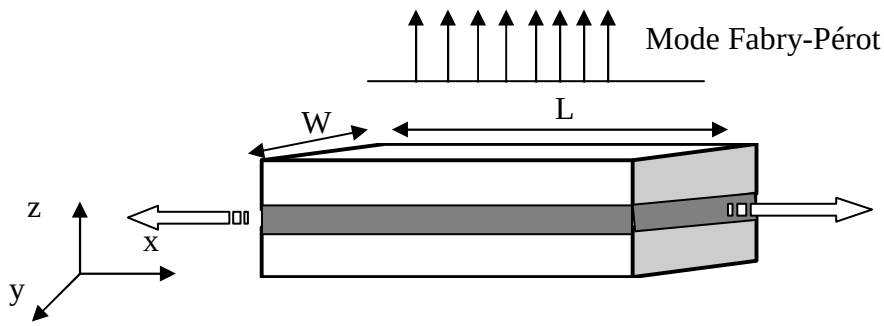


Fig.III.9 : Géométrie typique d'une diode laser [1]

Selon l'axe x, on trouve les modes de la cavité Fabry-Pérot qui est délimitée par les deux miroirs aux facettes du laser. Ce sont des modes stationnaires qui restent identiques (amplitude et phase) après un aller retour dans la cavité.
Selon l'axe y on trouve les modes latéraux, dans notre cas on essaiera de conserver un caractère monomodal latéral des lasers que nous avons étudiés. Pour cela la largeur des rubans actifs des lasers seront prises de même ordre de grandeur que la longueur d'onde du laser (w~>λ) par exemple w = 14 µm pour un laser de 9 µm et w= 6 µm pour un laser 4,6 µm.
Selon l'axe z, le guide d'onde présente une succession de couches avec des dopages différents. Deux polarisations peuvent y coexister : le mode TE parallèle au plan des couches (x,y) et le mode TM qui lui est perpendiculaire. Comme nous l'avons précisé dans le paragraphe III.A.2.a, les règles de sélection imposent que seule la polarisation TM peut être amplifiée dans le cas des lasers à cascade quantique. C'est cette remarque qui nous permet d'ailleurs de déterminer expérimentalement les pertes du guide hors région active et de remonter ensuite aux pertes générales dans les guides. Ceci est fait en utilisant une méthode de Hakki-Paoli. Une application de cette méthode de mesure aux LCQ peut être trouvée dans la référence [20]. Elle consiste à éclairer le LCQ par un autre laser polarisé selon TE. A partir des franges de Fabry-Pérot obtenues en sortie on peut remonter aux pertes du guide seulement. Pour plus de détails on peut se référer aux références [20, 21]. En fonction de la valeur de l'indice effectif du mode n_{eff} considéré par rapport aux indices des couches de confinement optique n_{conf} , on parlera de mode radiatifs ($n_{eff}< n_{conf}$), ou de modes guidés ($n_{eff}>n_{conf}$)
Pour exprimer le champ élecromagnétique dans les modes TE et TM, nous supposons que le guide d'onde est infini dans les directions longitudinale x et latérale y. Les modes transverses se propageant suivant x s'écrivent alors comme suit :

Pour le mode TE

$$E_{TE} = E_y(z).e^{j.(\beta.x-\omega.t)}.\vec{e}_y \qquad \text{(III.37)}$$

Ce mode répond à l'équation suivante :

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}.E_y(z) = (\beta^2 - n^2(z).\frac{\omega^2}{c^2}).E_y(z) \qquad \text{(III.38)}$$

Pour le mode TM

$$H_{TM} = H_y(z).e^{j.(\beta.x-\omega.t)}.\vec{e}_y \qquad \text{(III.39)}$$

Ce mode répond cette fois à l'équation suivante :

$$n^2(z).\frac{\partial}{\partial z}.(\frac{1}{n^2(z)}.\frac{\partial}{\partial z}).H_y(z) = (\beta^2 - n^2(z).\frac{\omega^2}{c^2}).H_y(z) \qquad \text{(III.40)}$$

Dans ces équations *n(z)* est l'indice optique suivant la direction *z*, β est le vecteur d'onde de propagation du mode et ω est la pulsation du mode.

L'indice effectif du mode est donné par $n_{eff} = \frac{\beta.\lambda_0}{2.\pi}$ avec λ_0 est la longueur d'onde dans le vide.

Dans ces conditions (guides d'onde infini), les modes d'ondes guidées sont obtenus en imposant que les champs s'annulent à l'infini. La résolution des équations (III.37), (III.38), (III.39) et (III.40) couplées à cette dernière hypothèse, va déterminer les indices effectifs des modes transverses de la cavité.

La description des performances d'un guide d'onde nécessite la connaissance de deux quantités essentielles : le recouvrement optique du guide et les pertes optiques engendrées par le guide. La détermination de ces deux quantités fait l'objet des paragraphes suivants.

III.B.1. Facteur de recouvrement du guide

Un paramètre essentiel qui décrit le guide d'onde est le facteur de recouvrement Γ. Il quantifie l'intensité relative du champ électrique dans la zone active (ou zone de gain du laser). Son expression est donnée par la formule suivante :

$$\Gamma = \frac{\int_{ZA} 1/2.\varepsilon_0.n^2(z).\vec{E}^*(z).\vec{E}(z).dz}{\int_{-\infty}^{+\infty} 1/2.\varepsilon_0.n^2(z).\vec{E}^*(z).\vec{E}(z).dz} \qquad \text{(III.41)}$$

Ce facteur de confinement apparaîtra comme un facteur multiplicatif dans l'expression du gain linéaire. Une optimisation du guide d'onde en termes de courant seuil du laser (en le minimisant) passe généralement par la maximisation de ce facteur. Cependant cette optimisation ne doit pas être faite au détriment de la qualité de la divergence angulaire du faisceau laser. En effet l'angle de divergence du faisceau laser varie généralement dans le même sens que le facteur de confinement optique : plus le mode est spatialement confiné, plus il diffracte avec un angle important au niveau des miroirs.

Une des manières d'augmenter ce facteur est d'augmenter la taille de la zone active dans le guide d'onde. Dans les LCQ ceci est généralement fait en utilisant un nombre de périodes plus grand. La figure.III.10 montre la variation du recouvrement dans le guide du laser de référence étudié dans cette partie (il s'agit du laser émettant à 4,6 µm). Le guide d'onde hors zone active est constitué d'une couche d'InP d'épaisseur 2,5 µm dopée à 1.10^{17} cm^{-3} pour le

revêtement inférieur, et de deux couches d'InP, une dopée à $1.10^{17}cm^{-3}$ et d'épaisseur 2,5 µm alors que l'autre plus loin de la zone active est dopée à 2.10^{19} cm^{-3} et d'épaisseur 1 µm. Ce revêtement supérieur est constitué d'une dernière couche en $Ga_{0.47}In_{0.53}As$ d'épaisseur 1 µm et dopée à 2.10^{19} cm^{-3}. Comme on le remarque sur cette figure, plus le nombre de périodes dans la zone active est grand plus le recouvrement entre le mode optique et la zone active est grand. La figure III.11, montre la variation de l'ouverture angulaire du laser en fonction du nombre de périodes dans la zone active du laser. Cette courbe passe par un maximum. Donc il devient clair qu'augmenter le nombre de périodes dans la zone active pourrait être tout à fait bénéfique pour le fonctionnement du laser. Une étude expérimentale sur les effets du nombre de périodes dans les LCQ a été faite dans la référence [22]. Il a été démontré notamment que le voltage au seuil est proportionnel au nombre de périodes dans la zone active alors que la puissance dissipée dans le laser passe par un minimum. Dans le cas des LCQ à injecteur long ce nombre de périodes optimal est aux alentours de 30.

En résumé, l'optimisation du dessin du laser et du guide d'onde dépendra de l'application et des performances souhaitées pour le laser. Si on cherche à avoir le maximum de puissance à la sortie du laser avec une bonne qualité du faisceau il faut utiliser le plus grand nombre possible de périodes. Au delà des contraintes technologiques, si on cherche à avoir un fonctionnement en mode continu (CW), la puissance dissipée à l'intérieur du composant doit être la moins élevée possible. Dans ce cas le meilleur choix est d'avoir un nombre de périodes ~30. De très grands progrès ont été faits dans ce sens. L'utilisation de matériaux qui ont une bonne conductivité thermique dans la cavité laser, l'utilisation de structures enterrées ainsi que de longues cavités laser montre qu'on peut pousser cette limite (de 30 périodes) à des nombres plus grands de périodes.

Une autre solution qui peut nous permettre de nous affranchir d'une telle limite consiste à diminuer la taille de la période. Ceci est fait généralement en utilisant des structures à injecteurs courts ou sans injecteurs. Avec ce type de lasers, on pourra garder une taille totale de l'ordre de 2,5 µm en utilisant en même temps un nombre de périodes supérieur à 60.

Nous reviendrons sur ces considérations d'optimisation du dessin dans le chapitre IV.

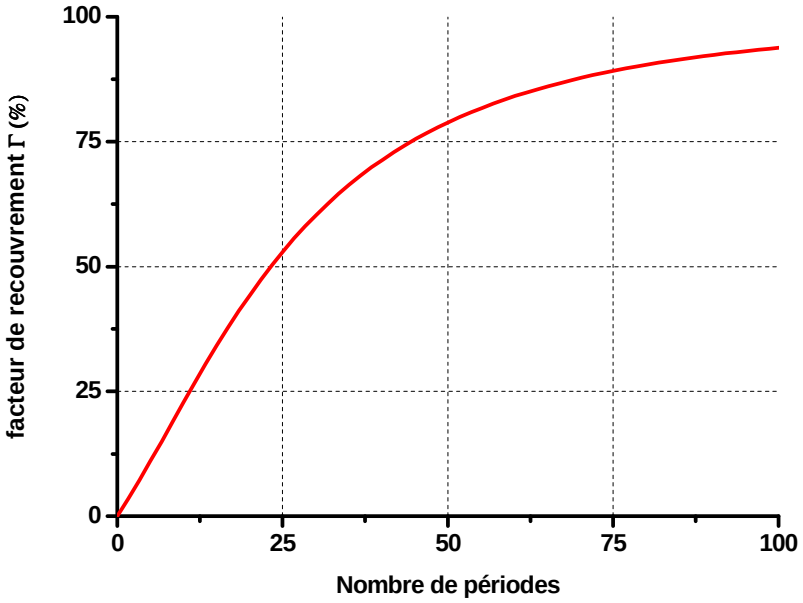


Fig.III.10 : Facteur de recouvrement en fonction du nombre de périodes dans la région active du guide d'onde (voir texte pour la description du guide)

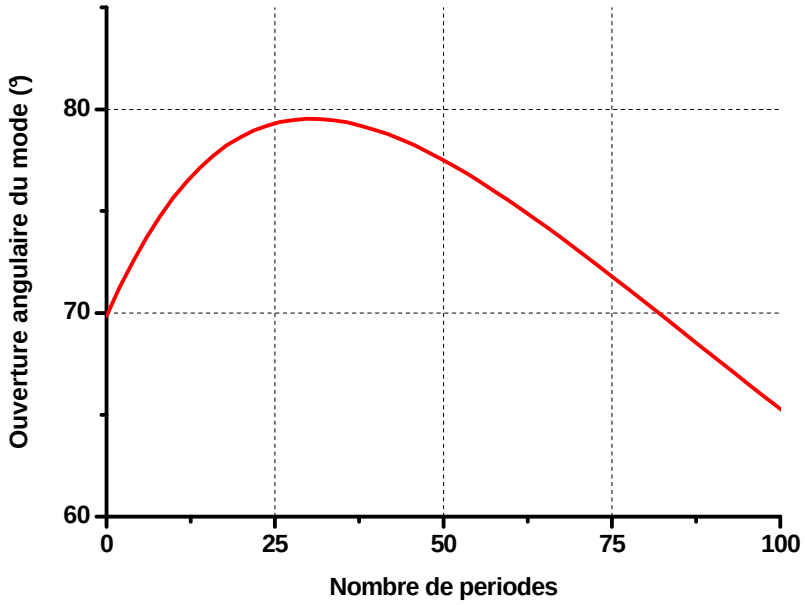


Fig.III.11 : Variation de l'ouverture angulaire à mi-hauteur en fonction du nombre de périodes dans la zone active

III.B.2. Pertes optiques du guide

Comme nous l'avons remarqué plus haut, l'indice du mode optique doit répondre à certaines conditions pour qu'il soit guidé. Les photons dans ces modes peuvent disparaître par différents processus que nous pouvons grouper en deux types : processus intrinsèques liés à l'absorption des matériaux semiconducteurs constituant le guide d'onde, et les processus extrinsèques qui sont dus aux imperfections du guide optique. Ces pertes ont une influence primordiale sur les performances des LCQ en termes de rendement externe du laser et de courant seuil. Dans ce qui suit, nous décrivons les différents effets qui peuvent jouer un rôle dans les pertes réelles du laser.

III.B.2.a. Effets intrinsèques : Pertes par porteurs libres

L'origine physique de l'absorption par porteurs libres est une interaction avec le champ électromagnétique suivie d'une interaction de diffusion qui ramène l'électron vers sa bande de départ. Pour cette dernière nous disposons des mécanismes d'interaction que nous avons décrits dans le premier chapitre. Le calcul total et complet est très complexe. On a recours généralement au modèle de Drude pour déterminer l'expression de l'absorption par porteurs libres. Bien qu'il soit inexact, ce modèle donne qualitativement une bonne dépendance de ce type de pertes et qui s'écrit comme le montre l'équation III.44. Elle montre que l'absorption par porteurs libres est proportionnelle à une puissance p (1,5<p<3), à la longueur d'onde et à la densité de dopage N [2] :

$$\alpha = K_{\alpha}.[\frac{N(cm^{-3})}{10^{17}}].[\frac{\lambda(\mu m)}{9}]^{p} \qquad \text{(III.42)}$$

Où K_{α} est une constante dépendante du matériau et dont les valeurs sont tabulées (voir la référence [2] par exemple).

Pour un matériau en GaAs K_{α} = 3, p = 3, et dopé avec une densité N = 5.10^{17} cm^{-3} et une longueur d'onde λ = 9 µm, les pertes par porteurs libres ont une valeur de α = 15 cm^{-1}. On voit donc que ces absorptions peuvent atteindre des valeurs importantes et doivent donc être prises en compte dans notre modèle pour avoir une prédiction réaliste des caractéristiques des lasers à cascade quantique.

M.Giehler et al [23] ont pu expliquer en utilisant un modèle semi-analytique des pertes par porteurs libres du type (III.42), basé sur des mesures de réflectivité, la dépendance expérimentale du courant seuil en fonction de la valeur du dopage dans le guide d'onde dans le cas de régions actives en GaAs/$Ga_{0.33}Al_{0.67}As$.

III.B.2.b. Pertes extrinsèques

Les autres effets que nous devons considérer sont les pertes extrinsèques. Il peut s'agir de pertes d'absorption dues à l'existence de niveaux de défauts dans les semiconducteurs tels que les impuretés, les lacunes ou encore les dislocations, etc…. Les termes de pertes correspondants sont donc liés à la concentration des défauts et à leur nature. Il existe aussi des pertes extrinsèques qui sont dues à la diffusion du mode guidé sur les inhomogénéités du guide d'onde dont les dimensions caractéristiques sont supérieures ou égales de la longueur d'onde du mode. Les pertes extrinsèques sont donc intimement liées à la méthode de

croissance utilisée, à la pureté des sources et du bâti de croissance, aux paramètres de croissance (températures, pression..) ainsi qu'à la qualité des interfaces entre les couches.

Il devient évident de ce qui précède que la détermination de l'origine physique des pertes internes pour avoir la contribution de chacun des processus dans les performances finales du composant est très complexe. En effet, il existe beaucoup d'effets physiques pouvant expliquer la disparition des photons dans le guide d'onde. L'intervention déterminante de l'un ou l'autre des facteurs dépend fortement du matériau considéré, de la méthode et de la technologie servant à réaliser le laser ainsi que de la longueur d'onde envisagée.
La diminution de ces pertes passe en premier lieu par une optimisation des propriétés des matériaux utilisés ainsi que la qualité des interfaces entre les couches épitaxiées. Le dessin du laser joue aussi un rôle important puisqu'on peut en partie optimiser les pertes des porteurs libres, ou en jouant sur les niveaux du dopage dans les différentes couches du guide d'onde ou sur les épaisseurs de ces couches. La figure.III.12 suivante montre la variation des pertes à l'intérieur d'un guide d'onde en fonction de l'épaisseur du cladding supérieur dans le guide d'onde. On voit l'impact important que cette épaisseur a sur les pertes internes du composant.

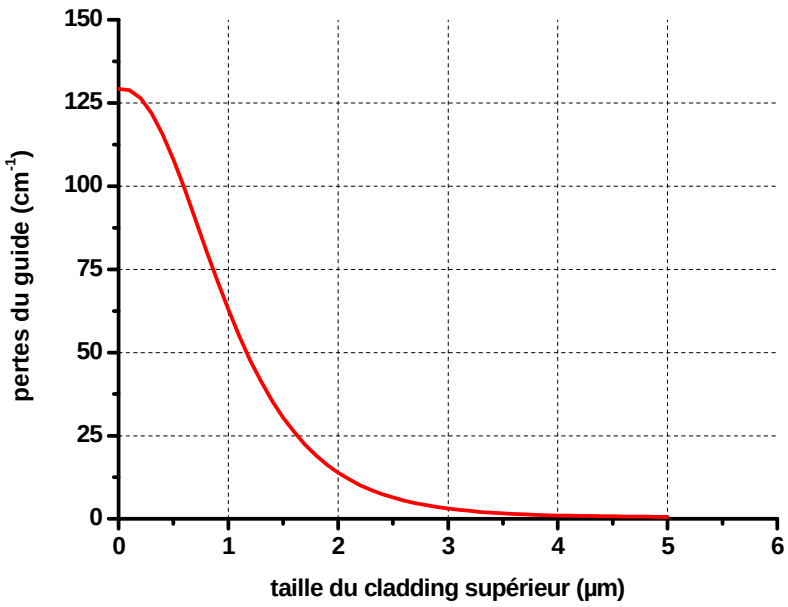


Fig.III.12 : Variation des pertes internes du guide en fonction de l'épaisseur du cladding supérieur

Dans notre modèle nous ne nous intéresserons alors qu'aux pertes totales. Elles seront prises comme paramètres de fit. C'est sans doute le point le plus faible dans notre simulation des LCQ.

III.B.3. Equation bilan porteurs-photons

Dans le paragraphe.I.E du premier chapitre de ce manuscrit nous avons décrit les modèles de transport dans les hétérostructures. Ces modèles ne tiennent pas compte de l'existence de photons dans la cavité laser et du couplage qui pourrait exister entre la distribution des porteurs dans la structure et celle des photons de la cavité.
Cette partie a pour but d'établir le lien entre la densité de photons à l'intérieur de la cavité et la densité de porteurs sur les niveaux électroniques dans le milieu à gain. Une équation bilan est établie entre les populations électroniques et photoniques. Nous verrons qu'il est possible

d'avoir une présentation générale de la puce dans laquelle une variation longitudinale des grandeurs électronique (gain, courant….) peut être formulée.
Considérons un laser de surface A comportant N_i porteurs sur l'état d'énergie E_i et N_ω de photon d'énergie $\hbar.\omega$ dans le mode fondamental TM. On s'intéresse aux taux de variation de ces deux quantités. Ils font intervenir les contributions associées aux transitions inter-sous-bandes avec des effets d'absorption et d'émissions stimulés. Ce terme s'écrit sous la forme $\sum_{k,l}(P_{k,l}^{em}(\omega)-P_{k,l}^{abs}(\omega))$ avec $P_{k,l}^{em}(\omega)$ et $P_{k,l}^{abs}(\omega)$ qui sont donnés par des équations de type (III.13). Il faut prendre aussi en considération dans ce bilan l'échange avec le milieu extérieur avec un terme de courant de remplissage pour les électrons dans le cas d'un pompage électrique ou un terme source optique dans le cas d'un pompage optique et un terme de pertes pour les photons. Les équations bilans décrivant ce système s'écrivent donc comme suit :

$$\frac{dN_i}{dt}=\frac{dN_i}{dt}\Big|_{ext}+\frac{dN_i}{dt}\Big|_{nonrad}-\sum_{\omega}\sum_{k,l}(P_{k,l}^{em}(\omega)-P_{k,l}^{abs}(\omega)) \qquad \text{(III.43)}$$

$$\frac{dN_\omega}{dt}=\frac{dN_\omega}{dt}\Big|_{ext}+\sum_{i,j}(P_{k,l}^{em}(\omega)-P_{k,l}^{abs}(\omega)) \qquad \text{(III.44)}$$

Le terme $\sum_{i,j}(P_{i,j}^{em}(\omega)-P_{i,j}^{abs}(\omega))$ peut s'exprimer en fonction du taux d'émission spontanée $A.R_{spont}$ du facteur du couplage β_ω de l'émission spontanée au mode guidé et du gain modal donnée par l'équation (III.23) qu'on multiplie par le facteur de recouvrement Γ.
On obtient alors :

$$\sum_{l,k}(P_{l,k}^{em}(\omega)-P_{l,k}^{abs}(\omega))=A.\beta_\omega.R_{spont}+\frac{c}{n_{eff}}.\Gamma.g_\omega.N_\omega \qquad \text{(III.45)}$$

Le terme $\left(\frac{dN_i}{dt}\Big|_{ext}+\frac{dN_i}{dt}\Big|_{nonrad}\right).\frac{1}{A}$ est donné par l'équation (I.43) du premier chapitre.
Nous introduisons dans la suite la densité surfacique des électrons sur l'état i, et la densité surfacique de photons à l'intérieur de la cavité. Ces deux quantités sont définies comme suit :

$$n_i=\frac{N_i}{A} \qquad \text{(III.46)}$$

$$S_\omega=\frac{N_\omega}{A} \qquad \text{(III.47)}$$

Dans ce cas le terme $\left(\frac{dN_i}{dt}\Big|_{ext}+\frac{dN_i}{dt}\Big|_{nonrad}\right).\frac{1}{A}$ s'écrit :

$$\begin{aligned}\left(\frac{dN_i}{dt}\Big|_{ext}+\frac{dN_i}{dt}\Big|_{nonrad}\right).\frac{1}{A}&=\frac{dn_i}{dt}\Big|_{ext}+\frac{dn_i}{dt}\Big|_{nonrrad}\\&=\sum_{j=1,j\neq i}^{N}\frac{n_j}{\tau_{j,i}}-n_i\sum_{j=1,j\neq i}^{N}\frac{1}{\tau_{i,j}}+\sum_{k=1}^{P}\sum_{j=1,j\neq 1}^{N}\left[n_j\left(\frac{1}{\tau_{j,i+kN}}+\frac{1}{\tau_{j+kN,i}}\right)-n_i\left(\frac{1}{\tau_{i+kN,j}}+\frac{1}{\tau_{i,j+kN}}\right)\right]\end{aligned} \qquad \text{(III.48)}$$

Le terme $\frac{dN_\omega}{dt}\Big|_{ext}$ rend compte de la disparition de photons, soit par couplage avec l'extérieur par les pertes miroir ($\alpha^m = -1/2L\ ln(R_1.R_2)$), soit par des pertes internes suite à des absorptions dans les couches ou des diffusions sur les imperfections du guide d'onde α^{int}. On notera α^T les pertes totales $\alpha^T = \alpha^m + \alpha^{int}$. En utilisant ces définitions $\frac{dN_\omega}{dt}\Big|_{ext}$ dans ce modèle non local, s'écrit sous la forme :

$$\frac{dN_\omega}{dt}\Big|_{ext} = -\frac{c}{n_{eff}}.\alpha^T.N_\omega \qquad \text{(III.49)}$$

Dans cette équation c est la vitesse de la lumière.

Les équations bilans sur les densités de porteurs et de photons s'écrivent alors comme suit :

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{j=1,j\neq i}^{N}\frac{n_j}{\tau_{j,i}} - n_i\sum_{j=1,j\neq i}^{N}\frac{1}{\tau_{i,j}} + \sum_{k=1}^{P}\sum_{j=1,j\neq 1}^{N}\left[n_j\left(\frac{1}{\tau_{j,i+kN}}+\frac{1}{\tau_{j+kN,i}}\right) - n_i\left(\frac{1}{\tau_{i+kN,j}}+\frac{1}{\tau_{i,j+kN}}\right)\right] - A\beta_\omega.R_{spont} - \sum_\omega\frac{c}{n_{eff}}.\Gamma.g_\omega.N_\omega \qquad \text{(III.50)}$$

$$\frac{dS_\omega}{dt} = -\frac{c}{n_{eff}}.(\Gamma.g_\omega - \alpha^T).N_\omega + \beta_\omega.R_{spont} \qquad \text{(III.51)}$$

On voit apparaître ici par comparaison avec l'équation (I.44), un terme qui tient compte de la densité photonique dans la cavité. Nous avons introduit dans le paragraphe III.A.4.b (équation (III.24) la section efficace de la transition. Dans ce cas le terme $\sum_\omega \frac{c}{n_{eff}}.g_\omega.S_\omega$ s'écrit :

$$\sum_\omega \frac{c}{n_{eff}}.g_\omega.S_\omega = \sum_\omega \frac{c}{n_{eff}}.\sum_\omega \sigma_{i,j}(\omega).(n_i - n_j).S_\omega \qquad \text{(III.52)}$$

Ecrit sous cette forme, ce terme fait ressortir un temps de transition de l'état i vers l'état j dû à l'existence de photons dans la cavité optique. En pratique, on se limite au seul mode optique correspondant à la longueur d'onde du maximum du gain linéaire. On fera l'hypothèse que le vecteur d'onde du mode qui nous intéresse a une faible inclinaison par rapport à l'axe x. Dans le cas contraire le mode subira plusieurs réflexions sur les parois du guide et sera un mode à pertes. Donc il ne lasera pas. Cette hypothèse nous permet d'assimiler le terme $\frac{\vec{k}_\omega}{|\vec{k}_\omega|}$ au vecteur directeur de l'axe longitudinal x. On définit dans ce cas, le temps de transition stimulée comme suit:

$$\frac{1}{\tau_{i,j}(stim)} = \frac{c}{n_{eff}}\sigma_{i,j}(E_{ij}).S_\omega \qquad \text{(III.53)}$$

En ajoutant l'effet du couplage avec les photons donné par l'équation précédente, le temps de transition de l'état i vers l'état j s'écrit alors comme suit

$$\frac{1}{\tau_{i,j}} = \frac{1}{\tau_{i,j}^{émission\ phonon}} + \frac{1}{\tau_{i,j}^{absorption\ phonon}} + \frac{1}{\tau_{i,j}^{alliage}} + \frac{1}{\tau_{i,j}^{phononLA}} + \frac{1}{\tau_{i,j}^{Stim}} \qquad \text{(III.54)}$$

Comme le montre la formule (III.53) la probabilité de transition suite au couplage avec le mode guide est proportionnelle à la densité de photons dans la cavité. Le facteur de proportionnalité est la section efficace de la transition. Ce temps de transition par couplage avec les photons de la cavité joue un rôle important dans le fonctionnement des lasers à cascade quantique et dans leurs dynamiques de gain comme déterminé expérimentalement dans la référence [24] par une expérience pompe sonde. Il a été démontré notamment qu'au-dessus du seuil laser le temps de vie de l'état haut est complètement dominé par ce terme.

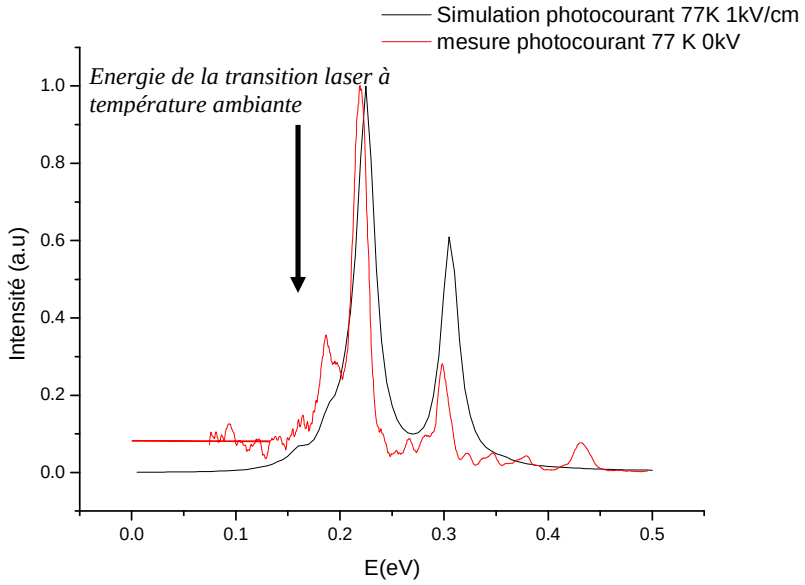
III.B.3.a. Photo-courant

La compréhension des mécanismes de formation du gain dans les LCQ est une étape importante dans l'amélioration des performances et des caractéristiques du laser. Pour cela, des études expérimentales de la dynamique du gain dans le composant sont généralement menées. Une des méthodes employée consiste à utiliser le laser à cascade quantique comme un détecteur. Le composant est éclairé avec une autre source ayant une bande d'émission large (glow bar d'un FTIR par exemple assimilé à un corps noir), ou par un laser à la même longueur d'onde du laser (DFB par exemple). Quand le champ électromagnétique arrive dans le composant, il affecte la distribution énergétique des électrons à l'intérieur de la structure. Ceci va changer le courant à la sortie du composant. L'expérience consiste à mesurer le courant en excès appelé photocourant sans tension appliquée en réponse au changement de fréquence de la source qui l'éclaire. Elle va permettre de caractériser énergétiquement le composant et de déterminer les niveaux qui interviennent dans le fonctionnement du laser.
Dans cette partie nous montrons que le modèle que nous avons développé permet de simuler correctement le comportement du composant dans ce type d'expérience.

1. Photocourant du laser sans tension appliquée

Nous avons utilisé pour cela une structure de laser développée à III-V Lab en GaInAs/AlInAs/InP émettant à 7,6µm à température ambiante. Les détails de la région active ainsi que ceux du guide d'onde utilisé peuvent être trouvés dans la référence [25]. Les expériences sont faites par E. Benvéniste et al [25] en utilisant le FTIR comme une source d'éclairement. La figure.III.13 montre la comparaison entre le résultat de calcul et celui des expériences faites à 77 K normalisés au maximum. Le calcul a été fait à un champ très faible mais non nul de 1 kV/cm pour s'affranchir des effets des anti-croisements des états qui pourraient fausser le calcul. La densité photonique a été fixée à une valeur arbitraire de 5.0 10^{15} m^{-2}, le facteur de recouvrement est pris égal à 0.5. Le spectre calculé est indépendant du choix fait sur la densité photonique. Nous avons fait le calcul avec deux élargissements différents γ = 20 meV (figure.III.13.a) et γ = 10 meV (figure.III.13.b). On voit qu'un bon accord théorie expérience a été trouvé. On voit que presque tous les pics sont bien prédits par le calcul. Le calcul rend bien compte des positions des pics avec une erreur estimée à 10 meV. On remarque aussi que le calcul avec γ pris égal à 10 meV rend mieux compte des pics trouvés expérimentalement et de leurs élargissements. Cette méthode est un bon moyen de remonter à l'élargissement réel du gain dans le composant. Ce qui va permettre d'affiner les paramètres du modèle. La comparaison entre l'expérience et le calcul nous permet de déterminer les transitions qui sont responsables de tels pics de photocourant. La figure.III.14 montre deux périodes de la structure du laser sans champ appliqué et les principales fonctions d'onde des états électroniques.

a.



b.

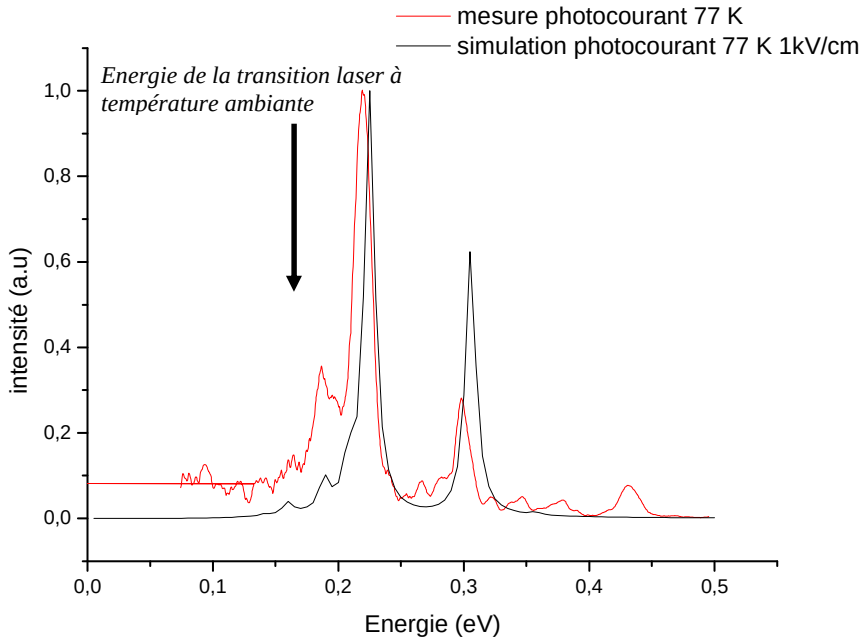


Fig.III.13 : Comparaison entre le calcul et l'expérience des mesures du photocourant en fonction de l'énergie d'émission de la source (a : γ=20 meV, b : γ=10 meV)

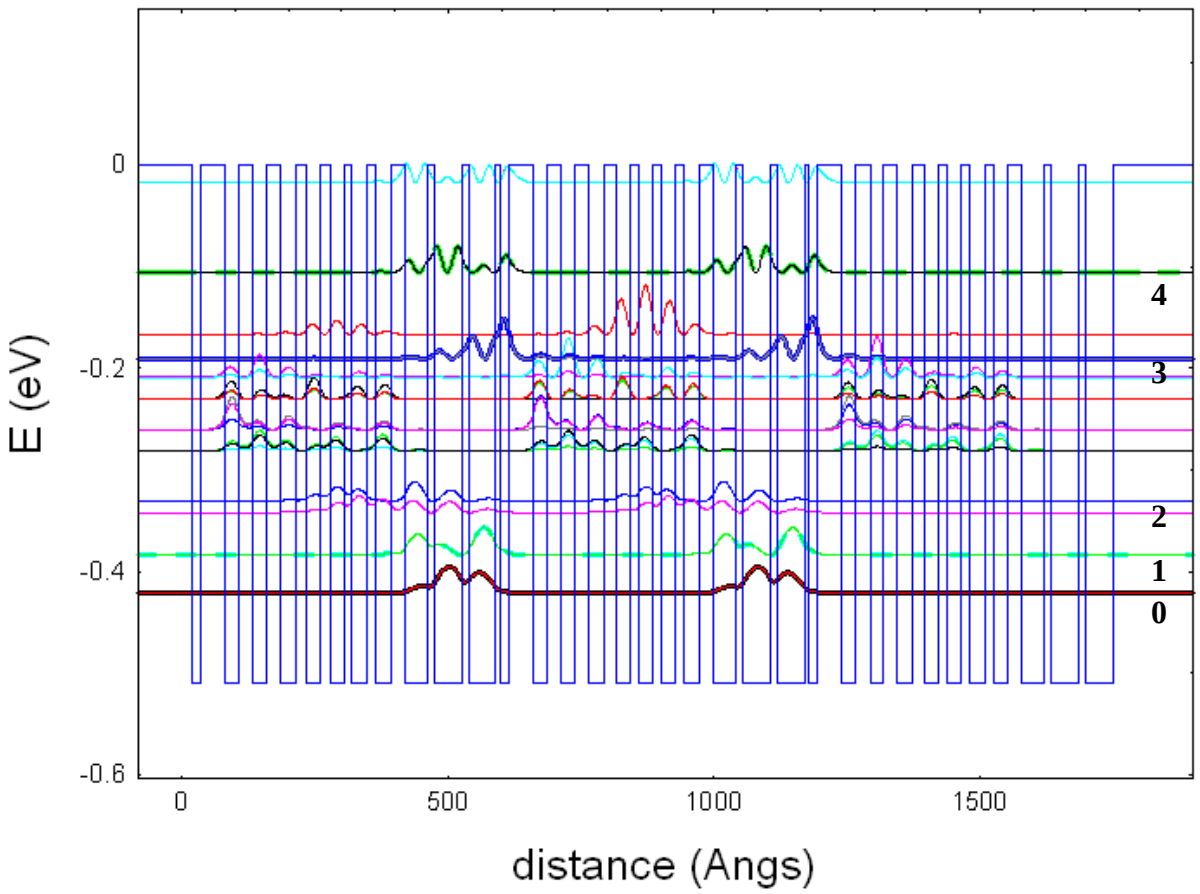


Fig.III.14 : Deux périodes de la structure du laser émettant à 7,6 µm sans champ appliqué à la structure. Les fonctions d'onde impliquées dans les transitions qui donnent les pics du photocourant sont tracées en gras

Les deux plus grands pics dans le spectre du photocourant correspondent à une transition dont l'état initial est le deuxième état phonon de la structure (tracé en rouge noir sur la figure.III.14 et noté 0). Le pic à 0,22 eV implique l'état haut de la transition radiative du laser (tracé en bleu gras et noté 3 dans le figure.III.14 Le calcul de l'énergie de cette transition donne 0,23 eV). Le pic à 0,3 eV implique l'état en vert gras dans la figure.III.14 noté 4 (c'est le premier état énergétiquement plus grand que l'état haut du laser et qui a un recouvrement non négligeable avec l'état numéro 0. L'énergie calculée de cette transition est de 0,307 eV).
Deux autres pics sont visibles sur le spectre expérimental. Le pic à une énergie de 0,196 eV est bien prédit par le calcul. Il correspond à la transition des électrons entre le premier état phonon (noté 1 et tracé en vert gras sur la figure.III.14) et l'état haut du laser (l'énergie de la transition calculée est de l'ordre de 0 ,193 eV). Le pic à haute énergie (autour de 0,44 eV) visible dans le spectre expérimental n'est cependant pas prédit par nos calculs. Ceci est dû probablement au fait que la transition correspondante implique des états du continuum ou des défauts localisés non pris en compte dans nos calculs. L'augmentation de la température de réseau montre que l'intensité du pic aux alentours de 0,193 eV augmente avec apparition d'autres pics dans le spectre de photocourant. A 300 K, ce pic devient le plus important. Ce changement est expliqué par une augmentation des populations des états de plus haute énergie quand la température de réseau augmente. Les transitions avec de grandes forces d'oscillateur vont avoir des signatures de plus en plus importantes.
L'erreur sur la position des pics pourrait s'expliquer par la différence entre la structure nominale que nous avons utilisée pour faire nos calculs et celle réelle en termes d'épaisseur de couches et de composition. Notons aussi qu'un décalage dans ce sens est obtenu de façon

systématique entre les positions expérimentales et calculées des pics d'absorption ou d'émission dans les composants inter-sous-bandes. Une partie de ce décalage systématique est due au fait que les interfaces ne sont pas parfaitement abruptes, contrairement à ce qui est simulé.
Par comparaison des deux calculs, on remarque que l'intensité relative des pics n'est pas la même entre l'expérience et la simulation indépendamment de la largeur prise en compte dans nos calculs. C'est dû probablement aux limites de notre modèle à basse température. La distribution électronique à 77 K dans les sous-bandes de la structure est certainement plus proche d'une distribution de Fermi-Dirac que de celle de Maxwell-Bolzmann. On fait aussi lors des calculs des transitions entre sous bandes, l'hypothèse que les sous-bandes sont paraboliques en énergie ce qui implique une surestimation du poids de la transition impliquée.

2. Effet de la présence de photons sur le courant de la structure

Ici on essaye de répondre à cette question : Comment est impacté le courant à la sortie de la structure par le couplage entre porteurs et photons de cavité ? En effet, il est clair d'après les calculs faits dans les paragraphes précédents, que la présence des photons dans la cavité peut avoir un effet non négligeable. Pour cela, pour la structure 4,6 µm, nous avons fait des calculs de courant à température de réseau T = 300 K, pour un champ électrique de 68 kV/cm. La densité photonique lors des calculs à été variée de 0 à $5.10^{18}m^{-2}$ par pas de $5.10^{16}m^{-2}$. La figure.III.15 montre le tracé du courant en fonction de la densité photonique (en échelle logarithmique) leurs énergies étant fixées à 0,275 eV (λ = 4,5 µm correspondant au maximum du gain). La courbe en rouge sur cette figure est la meilleure approximation des résultats. Le photocourant induit suit une équation de la forme suivante :

$$I = I_0 + \frac{\alpha . S_\omega}{1 + \frac{S_\omega}{S_{sat}}} \qquad \text{(III.55)}$$

I_0 est le courant qui traverse la structure sans éclairement ($S_\omega = 0$), S est la densité photonique dans la cavité et S_{sat} est la densité photonique de saturation du courant.
Dans notre cas I_0 = 3,55 kA/cm^2, α = $1{,}42.10^{-10}$ A, S_{sat} = $2{,}9.10^{18}$ m^{-2}. Cette forme de saturation est celle obtenue pour un système homogène. Ce comportement s'explique comme suit. La présence de photons dans la cavité induit la déplétion de l'état haut du laser. En conséquence les électrons se retrouvent sur les états énergétiquement plus bas et donc on aura une augmentation du courant. Cette augmentation va être dépendante de la manière avec laquelle sature la transition.

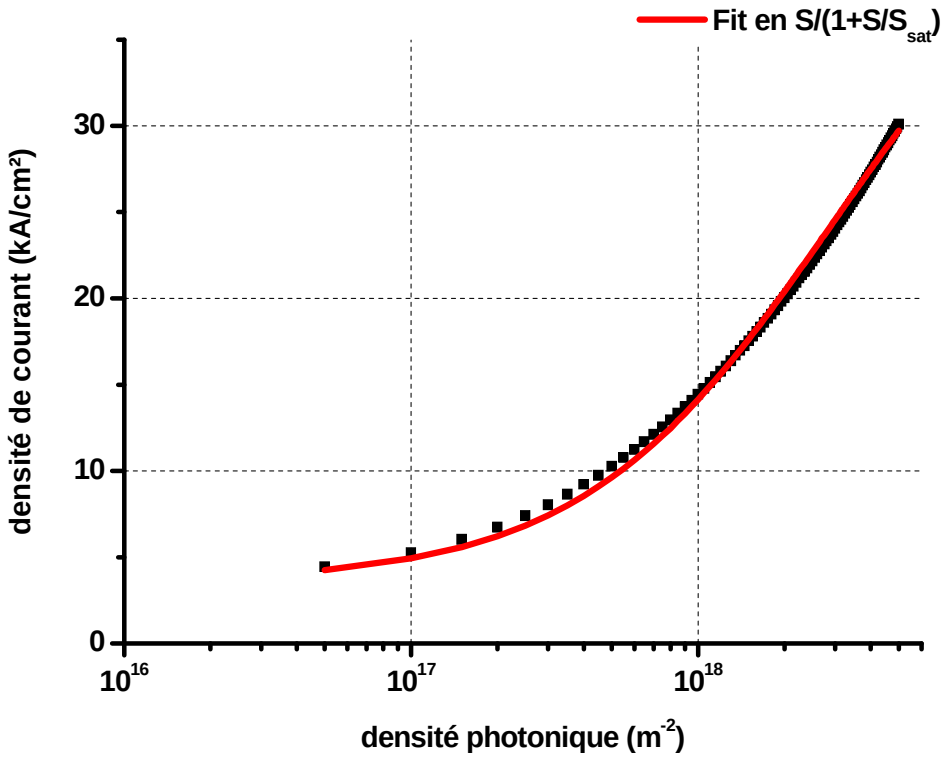


Fig.III.15 : La réponse en photocourant en fonction de la densité photonique qui traverse la structure

III.B.3.b. Saturation de gain

Le couplage entre le champ électromagnétique et les électrons dans le laser peut influer aussi la distribution électronique sur les niveaux énergétiques. Donc, la connaissance du gain linéaire donné par l'équation (III.23) ne peut suffire pour décrire le dessin de la région active qu'en dessous du seuil du laser c.à.d. dans le cas où la densité photonique est négligeable où l'on peut négliger la rétroaction des photons sur les caractéristiques électroniques dans la zone active.

Au-dessus du seuil, la densité photonique augmente énormément dans la cavité laser. La distribution énergétique des électrons devient alors dépendante de la densité de photons. Ceci a pour conséquence de faire chuter le gain de la structure : c'est ce qu'on appelle compression ou saturation du gain.

Nous nous intéressons ici à la simulation des LCQ dans le régime stationnaire, l'effet de la saturation du gain est de fixer le gain du milieu laser à une valeur égale à celle des pertes optiques totales du composant. Nous verrons que dans ce régime, un dessin qui optimise la puissance de sortie doit limiter la saturation de gain dans le milieu. On notera que ceci va à l'encontre de ce qu'on cherche à faire en régime de modulation rapide du courant où la compression du gain contribue à fixer la bande passante de la réponse optique et la fréquence de résonance du laser.

La figure.III.16 montre la variation du rapport du gain du milieu au gain linéaire en fonction de la densité photonique dans la cavité laser. Le calcul est fait pour la structure émettant à 4,6 µm. On constate que le gain décroît lorsque la densité des photons augmente dans la cavité. Ce comportement provient de l'égalisation progressive des populations entre les niveaux impliquées dans la transition lorsque les mécanismes d'absorption et d'émission

stimulée deviennent dominants sur tous les autres mécanismes de diffusion inter-états. Sur cette figure, nous avons tracé les courbes qui approximent le mieux le calcul complet. La forme trouvée est la forme standard suivante :

$$g = \frac{g_0}{1+\varepsilon.S_\omega} \qquad \text{(III.56)}$$

On voit d'après cette formule que le gain non linéaire du milieu est caractérisé par un paramètre appelé coefficient de saturation de gain qui est noté ε. En terme de puissance intra-cavité laser ce terme apparaît comme la puissance nécessaire pour diviser par deux le gain du milieu laser.

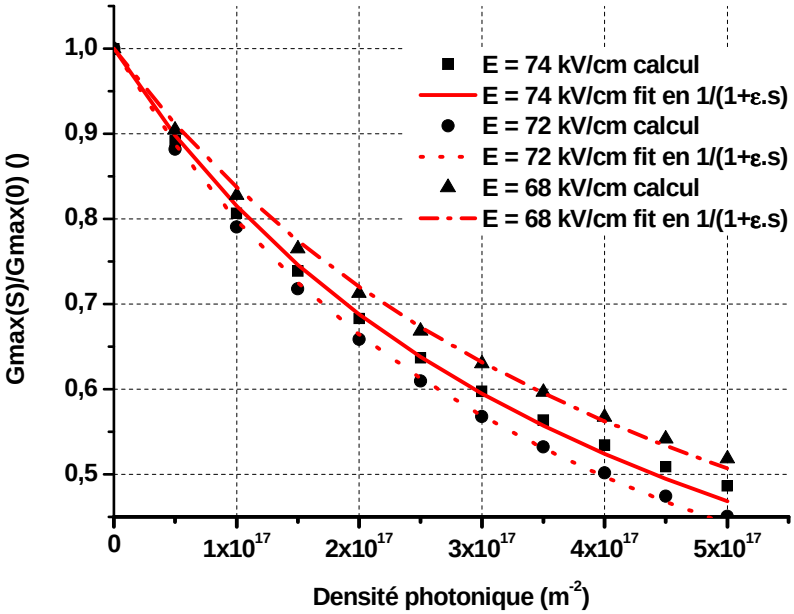


Fig.III.16 : Variation du gain en fonction de la densité photonique dans la cavité laser pour trois champs différents appliqués à la structure (E = 74 kV/cm, 72 KV/cm et 68 kV/cm)

Une expression de même type que (III.56) est généralement utilisée pour décrire la compression du gain dans les lasers inter-bande [1] pour le cas où l'on aurait une dépendance linéaire du gain en fonction de l'inversion et pour un élargissement homogène.
Pour faciliter la comparaison entre les lasers inter bande et les LCQ en termes de coefficient de saturation on définit également le coefficient de saturation et la densité de photons par unité de volume comme suit

$$\varepsilon^{3D}.S^{3D} = \varepsilon^{2D}.S^{2D} \qquad \text{(III.57)}$$

$$\frac{\Gamma}{Lzone_active}.S^{2D} = .S^{3D} \qquad \text{(III.58)}$$

Les calculs pour le champ de E = 74 kV/cm du coefficient de saturation donnent une valeur de $4{,}5.10^{-17}$ m^2 pour cette structure soit en utilisant les formules (III.57) et (III.58) de l'ordre de 1 10^{-16} cm^3 (pour une longueur de période de 504 Angström et un recouvrement de 2 % par période). Pour les lasers basés sur une structure en GaAlAs/GaAs, le coefficient de saturation

du gain est de l'ordre de 1.10^{-17} cm^3 [1]. On voit alors que le coefficient de saturation de gain est supérieur d'un à deux ordres de grandeurs dans les LCQ comparé aux lasers interbandes classiques. Le tableau suivant résume les coefficients de saturation de gain pour plusieurs types de lasers fonctionnant à différentes longueurs d'onde allant de 800 nm jusqu'au moyen infrarouge (9 µm). Les valeurs de ce tableau, excepté les deux dernières lignes, sont tirées de la référence [27] et des références qui y sont citées.

Laser	*Type*	ε_{3D} ($10^{-17}cm^3$)	*Mécanisme*	λ (µm)	*Réference*
GaAs	QW	0,774	Spatial hole burning et diffusions des porteurs	0,8	[27]
GaAs	MQW	0,04-0,15	Dispersion dépendante de l'injection		
GaAs	DFB	1,33	Spectral hole burning, chauffage de populations		
InGaAsP	DFB	0,2-6,7	Hole burning et autre source	1,3	
InGaAsP	DFB	1,2-4,7	Spectral hole burning, chauffage de populations	1,5	
InGaAs	QW, MQW, DFB	2,45-12,6	Spectral hole burning, chauffage de populations		
InGaAs	QCL	10^8-50^9	Spectral hole burning, chauffage des populations	4,6-5	Ce travail
InGaAs	QCL	10-100	Spectral hole burning, chauffage des populations	9	

Tableau.III.2 : Résumé des coefficients de saturation de gain pour plusieurs types de lasers

Bien que le coefficient de saturation soit un paramètre dépendant de la géométrie du composant, le tableau III.2 montre que ce coefficient augmente avec la longueur d'onde du laser laissant ainsi suggérer que la saturation du gain soit de plus en plus importante pour les grandes longueurs d'onde. Ce tableau montre aussi que deux mécanismes dominent la saturation du gain dans les lasers à semi-conducteur à grande longueur d'onde : le spectral hole burning et le chauffage de populations.

1. Effet de l'échauffement des porteurs

Comme nous l'avons montré dans le chapitre II sur la température des électrons dans le laser, cette dernière peut être supérieure de quelques 100 K à celle du réseau dans les lasers à cascade quantique. Pour voir l'effet d'un tel échauffement des porteurs sur la saturation du gain, nous avons calculé le coefficient de saturation de gain pour un champ donné pour plusieurs températures électroniques en utilisant la même structure à 4,6 µm. la température de réseau a été maintenue fixe à 300 K et la température électronique variée entre 300 K et 950 K. Nous avons fait varier aussi la densité de photons entre S = 0 et S = 5.10^{18} m^{-2}. Le recouvrement optique est pris égal à 0,5. La figure.III.17 montre la variation du coefficient de saturation en fonction de la température électronique pour deux champs électriques appliqués à la structure E = 68 kV/cm et E = 65 kV/cm.

[8]Structure à 4,6 µm
[9] Structure de la référence [28] émettant à 5 µm à température ambiante

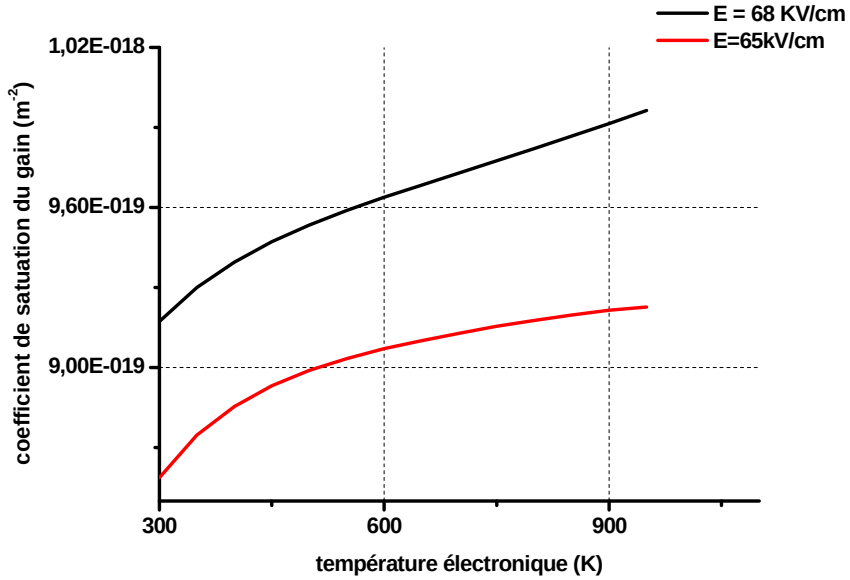


Fig.III.17 : Variation du coefficient de saturation de gain en fonction de la température électronique pour deux champs électriques appliqués à la structure de 65 kV/cm et de 68 kV/cm

Comme le montre ces courbes, le coefficient de saturation dépend de la température électronique. Plus cette température est grande plus ce coefficient est grand. En effet, la température élevée des électrons à l'intérieur de la structure va redistribuer les porteurs dans les sous bandes et va diminuer l'inversion de population pour un champ donné. La densité photonique nécessaire pour diminuer le gain de moitié devient alors plus petite.
Il est remarquable cependant que pour une température électronique variant de 300 K à 900 K, la variation du coefficient de saturation de gain est inférieure à 8 %. Donc l'effet de chauffage des porteurs a une contribution de deuxième ordre par comparaison au mécanisme de hole burning spectral. Cela a été vérifié expérimentalement par H.Choi et al [24], qui à l'aide d'une expérience pompe sonde ont pu démontrer que la contribution du chauffage des porteurs dans une structure LCQ émettant à 5,25 µm à température ambiante est négligeable dans la dynamique de gain.

2. Détermination d'une expression approchée du facteur de compression du gain dans les LCQ

Pour comprendre les mécanismes qui entrent en jeu dans la saturation du gain, il est important de donner une expression mathématique à ce facteur de saturation de gain en le liant à des paramètres caractéristiques du dessin de la zone active. C'est ce que nous essayons de faire dans cette partie. Nous allons partir de l'approximation du LCQ en un laser à trois niveaux (Figure.III.18, comme nous l'avons fait dans le paragraphe.I.C.2).

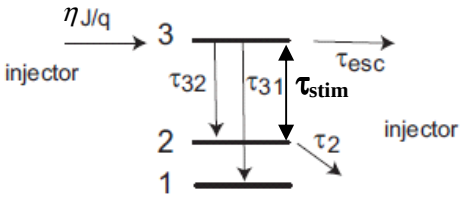


Fig.III.18: Représentation du modèle à trois niveaux avec les différents paramètres pertinents. L'inversion de population a lieu entre les deux niveaux du haut

On reprend les mêmes équations dans ce paragraphe que nous rappelons ici (ces équations ne sont qu'un cas particulier de (III.50) et (III.51) dans un système à trois niveaux.) :

$$\frac{dn_3}{dt} = \frac{\eta.J}{q} - \frac{n_3}{\tau_3} - \frac{(n_3 - n_2)}{\tau_{stim}} \tag{III.59}$$

$$\frac{dn_2}{dt} = \frac{n_3}{\tau_{32}} + \frac{(n_3 - n_2)}{\tau_{stim}} - \frac{n_2 - n_2^{therm}}{\tau 2} \tag{III.60}$$

$$\frac{dS}{dt} = \frac{c}{n_{eff}}.(g_\omega - \alpha_{tot}).S + \beta_\omega \frac{n_3}{\tau_{sp}} \tag{III.61}$$

Le temps de vie stimulé τ_{stim} dans ce cas s'écrit selon la formule (III.53). n_3 (resp. n_2) est la densité d'électrons sur l'état 3, (resp. de l'état 2), τ_3 (resp. τ_2) est le temps de vie de l'état 3 (resp. l'état 2). Dans le premier chapitre, la résolution de ces équations a été faite en négligeant la densité photonique S et n'est valable donc qu'en dessous du seuil laser. Comme nous venons de le montrer dans les paragraphes précédents, le couplage entre les photons et porteurs peut avoir un grand impact sur la distribution électronique dans la structure. On se mettra dans le régime où le temps de vie de l'état haut est donné par le temps de l'émission stimulée (c.à.d. au delà du seuil laser). On négligera aussi le terme de repopulation thermique de l'état 2 n_2^{therm}. Dans le régime stationnaire (d/dt = 0) nous pouvons montrer que les populations de l'état haut n_3 et bas n_2 s'écrivent comme suit en utilisant les équations (I.2) et (I.3)

$$n_3 = \frac{\eta}{q_0}.J.\tau_3 + \frac{(n_2 - n_3)}{\tau_{stim}}.\tau_3 \tag{III.62}$$

$$n_2 = n_3.\frac{\tau_2}{\tau_{32}} + \frac{(n_3 - n_2)}{\tau_{stim}}.\tau_2. \tag{III.63}$$

La différence entre ces deux équations nous permet d'obtenir la différence de populations entre ces deux états :

$$n_3 - n_2 = \frac{\eta}{q_0}.J.\tau_3 - n_3.\frac{\tau_2}{\tau_{32}} + \frac{(n_2 - n_3)}{\tau_{stim}}.(\tau_2 + \tau_3) \tag{III.64}$$

On substitue le terme n_3 dans le second membre de cette équation par la formule (III.62) ce qui nous donne l'équation suivante

$$n_3 - n_2 = \frac{\eta}{q_0}.J.\tau_3.(1 - \frac{\tau_2}{\tau_{32}}) - (n_3 - n_2).\frac{\tau_2.\tau_3}{\tau_{32}.\tau_{stim}} + \frac{(n_2 - n_3)}{\tau_{stim}}.(\tau_2 + \tau_3) \tag{III.65}$$

Cette dernière équation permet d'exprimer la différence de population en présence de photons dans la cavité comme suit :

$$n_3 - n_2 = \frac{\frac{\eta}{q_0}.J.\tau_3.(1-\frac{\tau_2}{\tau_{32}})}{1+\frac{1}{\tau_{stim}}.(\tau_2+\tau_3.(1-\frac{\tau_2}{\tau_{32}}))} \qquad \text{(III.66)}$$

On retrouve ainsi la condition classique d'obtention du gain dans un milieu laser à trois niveau : $\frac{\tau_2}{\tau_{32}} << 1$. En se mettant dans ce régime, et en remplaçant le temps de transition stimulé par son expression donnée par la formule (III.53), on trouve que la différence de population s'écrit comme suit :

$$n_3 - n_2 = \frac{\frac{\eta}{q_0}.J.\tau_3}{1+\frac{c}{n_{eff}}.\sigma_{32}.(\tau_2+\tau_3).S_\omega} \qquad \text{(III.67)}$$

Le gain de la structure en présence d'une densité de photons S_ω dans la cavité s'écrit donc :

$$g(S_\omega) = \sigma_{32}.(n_3 - n_2) = \frac{\sigma_{32}.\frac{\eta}{q_0}.J.\tau_3}{1+\frac{c}{n_{eff}}.\sigma_{32}.(\tau_2+\tau_3).S_\omega} = \frac{g_0}{1+\frac{c}{n_{eff}}.\sigma_{32}.(\tau_2+\tau_3).S_\omega} \qquad \text{(III.68)}$$

En comparant cette formule à celle donnée par l'équation (III.56), on voit ressortir une expression du coefficient de saturation du gain dans les LCQ :

$$\varepsilon = \frac{c}{n_{eff}}.\sigma_{32}.(\tau_2+\tau_3) = \frac{c}{n_{eff}}.\frac{2.\pi.q^2}{\varepsilon_0.n_{eff}}.\frac{\Gamma_p.z_{32}^2}{\lambda.L_p.(2.\gamma)}.(\tau_2+\tau_3) \qquad \text{(III.69)}$$

Cette expression du coefficient de saturation du gain permet de faire sortir les différents paramètres qui peuvent influencer ce paramètre pour un dessin donné. On voit ainsi que ce coefficient dépend fortement de la géométrie du composant à travers le terme Γ_p/L_p. L'élément de matrice z_{32}, et les temps de vie de l'état haut et bas du laser dépendent du point de fonctionnement du laser. Le coefficient de saturation du gain va donc dépendre de la tension appliquée à la structure et n'est plus fixé par la géométrie du laser comme dans les lasers interbande. La figure.III.19 montre une comparaison entre le calcul total du coefficient de saturation de gain par fit de la courbe du gain saturé en fonction de la densité de photons (courbe en ligne noire) et celui déterminé directement par la formule (III.69) (courbe en point rouge). Le calcul a été fait pour la structure laser tirée de la référence [28] émettant à 5 µm à température ambiante. C'est une structure à injecteur court (un seul puits) constituée de 80 périodes de longueur 220 Å chacune, le recouvrement par période est pris égale à 0,009.

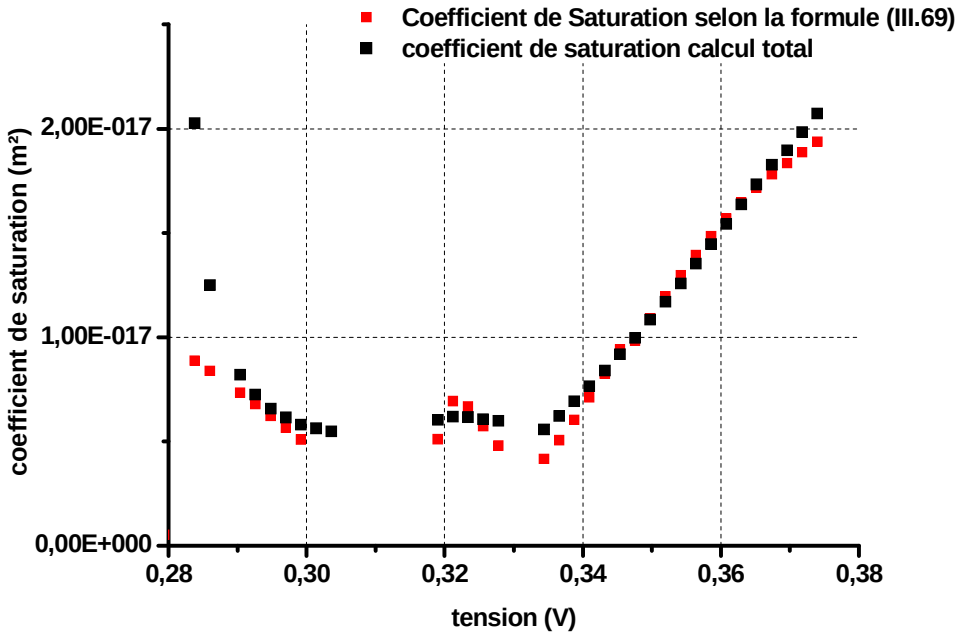


Fig.III.19 : Comparaison entre le calcul total du coefficient de saturation de gain par fit de la courbe du gain saturé en fonction de la densité de photons (courbe en ligne noire) et celui déterminé directement par la formule (III.69) (courbe en point rouge)

Un bon accord est obtenu entre les deux courbes. Les calculs n'ont pas été faits pour les points où des anti-croisements entre états existent. C'est ce qui explique le vide qui existe entre les points dans la courbe donnant le coefficient de saturation selon la formule approchée. Cette courbe montre aussi, comme nous l'avons précédemment souligné, que le coefficient de saturation dépend de la tension appliquée à la structure. Ceci n'est que le reflet de l'effet Stark dont nous avons discuté l'origine dans le paragraphe III.A.4.b.4. En changeant les tensions les énergies des états changent ce qui affecte les fonctions d'onde des électrons sur ces états. Ceci va influencer l'élément de matrice de la transition et les temps de vie des électrons sur ces états.

Cette expression du coefficient de saturation de gain rappelle celle déterminée par Yariv dans la référence [29] pour un système atomique à deux niveaux en interaction avec un champ électromagnétique. Il a notamment montré que le coefficient de saturation de ce système s'écrit comme suit :

$$\varepsilon\alpha\frac{dg}{dn}.\tau_3 \qquad \text{(III.70)}$$

$\frac{dg}{dn}$ étant le gain dynamique du laser et τ_3 est le temps de vie de l'état haut du laser.

Par comparaison avec la formule (III.69), on voit que dans le cas des lasers à cascade quantique un terme supplémentaire représentant le temps de vie de l'état bas du laser intervient. En effet, chaque période constituante du LCQ se comporte comme un système ouvert. Elle est couplée aux autres périodes via le transport électronique. Un électron qui transite de l'état haut du laser vers l'état bas par émission spontanée n'est pas réinjecté vers l'état haut de la même période. Il doit être transporté vers la période voisine pour qu'il puisse

contribuer encore une fois à la puissance induisant ainsi un retard représenté par le temps de vie de l'état bas du laser dans cette approximation simple du laser à trois niveaux.
Il est à noter aussi que pour obtenir à l'expression (III.69) du facteur de compression du gain, nous n'avons fait aucune hypothèse sur la bande d'émission du laser. Donc, ce raisonnement est valable aussi bien pour les LCQ dans la bande II que pour ceux émettant dans la bande III. Il présente alors un outil commode pour optimiser la puissance de sortie du laser comme nous le verrons dans le chapitre suivant où l'on prendra en exemple deux lasers ayant des longueurs d'onde d'émission dans la bande III pour le premier exemple et dans la bande II pour le deuxième.

III.C. Application au calcul de la puissance optique dans les LCQ

Dans ce paragraphe, nous résolvons les équations couplées (III.50) et (III.51). Il faut noter que ces équations n'ont pas de signification locale et ne sont valables que pour un cas ou toutes ces grandeurs sont spatialement uniformes. Pour retrouver les équations locales, on fait l'hypothèse que la cavité laser est décomposable en petites cellules indépendantes pour lesquelles on peut écrire les systèmes d'équation (III.50) et (III.51). On considèrera que la tension appliquée est la même pour toutes les cellules élémentaires et que les recombinaisons sont incohérentes et statiquement indépendantes d'une cellule à l'autre. Notre modèle consiste à sommer les courants et à propager la densité de photons entre cellules voisines pour déterminer les caractéristiques de sortie du laser (courant et puissance de sortie). On fera aussi l'hypothèse que le guide d'onde est un guide d'onde 1D c.à.d. qu'on négligera toute variation spatiale des paramètres décrivant le système dans la dimension latérale du guide y (voir la figure.III.9 et figure.III.20). Un terme source représentant la non-uniformité du courant le long de l'axe longitudinal du guide devrait en toute rigueur s'ajouter à l'équation (III.50) . Nous verrons dans la suite que ce terme peut être effectivement négligé.
L'équation qui gère la densité de population dans la cavité s'écrit quant à elle sous la forme :

$$\frac{dS_\omega}{dt} = \frac{\partial S_\omega}{\partial t} + \overrightarrow{grad}\left(S_\omega . \frac{c}{n_{eff}} . \frac{\vec{k}_\omega}{\left|\vec{k}_\omega\right|}\right) = \frac{c}{n_{eff}} .(g_\omega(x) - \alpha_{\text{int}}).S_\omega(x) + \beta_\omega . R_{spont}(x) \qquad \text{(III.71)}$$

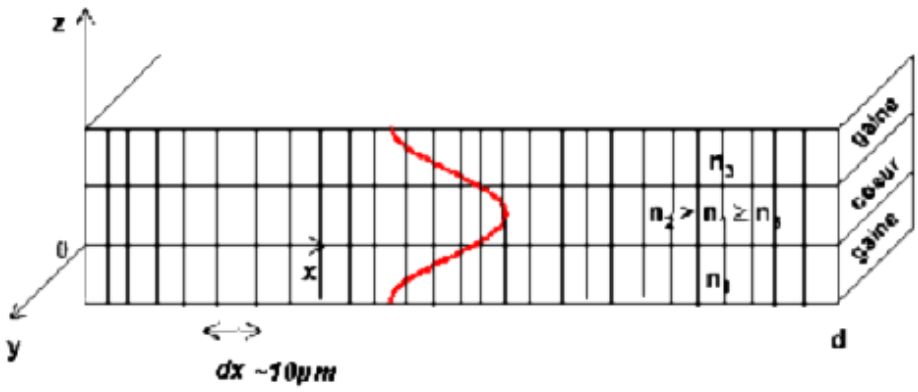


Fig.III.20: Cavité optique : on suppose qu'elle est infinie selon y

Pour résoudre ces équations, on peut écrire la densité totale locale des photons au point x comme la somme d'une densité locale de photons allant dans la direction des x croissants et une autre celle des photons allants dans la direction x décroissants

$$S_\omega = S_\omega^+ + S_\omega^- \tag{III.72}$$

Dans ce cas l'équation (III.71) peut s'écrire sous la forme du système d'équations suivant

$$\frac{\partial S_\omega^+}{\partial x} = (\Gamma g_\omega(x) - \alpha_{\text{int}})S_\omega^+ + \frac{n_g}{c}\beta_\omega R_{spont} \tag{III.73}$$

$$-\frac{\partial S_\omega^-}{\partial x} = (\Gamma . g_\omega(x) - \alpha_{\text{int}})S_\omega^- + \frac{n_g}{c}\beta_\omega R_{spont} \tag{III.74}$$

Le laser sera considéré de longueur d, avec en x = 0 un miroir de réflectivité R1 pour l'intensité et en x = d, une réflectivité R_2.
Les équations locales (III.50), (III.73) et (III.74) obtenues et complétées par les conditions aux limites adéquates, permettent donc une résolution self-consistante (auto-cohérente) des caractéristiques du laser selon l'algorithme présenté dans le schéma de la figure.III.21. Par ailleurs comme nous l'avons discuté dans le chapitre II, la température des électrons ainsi que la thermique du composant ont de fortes conséquences sur les temps de transition inter-sous-bandes, donc sur les taux d'émission et sur le gain local. Pour étudier plus finement les conséquences de cette élévation de la température sur le fonctionnement du composant il est important de coupler la résolution des équations précédentes avec la résolution de la température électronique. La prise en compte de cette modification va introduire une nouvelle boucle d'autocohérence dans l'algorithme de résolution du modèle. Pour une température électronique de départ, nous déterminons les taux d'émission stimulée et le courant local. La nouvelle température électronique est déduite de ces résultats en utilisant le raisonnement du deuxième chapitre de ce manuscrit. Ce calcul est itéré jusqu'à stabilisation de la température électronique.
Pour alléger les calculs nous allons tenir compte de la température de la région active et de la température électronique à travers la forme approchée déterminée dans le chapitre II donnée par l'équation (II.37) que nous rappelons ici

$$T_e = T_{zone_active} + Rthe.U.I + \frac{\alpha_{ej}}{L.w}.I \tag{III.75}$$

$$T_{zone_active} = T0 + Rth.\delta.(U.I - P_{optique}) \tag{III.76}$$

Dans ces équations R_{the} (resp. R_{th}) est la résistance thermique électronique de l'hétérostructure (resp. résistance thermique de l'assemblage), et U est la tension de fonctionnement du laser, J (ou I) est la densité de courant (ou courant) qui traverse le composant, T_0 est la température de la jonction, $P_{optique}$ [1] et [30] est la puissance optique émise par le laser et δ est le rapport cycle (=fréquence.temps du pulse) lors de l'expérience.
Les cellules que nous avons considérées pour la résolution des équations locales sont donc couplées entre elles par les équations de transport, de photons et de chaleur. La cellule de base sera décrite par trois paramètres indépendants : la tension V, le flux de photons traversant la cellule décrit par la densité de photons S et la température de fonctionnement. Ces paramètres sont imposés de l'extérieur. En réponse la zone active fournit le courant total et le nombre de

photons net créés dans cette cellule élémentaire. Il est important de voir qu'à ce stade, il n'y pas de relation entre ces trois paramètres de telle façon qu'on peut imposer l'un où l'autre de ces paramètres et voir son effet sur la réponse du système. C'est ce que nous avons fait pour l'obtention de la réponse en photocourant par exemple où le composant est utilisé comme un détecteur. Le résultat de ces expériences numérique est un diagramme qui décrit le composant sous différents aspects de fonctionnement. L'état de la cellule dans le contexte du fonctionnement donné du laser sera décrit par des points particuliers de ce diagramme.

Dans notre modèle nous ne prenons en compte que le courant transverse (le long de l'axe z) de la cavité laser, les courants de diffusion dans la direction y sont négligés. Le long de l'axe longitudinal de la cavité (x), un courant de diffusion peut exister pour restaurer l'homogénéité des porteurs dans le composant. Dans notre résolution, nous avons aussi négligé ce courant de diffusion. Dans l'exemple que nous avons pris pour illustrer cette partie, nous avons pu estimer que la différence de courant transverse aux deux facettes du laser ne dépasse pas 5 % du courant, ce qui valide cette approximation de négliger le courant de diffusion dans la direction longitudinale.
La tension locale correspond à la tension réellement appliquée à la cellule. La présence du substrat et des contacts peut être prise en compte à travers une résistance électrique qui traduit la chute de tension dans ce dernier.
Nous considérons un laser ayant une largeur de 10 µm, de longueur 2 mm de cavité. L'une des facettes a été traitée haute réflectivité ce qui permet d'avoir un coefficient de réflexion R_2 = 95 %. La facette de sortie est laissée sans traitement R_1=30 %. Le recouvrement est pris égal à 0,43, les pertes internes sont égales à 2,5 cm^{-1}. Le laser émet à 9,5 µm à température ambiante. La figure.III.22 montre la variation du courant transverse le long de l'axe longitudinal. On voit l'apport de l'émission de photons sur le courant qui traverse la cavité. Le courant est plus fort près de la facette de sortie du laser là où il y a le plus de photons. La figure.III.23 montre la variation du gain à l'intérieur de la cavité. Là aussi on voit l'impact de l'asymétrie optique sur le comportement du gain à l'intérieur de la cavité laser. Un gain maximum est observé près de la facette traitée HR alors qu'il est minimum près de la facette non traitée.

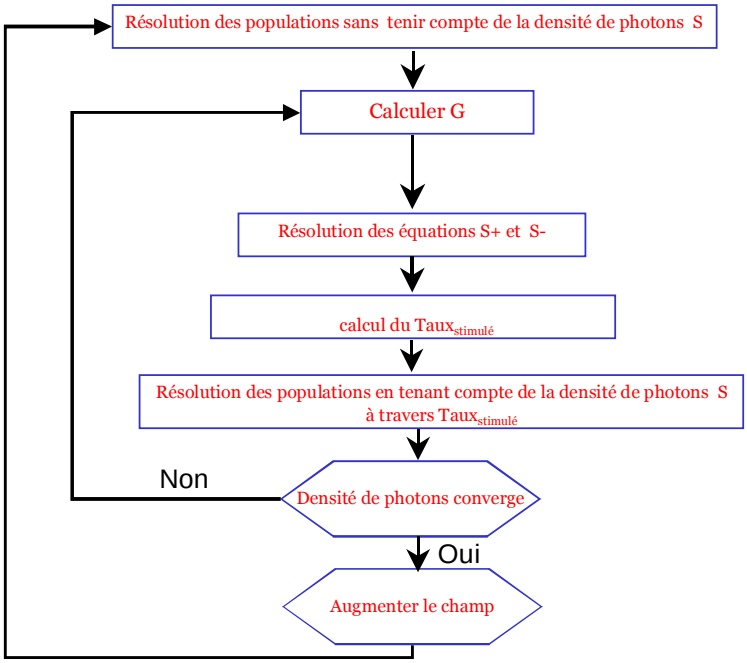


Fig.III.21 : Algorithme de résolution self-consistante des caractéristiques des LCQ

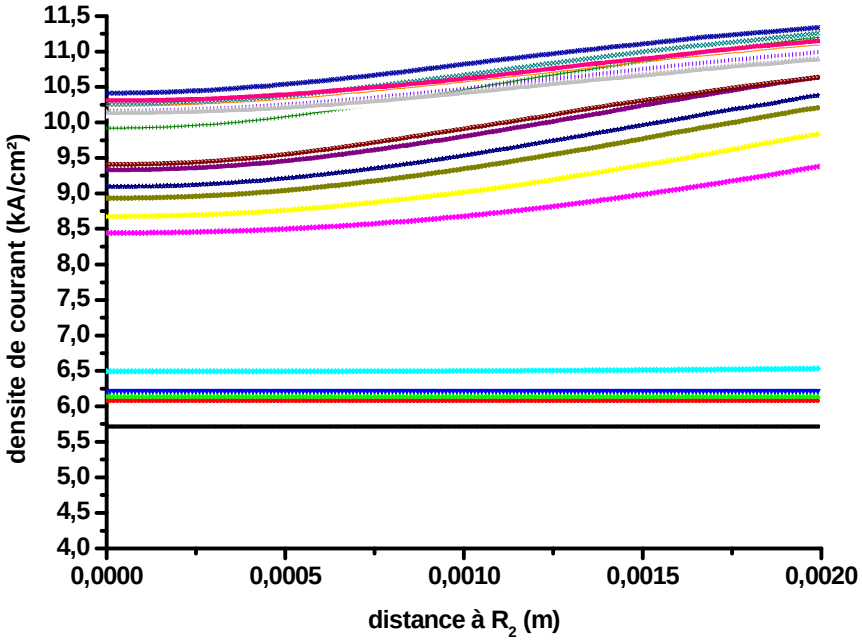


Fig.III.22 : Variation du courant transverse le long de l'axe longitudinal : la différence du courant entre les deux extrémités du guide est inférieure à 5 % ce qui permet de négliger le courant de diffusion longitudinal (courbes tous les 1 kV/cm entre 10 et 50 kV/cm)

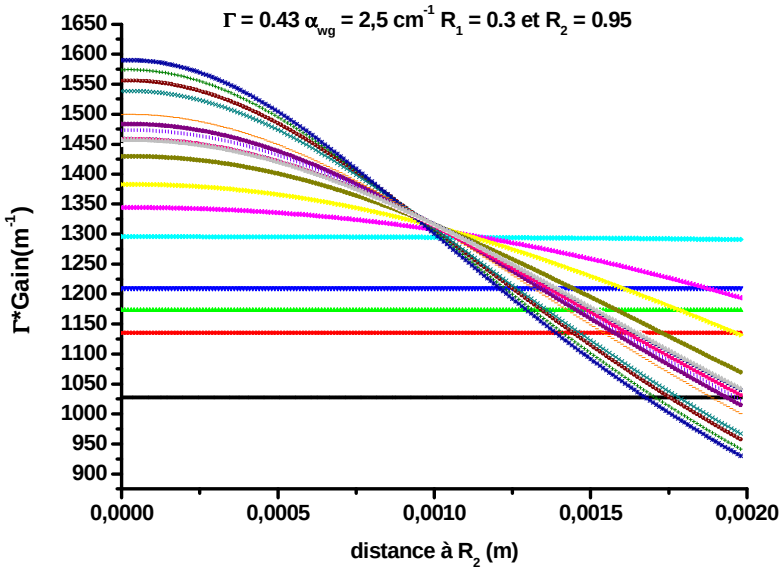
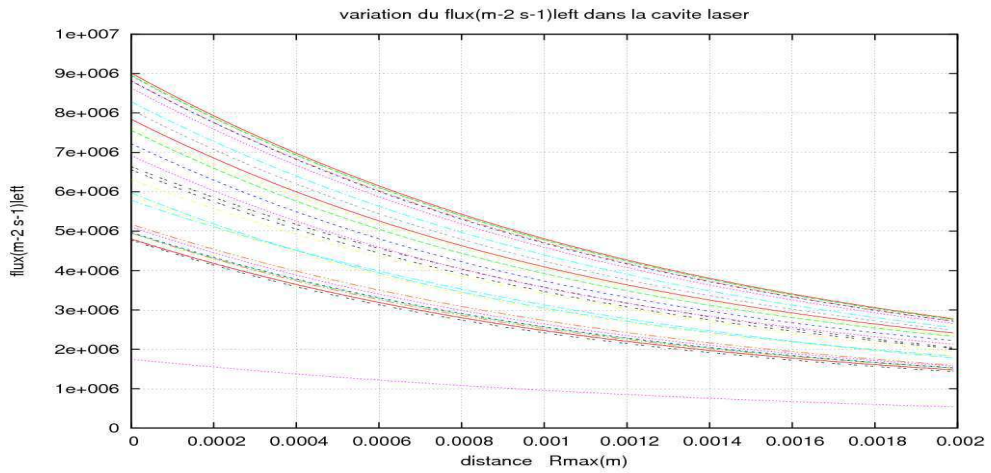


Fig.III.23 : Variation du gain à l'intérieur de la cavité laser (courbes tous les 1kV/cm entre 10 et50 kV/cm)

a/



b/

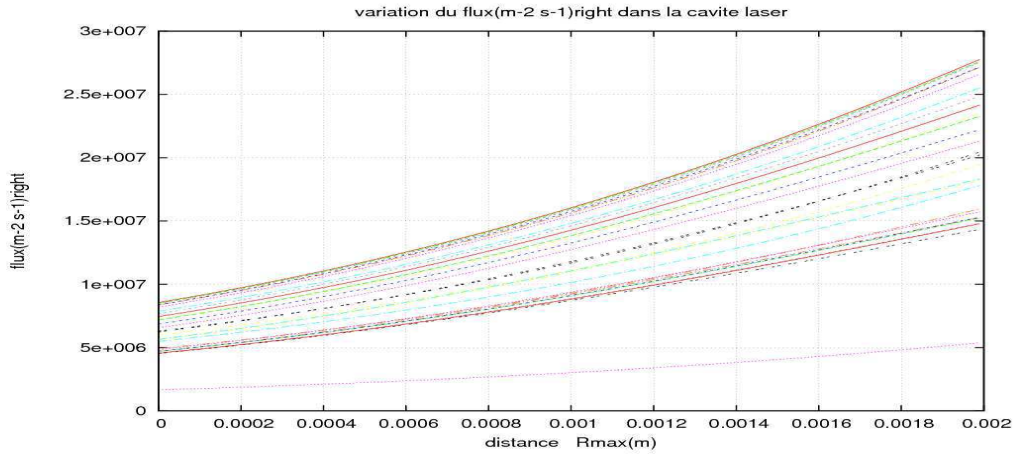


Fig.III.24 : Variation de flux de photons dans la cavité (courbes tous les 1 kV/cm entre 10 et50 kV/cm)

Ceci s'explique par le fait que la saturation du gain est d'autant plus forte que la densité de photons locale est grande comme le montre l'équation (III.56). Les figures.III.24 montrent la variation de flux de photons allant vers R_2 (a) ou vers R_1 (b). On remarque que la densité énergétique locale de photons (c/n.E. Flux) sera beaucoup plus grande (3 fois) coté R_1 (facette de sortie) que celle côté R_2.

III.D. Effet de la saturation du gain

On s'intéresse ici à l'impact du coefficient de saturation du gain sur les caractéristiques Courant-Tension et Puissance-Courant pour les lasers à cascade quantique à température ambiante. La figure.III.25 montre la comparaison entre la puissance de sortie du calcul de la puissance en fonction de la tension appliquée à la structure pour la structure LCQ de la structure de la référence [28] (C'est une structure à injecteur court (un seul puits) constituée de 80 périodes de longueur 220 Å chacune). Le recouvrement total est pris égal à 0,5.

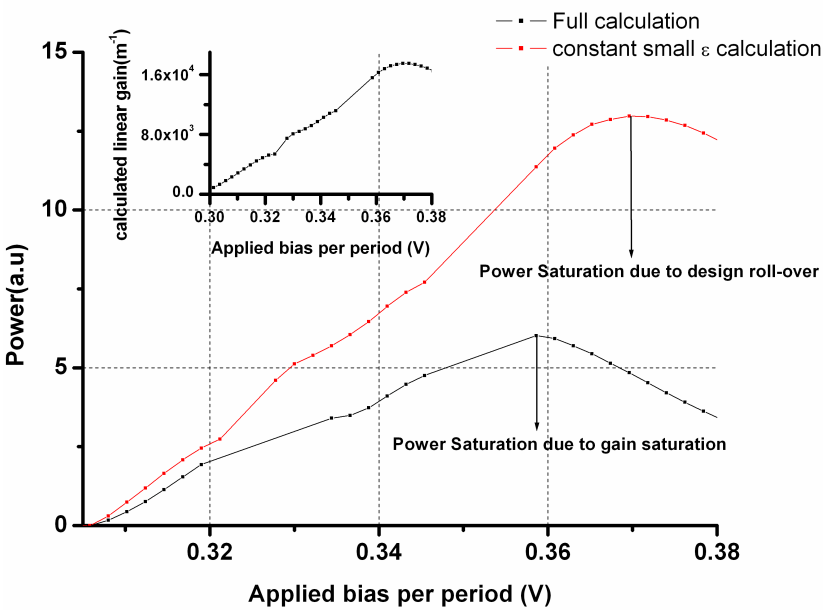


Fig.III.25 : Effet de la saturation du gain sur la puissance de sortie du laser : comparaison entre un cas avec saturation calculé selon le modèle décrit dans le paragraphe III.B.3.b et sans prise en compte de la saturation du gain

La différence entre les deux calculs consiste dans le calcul de la saturation du gain dans la structure. La courbe en rouge est obtenue en supposant que le facteur de saturation est du même ordre que dans les lasers semi-conducteurs classiques ($\varepsilon \sim 1 \cdot 10^{17}$ cm^{-3}) et qu'il est indépendant de la tension appliquée à la structure. La courbe noire est obtenue par le calcul total auto-cohérent tel que nous l'avons décrit dans les paragraphes précédents (on rappelle qu'on obtient un facteur de saturation d'un ordre de grandeur plus grand que dans le premier cas et qu'il est dépendant de la tension appliquée à la structure). Cette figure montre que l'effet du coefficient de saturation de gain est faible sur les caractéristiques du laser lorsque la densité de photons à l'intérieur de la cavité est faible. En effet, nous avons obtenu le même courant seuil, la même tension au seuil. A plus forte tension appliquée à la structure, la puissance à la sortie du laser devient de plus en plus dépendante du facteur de coefficient de saturation du gain. On obtient en particulier une puissance maximale de sortie 2 fois plus

grande pour le calcul à coefficient de saturation petit que dans l'autre (une différence de l'ordre de 2 V). L'effet de la saturation du gain se voit aussi sur la valeur de la tension de maximum de la puissance. Avec le calcul simple, la tension de saturation de la puissance est celle qui correspond au désalignement entre l'état haut et bas du laser (comme le montre l'insert de la figure.III.25 où nous avons tracé la courbe du gain linéaire en fonction de la tension par période appliquée à la structure).

En résumé la saturation de gain dans les lasers à cascade quantique joue un rôle important sur les puissances de sortie du composant. La diminution du coefficient de saturation du gain dans la structure LCQ sera l'une des manières d'optimiser en puissance les lasers à cascade quantique. Pour cela nous avons défini une figure de mérite, que nous noterons *f*, déduite de la formule approchée du facteur de compression du gain ε ;

$$\boxed{f = z_{32}^{2}.(\tau_2 + \tau_3)} \qquad \text{(III.77)}$$

de telle façon que cette figure de mérite soit proportionnelle au coefficient de saturation du gain dans la structure.

III.E. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit les propriétés optiques des lasers à cascades quantiques. En particulier, nous avons déterminé une expression du gain optique dans les LCQ. L'étude de l'effet de l'élargissement γ des transitions optiques a montré que la rugosité d'interface joue un rôle important sur le gain optique du milieu. Le couplage entre l'onde électromagnétique et les électrons dans la structure montre que la saturation du gain dans les LCQ est importante comparée à celle des lasers semiconducteur interbandes. Cette étude nous a permis de déterminer un facteur de mérite donné par l'équation (III.77).

Dans le chapitre suivant, nous allons utiliser ce facteur de mérite pour optimiser des structures laser que nous avons dessinées ou tirées de la littérature et émettant dans la bande II et III du spectre de transmission de l'atmosphère.

Références Bilbliographiques

[1] A. Fily. *Modèles pour diodes laser de puissance*. PhD thesis, Université PARIS XI, 1998.
[2] E.Rosencher and B.Vinter. *Optoélectronique*. DUNOD, 2002.
[3] G.Bastard. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. les étditions de physique, 1992.
[4] R. Q. Yang, J. M. Xu, and M. Sweeny. Selection rules of intersubband transitions in conduction-band quantum wells. *Phys. Rev. B*, 50(11):7474, September 1994.
[5] H. C. Liu, M. Buchanan, and Z. R. Wasilewski. How good is the polarization selection rule for intersubband transitions? *Applied Physics Letters*, 72(14):1682, 1998.
[6] A. Leuliet. *Simulation de Transport dans les Lasers à Cascade Quantiques*. PhD thesis, Université Paris 7, 2010.
[7] H. Ehrenreich and M. H. Cohen. Self-consistent field approach to the many-electron problem. *Phys. Rev.*, 115(4):786, August 1959.
[8] M Semtsiv. *InGaAs-AlAs and InGaAs-InGaP Strain-Compensated Heterostructures for Short-Wavelength Intersubband Transitions and Lasers*. PhD thesis, Humboldt-Universität zu Berlin, http://edoc.hu-berlin.de/dissertationen/semtsiv-mykhaylo-2004-09-08/PDF/Semtsiv.pdf, 2004.
[9] R. A. Kaindl, S. Lutgen, M. Woerner, T. Elsaesser, B. Nottelmann, V. M. Axt, T. Kuhn, A. Hase, and H. Künzel. Ultrafast dephasing of coherent intersubband polarizations in a quasi-two-dimensional electron plasma. *Phys. Rev. Lett.*, 80(16):3575, April 1998.
[10] T. Elsaesser and M. Woerner. Femtosecond infrared spectroscopy of semiconductors and semiconductor nanostructures. *Physics Reports*, 321(6):253, November 1999.
[11] R. A. Kaindl, K. Reimann, M. Woerner, T. Elsaesser, R. Hey, and K. H. Ploog. Homogeneous broadening and excitation-induced dephasing of intersubband transitions in a quasi-two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, 63(16):161308, April 2001.
[12] Z. Ikonic, V. Milanovic, D. Tjapkin, and S. Pajevic. Effective-mass-mismatch-induced intersubband absorption line broadening in semiconductor quantum wells. *Phys. Rev. B*, 37(6):3097, February 1988.
[13] S. Tsujino, A. Borak, E. Muller, M. Scheinert, C. V. Falub, H. Sigg, D. Grutzmacher, M. Giovannini, and J. Faist. Interface-roughness-induced broadening of intersubband electroluminescence in p-sige and n-GaInAs/AlInAs quantum-cascade structures. *Applied Physics Letters*, 86(6):062113, 2005.
[14] T. Unuma, M. Yoshita, T. Noda, H. Sakaki, and H. Akiyama. Intersubband absorption linewidth in gaas quantum wells due to scattering by interface roughness, phonons, alloy disorder, and impurities. *Journal of Applied Physics*, 93(3):1586, 2003.
[15] A. Wittmann, Y. Bonetti, J. Faist, E. Gini, and M. Giovannini. Intersubband linewidths in quantum cascade laser designs. *Applied Physics Letters*, 93(14):141103, 2008.
[16] T. Unuma, T. Takahashi, T. Noda, M. Yoshita, H. Sakaki, M. Baba, and H. Akiyama. Effects of interface roughness and phonon scattering on intersubband absorption linewidth in a GaAs quantum well. *Applied Physics Letters*, 78(22):3448, 2001.
[17] J. B. Khurgin. Inhomogeneous origin of the interface roughness broadening of intersubband transitions. *Applied Physics Letters*, 93(9):091104, 2008.
[18] C. A. Ullrich and G. Vignale. Theory of the linewidth of intersubband plasmons in quantum wells. *Phys. Rev. Lett.*, 87(3):037402, July 2001.
[19] J. Li and C. Z.Ning. Effects of electron-electron and electron-phonon scatterings on the linewidths of intersubband transitions in a quantum well. *Phys. Rev. B*, 70(12):125309, September 2004.

[20] K. H. Park, M. W. Kim, Y. T. Byun, D. Woo, S. H. Kim, S. S. Choi, Y. Chung, W. R. Cho, S. H. Park, and U. Kim. Nondestructive propagation loss and facet reflectance measurements of GaAs/AlGaAs strip-loaded waveguides. *Journal of Applied Physics*, 78(10):6318, 1995.

[21] E. Peter, S. Laurent, C. Sirtori, M. Carras, J. A. Robbo, M. Garcia, and X. Marcadet. Measurement of semiconductor waveguide optical properties in the midinfrared wavelength range. *Applied Physics Letters*, 92(2):021103, 2008.

[22] C. Gmachl, F. Capasso, A. Tredicucci, D.L. Sivco, R. Kohler, A.L. Hutchinson, and A.Y. Cho. Dependence of the device performance on the number of stages in quantum-cascade lasers. *Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE,* 5(3):808, 1999.

[23] M. Giehler, H. Kostial, R. Hey, and H. T. Grahn. Effect of free-carrier absorption on the threshold current density of GaAs/AlGaAs quantum-cascade lasers. *Journal of Applied Physics*, 96(9):4755, 2004.

[24] H. Choi, L. Diehl, Z. Wu, M. Giovannini, J. Faist, F. Capasso, and T. B. Norris. Gain recovery dynamics and photon-driven transport in quantum cascade lasers. *Phys. Rev. Lett.*, 100(16):167401, April 2008.

[25] E. Benveniste, S. Laurent, A. Vasanelli, C. Manquest, C. Sirtori, F. Teulon, M. Carras, and X. Marcadet. Measurement of gain and losses of a midinfrared quantum cascade laser by wavelength chirping spectroscopy. *Applied Physics Letters*, 94(8):081110, 2009.

[26] R. P. Green, A. Tredicucci, N. Q. Vinh, B. Murdin, C. Pidgeon, H. E. Beere, and D. A. Ritchie. Gain recovery dynamics of a terahertz quantum cascade laser. *Phys. Rev. B*, 80(7):075303, August 2009.

[27] J. Huang and L. W. Casperson. Gain and saturation in semiconductor lasers. *Optical and Quantum Electronics*, 25:369, 1993.

[28] Y. Bai, S. Slivken, S. Kuboya, S. R. Darvish, and M. Razeghi. Quantum cascade lasers that emit more light than heat. *Nat Photon*, 4(2):99, February 2010.

[29] A.Yariv. *Optical electronics in modern Communications*. Oxford University Press, 1997.

[30] A. J. Hoffman, P. X. Braun, M. D. Escarra, S. S. Howard, K. J. Franz, X. Wang, J. Fan, and C. Gmachl. Lasing-induced reduction in core heating in high wall plug efficiency quantum cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 94(4):041101, 2009.

Chapitre IV : Optimisation des lasers à cascade quantique

Comme nous l'avons remarqué dans le premier chapitre, l'obtention de meilleures performances fait appel à plusieurs moyens tels que l'optimisation du guide d'onde pour un meilleur management de la thermique dans le composant par exemple [1], ou l'optimisation de la zone active elle-même à travers la diminution du repeuplement thermique de l'état bas du laser par une extraction non résonnante [2], ou en utilisant des lasers à injecteur court ou sans injecteur [3].
Dans les chapitres précédents nous avons vu que le modèle que nous avons développé pour la description du laser donne des résultats en bon accord avec l'expérience. Nous avons pu montrer notamment que l'interaction entre les électrons et le champ électromagnétique joue un rôle important dans la puissance réellement obtenue par le composant.
Dans ce chapitre nous nous intéresserons à l'optimisation des lasers à cascade quantique en termes de puissance de sortie et de rendement à la prise.

IV.A. Pourquoi les dessins injecteur court

Pour un bon fonctionnement et un bon transport des électrons dans la structure, il faut que les porteurs puissent circuler entre les différentes périodes constituant le laser sans qu'il y ait des effets de repopulation ou des effets d'engorgement [4]. De plus il faut minimiser les pertes des porteurs vers le continuum. Pour cela, il a été longtemps admis qu'il est nécessaire d'utiliser un injecteur en mini-bande [5] pour un bon fonctionnement du laser et une bonne stabilité du courant d'injection. La formule (I.7) du courant seuil dans une approximation à trois états montre qu'il est inversement proportionnel au nombre de périodes dans la région active, la puissance quant à elle est proportionnelle à ce nombre de périodes. Donc pour une optimisation de la puissance de sortie de la structure une des manières serait d'augmenter le nombre de périodes. Nous avons remarqué aussi dans le premier chapitre que le rendement à la prise s'écrit comme le produit de quatre termes essentiels (on rappelle l'équation ici) :

$$\eta = \left(\frac{\hbar.\omega}{\hbar.\omega + \Delta_{inj}}\right).\left(\frac{\alpha_m}{\alpha_m + \alpha_{op}}\right).\left(\frac{J_{\max} - J_{th}}{J_{\max}}\right).\eta_{tr} = \eta_V.\eta_{op}.\eta_J.\eta_{tr} \qquad \text{(IV.1)}$$

Dans l'expression du rendement en tension η_V, Δ_{inj} est la taille en énergie de la mini-bande injecteur. On voit donc que nous avons intérêt à diminuer cette quantité pour maximiser le rendement du laser. En résumé pour optimiser les LCQ en terme de puissance, une solution serait de diminuer la taille de l'injecteur en diminuant le nombre de puits le constituant pour s'affranchir de la mini-bande et la remplacer par un ou deux états discrets [3]. Le transport des porteurs est garanti à l'aide d'un bon recouvrement entre les états injecteurs et les états haut et bas du laser. Le prix à payer dans ce cas sera un champ électrique de fonctionnement plus élevé dans les composants à injecteur courts que dans les composants classiques. Donc, selon le type de fonctionnement souhaité une attention particulière sera donnée aux matériaux utilisés, ainsi qu'à la méthode d'injection des courants sur l'état haut et leur extraction de l'état bas.

Ce chapitre s'articule autour de ce type de dessin comme un moyen pour augmenter les performances des LCQ en termes de puissance et de rendement à la prise. Pour cela nous nous appuierons sur deux structures de zones actives que nous avons dessinées ou améliorées. Nous comparerons à chaque fois les performances obtenues en utilisant notre modèle à celles

obtenues par l'expérience. Dans un second temps nous verrons la démarche poursuivie pour optimiser ces structures. Ceci nous permettra aussi d'avoir une idée sur le caractère prédictif du modèle que nous avons mis en place.

IV.B. Laser émettant dans la bande III

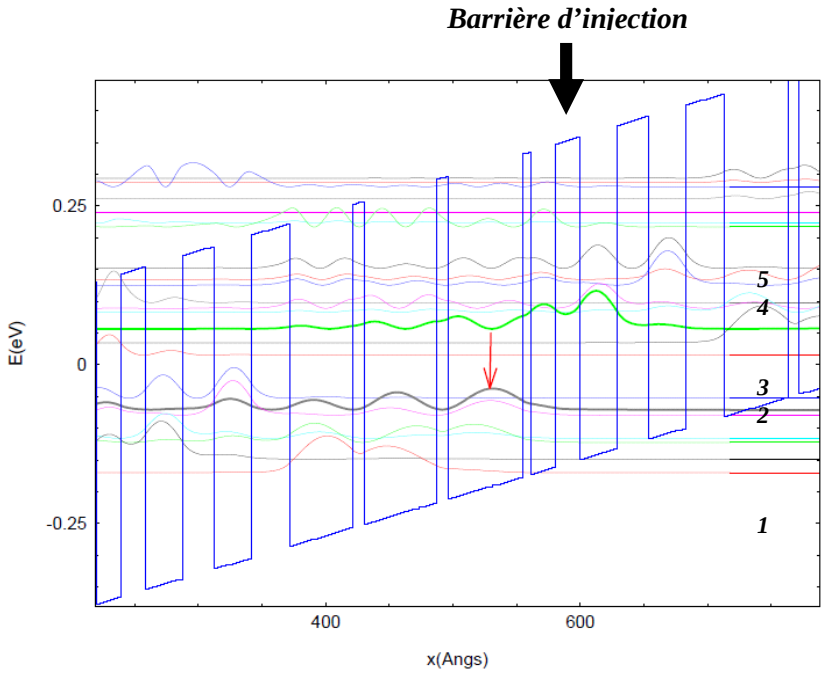


Fig.IV.1 : Dessin de la région active du laser à injecteur court. Elle est basée sur une structure périodique en $Ga_{0.47}In_{0.53}As$ /$Al_{0.48}In_{0.52}As$/InP. Les épaisseurs des couches sont comme suit en commençant par la barrière d'injection **19.5**/19/**7**/58/**9**/57/**9**/50/**30**/29/**25**/29. Les puits sont écrits en gras. Les couches soulignées sont dopées silicium avec une densité de 3.10^{17} cm^{-3}

Nous avons dessiné pour cette partie un laser qui émet à 9 µm. La figure.IV.1 montre une période de la zone active de ce laser avec les fonctions d'onde des électrons des états dans la structure. Les états hauts et bas du laser sont en gras. La structure est basée sur le matériau $Ga_{0.47}In_{0.53}As$ comme matériau puits, le $Al_{0.48}In_{0.52}As$ comme matériau barrière le tout étant déposé par épitaxie sur InP. Cette structure est constituée de deux puits dans la partie injecteur La partie active de ce dessin est constituée de quatre puits résultant en un schéma en double phonon. La différence d'énergie entre l'état bas (3) du laser et l'état (1) est de l'ordre de 100 meV. (En effet $\Delta E_{23} = 2.\hbar\omega_o = 54$ meV). Ceci a trois avantages essentiels : 1) le temps de vie de l'état bas du laser est contrôlé par l'émission phonon (de l'ordre de la picoseconde), ce qui assurera un bon vidage de cet état. 2) Ceci permettra aussi une bonne extraction des électrons pour les injecter dans la période suivante sans qu'il y ait une accumulation des électrons. 3) la repopulation thermique de l'état bas de cet état est faible, en effet le rapport de la repopulation thermique à la population de l'état bas ne dépasse pas 2 % à température ambiante (en utilisant la formule du paragraphe I.C.2 du premier chapitre). L'état haut du laser est mis en résonance phonon avec l'état 5 qui est au dessus de lui énergétiquement. Le puits juste après la barrière d'injection est utilisé pour délocaliser la fonction d'onde de l'état haut du laser de telle façon que son recouvrement avec les états de l'injecteur est non négligeable comme c'est le cas dans les dessins classiques. La transition laser est donc légèrement diagonale. Ceci va permettre une bonne injection des porteurs sur l'état haut pour pouvoir atteindre l'inversion de

population entre l'état haut et bas du laser. Elle assure aussi un bon transport des électrons inter-période. Les états les plus hauts en énergie dans la période sont séparés du continuum d'une énergie de l'ordre de 150 meV. Pour diminuer le couplage avec les fonctions du continuum et donc de la fuite des électrons qui pourrait être un point négatif de ce dessin, nous verrons dans la section IV.C qu'une solution simple existe et qui consiste à utiliser une région active à trois matériaux.
La longueur d'une période de cette structure est 342 Å. Dans les calculs des caractéristiques de cette structure que nous avons faits, l'énergie d'un phonon LO est prise égale à 34 meV, la rugosité est caractérisée par un paramètre de corrélation des îlots Δ = 1 Å et un taille caractéristique de Λ = 90 Å (voir chapitre 1 pour les définitions). La taille de l'élargissement optique est prise égale à 15 meV, le recouvrement optique total égal à 0,85 et le nombre de périodes égal à 100.
La figure.IV.2 montre la courbe de gain et la caractéristique courant-tension de cette structure calculées avec le modèle développé.

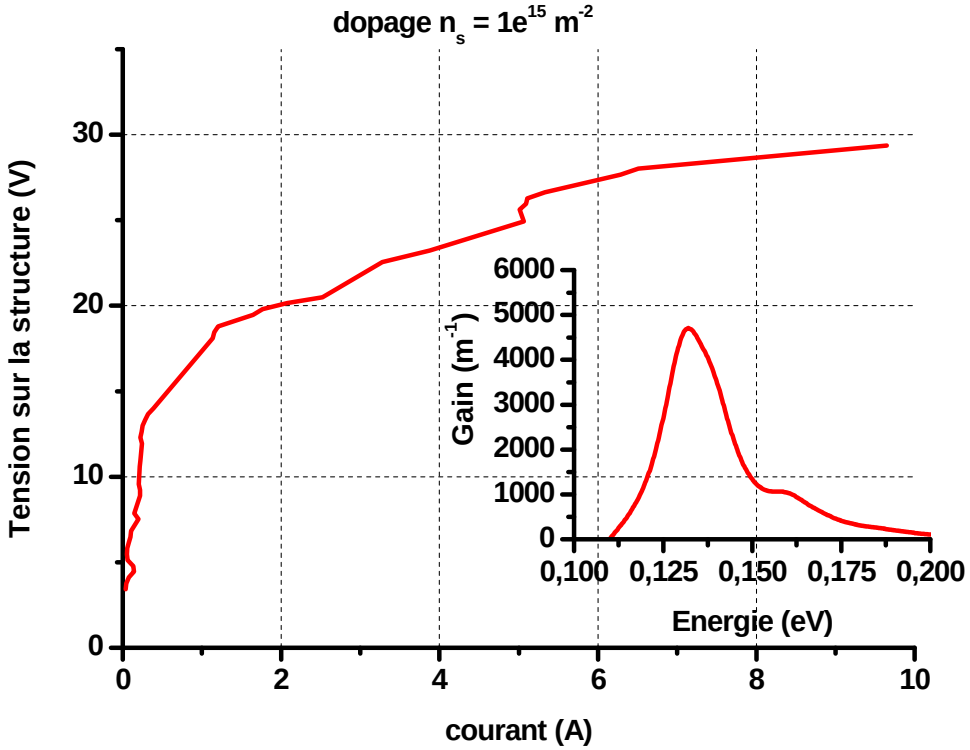


Fig.IV.2 : Caractéristique Courant-Tension calculée pour la structure à injecteur court que nous avons dessiné calculé pour un dopage surfacique de ns = 1.10^{15} m^{-2}. L'insert montre la courbe du gain calculé de la structure pour un champ appliqué à la structure de 68 kV/cm. Le calcul est fait pour une température de réseau de 300 K et un laser de longueur 3mm et de largeur 14 µm

On remarque d'après cette figure que diminuer la taille de la période va se répercuter sur les tensions applicables à la structure. Ainsi les tensions de fonctionnement sont 1 à 2 fois plus grandes dans ce dessin que dans les dessins plus classiques. La courbe de gain montre que le maximum de gain est obtenu pour une énergie de l'ordre de 135 meV soit une longueur d'onde de 9,18 µm.
La figure.IV.3 montre la comparaison entre les caractéristiques de sortie calculées pour la structure que nous avons dessinée et la structure classique à injecteur long [4]. Nous avons

pris en compte 100 périodes pour la structure à injecteur court et 35 périodes pour celle avec injecteur long.
La figure.IV.3.a montre une comparaison entre la densité de courant en fonction de la tension appliquée à la période. On voit que pour une même tension par période, le courant qui traverse la structure à injecteur court est plus grand que celle de la structure classique. En d'autres termes, la résistance équivalente d'une période est plus petite pour le dessin ayant une période plus courte. Si on note τ_{trans} le temps de passage de l'électron dans la période, ce temps peut être écrit dans une première approximation comme suit

$$\tau_{trans} = \tau_4 + \tau_3 + \tau_{inj} \qquad \text{(IV.2)}$$

Où τ_4 (resp τ_3) est le temps de vie de l'état haut (resp. de l'état bas du laser) et τ_{inj} est le temps que passe l'électron dans la région injecteur. En diminuant la taille de l'injecteur ce dernier temps sera plus petit et donc le courant qui traverse la période $j = \frac{q.n_s}{\tau_{trans}}$ (n_s étant le dopage par période) devient plus grand pour une même tension appliquée à la structure.
La figure.IV.3.b montre la comparaison de la caractéristique Puissance-courant pour ces deux structures. Le recouvrement est pris égal à 0,5 pour la structure à injecteur long (35 périodes), les pertes de guide égales à 2,5 cm^{-1} pour les deux structures. Un des miroirs est traité haute réflectivité (R_2 = 0,95) alors que le miroir de sortie est laissé sans traitement (R_1 = 0,3). La longueur de la cavité est prise égale à 3 mm et sa largeur à 10 µm. Cette figure montre que la nouvelle structure que nous avons dessinée présente deux avantages essentiels par rapport au dessin classique à injecteur long.
D'une part, ce nouveau dessin présente un courant seuil plus petit. D'autre part, on voit que le rendement différentiel du nouveau dessin est amélioré de l'ordre de 50 % par rapport à celle du dessin classique. Ceci s'explique par une amélioration du rendement en tension de la structure à injecteur court par rapport à celle ayant un injecteur long comme le montre la formule (I.7). En effet la taille en énergie de l'injecteur $\Delta_{inj} = E_{\text{bas injecteur}} - E_{1\ (\text{période-1})}$ ne dépasse pas 30 meV dans le régime de fonctionnement du laser pour le nouveau design alors qu'elle est de l'ordre 70 meV ($\sim 2.\hbar.\omega_{Lo}$) dans le l'ancien design.

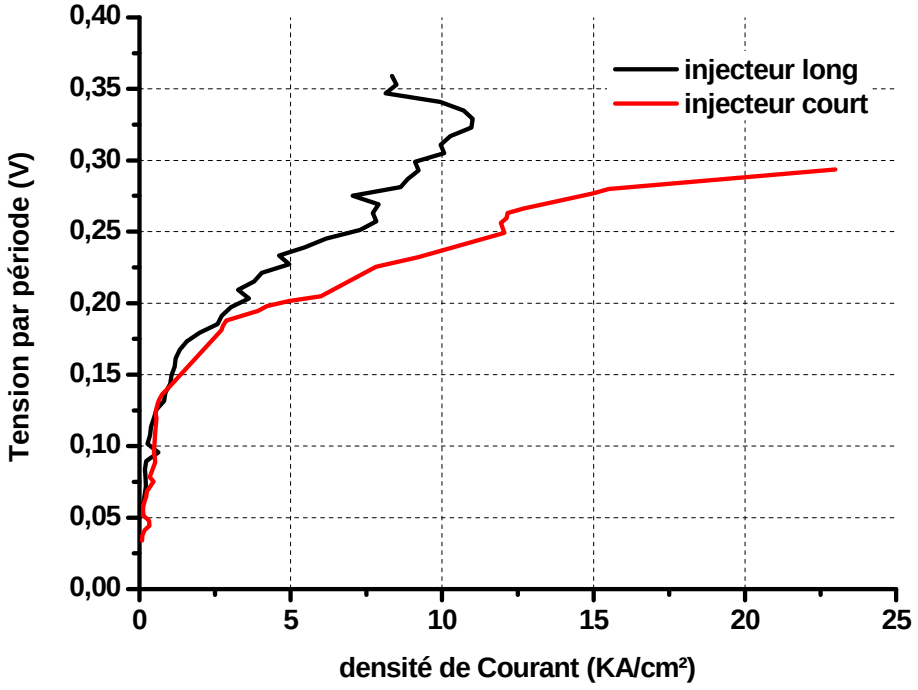


Fig.IV.3.a : Comparaison des caractéristiques Tension-courant calculées pour la structure à injecteur court que nous avons dessinée (courbe rouge) et pour le dessin classique pour un dopage surfacique de ns = 1.10^{15} m^{-2}

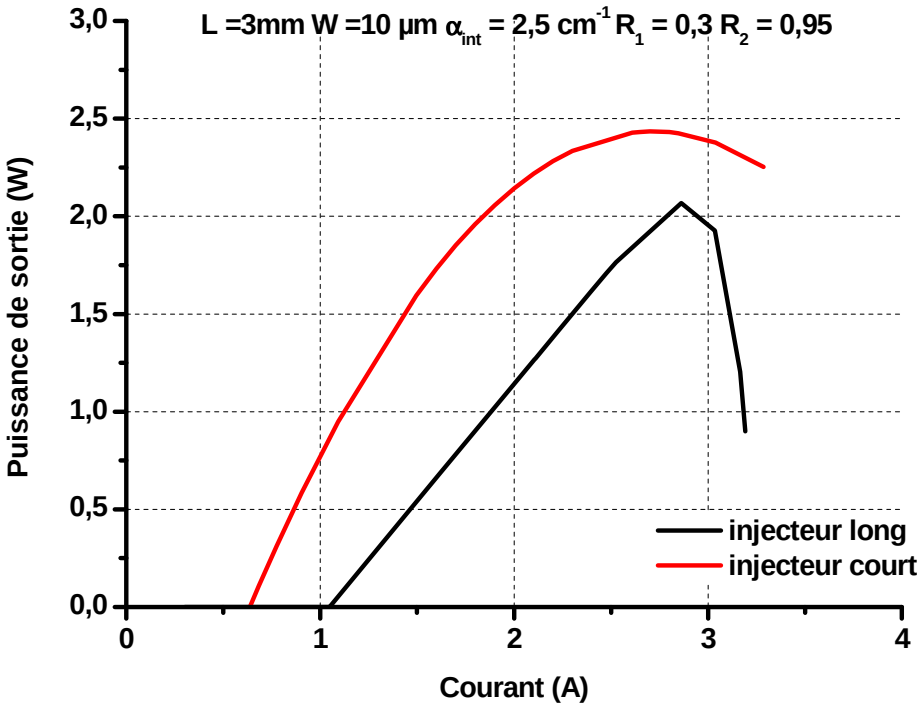


Fig.IV.3.b : Comparaison des caractéristiques Puissance-courant calculées pour la structure à injecteur court que nous avons dessinée (courbe rouge) et pour le dessin classique pour un dopage surfacique de ns = 1.10^{15} m^{-2}

IV.B.1. Optimisation de la région active

Dans cette partie nous nous intéresserons à l'optimisation de cette structure en termes de puissance de sortie. Dans une première partie nous nous focaliserons sur l'optimisation de la zone active. Pour cela nous nous baserons sur l'étude que nous avons faite dans le chapitre précédent et où nous avons montré que la saturation du gain influe de façon très importante sur la puissance de sortie des LCQ. Nous avons en particulier déterminé une figure de mérite (formule (III.77)). Dans la suite, nous montrerons comment elle va permettre d'optimiser le laser en termes de puissance de sortie.

IV.B.1.a. Optimisation en saturation de gain

Dans le dessin de la région active d'un laser à cascade quantique la barrière qui sépare l'injecteur de la région où la transition active a lieu joue un rôle important dans le fonctionnement du LCQ. En effet, pour que les électrons puissent transiter dans la structure, l'état haut du laser d'une part et l'état bas de l'injecteur d'autre part doivent être alignés en énergies. La barrière d'injection contrôle le couplage entre ces deux états et donc a une influence sur l'injection de l'état haut du laser.
Pour voir l'effet de cette barrière dans les propriétés optique et électronique du dessin que nous avons décrit dans le paragraphe précédent, nous avons fait varier l'épaisseur de cette couche dans la structure entre 17 Å et 30 Å. Tous les autres paramètres de la structure sont inchangés. La figure IV.4 montre la variation de l'énergie du maximum du gain dans la structure en fonction de la tension appliquée à une période de la structure, pour quatre différentes épaisseurs de barrière d'injection.

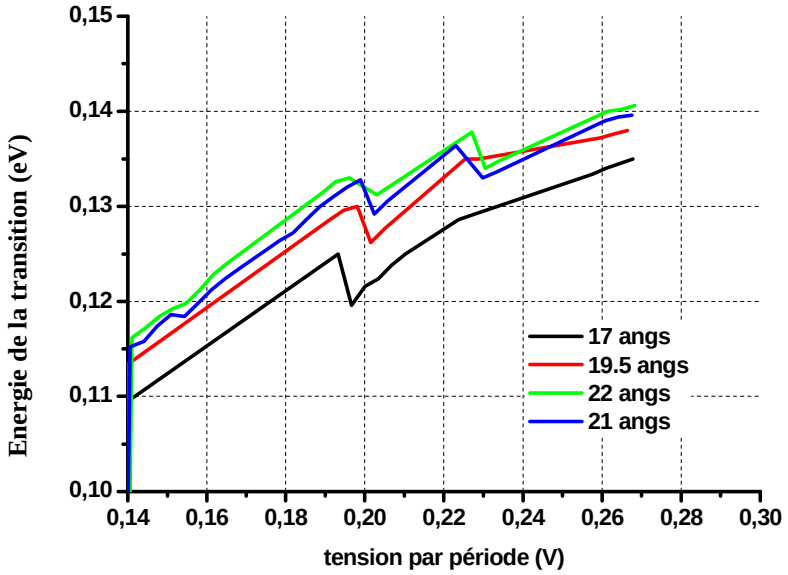


Fig.IV.4 : L'énergie du maximum du gain calculé pour quatre structures lasers : la différence entre ces quatre lasers est la taille de la barrière d'injection

D'après cette figure, on voit que la longueur d'émission des lasers est peu dépendante de la taille de la barrière d'injection. En effet elle est de 9,5 µm pour une épaisseur de barrière d'injection Lb = 17 Å et de 9,2 µm pour Lb = 22 Å. Soit une variation de moins de 2 % de la longueur d'onde pour une variation d'à peu prés de 30 % de l'épaisseur de la barrière d'injection. La figure.IV.5 représente la variation de la figure de mérite donnée par la formule (III.77) du chapitre précédent en fonction de l'épaisseur de la barrière d'injection pour deux champs appliqués à la structure E = 60 kV/cm et 70 kV/cm.

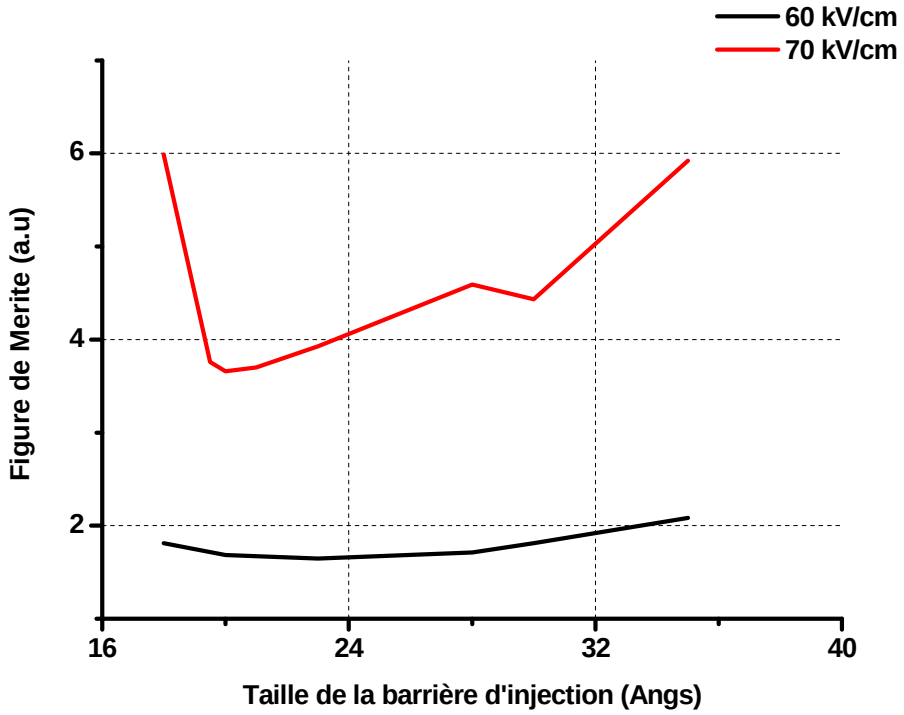


Fig.IV.5: Variation de la figure de mérite en fonction de la taille de la barrière d'injection pour deux champs appliqués à la structure

D'après cette figure, on voit que pour les deux champs appliqués à la structure, la courbe de la figure de mérite passe par un minimum en fonction de la taille de la barrière d'injection. Rappelons que cette figure de mérite est proportionnelle, à un coefficient prés, au coefficient de saturation de gain dans la structure. Donc minimiser ce facteur revient à minimiser la saturation du gain dans la structure. Ce résultat suggère qu'il y a un optimum dans la puissance de sortie pour une épaisseur de la barrière d'injection qui se trouve entre 24 Å et 19 Å. Les figures IV.6 et IV.7 résument les caractéristiques de sortie du laser pour différents lasers qui se différencient par l'épaisseur de la barrière d'injection (Lb est prise entre 22 et 17 Å). Les calculs ont été faits pour une température de réseau de 300 K. L'élargissement du gain est pris égal à 15 meV. La température électronique est prise en compte à travers le modèle approché : la résistance thermique électronique est prise égale à R_{the} = 15 K/W et la constante de couplage courant température α_{eJ} = 15 Kcm^2/kA

La barrière d'injection n'a pas d'effet notable sur le courant de sortie pour cette structure. En particulier, les lasers ont la même résistance équivalente. Ceci s'explique par le fait que dans ce dessin la fonction d'onde des électrons dans l'état haut est délocalisée vers les deux niveaux injecteurs. Donc la variation de l'épaisseur de la barrière d'injection va avoir un effet très faible sur les caractéristiques linéaires du laser. Pour appuyer cette affirmation nous avons

tracé dans la figure.IV.6.b, le gain linéaire de ces lasers en fonction de la tension par période appliquée à la structure. On voit que la courbe obtenue est presque inchangée entre les différents lasers avec une pente dg/dV et un maximum de gain sensiblement égaux entre les trois lasers.

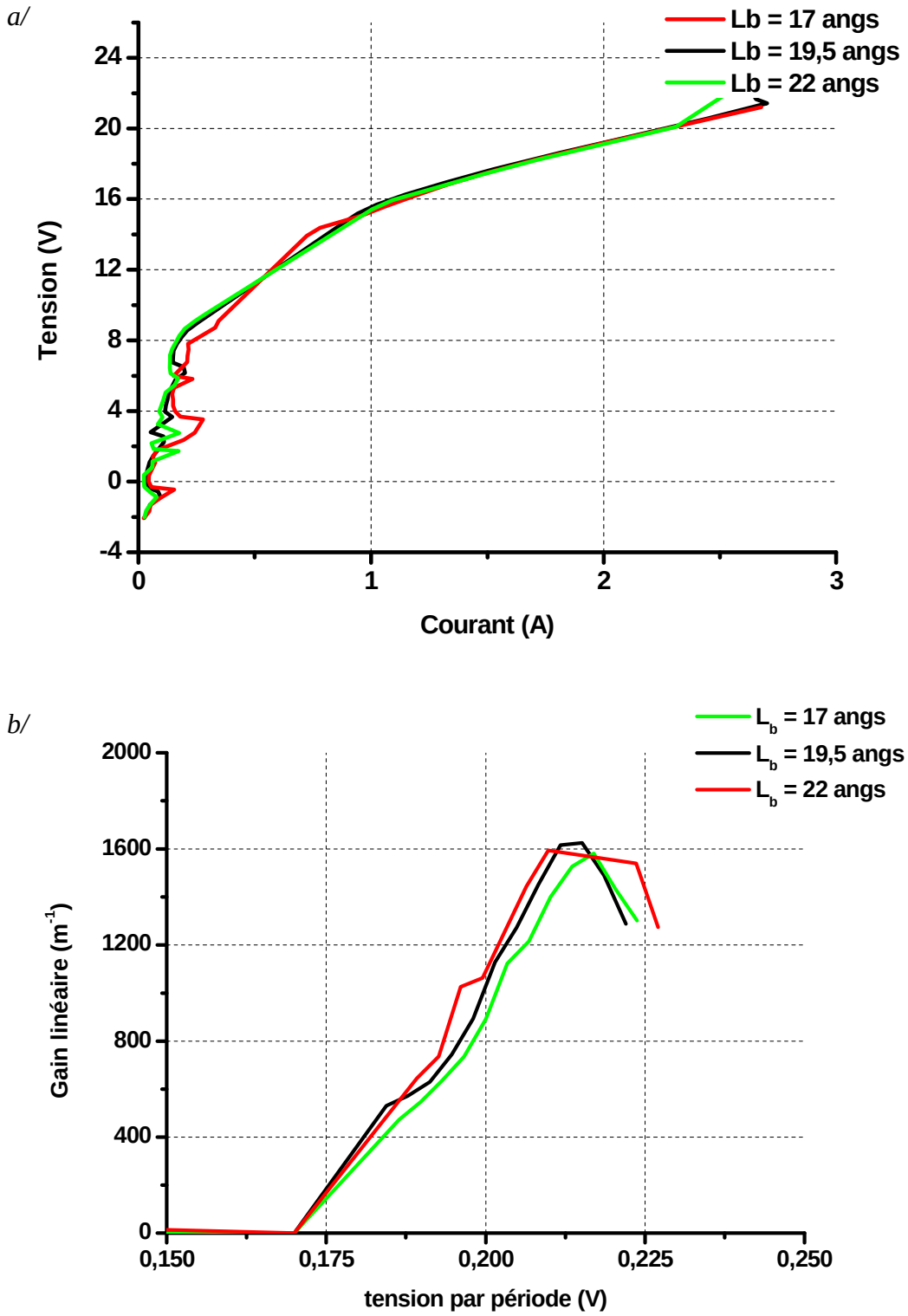


Fig.IV.6: Calcul de la caractéristique linéaire courant tension et gain tension pour les trois lasers (la différence entre les trois lasers est la taille de la barrière d'injection)

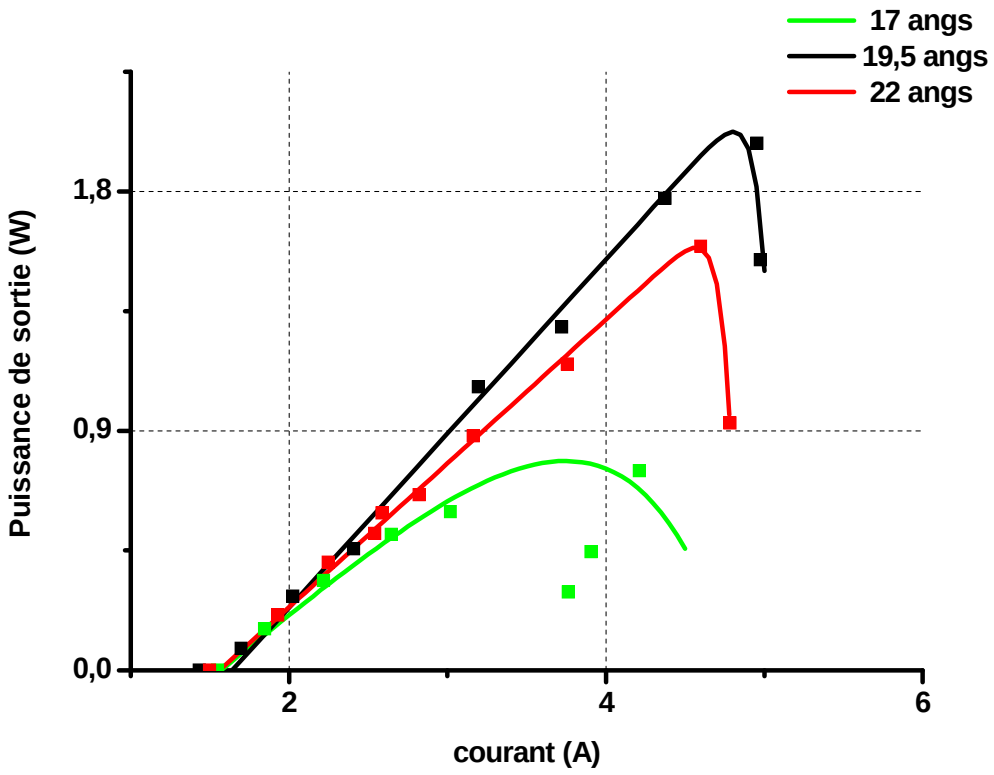


Fig.IV.7 : Caractéristique Puissance-courant calculée pour les trois lasers

La figure.IV.7 montre l'effet de la barrière d'injection sur la puissance de sortie du laser. Dans ces calculs, le recouvrement optique est pris égal à 0,85. Les miroirs sont supposés sans traitement particulier (HR ou AR), les pertes supplémentaires du guide sont prises égales à 8 cm^{-1}. La cavité laser est de longueur 3 mm et de largeur 14 µm. Les points représentent le calcul total selon le modèle auto-cohérent. Les courbes en ligne sont les meilleurs fits de ces points selon une formule donnée dans l'annexe suivant. On voit que contrairement à ce que nous avons vu pour les caractéristiques linéaires, l'effet de la barrière d'injection est important sur la puissance de sortie. On remarque en particulier que le seuil de courant ne change pas entre les trois structures alors que la puissance de sortie passe par un maximum de sortie (pour ce calcul particulier pour une épaisseur de barrière d'injection de 20 Å). Ceci s'explique par la variation des effets non linéaires de la saturation de gain dans la structure comme nous l'avons remarqué plus haut en discutant la variation du facteur de mérite en fonction de l'épaisseur de la barrière d'injection. Tant qu'on est en dessous du seuil, les effets non linéaires de la saturation de gain sont négligeables, les structures se comportent alors de la même façon. Au-delà du seuil, le couplage électrons photons devient prépondérant, et influe sur la puissance de sortie du laser. La structure présentant le plus faible facteur de saturation de gain aura la plus grande puissance de sortie.

Pour valider cette approche d'optimisation de la puissance en utilisant le facteur de mérite nous avons demandé la réalisation au III-V Lab de trois lasers qui diffèrent par l'épaisseur de la barrière d'injection toutes choses étant égales par ailleurs. Dans ce qui suit nous décrivons, dans un premier temps de manière théorique le guide d'onde adopté pour cette structure. Ensuite les étapes technologiques pour la fabrication de ces structures. Nous finirons par une étude expérimentale des trois lasers réalisés et la comparaison des résultats obtenus avec le modèle.

IV.B.1.b. Etude théorique du guide d'onde

Le tableau.IV.1 montre l'ensemble des couches dans la direction d'épitaxie d'un des trois lasers dont nous avons demandé la fabrication. On retrouve dans ce tableau les deux parties essentielles constituant le laser :

1. la zone active de 100 périodes constituée d'une hétérostructure en GaInAs/AlInAs.
2. Le guide d'onde constitué d'un cladding inférieur en InP dopé à 1.10^{17} cm^{-3} et le cladding supérieur constitué d'une succession de couches différemment dopées. Comme nous l'avons discuté dans le chapitre précédent le guide d'onde est un élément important dans le fonctionnement du laser et doit répondre à plusieurs contraintes en même temps. Le critère de choix du matériau constituant le guide d'onde à ce stade est qu'il doit être un bon conducteur thermique et électrique. Notre choix est fait pour l'InP qui présente une faible résistance thermique et dont la conductivité peut être modulée en modulant son dopage. L'inconvénient de cette configuration est le faible contraste d'indice entre l'InP (n~3,1) et la zone active (n~3,4). Etant donné que le substrat est beaucoup plus grand que la taille de la zone active, le mode optique peut s'étaler dans le substrat sans qu'il y ait beaucoup de pertes. Le cladding inférieur est alors constitué d'une simple couche d'InP dopée à 1.10^{17} cm^{-3}. Ceci n'est pas le cas pour la partie supérieure du guide. En effet, d'une part il y a une limitation technologique qui ne nous permet pas d'atteindre des tailles semblables à celle du substrat. D'autre part, au dessus de ce cladding supérieur, on va déposer une couche de contact de GaInAs fortement dopée et une couche de métal pour créer le contact. Cette zone peut être responsable de grandes pertes pour le mode optique s'il l'atteint. Le cladding supérieur ne peut pas alors être aussi simple que le cladding inférieur. On doit empêcher le mode optique d'y arriver en utilisant une couche d'InP fortement dopée appelée couche plasmon. Cette couche présente un fort contraste d'indice avec la couche InP faiblement dopée. Avec cette couche d'InP plasmon les pertes calculées du guide sont de l'ordre de 2 cm^{-1}, alors qu'elles sont de l'ordre de 6 cm^{-1} pour un cladding supérieur sans cette couche. Finalement, il existe deux couches un peu particulières au guide d'onde infrarouge. Ce sont des couches antiguidantes. Elles sont reconnaissables sur le profil d'indice de la figure.IV.8.a par des indices plus grands que ceux de la zone active. Ces couches ont pour but d'homogénéiser le champ électromagnétique le long de la zone active et d'augmenter le recouvrement du mode optique. Il faut cependant que l'épaisseur de cette couche ne soit pas grande car son indice optique est supérieur à celui de la zone active et elle constitue en même temps une barrière thermique. La figure.IV.8.b montre que la variation du paramètre de confinement optique en fonction de la taille de ces couches passe par un maximum. Un juste milieu est donc à trouver. Nous avons alors choisi une épaisseur de l'ordre 300 Å.

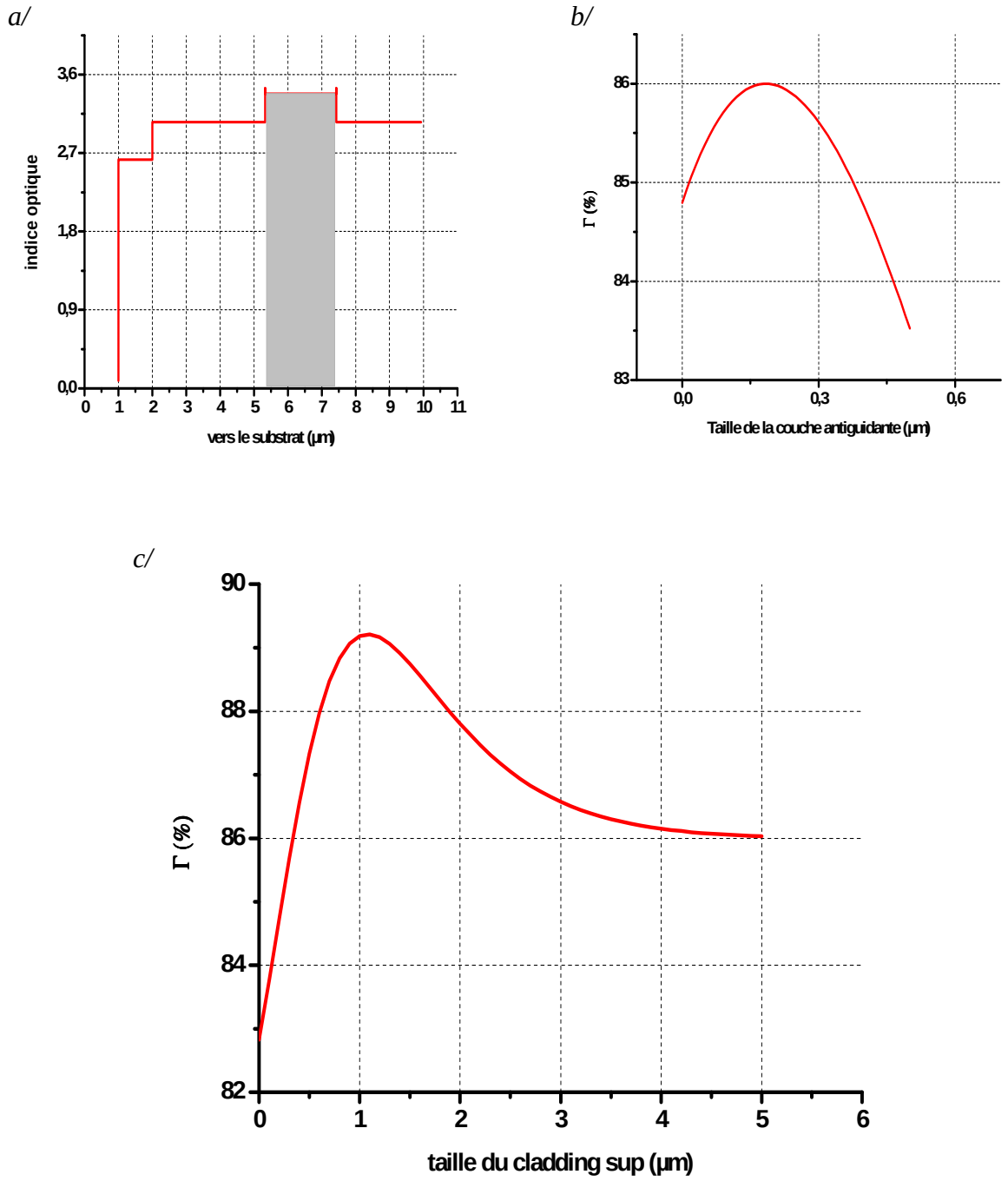


Fig.IV.8 : Etude du guide d'onde proposée. a : profil d'indice dans la direction transverse du guide d'onde. b : effet des couches antiguidantes sur le recouvrement optique. c : recouvrement en fonction de la taille du cladding.

Layers	Loop	Doping	**Material**	Thickness
MOCVD	Cladding sup	n : 2e19cm-3	**$GaIn_{0.53}As$:Si**	1000 Å
		n : 2.0e19 cm-3	**InP:Si**	1.0 µm
		n : 1e17cm-3	**InP:Si**	3.3 µm
		n : 6e16cm-3	$GaIn_{0.53}As$:Si	100 Å
LOC (fin MBE)		n : 6^{e}16 cm-3	**$GaIn_{0.53}As$:Si**	200 Å
Digital Grading I 3415 nm	34.15nm x 100		**$Al_{0.48}In_{0.52}$ As**	9
			$Ga_{0.47}In_{0.53}$ As	50
			$Al_{0.48}In_{0.52}$ As	30
		n : 3e17cm-3	**$Ga_{0.47}In_{0.53}$ As:Si**	29
		n : 3e17cm-3	**$Al_{0.48}In_{0.52}$ As:Si**	25
			$Ga_{0.47}In_{0.53}$ As	29
			$Al_{0.48}In_{0.52}$ As	**19.5**
			$Ga_{0.47}In_{0.53}$ As	19
			$Al_{0.48}In_{0.52}$ As	7
			$Ga_{0.47}In_{0.53}$ As	58
			$Al_{0.48}In_{0.52}$ As	9
			$Ga_{0.47}In_{0.53}$ As	57
Digital Grading II			**$Al_{0.48}In_{0.52}$ As**	9
			$Ga_{0.47}In_{0.53}$ As	50
			$Al_{0.48}In_{0.52}$ As	30
			$Ga_{0.47}In_{0.53}$ As	29
			$Al_{0.48}In_{0.52}$ As	25
LOC (début MBE)		n : 6^{e}16 cm-3	**$GaIn_{0.53}As$:Si**	400 Å
Cladding inférieur		n : 1e17cm-3	**InP:Si**	2.5 µm

Tableau.IV.1 : Description des couches du laser fabriqué (Lb = 19,5)

Finalement, la figure.IV.8.c montre la variation du recouvrement optique en fonction de l'épaisseur du cladding supérieur. On voit qu'elle passe par un maximum. Aux alentours de 89 % pour une taille de cladding de l'ordre de 1 µm. Nous avons choisi de travailler avec des épaisseurs de l'ordre de 3,3 µm pour éloigner la couche InP plasmon de la zone active pour diminuer les pertes par porteurs libres qui ont lieu dans cette couche fortement dopée.

En conclusion nous avons montré par cette étude du confinement vertical qu'il est possible d'obtenir un guide optique avec de faibles pertes optiques calculées (~2 cm^{-1}) et un fort paramètre de recouvrement Γ (~85 %). Dans la partie suivante nous allons parler des étapes technologiques pour déterminer la forme du guide dans la direction transverse.

IV.B.2. Résultats expérimentaux et comparaison avec le calcul :

Dans le paragraphe précédent nous avons montré par une étude théorique la possibilité de l'optimisation de la puissance de sortie du laser. Afin de démontrer que cette approche est tout à fait valide, nous avons fait réaliser trois lasers dont la région active est basée sur le dessin décrit dans le paragraphe IV.B, la barrière d'injection ayant une épaisseur différente pour chacun des trois lasers toutes choses étant identiques par ailleurs. Le tableau suivant montre les paramètres de ces lasers.

Tableau.IV.2 : description des différents lasers fabriqués

Laser	Taille de la barrière d'injection (Å)	Longueur (mm)
LB1	17	3
LB2	19,5	3
LB3	22	3

Dans un premier temps, nous décrivons succinctement les étapes technologiques qui nous permettront la fabrication de ces lasers. Ensuite, nous nous intéresserons à la caractérisation expérimentale de ces lasers. Nous verrons en particulier l'effet du taux de remplissage et de la taille transverse du ruban sur les caractéristiques de sortie de ces lasers. Finalement nous discuterons l'accord entre la théorie et l'expérience.

IV.B.2.a. Réalisation pratique et étapes technologiques

La figure.IV.9 montre une image de face prise en microscopie électronique à balayage et une représentation schématique des matériaux déposés pour assurer le confinement latéral du mode. Dans notre cas la longueur du ruban est de 3 mm et sa largeur est de 10 µm.

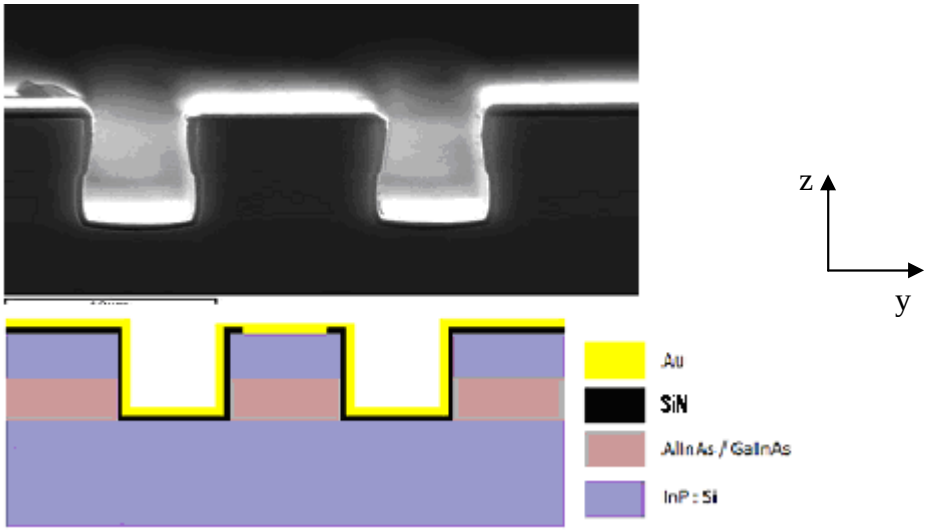


Fig.IV.9 : Structure en ruban du laser : haut : image prise par MEB. bas : représentation schématique des différentes couches constituantes du laser

Cette structure est obtenue en cinq étapes (réalisation par III-V Lab) :

1 Génération du ruban à l'aide des procédés de lithographie optique. Dans un premier temps une couche de 1µm d'épaisseur d'oxyde de silicium est déposée sur toute la plaque. Une résine positive est déposée en dessus (~1,2 µm). Celle déposée sur les parties que nous allons graver est éclairée par un faisceau UV. L'oxyde de silicium dans ces parties est ensuite enlevé par procédé gravure RIE. Une gravure en plasma chloré ICP d'une profondeur de 5 µm vient finir cette étape de dessin du ruban

2 Isolation pour génération de contact et confinement de courant. La première étape dans ce cas est le retrait de l'oxyde de silicium par gravure RIE. Ensuite, un diélectrique est déposé sur le ruban et ses faces latérales. Il a pour fonction d'isoler électriquement le reste de la structure. Dans les LCQ, deux types de diélectrique peuvent être utilisée : l'oxyde de silicium (SiO_2) ou le nitrure du silicium (SiN). Le choix de l'un ou l'autre de ces diélectriques dépend de la longueur d'émission du laser. La figure.IV.10 donne le spectre d'absorption des systèmes SiO_xN_y ($c = x/(x+y)$). On voit que dans le cas particulier des lasers que nous avons dessinés et émettant dans la bande III autour de 9 µm, il est préférable d'utiliser le nitrure car son maximum d'absorption est loin de la longueur d'onde du laser, alors que le maximum d'absorption l'oxyde du silicium en est tout proche. L'utilisation de ce dernier peut alors engendrer des pertes importantes pour le mode optique.

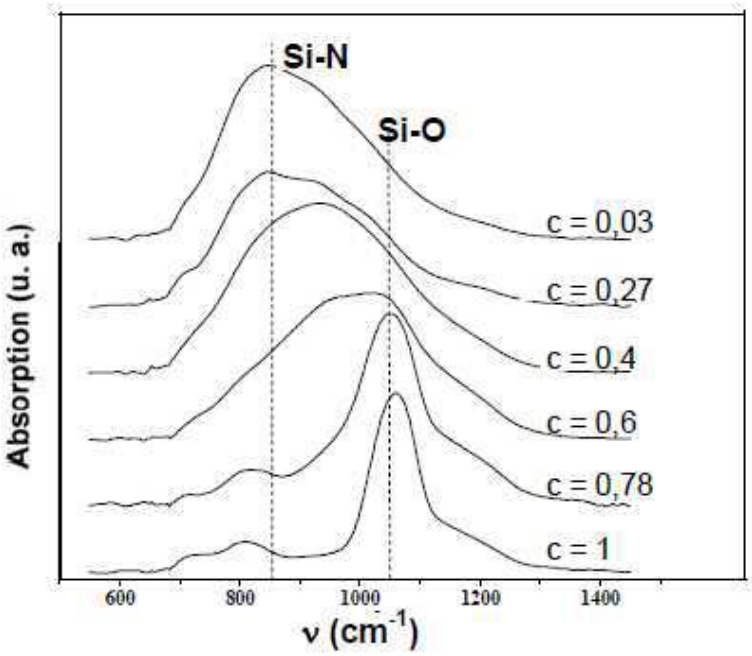


Fig.IV.10 : spectre d'absorption du SiNxOy

L'épaisseur de la couche de diélectrique est de l'ordre de 500 nm. Cette étape est finie par une lithographie de la face de dessus du ruban pour placer les contacts

3 Génération du contact. Le contact est constitué par dépôt des couches Titane (Ti)-Platinium (Pt)-Or (Au) avec respectivement les épaisseurs suivantes 500 Å – 730 Å et 3500 Å.

4 Amincissement et métallisation de la face arrière du laser avec les mêmes matériaux Ti-Pt-Au avec les épaisseurs suivantes 3000 Å - 250 Å et 2500 Å respectivement.

5 La dernière étape consiste à cliver les structures et à les monter sur une embase en AlN. Lorsque la zone active est collée directement sur l'embase on parle d'un montage Epilayer-down, alors que si c'est le substrat qui est collé à l'embase on parle d'Epilayer-UP. Dans notre cas les puces sont montées Epilayer-UP. Avant cette étape, les facettes peuvent être traitées (HR ou AR). Dans notre cas nous les avons laissées sans traitement particulier.

IV.B.2.b. Résultats expérimentaux

Dans cette partie, nous avons caractérisé expérimentalement les trois structures lasers. On note que tous les lasers que nous avons pu tester fonctionnent à température ambiante en régime pulsé.

1. Effet de la taille transverse du ruban

La largeur du ruban est un des paramètres importants de la structure qui peuvent influencer le fonctionnement du composant. Généralement, quand cette largeur est diminuée, il peut y avoir un courant de fuite latéral et une augmentation des pertes du guide d'ondes par suite des effets de diffusion du mode optique sur les rugosités latérales du guide d'onde. Suivant un modèle

de courant introduit par Hu et al [6], on peut écrire le courant qui traverse la structure comme suit :

$$I = J.L.w + I_{leak}(w) \qquad \text{(IV.3)}$$

Dans cette équation J est la densité de courant mesurée et I_{leak} est le courant de fuite latéral qui est contrôlé par la diffusion latérale des porteurs dans la cavité laser.
Une attention particulière doit être donnée au procédé technologique. Pour cela nous avons testé plusieurs lasers avec différentes largeurs de ruban de 14 µm à 4 µm. La figure IV.11, montre la caractéristique Courant-tension du laser LB2 pour une température de fonctionnement de 300 K et un taux de remplissage de 1 % (fréquence de 100 kHz, et une durée de pulse de 100 ns). Le fait que le courant mesuré est non nul à tension nulle appliquée à la structure est probablement dû à des erreurs de mesures ou de lecture sur l'oscilloscope, ce qui rend cette partie de la courbe non exploitable (0<I<0,1 A).
On remarque les faibles valeurs de courant de seuil et les fortes tensions de fonctionnement expérimentales (de l'ordre de 20 V) quelle que soit la largeur du ruban. Ceci est dû à la diminution de la taille de la période élémentaire dans la structure et confirme les calculs que nous avons faits dans le paragraphe IV.B.1.

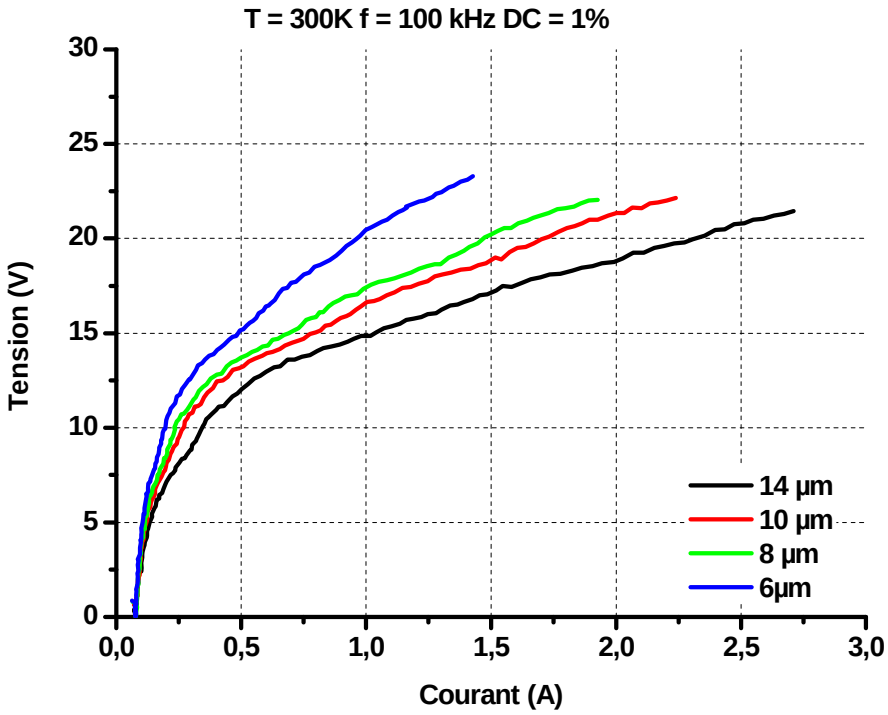


Fig.IV.11 : Caractéristique courant-tension du laser LB 2 en fonction de la largeur du ruban

D'après les résultats expérimentaux, le courant qui traverse la structure est proportionnel à la largeur du ruban. En termes de densité de courant, ces quatre lasers montrent une caractéristique densité de courant-tension presque identique. En utilisant la formule (IV.3) on peut conclure de cette observation que le courant de fuite latéral peut être négligé dans nos composants. La distribution électronique dans la direction latérale est peu affectée par la dimension latérale non infinie des composants. Nous pourrons ainsi la considérer comme homogène dans cette direction. Ceci confirme ainsi la bonne qualité du procédé technologique

et aussi l'hypothèse que nous avons faite dans notre modèle qui consiste à négliger le courant de diffusion latéral dans la cavité laser.
Nous avons testé pour chaque largeur de ridge deux puces. Nous les avons comparées en termes de puissance de sortie et de courant au seuil. Nous avons trouvés une bonne reproductibilité des résultats pour toutes les puces de même largeur. Les résultats d'une telle comparaison pour le laser LB1 ayant 14 µm de largeur est visible dans la figure suivante. On voit que la caractéristique Puissance-courant des lasers est presque inchangée entre les deux puces.

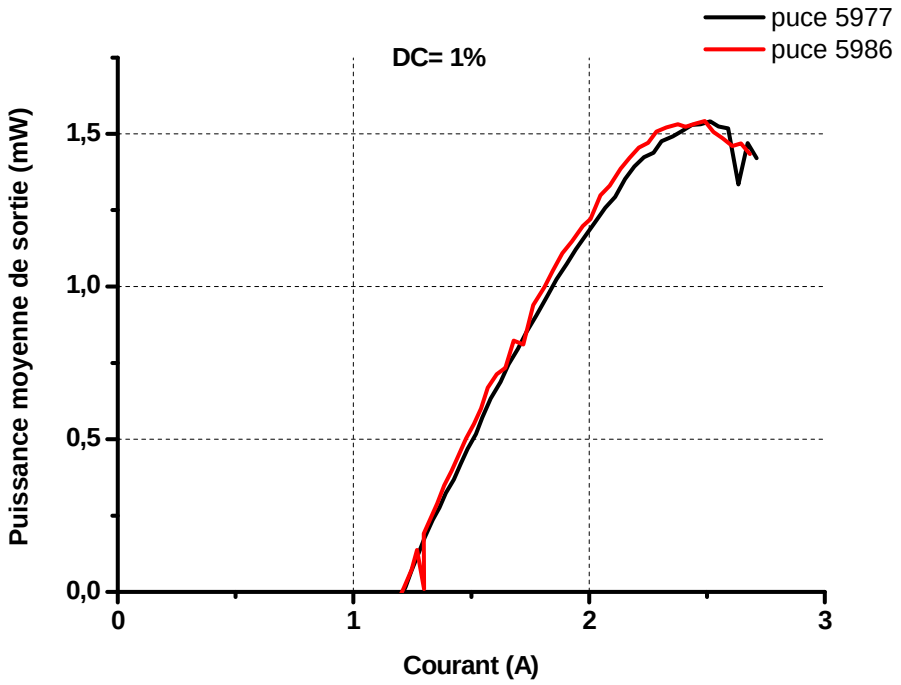
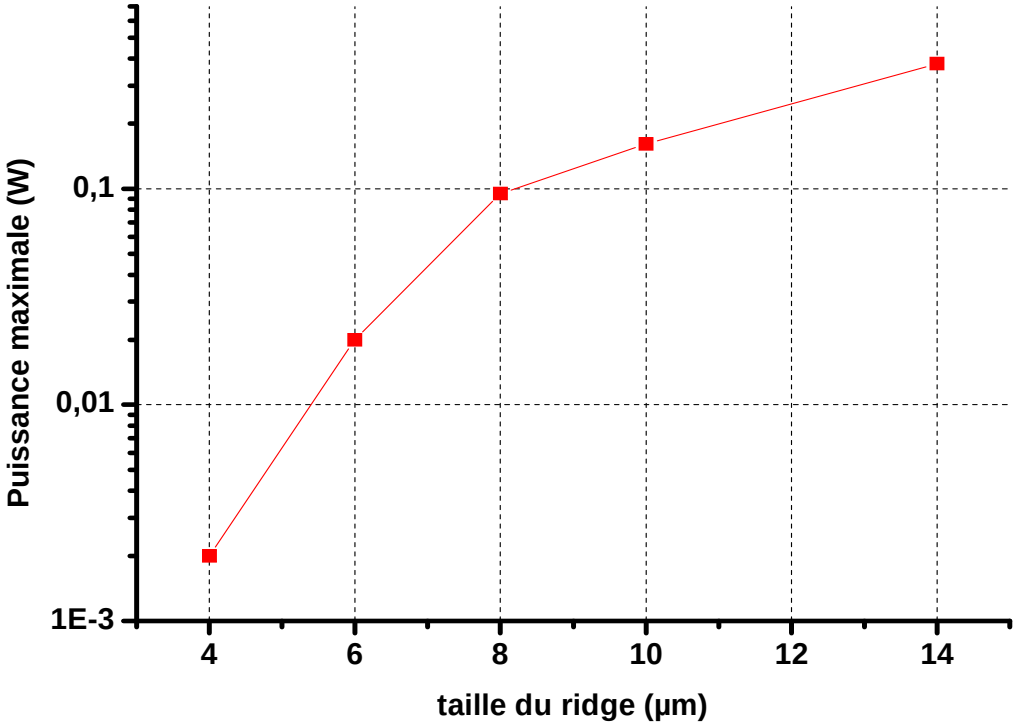


Fig.IV.12 : Comparaison entre les moyennes puissances de sortie des deux puces correspondant au même laser (DC = 1 %)

L'effet de la taille du ruban sur les caractéristiques optiques du laser ne peut cependant pas être négligé. La figure.IV.13 montre la variation de la puissance maximale et de la densité de courant du composant en fonction de la largeur du ruban.
On remarque que ces deux paramètres dépendent fortement de la largeur du laser. En particulier, comme le montre la figure.IV.13.a, la puissance varie rapidement en fonction de la largeur du laser (et pas linéairement comme on pourrait l'attendre). La densité de courant quant à elle décroît en fonction de cette largeur. Ces variations peuvent être expliquées par l'augmentation des pertes. En effet plus la largeur du guide diminue plus le recouvrement du mode optique avec la couche de l'isolant en SiN et avec les cotés latérales du guide d'onde est grande. Les pertes par absorption dans la couche SiN ou par diffusion sur la rugosité du guide augmentent causant une augmentation du courant seuil et une diminution de la puissance de sortie.

a/



b/

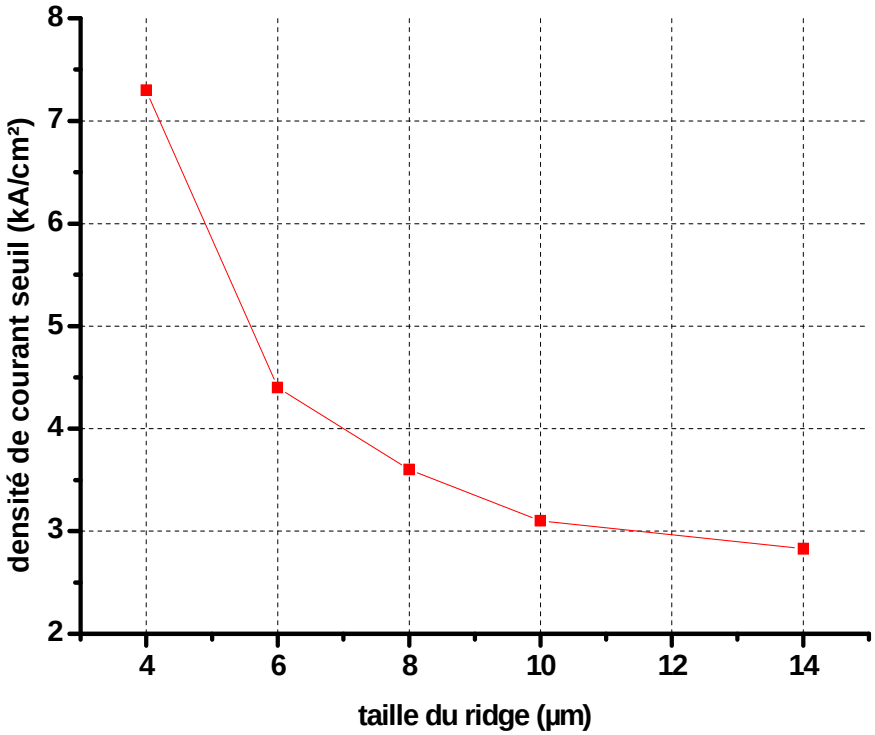


Fig.IV.13 : Variation de la puissance maximale (haut) et de la densité de courant seuil (bas) en fonction de la largeur du laser

2. Effet du rapport cyclique

Un des paramètres qui influence le fonctionnement du laser est la température de la région active du laser. Celle-ci est directement liée à la manière dont la chaleur produite dans le laser est extraite du composant. L'élévation de température est due à la partie de puissance électrique fournie au composant qui n'est pas transformée en puissance optique. Une dissipation inefficace va induire l'augmentation de la température locale dans le composant. Ceci aura pour effet de diminuer la conductivité thermique des matériaux et surtout de dégrader les propriétés du laser en termes de gain et de puissance.
Une des manières qui nous permet de décrire le comportement thermique d'un LCQ et donc de remonter à ses propriétés thermiques, consiste à voir le changement des caractéristiques du laser en réponse à un changement de taux de remplissage ou du rapport cyclique. La figure.IV.14 montre la variation de la caractéristique puissance-pic en fonction du courant qui traverse le laser en fonction du rapport cyclique entre 1 % et 3 % pour le laser LB2 ayant une largeur de ruban de 10 µm. Dans ce cas, nous avons fait varier la longueur temporelle du pulse et gardons fixe la fréquence égale à 100 kHz. On voit que plus le rapport cyclique est grand plus petite est la puissance de sortie et plus grand est le courant seuil du laser. Ceci est bien la signature de l'échauffement de la zone active.

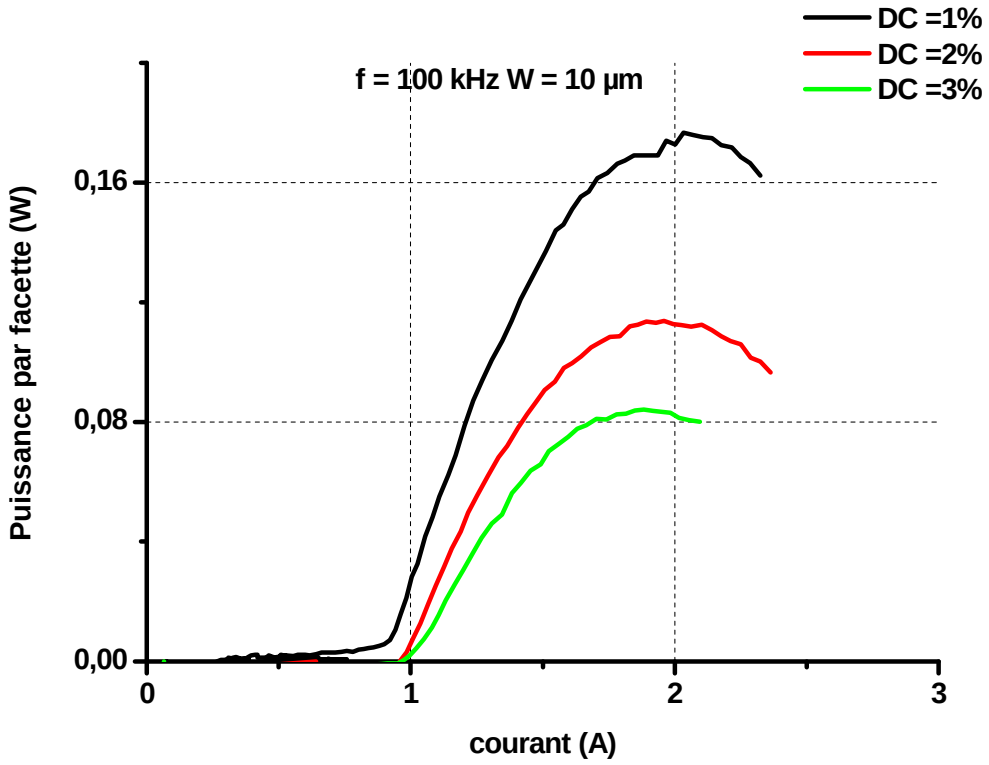


Fig.IV.14 : La puissance de sortie du laser en fonction du rapport cyclique à fréquence fixe

De ces mesures nous pouvons extraire les propriétés thermiques du composant. La variation du courant seuil en fonction de la différence de température entre la jonction et la zone active ΔT est donnée par l'équation suivante :

$$I_{th} = I_0.\exp(\frac{\Delta T}{T0}) \qquad \text{(IV.4)}$$

La différence de température est donnée par l'équation (III.75) :

$$\Delta T = R_{th}.\delta.U_{th}.I_{th} = R_{th}.P_{elec_th} \qquad \text{(IV.5)}$$

(La partie optique est négligée car on suppose que la puissance optique est négligeable au seuil du laser), δ est le rapport cyclique, P_{elec_th} est la puissance électrique dissipée au seuil. La figure.IV.15 montre la variation du courant seuil en fonction de la puissance électrique dissipée à l'intérieur du composant au seuil. Le fit avec une fonction de type (IV.4) donne les valeurs de fit suivante $I_0 = 0,89$ *A et* $R_{th} = 18$ *K/W (pour une* T_0 *déterminée théoriquement de l'ordre de 100 K).* Un calcul 2D complet de la résistance thermique dans les LCQ [7], montre que le transfert thermique dans l'hétérostructure est bien décrit avec un tenseur de conductivité ayant deux composantes : k// est la conductivité de l'hétérostructure dans le plan des couches donnée par les conductivités des matériaux en volume et $k^{\perp}$ est la conductivité thermique dans le plan perpendiculaire des couches. Ce calcul montre que la résistance thermique équivalente de l'hétérostructure est imposée par celle dans la direction de croissance du matériau et s'écrit comme suit :

$$R_{th}(T) = R_{thpuits}\frac{A}{A+B} + R_{thbarrière}\frac{B}{A+B} + \frac{N}{A+B}.TBR = R_{th_mat} + R_{th_kapitza} \qquad \text{(IV.6)}$$

Dans cette formule R_{th} est la résistance thermique du matériau que ce soit le matériau barrière $Rt_{thbarrièrre}$ ou puits $R_{thpuits}$, A (resp.B) sont la somme des épaisseurs des couches du matériau puits (resp. barrière), et N le nombre d'interfaces dans le laser et TBR est la résistance Thermique de Kapitza due à la discontinuité des propriétes themiques dans la direction d'épitaxie suite à l'existence de plusieurs interfaces dans cette direction.
Le calcul de la résistance équivalente des matériaux sans prise en compte de la résistance de Kapitza donne $R_{th_mat} = 3K/W$ pour une cavité de longueur 3 mm et un ruban de largeur 14 µm. Pour ce calcul nous avons utilisé les valeurs des conductivités thermiques des alliages disponibles dans la référence [8] (k(AlInAs) = 0,16 W/cm K et k(GaInAs) = 0,08 W/cm K). On voit ainsi que la résistance thermique du composant est 6 fois plus grande que la résistance moyenne des deux matériaux.
La détermination de la résistance thermique en utilisant l'effet du changement de la fréquence à durée de pulse constante égale à 100ns (en utilisant la même démarche que dans le cas de fréquence fixe voir figure.IV.16), sur le courant au seuil, donne une résistance thermique calculée de l'ordre de 16 K/W tout à fait comparable à celle déterminée précédemment.
Cette détermination nous permet d'affiner notre simulation, en utilisant cette fois-ci dans le modèle effectif de calcul de la température du réseau et de la température électronique la résistance thermique ainsi calculée.
Pour finir, on voit aussi que la puissance maximale à la sortie du composant est obtenue pour un rapport cyclique de 1 %. C'est l'élévation de température de la région active qui explique cette différence en puissance de sortie entre les rapports cycliques.

Dans la suite, les expériences que nous décrirons seront faites avec un taux de remplissage de 1 %. D'autre part nous utiliserons des largeurs de cavité de 14 µm pour travailler dans des conditions optimales en termes de puissance de sortie.

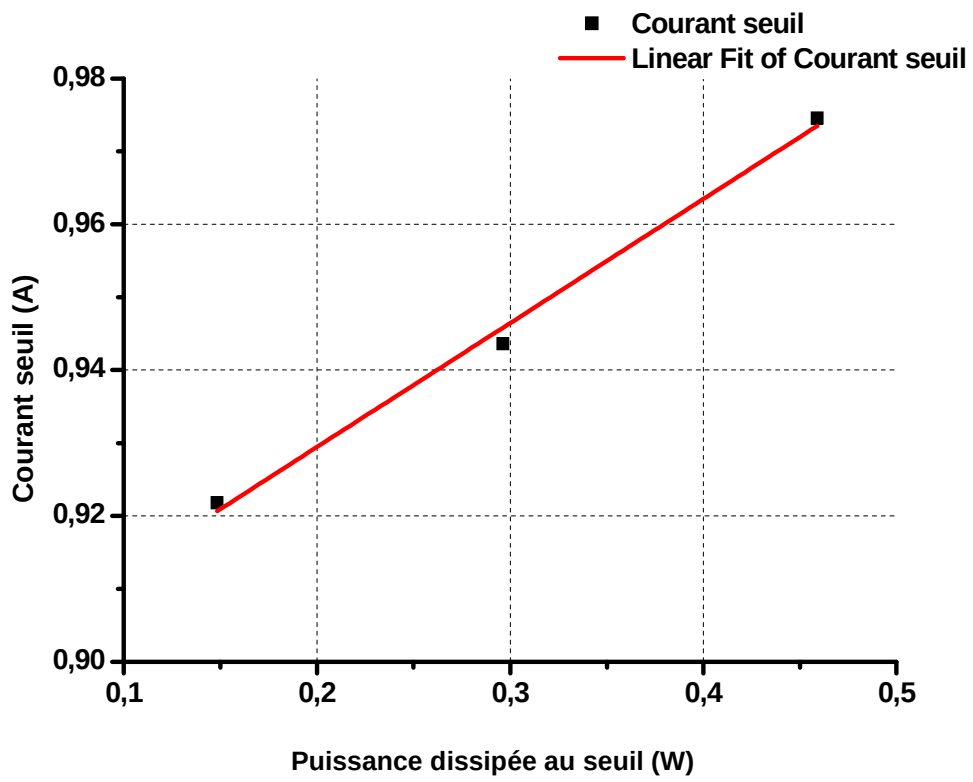


Fig.IV.15 : Le courant seuil en fonction de la puissance dissipée à l'intérieur du laser à fréquence fixe

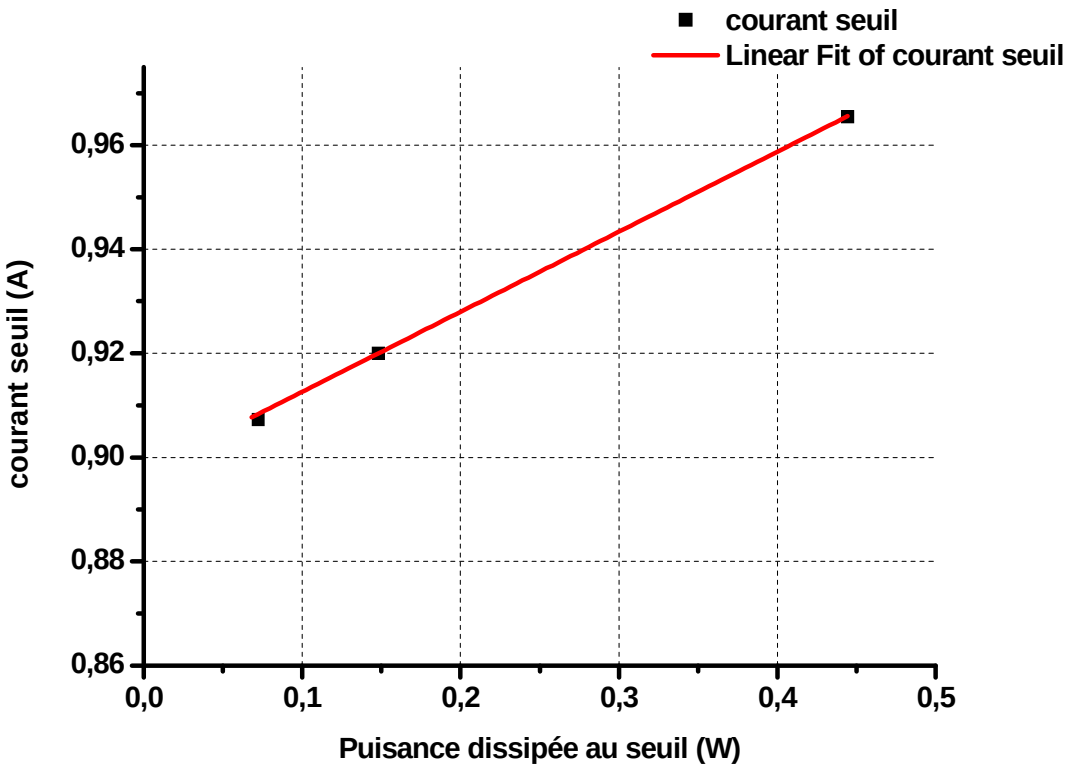


Fig.IV.16: Le courant seuil en fonction de la puissance dissipée à l'intérieur du laser à durée de pulse fixe

IV.B.2.c. Comparaison calcul expérience

Dans ce paragraphe, nous allons comparer les résultats expérimentaux et ceux obtenus par le modèle auto-cohérent. Pour cela dans un premier temps, nous comparerons les caractéristiques des trois lasers réalisés (LB1 (17 Å), LB2 (19,5 Å) et LB3 (22 Å) pour déterminer le degré de prédiction du modèle de calcul. Dans une seconde étape, nous essaierons de décrire les facteurs limitants dans cette approche pour finir avec les améliorations qui peuvent être apportées au dessin de ces structures.

La figure.IV.17 présente la comparaison des caractéristiques des trois lasers du tableau IV.2, mesurées à température ambiante, à un taux de remplissage de 1 %. La cavité laser est identique pour les trois composants avec une longueur de 3 mm et une largeur de 14 µm.

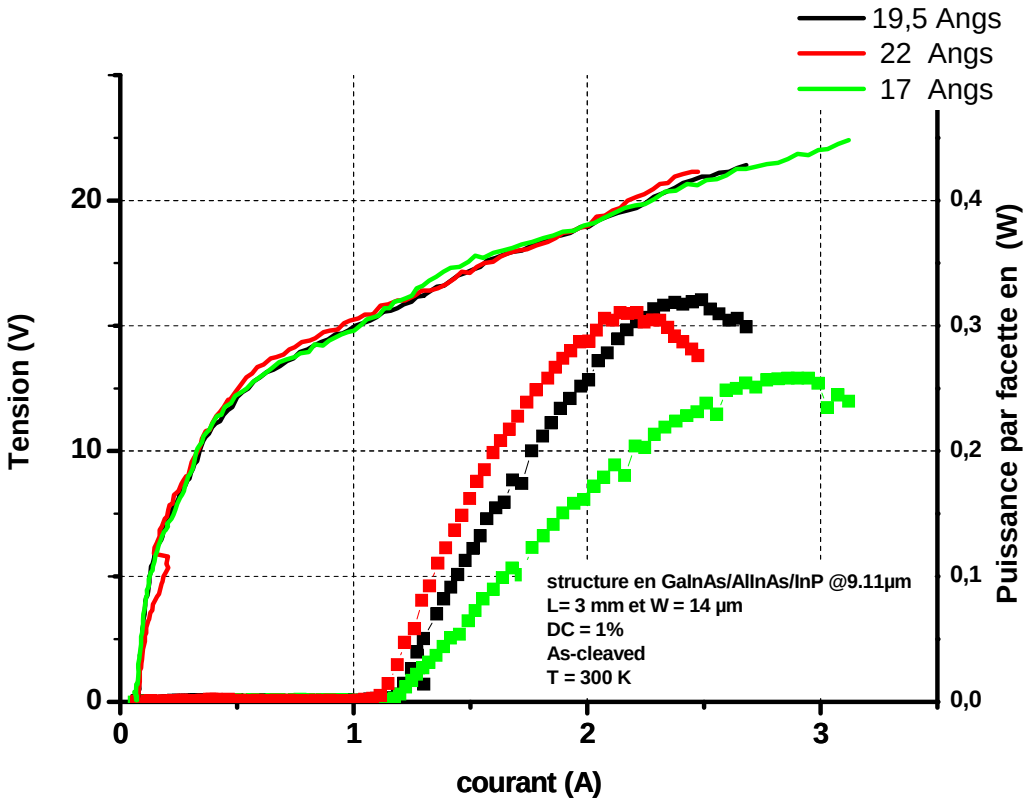


Fig.IV.17 : Effet de la barrière d'injection sur les caractéristiques Tension-courant et puissance-courant expérimentales

On remarque que les trois lasers fonctionnent à température ambiante comme cela a été prédit par le calcul. La figure.IV.18 montre la variation de l'énergie d'émission expérimentale (carré) et théorique (point) des trois lasers LB1, LB2, et LB3. On voit que les valeurs de la longueur d'onde d'émission des lasers et leurs variations en fonction de la tension appliquée à la structure sont très bien estimées par le modèle. La différence entre l'expérience et la théorie maximale est de l'ordre de 10 meV soit moins de 8 % de la valeur expérimentale et de même ordre de grandeur que la largeur de la courbe du gain théorique de cette structure. Cette variation peut être expliquée par deux raisons: d'une part les paramètres de bandes des matériaux dans notre modèle peuvent être mal ajustés et d'autre part par le fait que la structure réelle fabriquée est différente de la structure nominale. Dans un travail précédent [9], A. Leuliet a démontré qu'une variation de 10 % de flux de gallium ou d'indium induit une diminution de l'énergie du maximum de gain.

Il est remarquable aussi que comme cela a été suggéré par l'étude théorique du paragraphe IV.B.1, les caractéristiques linéaires des lasers sont identiques, en particulier les courbes courant-tension et le courant seuil sont les mêmes pour les trois lasers. Ce dernier point laisse suggérer que les pertes du guide sont très peu différentes entre les trois composants pour cette cavité (L = 3 mm, et w = 14 µm). La variation de la taille de la zone active entre les trois lasers de l'ordre de 250 Å n'ayant pas d'effet notable sur le paramètre de recouvrement du guide.

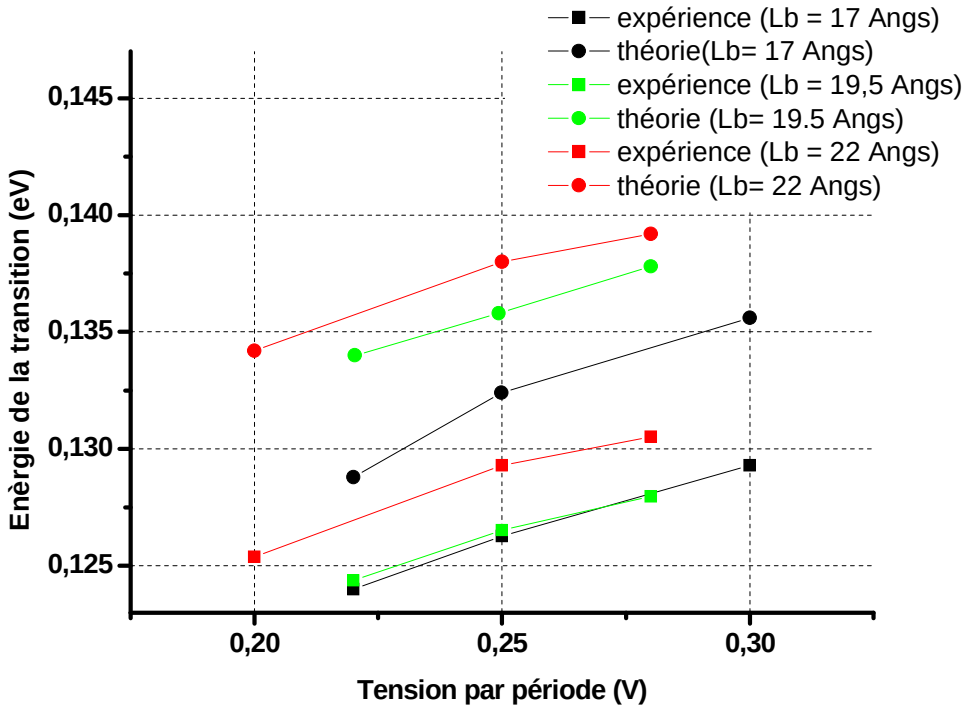
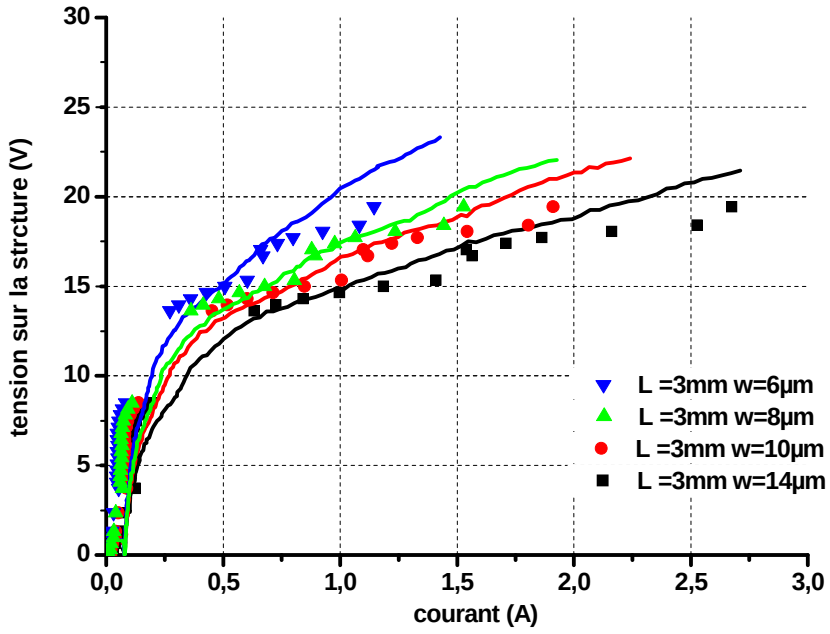


Fig.IV.18 : Comparaison expérience modèle des effets de la barrière d'injection sur la variation de l'énergie d'émission du laser

La figure.IV.19.a montre la comparaison entre les résultats des calculs et de l'expérience des caractéristiques courant-tension du laser LB2 pour différentes largeurs de ruban. Le calcul est fait avec un dopage nominal de $5{,}8.10^{10}$ cm^{-2} soit un dopage de 1,7 fois inférieur à celui demandé lors de la fabrication du composant. Ce facteur est dû à la disparité entre le dopage nominal et le nombre réel de porteurs qui peut atteindre un facteur 3 comme cela a été démontré par A. Leuliet dans ses travaux de thèse [9]. Nous remarquons qu'il existe une différence entre les pentes des courbes courant-tension calculées et celles expérimentales. Ceci peut s'expliquer par l'existence d'une résistance série dans le composant réel que nous n'avons pas prise en compte dans notre calcul. Elle correspond à la somme des résistances de contact des deux contacts métalliques, de la résistance du substrat et celle du guide d'onde. Nous supposons que c'est la résistance du substrat qui domine dans ce type de composant et qu'elle est indépendante de la taille du ruban. Dans notre cas le substrat en InP a un dopage nominal de l'ordre de 1à 3.10^{17} cm^{-3}, soit une résistance équivalente de l'ordre de 0,5 à 1,2 Ω. Compte tenu de l'incertitude sur les valeurs de dopage du substrat, la valeur de la résistance que nous avons introduite dans nos calculs est prise égale à 1Ω. La figure.19.b montre que la prise en compte de cette résistance permet d'avoir un bon accord entre l'expérience et le calcul.

a/



b/

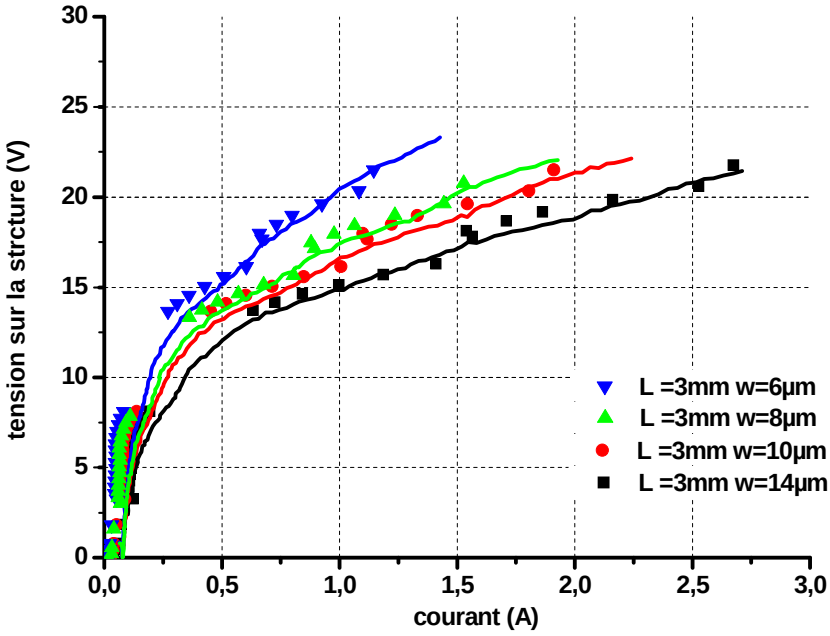


Fig.IV.19 : Comparaison des caractéristiques Tension-courant expérimentales et calculées pour plusieurs largeurs du ruban actif du laser : a. comparaison sans prise en compte de la résistance série du substrat. b.avec prise en compte de la résistance série du substrat

La valeur de la résistance peut être diminuée en utilisant un substrat plus dopé et des contacts moins résistifs. Cependant il faut garder à l'esprit qu'en augmentant le dopage du substrat les pertes dans le laser vont augmenter. Amincir le substrat dans le cas ou c'est sa résistance série qui domine celle du composant est une des solutions utilisées dans ce cas. Une autre solution

consiste à utiliser un contact arrière en Or-Germanium (Au-Ge) (le contact haut est laissé en Ti-Au). Cette configuration montre une résistance parasite plus faible [10]. Comme expliqué dans la référence [10], le Germanium recuit à 400 °C va diffuser dans le substrat dopé constituant ainsi un nouvel atome donneur pour l'InP. Il en résulte une couche fine de InP fortement dopé (n^{++}-InP) à l'interface entre le métal et le semiconducteur diminuant d'une part la résistance parasite équivalente du substrat et d'autre part par comme elle est loin de la zone active, n'aura pas d'effet sur les pertes vues par le mode guidé.

L'étape suivante dans cette comparaison entre théorie et expérience consiste à faire le fit entre l'expérience et le modèle pour la caractéristique Courant-Puissance. Les calculs sont faits avec un dopage de $5{,}8.10^{10}$ cm^{-2}(= $1/1{,}7.10^{10}$ cm^{-2}). Tout d'abord, il est remarquable que l'amélioration en puissance expérimentale est plus petite que celle que nous avons prédite théoriquement. En effet, dans le cas particulier de la figure.IV.7, nous avons une augmentation de l'ordre de 60 % entre le laser LB1 (taille de la barrière d'injection de 17 Å) et celle du laser LB2 (taille de la barrière d'injection de 19,5 Å) alors qu'elle est seulement de 20 % dans l'expérience. La figure.IV.20 montre la variation de la puissance maximale à la facette de sortie du composant en fonction de la barrière d'injection pour plusieurs pertes de guides différentes (on rappelle que les pertes théoriques du guide que nous avons dessiné sont de 2 cm^{-1}, les pertes en plus viennent des absorptions par des défauts des matériaux, en particulier ceux associés aux étapes de reprise de croissance épitaxiale ainsi que des diffusions sur les inhomogénéités du guide d'onde). L'échelle des ordonnées est une échelle logarithmique. Les courbes en tiret sont des fits par un polynôme d'ordre 2 des points de calcul (carrés). On observe sur cette figure la diminution de la puissance de sortie du laser quand les pertes du guide augmentent. Ce qui est remarquable en comparant les différentes courbes est leur tendance à s'aplatir quand les pertes de la cavité augmentent. On passe ainsi d'un rapport de l'ordre de 60 % pour des pertes totales égales à (α_{guide}/Γ = 9,41 cm^{-1}) entre le laser LB1 et LB2 à une amélioration de moitié moins de l'ordre de 30 % pour des pertes totales de (α_{guide}/Γ = 16,5 cm^{-1}). Donc une première explication de la diminution de l'amélioration en puissance expérimentale par rapport à celle théorique est que les pertes réelles du guide sont plus grandes que celles avec lesquelles nous avons fait le calcul de la figureIV.7. Ceci est bien visible sur la figure.IV.20, où pour obtenir les puissances expérimentales de sortie (données par des étoiles) les pertes introduites dans le modèle sont à peu près 2,5 fois plus grandes que celles avec lesquelles nous avons fait nos calculs dans la partie IV.B.1. Sur la figure.IV.20 nous avons tracé les barres d'erreurs sur la puissance et la taille de la barrière d'injection. Etant donné que les trois composants sont fabriqués l'un à la suite de l'autre dans les mêmes conditions de dépôt, nous pourrons supposer que l'erreur sur les épaisseurs des couches va dans le même sens pour les trois lasers. Avec ce raisonnement, la taille réelle de la barrière d'injection serait plutôt plus petite que celle nominale et est de l'ordre de 17,6 Å dans le laser LB1, de 20,1 Å dans le laser LB2 et de 22,7 Å dans le laser LB3.

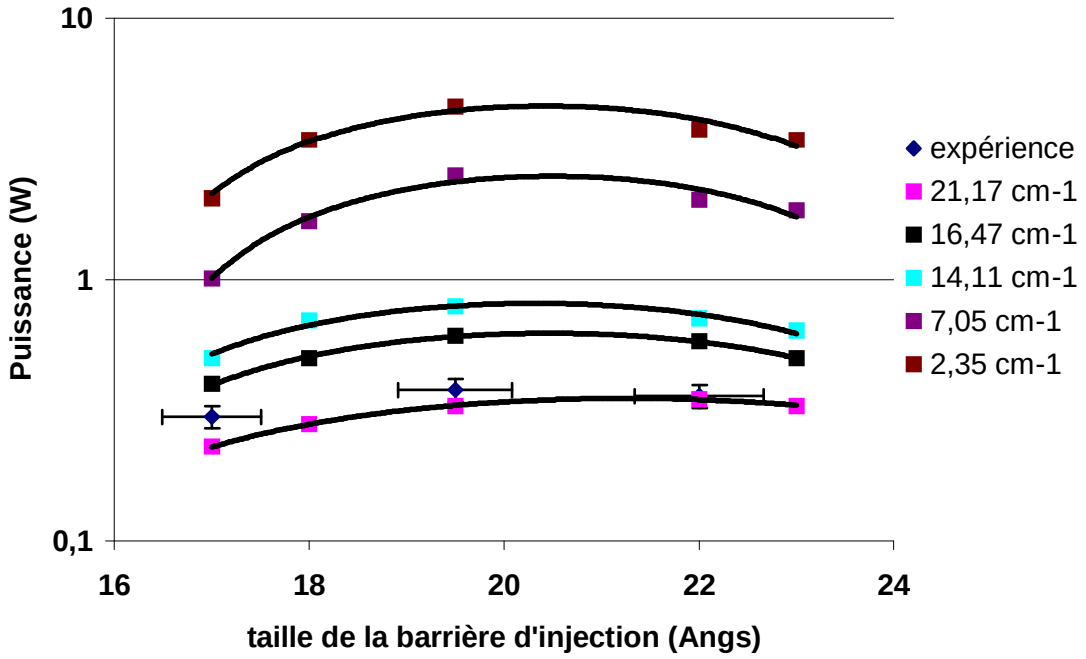


Fig.IV.20 : Effet des pertes sur les puissances de sortie du laser. L'amélioration due à l'optimisation de la saturation du gain dans le laser est de moins en moins prononcée en augmentant les pertes du guide

IV.B.3. Discussion et voie d'amélioration

Les puissances de sortie des lasers proposés sont basses par rapport à ce que les calculs prévoyaient. De plus l'amélioration que l'on attendait par rapport au dessin classique à long injecteur, n'est pas visible avec ces échantillons qui ont des courants de seuil et des puissances de sortie finalement comparables à ceux des dessins classiques. Ceci est dû pour l'essentiel à des valeurs des pertes du guide qui sont de beaucoup supérieures aux valeurs calculées. Les pertes éxpérimentales peuvent certainement être optimisées. Il se pourait aussi que les valeurs calculées de ces pertes ne soient pas exactes. Il y a certainement un travail complémentaire à mener dans ce domaine.

Au-delà de l'optimisation des pertes, des améliorations peuvent être apportées sur deux plans. Sur le plan expérimental pour le simple fait que la technologie adoptée pour nos composants n'était pas adaptée au type de fonctionnement en continu. La résistance thermique expérimentale obtenue pour nos composants est trois fois plus élevée par rapport à ce qui se trouve de mieux dans la littérature avec des résistances thermiques de l'ordre de 6 K/W pour une cavité optique de 3 mm et de taille de ruban de l'ordre de 11 µm pour un laser émettant dans la bande II. Cette grande différence peut être expliquée par le fait que nous n'avons par utilisé de couche Or-électrolytique dans nos composants. En effet il a été démontré que cette couche joue un rôle important dans la dissipation de la chaleur de la zone active. Il est aussi préférable que le composant soit collé directement au support (montage en epilayer-down) et qu'il soit enterré dans InP-dopé fer semi-isolant pour une meilleure extraction de la chaleur ce qui n'est pas le cas de nos composants. Ces améliorations vont diminuer l'élévation de la température dans la région active de la structure.

En anticipant sur la section suivante, nous verrons qu'une manière d'améliorer encore les performances de ce type de dessin à température ambiante est d'utiliser localement dans la

structure des matériaux avec des grandes discontinuités de bandes et tout particulièrement des matériaux contraints. Une solution consiste à utiliser des barrières de blocage plus hautes que les autres dans le dessin du laser (notamment du AlAs), pour augmenter le confinement des états dans la structure et tout particulièrement l'état haut. Cette solution a été utilisée avec succès pour des dessins à injecteur long et montre une amélioration notable dans la température maximale de fonctionnement des lasers et dans la puissance de sortie du laser [11]. Nous verrons dans la partie suivante comment cette solution sera utilisée pour des lasers émettant dans la bande II à injecteur courts en se basant sur la minimisation du coefficient du la saturation de gain.

IV.C. Laser émettant dans la bande II

Dans cette partie nous nous intéresserons aux lasers à cascades quantiques émettant dans la bande II du spectre optique. Dans une première partie, nous nous baserons sur un dessin tiré de la littérature [12] pour comparer le modèle à l'expérience dans un premier temps, ensuite pour l'optimiser en termes de rendement à la prise. Dans la seconde partie, nous présenterons un dessin à injecteur court que nous avons dessiné émettant à 4,6 µm. Les performances d'un tel dessin sont ensuite améliorées en terme de puissance de sortie et de courant qui traverse la structure en se basant sur la même approche qui consiste à diminuer le coefficient de saturation du gain dans le dessin.

IV.C.1. Structure émettant à 5 µm

Le rendement à la prise est défini par le rapport de la puissance maximale à la sortie du laser à celle électrique fournie au composant. Ce rapport traduit la portion de l'énergie électrique transformée en énergie optique. Le rendement à la prise est une des figures de mérite les plus importantes dans les lasers à semiconducteurs. Pour des raisons évidentes de thermique, à une même puissance de sortie les composants avec des rendements à la prise élevée sont meilleurs en termes de dissipation d'énergie et de fiabilité. Bien que les performances des lasers à cascade quantique n'aient cessé de s'améliorer, le meilleur rendement à la prise aujourd'hui de ces composants ne dépasse pas 16 % à température ambiante [1,2] loin des meilleurs rendements des lasers interbande classiques de l'ordre de 75 %.

IV.C.1.a. Description du dessin

Un nouveau dessin ayant un seul puits injecteur a été proposé par Y.Bai et al [12] pour remédier à cela avec un rendement à la prise de 53 % à basse température (40 K). Cette structure est basée sur une hétérostructure en $Ga_{0.34}In_{0.66}As/Al_{0.64}In_{0.36}As/InP$. La figure.IV.21 présente la bande de conduction de la région active correspondant à ce laser ainsi que les fonctions d'onde des états les plus importants dans son fonctionnement. Les états haut et bas du laser y sont dessinés en gras. La taille de la période est de 220 Å.
L'idée à travers ce dessin est d'une part de diminuer les défauts en tension requis pour l'inversion de population et le gain ainsi que la tension pour atteindre le désalignement. Ceci a pour conséquence l'augmentation du rendement en tension et donc du rendement total du composant selon la formule (I.11). D'autre part, l'idée consiste aussi à augmenter le gain différentiel (gain/population) de la structure en utilisant un dessin en injecteur court ayant une période plus petite que celle des dessins classiques à injecteur long (~500 Å). Le laser est constitué de 80 périodes, il a une longueur de 2mm, et une largeur de 6µm et a été enterré

dans du InP-dopé fer pour une meilleure extraction de la chaleur lors du fonctionnement du laser. Ce laser émet à 5µm à température ambiante.

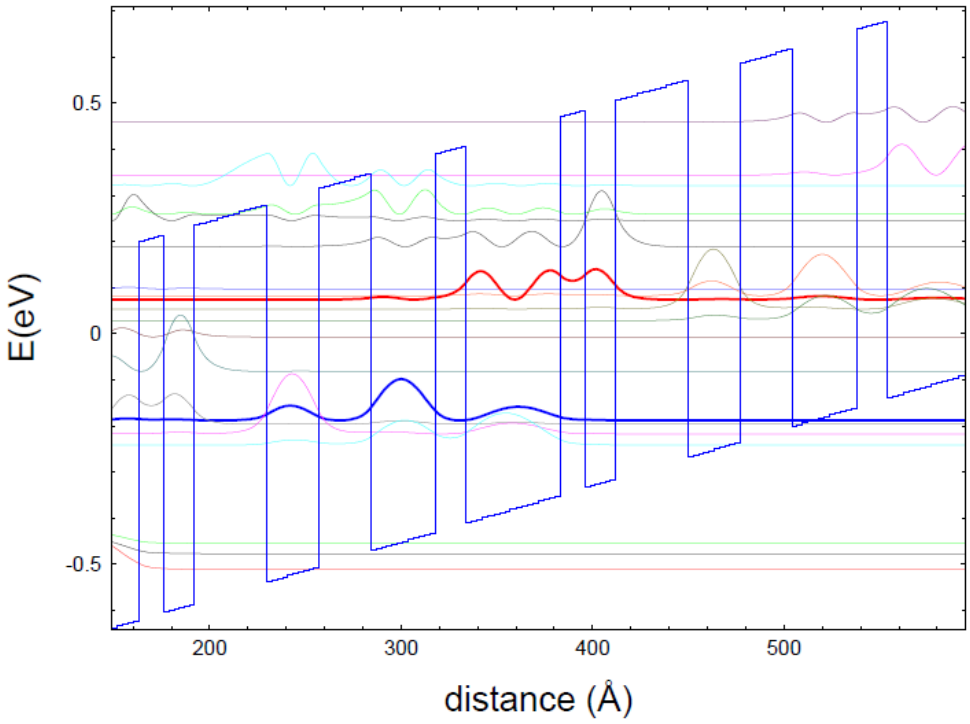


Fig.IV.21 : Bande de conduction et fonction d'onde des états du dessin de LCQ émettant à 5 µm de la référence [12] pour un champ électrique appliqué de 123 kV/cm. La transition optique a lieu entre les états en gras (rouge état haut, bleu état bas)

IV.C.1.b. Comparaison modèle expérience

Dans un premier temps nous avons comparé les caractéristiques courant-tension et courant-puissance obtenues par le modèle que nous avons développé et ceux obtenus expérimentalement. Les expériences ont été faites pour un rapport cyclique de DC = 5 %. Pour faire ces calculs, le recouvrement optique est pris égal à 0,72, l'élargissement du gain égal à 20 meV. Ces paramètres sont supposés indépendants de la température. En se basant sur les résultats expérimentaux de la référence [13] pour une structure LCQ enterrée, la résistance thermique du composant est prise proportionnelle à la température de jonction. Pour T_0 = 300 K nous avons pris une résistance thermique égale à 6 K/W pour cette cavité de 3 mm.
Les pertes du guide aussi sont prises dépendantes de la température. En effet, comme nous l'avons discuté lors du chapitre précédent, la contribution principale dans ce terme de pertes vient des absorptions des porteurs :

$$\alpha_{wg} = a.n_{wg} \qquad \text{(IV.7)}$$

Il est aussi connu que lorsqu'on abaisse la température, les porteurs peuvent être piégés dans les niveaux profonds c'est ce qu'on appelle le gel des porteurs. Ainsi le nombre de porteurs

libres va diminuer avec la température. Les pertes du guide auront la même dépendance en température et s'écriront comme suit :

$$\alpha_{wg} = a.n_{wg} = a.(n_0 + n(T)) \qquad \text{(IV.8)}$$

Où n_0 est la densité de porteur libre au zeros absolu et $n(T)$ rend compte de la variation de cette densité suite à la variation de la température.
Le calcul de la longueur d'onde d'émission du laser donne une valeur de 4,55 µm. Soit une différence de l'ordre de 25 meV avec la longueur d'onde d'émission expérimentale du laser. Cette différence peut s'expliquer par la différence qui existe entre la composition nominale de l'hétérostructure en terme d'épaisseur et type de matériaux et celle expérimentale et sera prise en compte dans nos calculs comme une tension d'offset (U_{offset} = Np.0,025 = 2 V). La figure.IV.22.a montre la courbe courant tension sans prise en compte de cette tension offset pour la température de réseau T_0 = 300 K.
La comparaison entre le calcul et l'expérience pour les caractéristiques courant-Tension et Puissance-courant a été faite sur une plage large de température de fonctionnement allant de 80 K jusqu'as 350 K. La figure.IV.22.b montre le résultat d'une telle comparaison pour deux températures particulières de fonctionnement différentes (T_h = 160 K et 300 K). On voit que l'accord est excellent à la fois sur la forme et les valeurs. Avec ce calcul, la température caractéristique de la variation du courant en fonction de la température T_0 = 124 K ce qui est en très bon accord avec celle déterminée expérimentalement de 120 K [12].

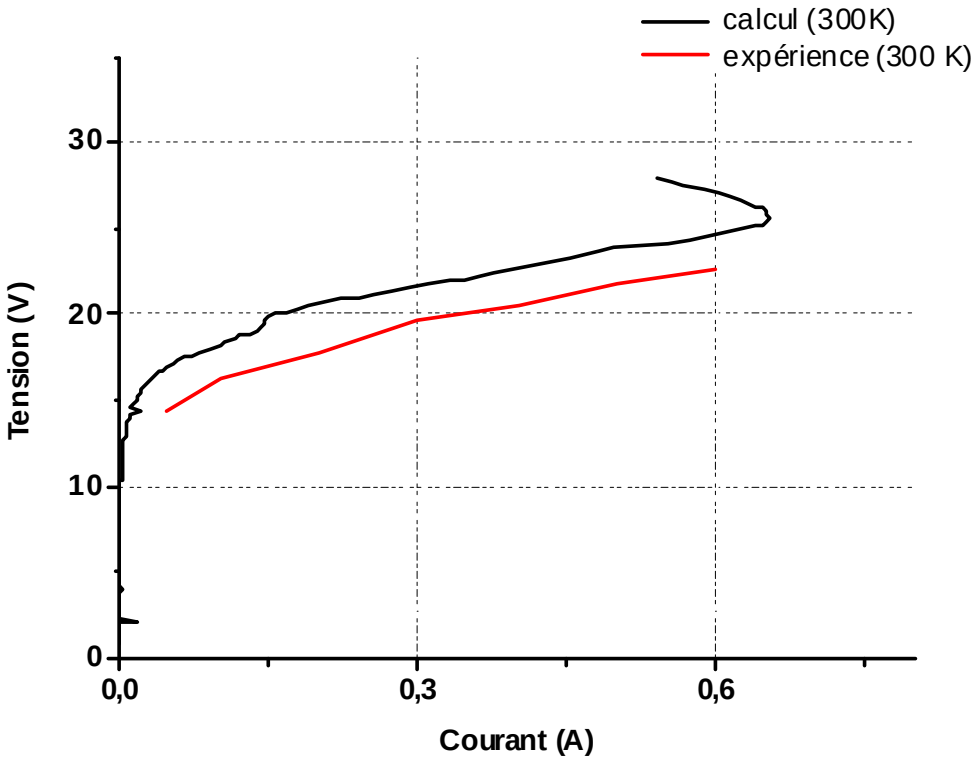


Fig.IV.22.a: Comparaison de la caractéristique courant tension du laser de la référence [12] calculée et expérimentale pour une température T0 = 300 K avant application de la tension d'offset

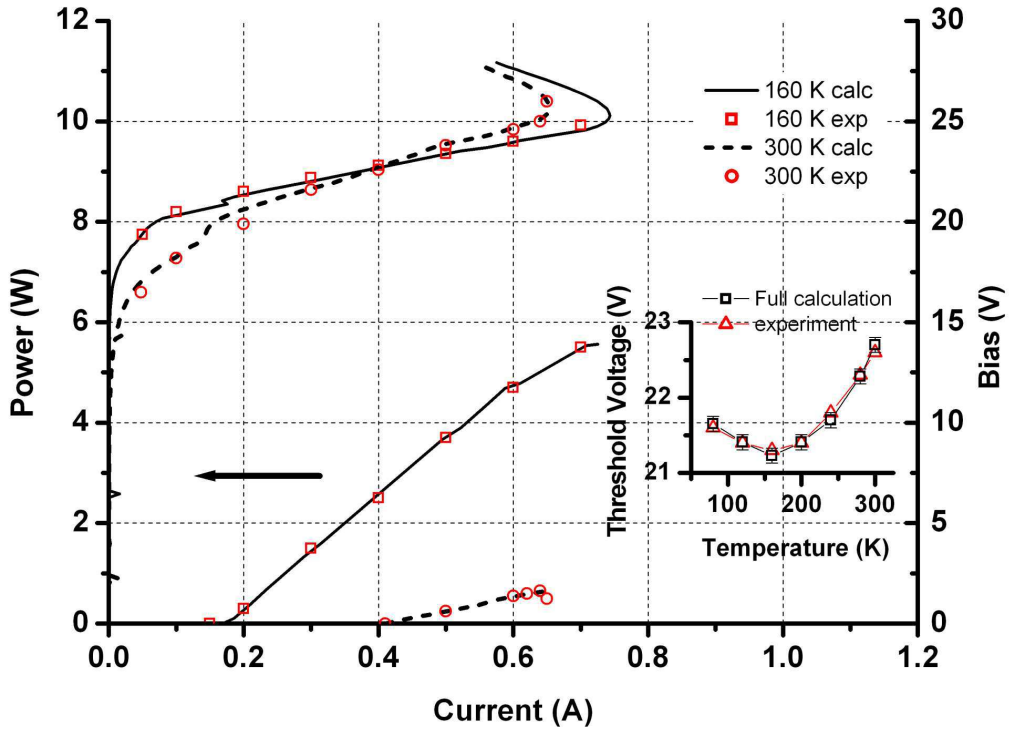


Fig.IV.22.b: Comparaison des caractéristiques de sortie du laser de la référence [12] calculées et expérimentales pour deux températures de jonction

L'insert de la même figure montre la variation de la tension au seuil du laser déterminée par le calcul comparée à celle obtenue par l'expérience. Il montre aussi le très bon accord entre le modèle et l'expérience.

Pour ajuster les résultats de la modélisation il a été nécessaire d'ajuster pour chaque température la valeur des pertes. Les valeurs obtenues sont présentées sur la figure.IV.23.

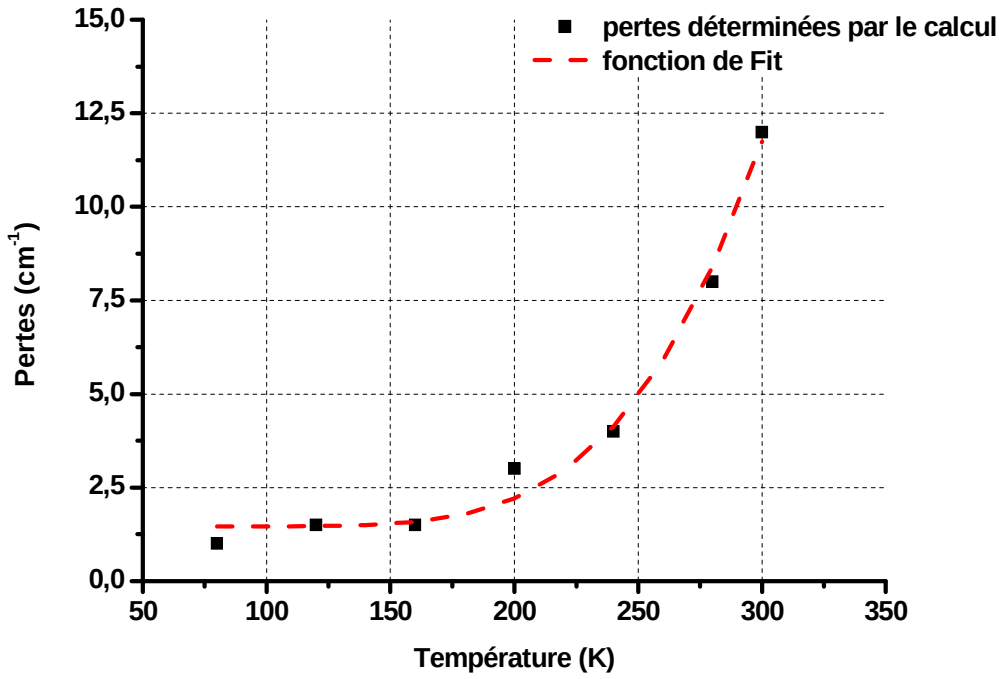


Fig.IV.23 : Variation des pertes du guide en fonction de la température de la jonction

La courbe en ligne tirets rouge est l'approximation des pertes calculées selon la formule suivante :

$$\alpha_{wg} = \alpha(T=0) + a.T^{3/2}.\exp(-\frac{E_a}{k_b T}) \qquad \text{(IV.9)}$$

où $\alpha(T=0) = 1{,}46cm^{-1}$ sont les pertes qu'aurait le guide au zero absolu, a = 0,11 $cm^{-1}/K^{3/2}$, E_a est une énergie d'activation de l'ordre de 100 meV ($\frac{E_a}{k_b} = 1219K$)

IV.C.1.c. Optimisation de la structure

Dans cette partie, nous partirons du même principe qui est que la saturation du gain est le facteur limitant les performances du laser comme nous en avons discuté dans le chapitre précèdent et dans le début de ce chapitre. Pour les améliorer il faut diminuer ce facteur. Il faut dire que généralement pour un dessin donné, le nombre de paramètres sur lesquels on peut jouer pour essayer de l'optimiser n'est pas grand. Une fois la longueur d'onde d'émission du laser trouvée, les matériaux que nous allons utiliser fixés et la condition d'extraction établie (double phonon ou simple phonon,…), il ne reste pratiquement plus de paramètres sur lesquels nous pouvons jouer (à part, peut être, changer les épaisseurs des couches de manière perturbative et localisée comme nous l'avons fait dans le paragraphe IV.B). Une des façons d'augmenter cette flexibilité du dessin d'un LCQ consiste à utiliser plus que deux matériaux C'est ce que nous avons fait pour améliorer le rendement à la prise du dessin de la figure.IV.21. Nous avons utilisé un dessin qui utilise 3 matériaux différents basés sur la structure active de la référence [12].

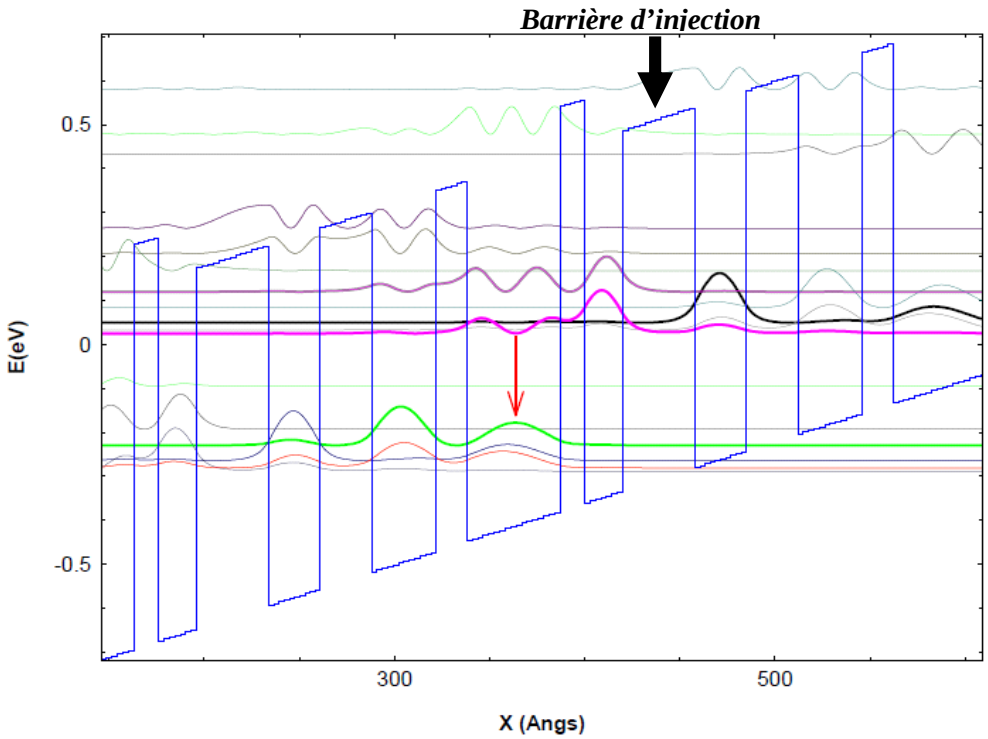


Fig.IV.24 : Bande de conduction et fonction d'onde des états du dessin amélioré émettant à 5 µm. la transition radiative a lieu entre l'état en vert gras et l'état en violet. Les épaisseurs des couches en angström en commençant par la barrière d'injection (de droite à gauche): **3.8**,2.0,***1.3***,4.9,**1.6**,3.4,**2.7**,2.7, où les barrières sont en gras, la couche en gras et italique représente la couche en $Al_{0.7}In_{0.3}As$

La différence principale avec le dessin d'origine consiste dans l'utilisation d'une première barrière dans la région active plus haute énergétiquement que les autres barrières (voir figure.IV.24). Ceci est fait en utilisant une composition en aluminium Al plus grande dans cette barrière : $Al_{0.7}In_{0.3}As$ alors qu'elle est de 0,6 dans les autres barrières de la structure. Le puits entre cette barrière et la barrière d'injection a une épaisseur plus grande pour compenser les contraintes supplémentaires introduites par cette barrière plus haute. Ces modifications vont conduire à un confinement plus grand des états de la structure. En particulier, l'état haut est mis en résonance avec l'état juste au dessus de lui ce qui va améliorer l'injection de courant sur l'état haut du laser et donc le transport des électrons. Ce dessin aura de meilleures performances en température car la présence de la barrière plus haute va diminuer la repopulation thermique de l'état bas.
La différence entre les longueurs d'onde d'émission entre le dessin d'origine et ce dessin amélioré est du même ordre de grandeur que l'élargissement du gain optique : pour le nouveau dessin, nous trouvons une longueur d'onde d'émission égale à 4,65 µm comparée à celle calculée de l'ancien dessin et qui est égale à 4,55 µm.
La figure.IV.25 montre la comparaison entre le rendement à la prise de l'ancienne structure et celui de la nouvelle structure.

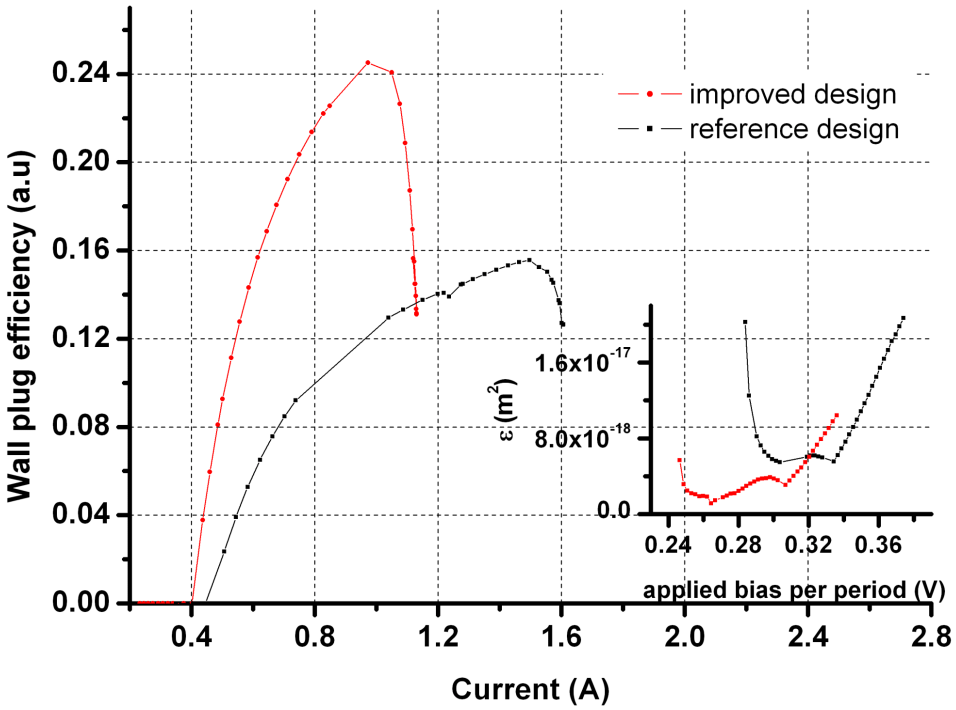


Fig.IV.25 : Comparaison du rendement à la prise à température ambiante en fonctionnement pulsé a T = 300 K pour le dessin de la référence [12] (courbe noire) et le dessin à performances améliorées (courbe rouge). L'insert montre la variation du coefficient de saturation de gain (ε) en fonction de la tension appliquée à la structure pour ces deux dessins

On voit que ce facteur est amélioré de 50 % avec la nouvelle structure. La raison principale et fondamentale de cette amélioration est montrée dans l'insert de cette figure qui montre la variation du coefficient de saturation du gain dans les deux structures. On voit que le coefficient de saturation de gain dans la nouvelle structure est deux fois plus petit que celui de l'ancienne. Dans le graphe de la figure.IV.26.a, nous avons tracé la courbe tension par période en fonction de la densité de courant qui traverse la structure pour la structure de la référence [12] et la structure améliorée que nous proposons. Nous remarquons qu'à une tension fixe, la

densité de courant est plus grande dans la nouvelle structure que celle de l'ancienne structure. Ceci est la conséquence comme nous l'avons dit du meilleur confinement des états dans la nouvelle structure. Les tensions de fonctionnement sont donc plus basses pour le nouveau dessin avec, en particulier, une tension de désalignement plus petite que dans l'ancien dessin (ceci est aussi visible dans l'insert de la figure.IV.25). En d'autres termes la diminution du coefficient de saturation de gain se traduit par une diminution de la résistance équivalente du composant.

Cet abaissement des tensions de fonctionnement est important pour augmenter le rendement à la prise des composants. Du point de vue de la thermique, fonctionner à plus faible tension est aussi important, car ceci se traduit par un abaissement de la température de la zone active du laser. La figure.IV.26.b montre la comparaison des caractéristiques linéaires gain-tension. On voit que le gain maximal est plus petit dans la nouvelle structure.

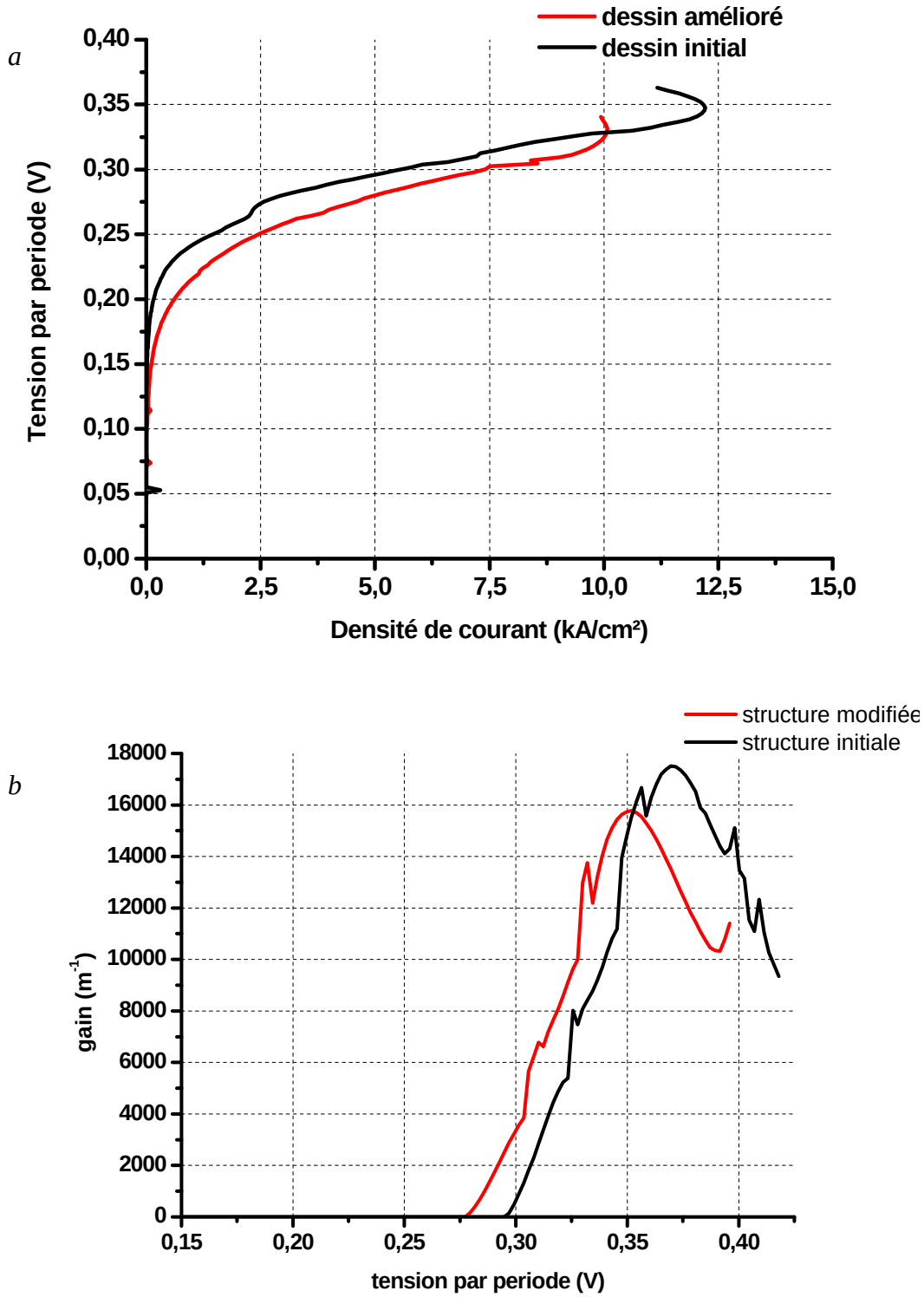


Fig.IV.26 : comparaison des caractéristiques linéaires des deux structures courant-tension et gain-tension

IV.C.2. Dessin de la structure émettant à 4µm

Dans cette partie nous allons donner un autre exemple d'optimisation de performances d'un laser émettant dans la bande II. La figure.IV.27.a montre la structure à injecteur court initiale que nous avons dessinée pour un champ électrique de100 kV/cm appliqué à la structure et qui émet aux alentours de 4,6 µm

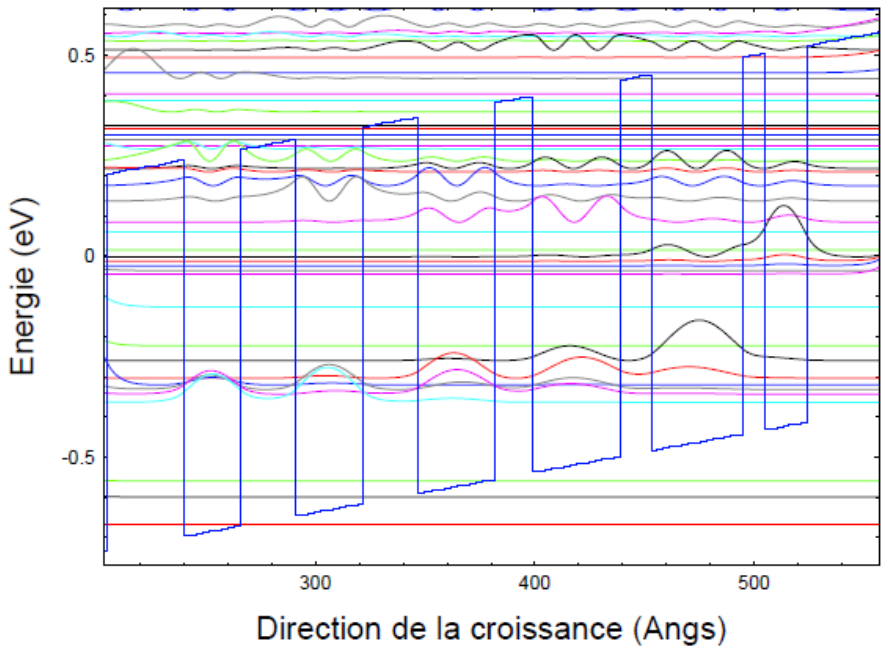


Fig.IV.27.a : Structure initiale proposée à deux puits injecteurs

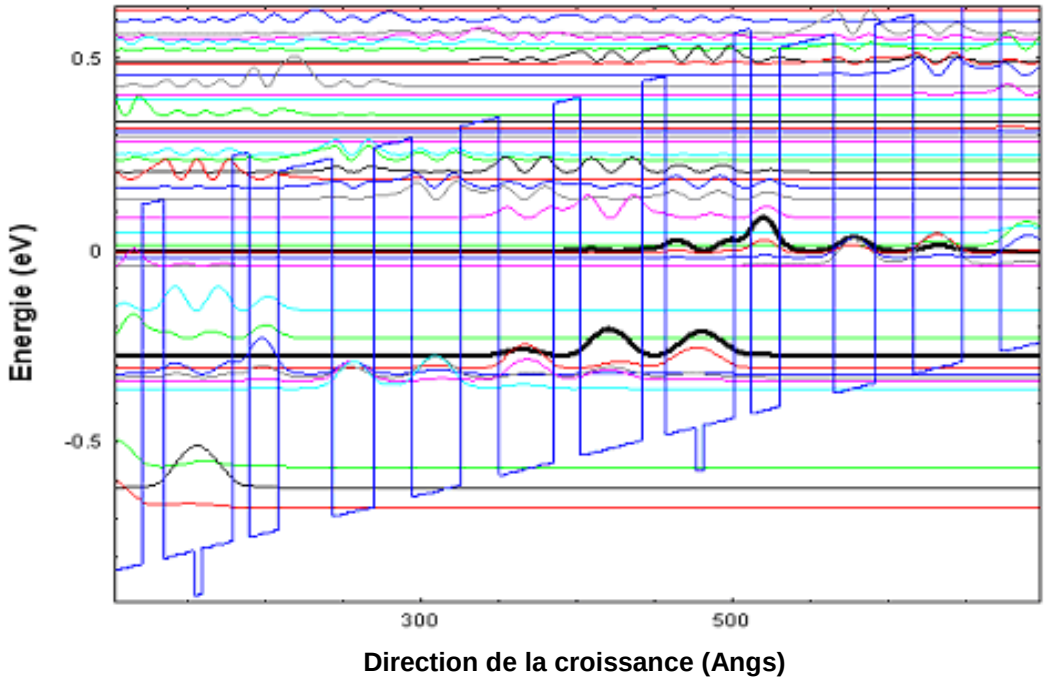


Fig.IV.27.b : Structure améliorée (on notera l'utilisation de la barrière en $Al_{0.74}In_{0.26}As$ et une couche en InAs)

Cette structure est constituée d'une hétérostructure en $Ga_{0.3}In_{0.7}As/Al_{0.7}In_{0.3}As/InP$, dont la région active est formée de deux puits injecteurs et une transition active selon un schéma en double phonon. Pour optimiser les performances de cette structure et en procédant de la même manière, nous avons opté pour un dessin en quatre types de matériaux. Nous allons incorporer une barrière en $Al_{0.74}In_{0.26}As$ et une couche d'épaisseur 5 Å en InAs dans le dessin de la zone active. Les barrières en $Al_{0.74}In_{0.26}As$ vont jouer le rôle de barrières de blocage qui vont permettre un confinement plus important des états de la structure et diminuer les fuites des électrons vers le continuum. Pour compenser les contraintes dues à l'utilisation de cette couche, la couche en InAs est alors ajoutée. L'utilisation de cette couche va augmenter la discontinuité de bande effective et en même temps la flexibilité du dessin. La structure améliorée est donnée dans la figure.IV.27.b. La figure.IV.28 montre la variation du coefficient de saturation de gain des deux structures. On voit que ce paramètre est trois fois plus petit pour la nouvelle structure en comparaison par rapport au dessin initial.

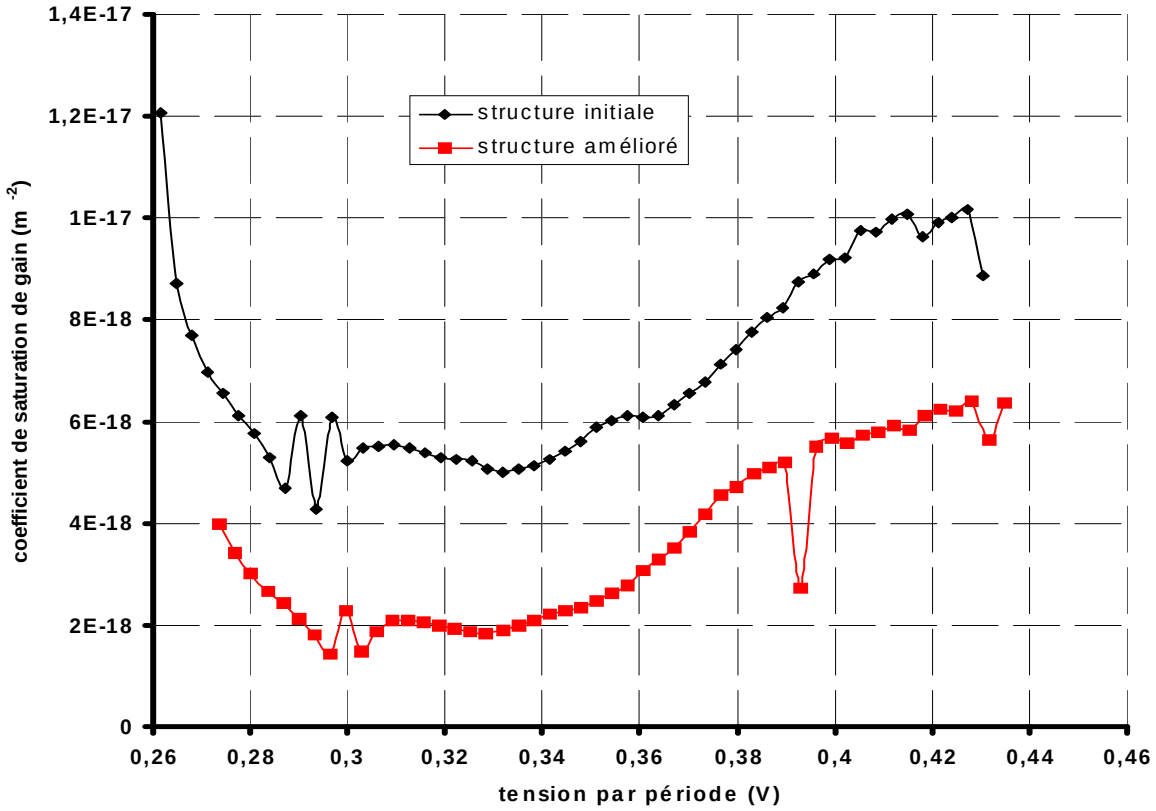


Fig.IV.28 : Comparaison du coefficient de la saturation de gain entre les deux structures (initiale et améliorée)

Cette diminution du coefficient de la saturation du gain dans la structure est accompagnée par une amélioration des performances du laser en termes de courant, de gain de la structure et de puissance de sortie. Les figures.IV.29 et IV.30 montrent la comparaison des caractéristiques courant-tension et gain maximal–tension des deux structures. On voit que la nouvelle structure présente à la fois une plus petite résistance équivalente et un plus grand gain linéaire. L'énergie du maximum de gain est différente de moins de 20 meV entre les deux dessins. Le calcul de la puissance de sortie avec le même recouvrement, et pertes de guides, montre que le nouveau dessin présente des puissances 3 fois plus grandes pour le nouveau dessin par rapport à l'initial.

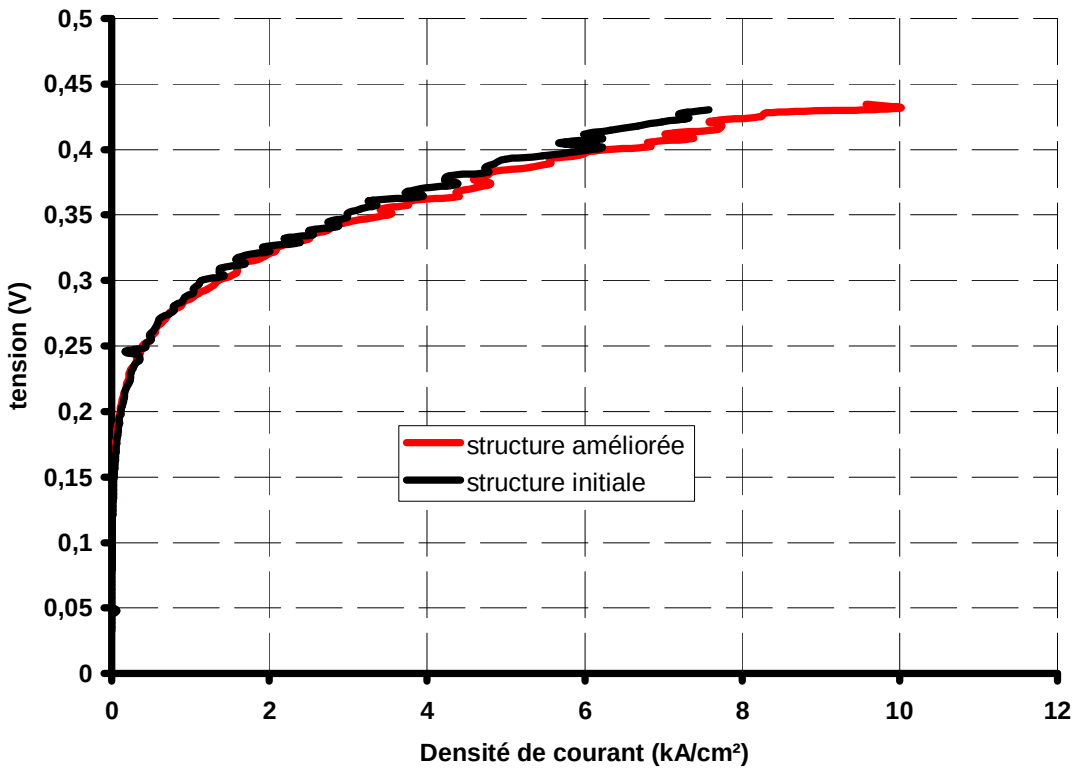


Fig.IV.29 : Comparaison de la caractéristique courant-tension des structures étudiées

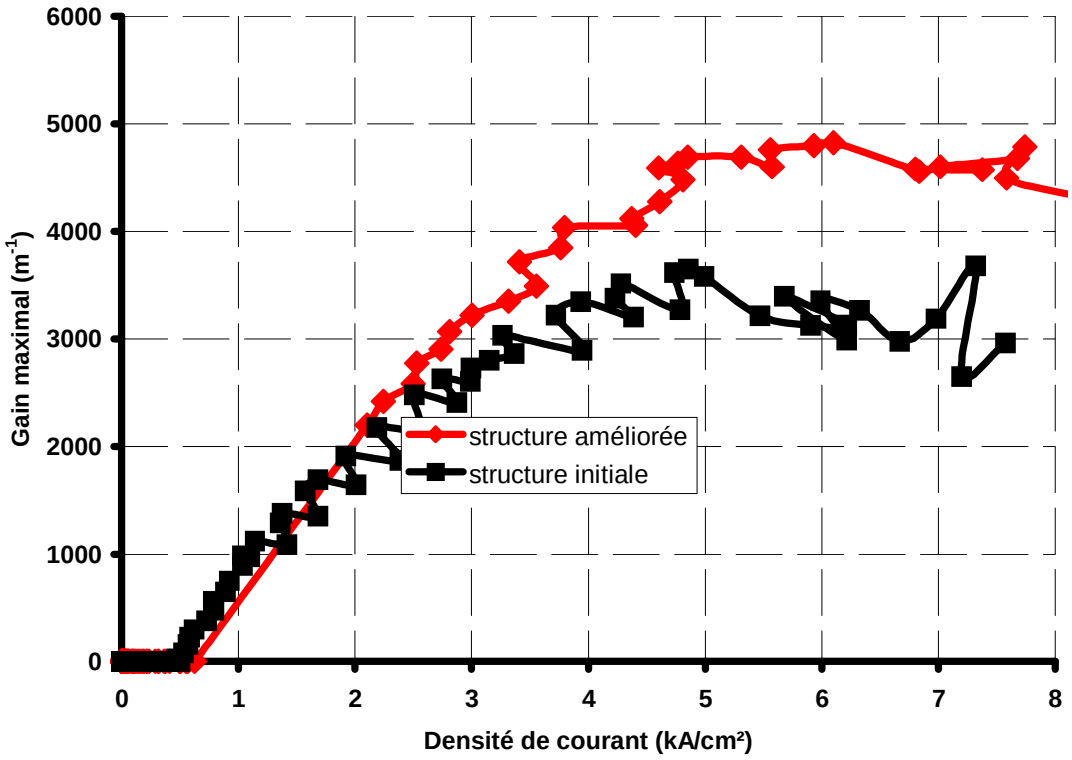


Fig.IV.30: Comparaison du gain des deux structures

IV.D. Conclusion

Nous avons montré dans ce chapitre, en partant des structures que nous avons dessinées ou tirées de la littérature, que les caractéristiques électro-optiques calculées par le modèle sont en bon accord avec celles expérimentales. Par ailleurs, nous avons montré que nous disposons d'un véritable outil d'optimisation du dessin de la zone active d'un laser à cascade quantique qui est le coefficient de saturation du gain de la structure. L'optimisation de ce paramètre permet d'optimiser le dessin en termes de courant, de gain et de puissance de sortie.

Références Bibliographiques

[1] Y. Bai, S. Slivken, S. R. Darvish, and M. Razeghi. Room temperature continuous wave operation of quantum cascade lasers with 12.5% wall plug efficiency. *Appl. Phys. Lett*, 93:021103, 2008.
[2] A. Lyakh, R. Maulini, A. Tsekoun, R. Go, C. Pflügl, L. Diehl, Q. J. Wang, F.Capasso, and C. Kumar N. Patel. 3 W continuous-wave room temperature single-facet emission from quantum cascade lasers based on nonresonant extraction design approach. *Appl. Phys. Lett*, 95:141113, 2009.
[3] A. Friedrich, G. Boehm, and M.C. Amann. Low-threshold injectorless quantum cascade laser with four material compositions. *Electronics Letters*, 44(9):580, 2008.
[4] J. Faist, D. Hofstetter, M. Beck, T. Aellen, M.Rochat, and A. Blaser. Bound-to-continuum and two-phonon resonance, quantum-cascade lasers for high duty cycle, high-temperature operation. *IEEE JQE*, 38:533–546, 2002.
[5] J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori, D. L. Sivco, A. L. Hutchinson, and A. Y. Cho. Vertical transition quantum cascade laser with bragg confined excited state. *Appl. Phys. Lett*, 66:538, 1995.
[6] S.Y. Hu, D.B. Young, A.C. Gossard, and L.A. Coldren. The effect of lateral leakage current on the experimental gain/current-density curve in quantum-well ridge-waveguide lasers. *Journal of Quantum Electronics, IEEE* , 30(10):2245, 1994.
[7] C. Zhu, Y. G. Zhang, A. Z. Li, and Z. B. Tian. Analysis of key parameters affecting the thermal behavior and performance of quantum cascade lasers. *Journal of Applied Physics*, 100(5):053105, 2006.
[8] S. Adachi. Lattice thermal conductivity of group-IV and III–V semiconductor alloys. *Journal of Applied Physics*, 102(6):063502, 2007.
[9] A. Leuliet. *Simulation de Transport dans les Lasers à Cascade Quantiques*. PhD thesis, Université Paris 7, 2010.
[10] Y. Bai, S. R. Darvish, S. Slivken, W. Zhang, A. Evans, J. Nguyen, and M. Razeghi. Room temperature continuous wave operation of quantum cascade lasers with watt-level optical power. *Applied Physics Letters*, 92(10):101105, 2008.
[11] Q. K. Yang, C. Mann, F. Fuchs, R. Kiefer, K. Kohler, N. Rollbuhler, H. Schneider, and J. Wagner. Improvement of lambda ~5 um quantum cascade lasers by blocking barriers in the active regions. *Applied Physics Letters*, 80(12):2048, 2002.
[12] Y. Bai, S. Slivken, S. Kuboya, S.R Darvish, and M. Razeghi. Quantum cascade lasers that emit more light than heat. *Nat Photon*, 4(2):99–102, February 2010.
[13] S.S. Howard, Zhijun Liu, D. Wasserman, A.J. Hoffman, T.S. Ko, and C.F. Gmachl. High-performance quantum cascade lasers: Optimized design through waveguide and thermal modeling. *Journal of Selected Topics in Quantum Electronics, IEEE*,13(5):1054, 2007.

Conclusion

Le contexte général de ce travail est l'amélioration des caractéristiques des lasers à cascade quantique en termes de puissance de sortie et de rendement à la prise.
Une modélisation des lasers à cascade quantique à été développée tout au long de ce travail de thèse partant des aspects liés à la description des états électroniques dans la structure pour finir par des problèmes de propagation d'onde.

La démarche du développement de notre modèle de calcul a reposé sur trois étapes essentielles :

- On s'est intéressé dans un premier lieu aux structures des sous-bandes constituant les états dans la structure du laser. Ces états ont été calculés dans l'approximation de l'hamiltonien $\vec{k}.\vec{p}$ à 3 bandes couplant la bande de conduction, la bande de trous légers et la bande de split-off. Les énergies et les états propres de l'hétérostructure sont déterminés grâce à l'emploi d'une méthode de matrice de transferts. Une fois ces états obtenus, on s'intéresse au transport électronique à l'intérieur de la structure laser en utilisant un modèle de diffusion entre états électroniques.
- En second lieu, nous avons abordé la question de la température électronique dans les lasers à cascade quantique. Le calcul comparé aux expériences tirées de la littérature montre qu'elle prend une forme simple qui fait ressortir deux paramètres caractéristiques de la structure qui sont : la résistance thermique électronique de l'hétérostructure et le coefficient de couplage courant température électronique. Cette étude montre que la diffusion par les phonons–LO est le seul mécanisme par lequel le gaz d'électrons peut transférer son énergie vers le réseau. Les mécanismes élastiques d'interaction représentent les sources d'énergie pour le gaz d'électrons. C'est cette forme simple qui a été utilisée ensuite directement dans le calcul des caractéristiques des LCQ car son utilisation présente un gain de temps non négligeable par rapport au calcul total.
- En troisième point, nous nous sommes intéressés aux propriétés optiques du composant. Comprendre les mécanismes de formation du gain dans les LCQ est une étape importante dans l'amélioration des performances et des caractéristiques du laser. Le modèle adopté pour calculer l'absorption dans les LCQ fait ressortir un paramètre important dans la description de ces composants qui est le facteur d'élargissement. Il est possible de calculer ce facteur en utilisant les temps de transition intra-sous-bande. Il s'est avèré que c'est la rugosité qui joue le rôle le plus important dans l'élargissement de la transition optique de la courbe d'absorption. Nous avons ensuite étudié le couplage entre les modes optiques et les électrons sur les états de la structure. L'introduction de la cavité optique nous a permis de calculer la répartition longitudinale des photons dans le laser en tenant compte des diverses pertes internes présentes dans le système et de la réflectivité des miroirs. Ce modèle complet du laser a permis de simuler les propriétés électro-optiques du laser en termes de courant et de puissance de sortie. Il nous a permis de déterminer en particulier le lien entre la puissance de sortie du laser et la saturation du gain dans la structure. L'effet des photons sur le gain de la structure peut être décrit par un paramètre qui dépend des caractéristiques de la structure. Une formule approchée pour ce paramètre a été déduite en utilisant un modèle à

trois niveaux. Cette étude nous a permis aussi de déduire une figure de mérite simple qui caractérise le comportement de la structure vis-à-vis de la saturation du gain et dont la minimisation permet d'augmenter la puissance du laser.

A l'issue de cette étape d'élaboration du modèle, nous avons proposé de nouvelles structures et approches pour améliorer le rendement à la prise et la puissance de sortie. Pour un bon fonctionnement et un bon transport des électrons dans la structure, il faut que les porteurs puissent circuler entre les différentes périodes constituant le laser sans qu'il y ait des effets de repopulation ou des effets d'engorgement. De plus il faut minimiser les pertes des porteurs vers le continuum. Pour cela, il a été longtemps admis qu'il est nécessaire d'utiliser un injecteur en mini-bande. Nous montrons ici, à la lumière des résultats du couplage électron-photon, que diminuer la taille de l'injecteur peut maximiser le rendement du laser.

Nous avons démontré, théoriquement et expérimentalement, qu'en changeant l'épaisseur de la barrière d'injection dans une structure à injecteur court que nous avons dessinée, la puissance de sortie passe par un optimum pour une épaisseur donnée. L'effet important de la saturation de gain dans les LCQ a ainsi été mis en avant. Nous avons montré que cet optimum est de moins en moins prononcé quand on augmente les pertes du guide. La réalisation pratique de ces structures a démontré l'importance d'une bonne maîtrise des procédés technologiques pour minimiser les courants de fuites et les pertes de guide. Nous avons pu vérifier au passage l'importance de choisir une couche d'isolation électrique qui n'absorbe pas dans la gamme de longueur d'onde qui nous intéresse.

Une autre manière d'améliorer les puissances de sortie des LCQ à température ambiante peut être l'utilisation de matériaux avec de grandes discontinuités de bandes et tout particulièrement des matériaux contraints. Une solution consiste à utiliser des barrières de blocages plus hautes que les autres dans le dessin du laser (notamment du AlAs), pour augmenter le confinement des états dans la structure. Cette solution a été utilisée avec succès, dans une seconde phase de cette étude, pour dessiner des structures émettant dans la bande II à des puissances plus élevées.

Avec la compréhension et la prise en compte du couplage entre les électrons et les photons dans la structure, nous avons pu obtenir des résultats prometteurs en vue de l'amélioration en puissance de sortie des lasers à cascade quantique. Par ailleurs, notre modèle d'interaction électron photon a été appliqué avec succès sur d'autres composants optoélectroniques (détecteurs QWIP et QCD) pour le calcul de leurs réponses spectrales en présence de champ électromagnétique incident.

Dans cette étude, nous nous sommes limités à un modèle bidimensionnel et nous nous sommes focalisés sur l'optimisation de la structure électronique. Une amélioration du modèle consisterait en la prise en compte de la géométrie réelle du composant en incluant la troisième dimension (la direction latérale). Ceci permetterait le calcul des pertes réelles ainsi qu'un calcul précis de la résistance thermique de l'assemblage. Une optimisation de la structure du guide d'onde reste en effet à mener sur deux plans :

- d'un point de vue optique, homogénéiser la distribution photonique entre les différentes périodes de la zone active et diminuer les pertes optiques associées au guide.
- d'un point de vue thermique, tester des dessins de guide d'onde et des matériaux alternatifs permettant une meilleure extraction de la chaleur produites lors du fonctionnement du laser.

Annexe : Complément de modélisation

Nous avons cherché à paramétrer les courbes de puissance en fonction du courant obtenues par le calcul total afin de pouvoir faire des extrapolations simples des performances en fonction de la température, de la résistance thermique ou du nombre d'émetteurs d'une barrette sans avoir à refaire en chaque point l'ensemble des calculs de transport et de gain.

A. Paramétrisation empirique des courbes P(I)

Nous avons trouvé une expression qui permet de rendre compte de façon très précise de la chute brusque des P(I) au-dessus d'un certain courant :

$$P(I) = (I - I_{th})\left\{\eta_0 - \eta_1 \exp(\frac{I}{I_d})\right\} \qquad \text{(V.1)}$$

I_{th} correspond exactement au courant de seuil.
I_d correspond en gros à l'extension de la plage de courant sur laquelle se produit la saturation de la puissance. η_0 et η_1 sont homogènes à des rendements différentiels (W/A).
La quantité (η_0 - $\eta_1$exp(I_{th}/I_d)) correspond au rendement différentiel externe juste au-dessus du seuil habituellement notée η_d.

On montre sur les figures.V.1 et 2 un exemple de fit avec cette expression des résultats théoriques et expérimentaux pour le laser émettant à 7,6µm étudié dans la chapitre.III de ce manuscrit.

Quand les courbes puissance-courant sont tracées en fonction de la densité de courant, on remplace les notations I, I_{th} et I_d par J, J_{th} et J_d. Dans ce cas, les quantités η_0 et η_1 sont exprimées en W.cm^2 /kA.

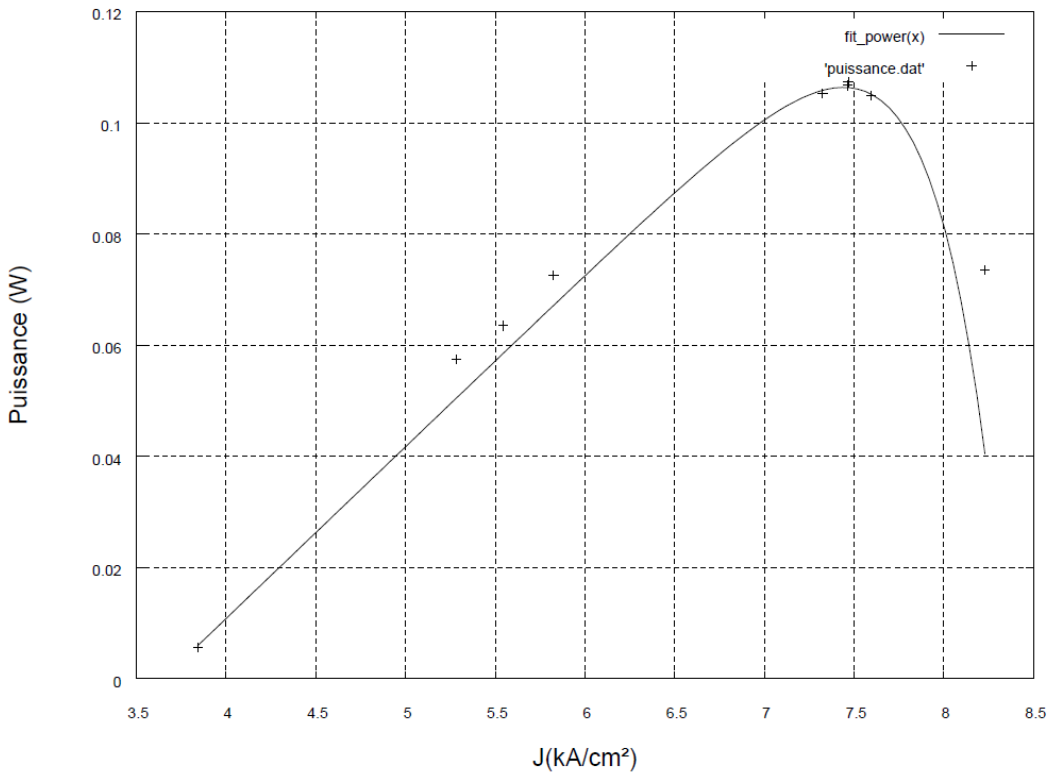


Fig.V.1 : Fit de la courbe Puissance-Courant simulée de la structure 7,6 µm (J_{th} = 3,65 kA/cm² , η_0 = 3,09x10^{-2} W.cm^2/kA, η_1 = 1,15x10^{-11} W.cm^2/kA, J_d = 0,385 kA/cm^2)

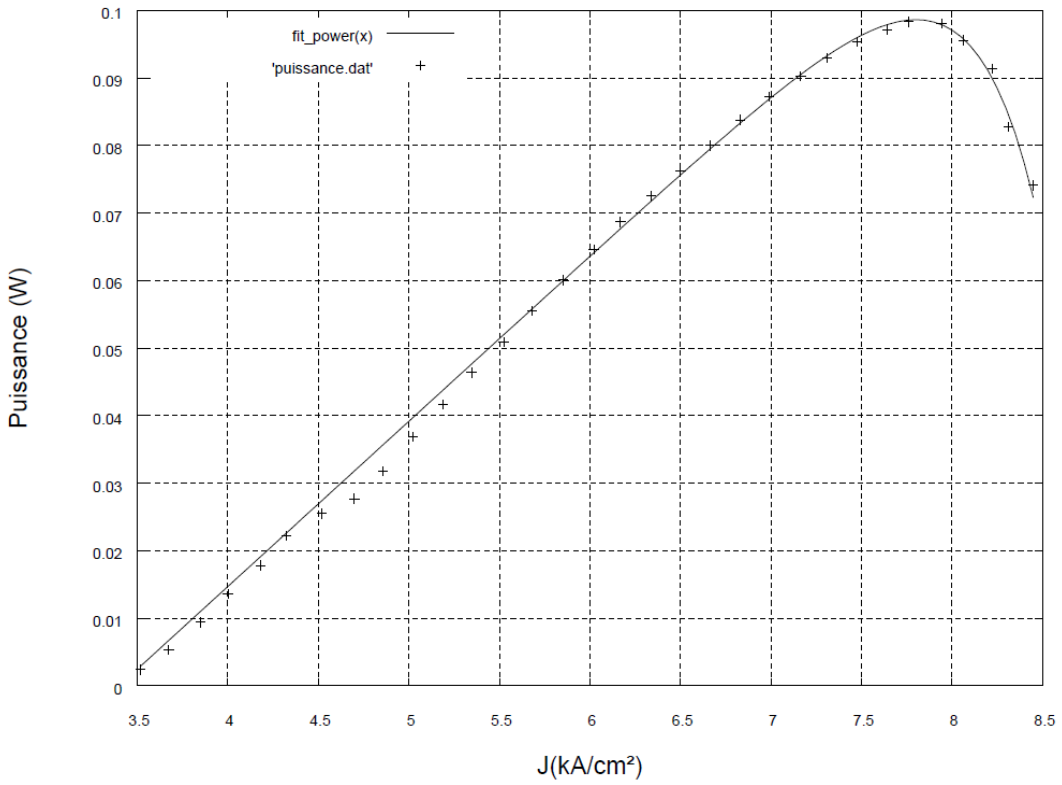


Fig.V.2 : Fit de la Puissance-Courant obtenue expérimentalement de la structure 7,6 µm (J_{th} = 3,40 kA/cm^2, η_0 = 2,45x10-2 W.cm^2/kA, η_1 = 0,98x10-11 W.cm^2/kA, J_d = 0,407 kA/cm^2)

B. Fit empirique des dépendances en température d'un laser à 11 µm

Nous allons montrer qu'il est possible de décrire avec un fit empirique comme celui de la section précédente l'ensemble des résultats de P(I) pulsés entre 80K et 300K pour le cas d'un laser émettant à 11 µm. Les données expérimentales sont tirées de A. Tahraoui et al., APL 78, 416 (2001). Elles sont rappelées sur la figure.V.3.

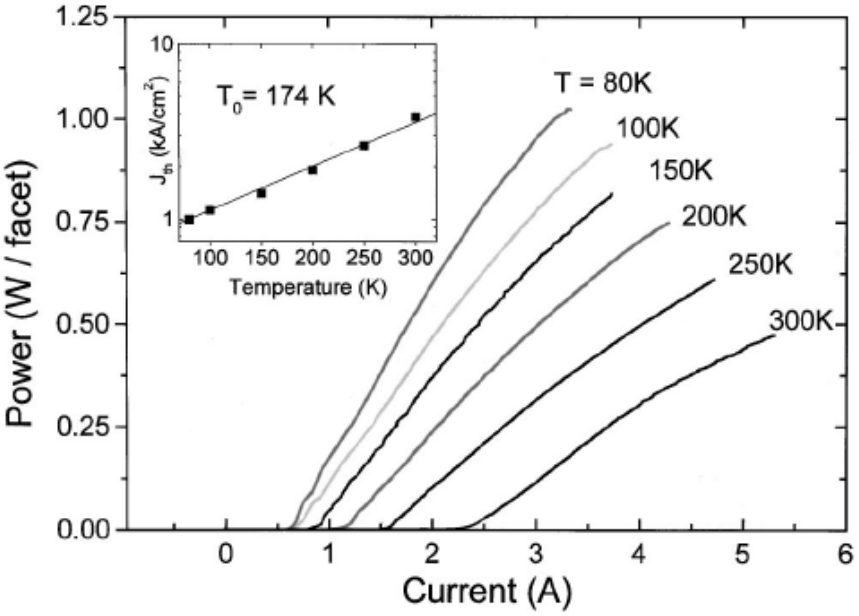


Fig.V.3 : Carctéristiques Puissance-courant pulsées pour un QCL émettant à 11 µm en fonction de la température d'embase (Tahraoui et al, APL 78, 416 (2001))

Pour chacune des courbes ci-dessus, nous déterminons la valeur des quatre paramètres I_{th} , I_d , η_0 et η_1 en utilisant l'expression (V.1).
Les valeurs étant extraites pour chacune des températures, on décrit ensuite la dépendance en température de ces paramètres sous la forme :

$$I_{th} = I_{th0} \left\{ \exp(\frac{T}{T_0}) \right\} \quad \text{(V.2)}$$

$$I_d = I_{d0} \left\{ \exp(-\frac{T}{T_{d0}}) \right\} \quad \text{(V.3)}$$

$$\eta_0 = \eta_{00} \left\{ \exp(-\frac{T}{T_{10}}) \right\} \quad \text{(V.4)}$$

$$\eta_1 = \eta_{10} \left\{ \exp(-\frac{T}{T_{11}}) \right\} \quad \text{(V.5)}$$

On peut retrouver la quantité correspondant au rendement différentiel au-dessus du seuil en calculant la quantité :

$$\eta_d = \eta_0 - \eta_1 \exp(\frac{I_{th}}{I_d}) \qquad \text{(V.6)}$$

On peut paramétrer la dépendance de η_d de la même manière sur la base de l'expression :
:

$$\eta_d = \eta_{d0} \left\{ \exp(-\frac{T}{T_1}) \right\} \qquad \text{(V.7)}$$

Dans les expressions ci-dessus, les paramètres T_0 et T_1 correspondent aux définitions traditionnelles pour les lasers semiconducteurs. Ces paramètres décrivent respectivement la dépendance en température du courant de seuil et celle du rendement différentiel au voisinage du seuil.

Les figures.V.4 à V.8 ci-dessous montrent les déterminations de l'ensemble de ces paramètres pour les cinq quantités considérées : I_{th} , I_d , η_0 , η_1 et η_d .

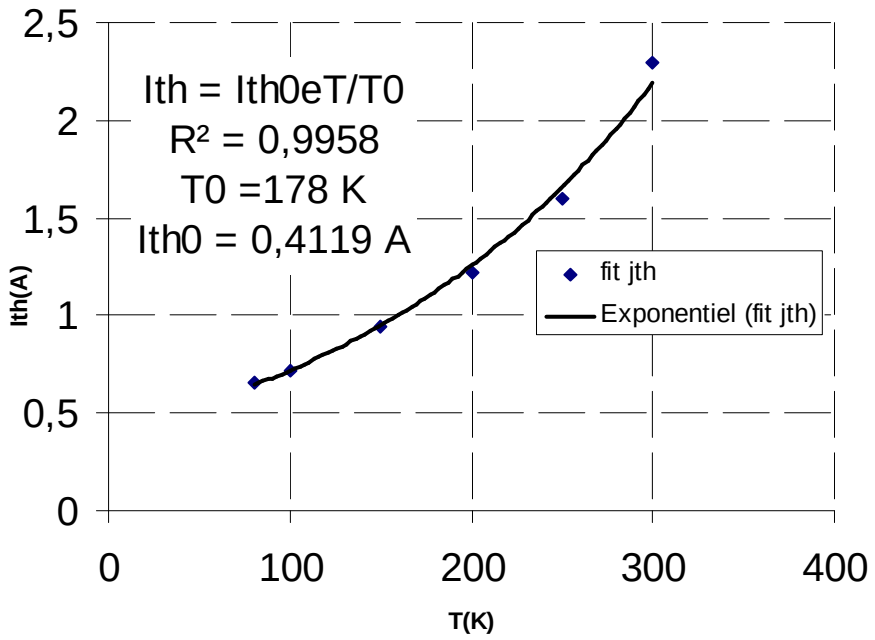


Fig.V.4 : Variation en température du courant de seuil I_{th} déterminée à partir du fit de la courbe Puissance-Courant

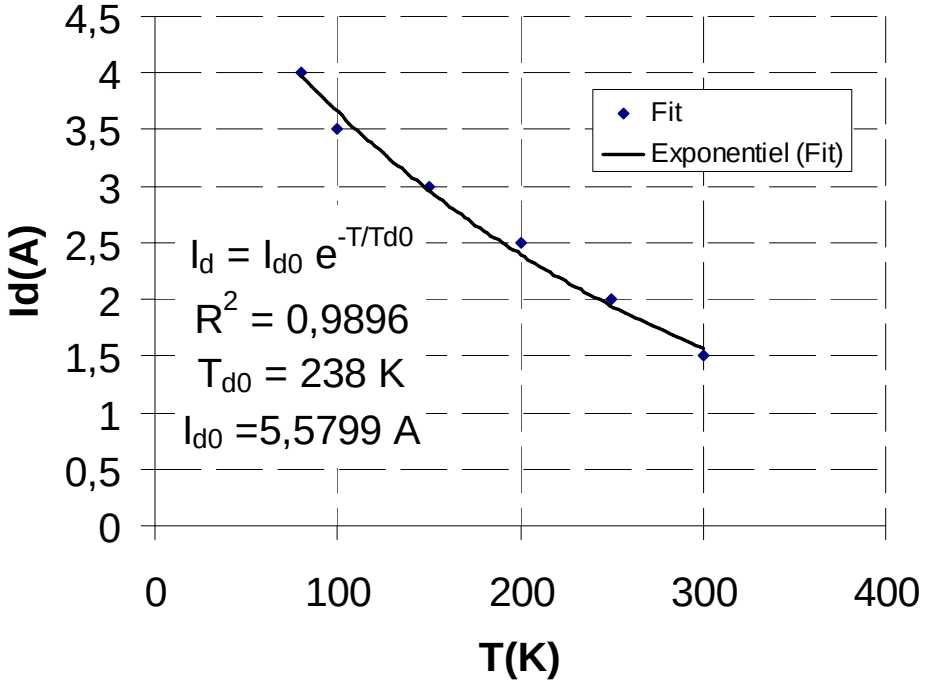


Fig.V.5 : Variation en température du courant I_d déterminée à partir du fit de la courbe Puissance-Courant

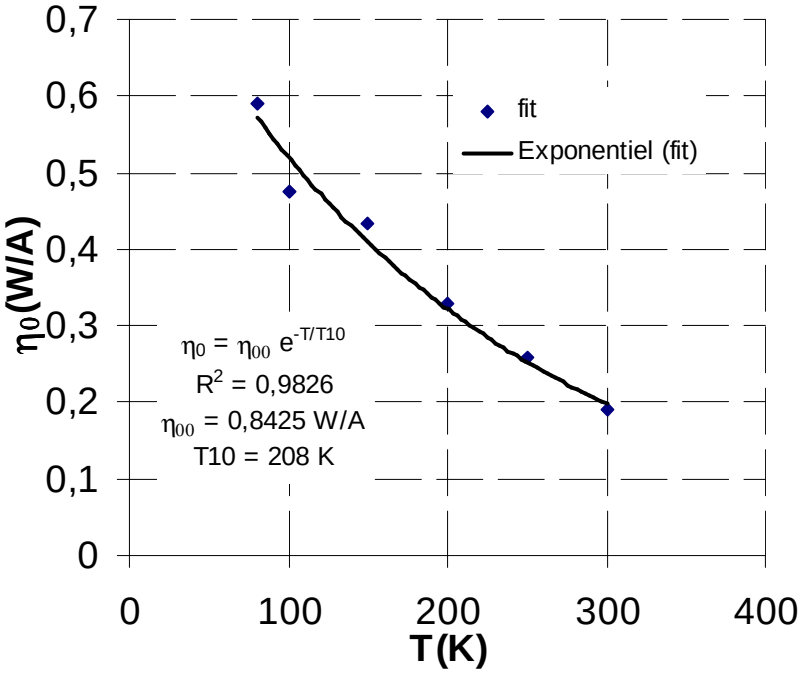


Fig.V.6 : Variation en température du paramètre η_0 déterminée à partir du fit de la courbe Puissance-Courant

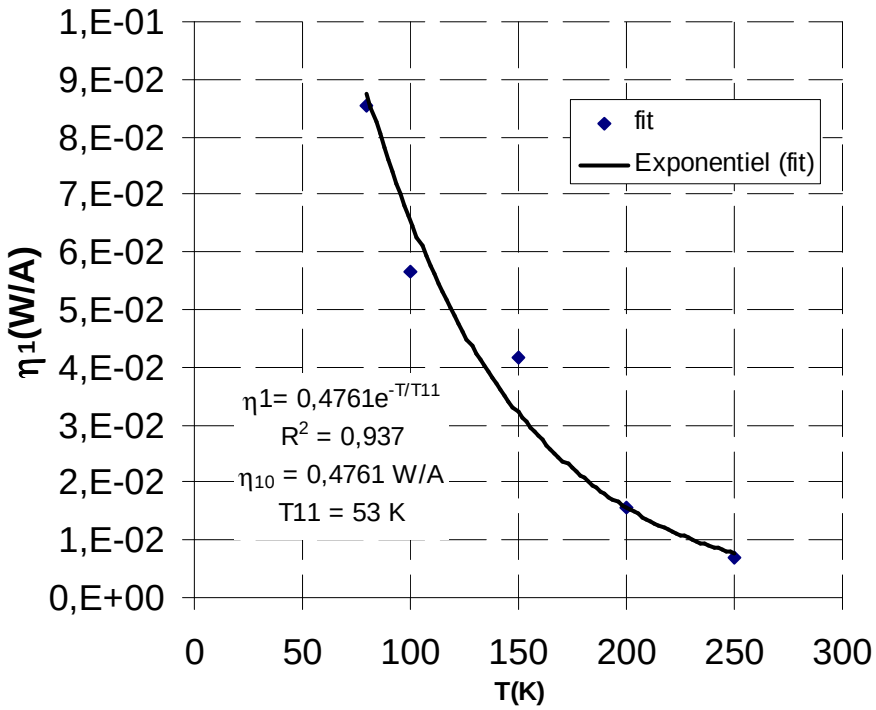


Fig.V.7 : Variation en température du paramètre η_1 déterminée à partir du fit de la courbe Puissance-Courant

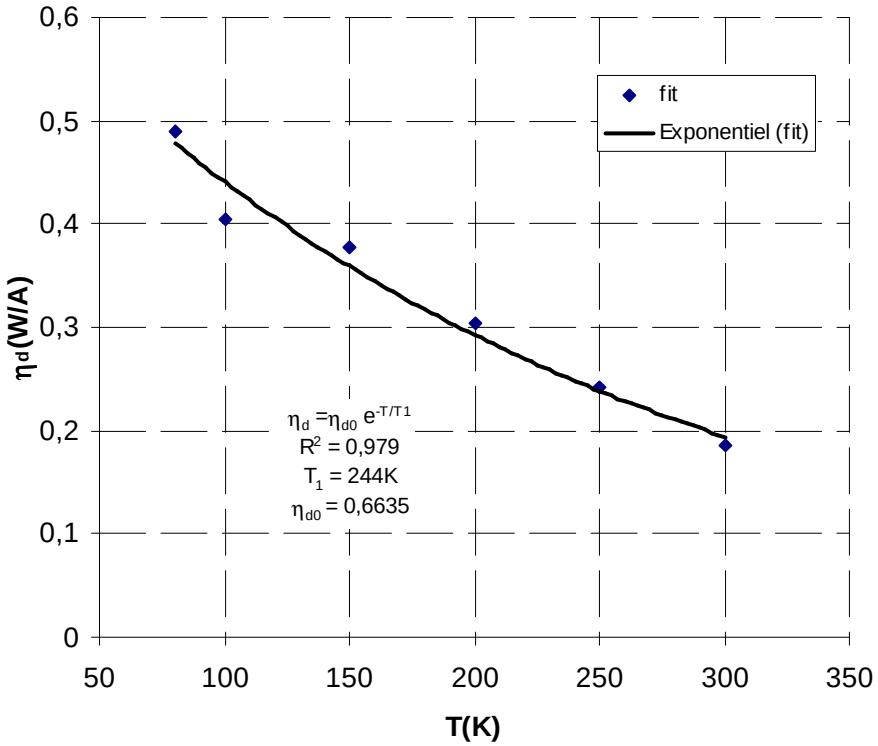


Fig.V.8 : Variation en température du rendement différentiel η_d déterminée à partir du fit de la courbe Puissance-Courant

A la fin de cette procédure, on constate qu'il est possible de décrire entièrement les caractéristiques P(I) pour toutes les températures comprises entre 80 K et 300 K avec la seule connaissance des huit paramètres qui sont repris dans la table ci-dessous.

Paramètre	
I_{th0} *(A)*	*0,412*
T_0 *(K)*	*178*
I_{d0} *(A)*	*5,58*
T_{d0} *(K)*	*238*
η_{00} *(W/A)*	*0,843*
T_{10} *(K)*	*208*
η_{10} *(W/A)*	*0,476*
T_{11} *(K)*	*53*

Tab.V.1 : Table des paramètres décrivant la dépendance en température des P(I) pulsés du laser émettant à 11 µm décrit par Tahraoui et al., APL 78, 416 (2001)

Les courbes déterminées sur la base de ces paramètres (Fig.V.8) montrent par comparaison avec celles expérimentales que la qualité des données expérimentales et des fits est suffisante pour pouvoir se baser sur les expressions approximées afin d'extrapoler les propriétés de ces lasers à forte puissance.

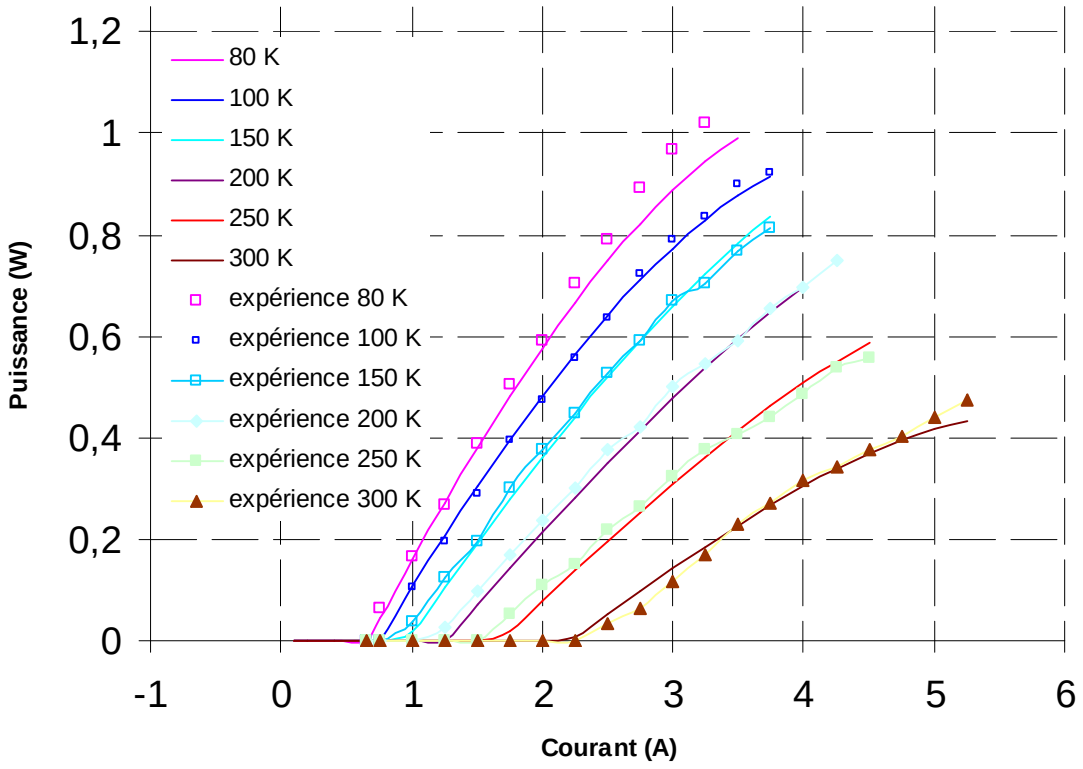


Fig.V.8 : Les courbes des P(I) pulsés du laser émettant à 11 µm décrit par Tahraoui et al. (APL 78, 416 (2001)) déterminées sur la base de paramètres du tableau Tab.V.1

C. Fit empirique des dépendances en température d'un laser à 8 µm

Dans cette section, nous montrons qu'il est possible de décrire avec un fit empirique comme celui de la section précédente l'ensemble des résultats de P(I) pulsés entre 50 K et 250 K pour le cas d'un laser émettant à 8 µm. Les données expérimentales sont tirées de Gmachl et al., APL 79, 572 (2001).

Les figures.V.9 à V.13 ci-dessous montrent les déterminations de l'ensemble de ces paramètres pour les cinq quantités considérées : Ith, Id, η0, η1 et ηd.

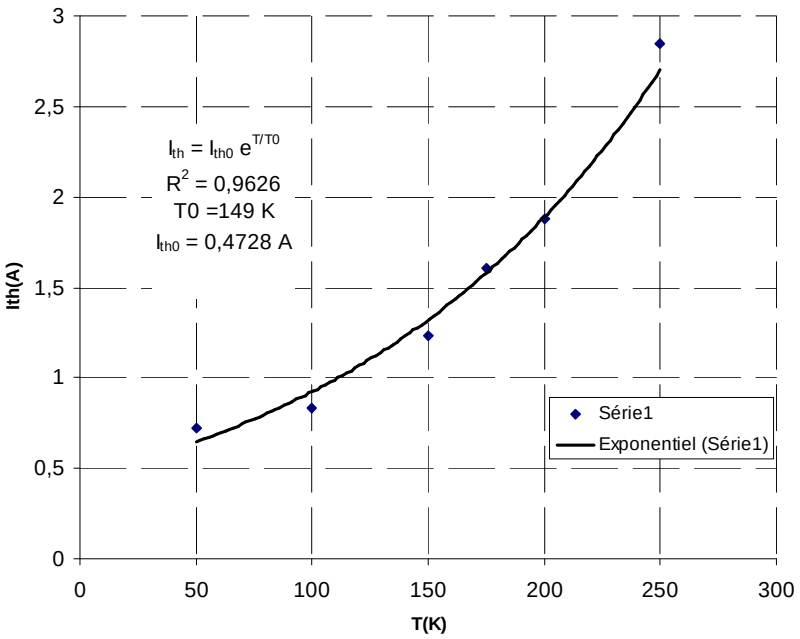


Fig.V.9 : Variation en température du courant de seuil I_{th} déterminée à partir du fit de la courbe Puissance-Courant

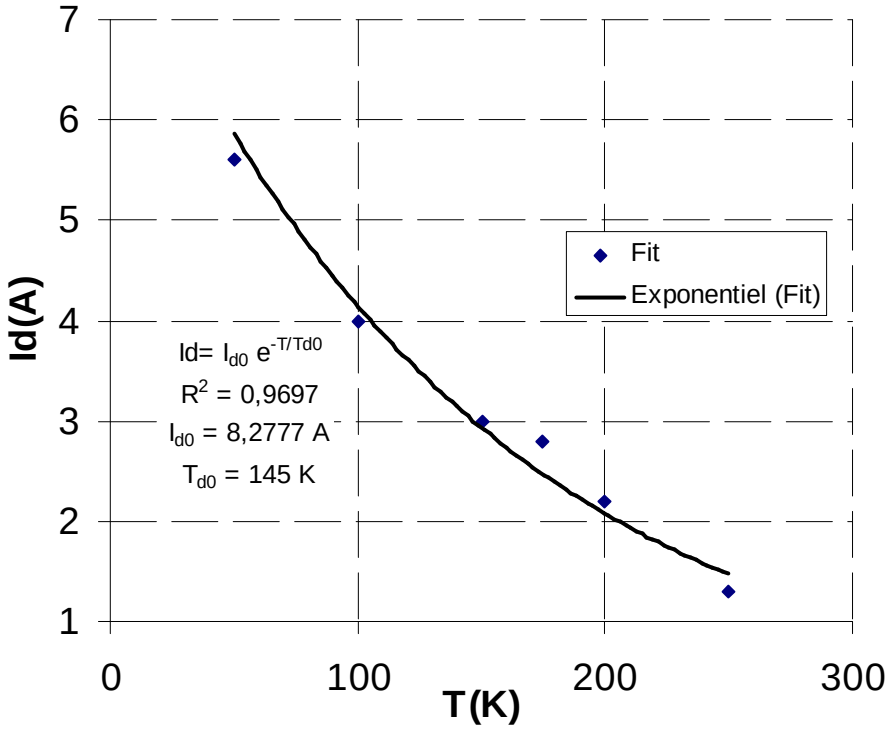


Fig.V.10 : Variation en température du courant I_d déterminée à partir du fit de la courbe Puissance-Courant

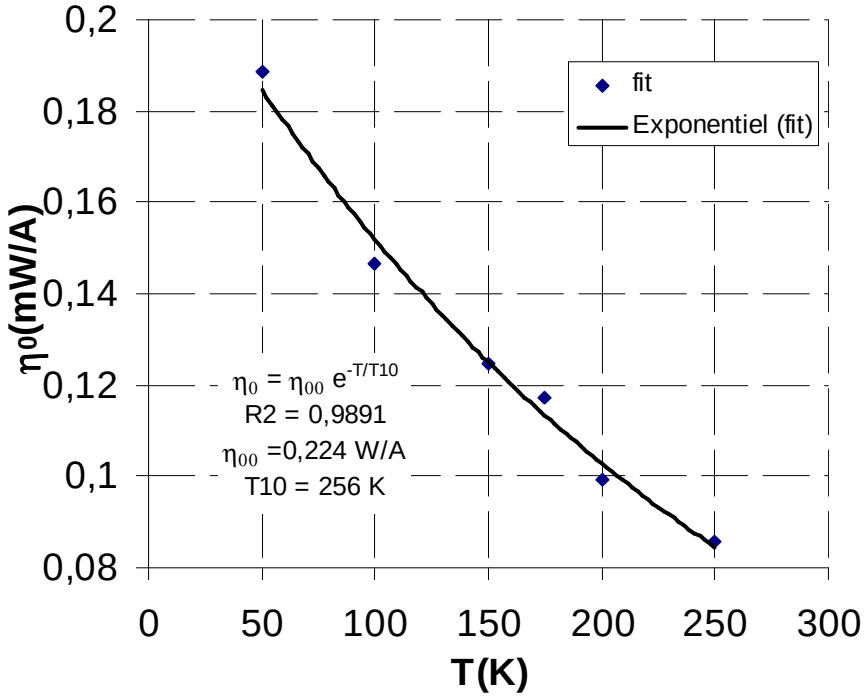


Fig.V.11 : Variation en température du paramètre η_0 déterminée à partir du fit de la courbe Puissance-Courant

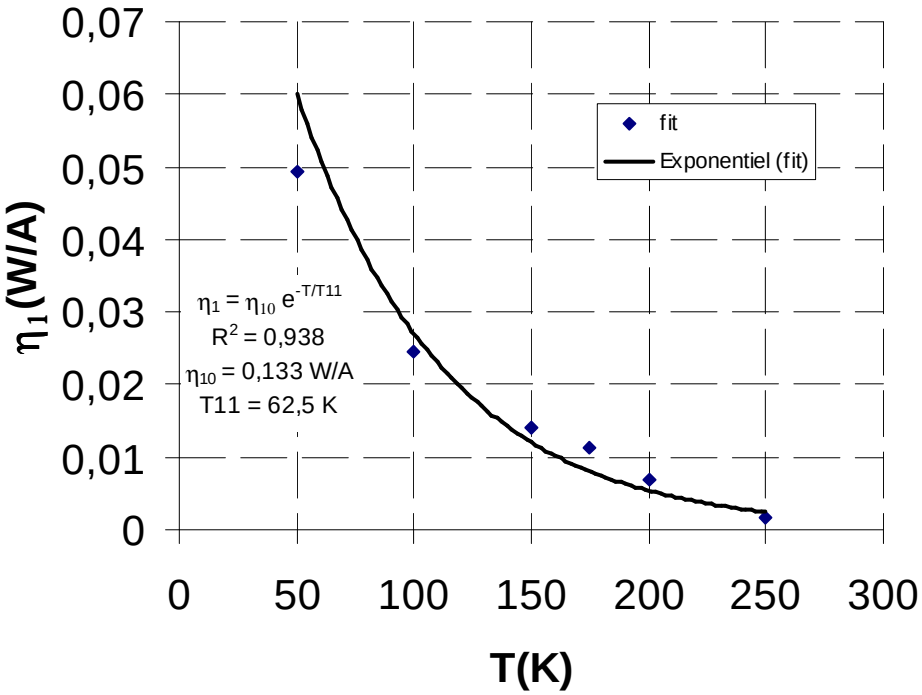


Fig.V.12 : Variation en température du paramètre η_1 déterminée à partir du fit de la courbe Puissance-Courant

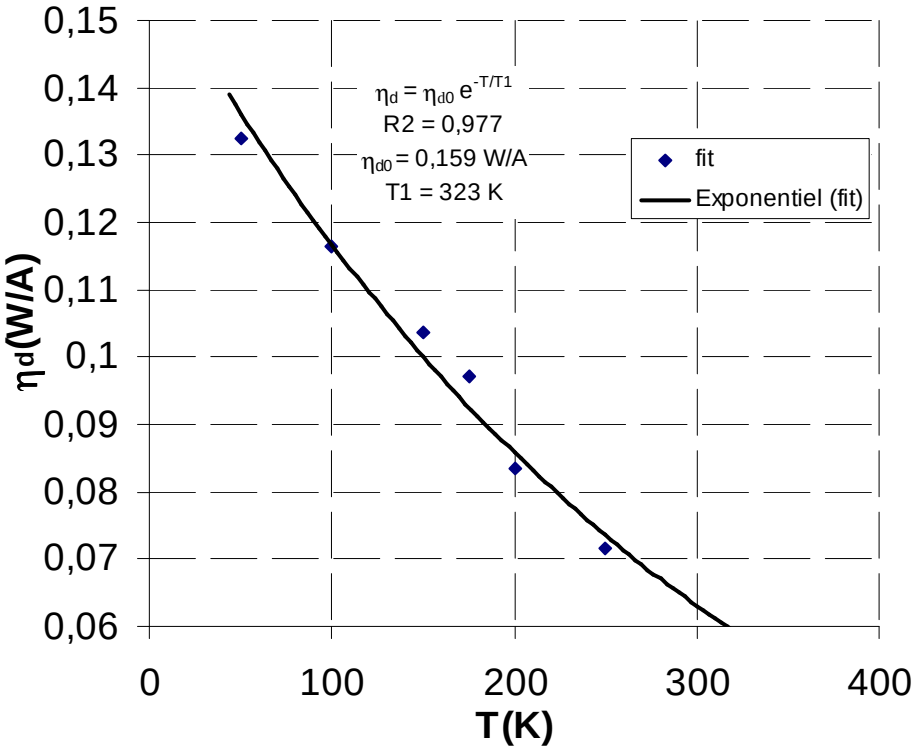


Fig.V.13 : Variation en température du rendement différentiel η_d déterminée à partir du fit de la courbe Puissance-Courant

A la fin de cette procédure, on constate qu'il est possible de décrire entièrement les caractéristiques P(I) pour toutes les températures comprises entre 50 K et 250 K avec la seule connaissance des huit paramètres qui sont repris dans la table ci-dessous.

Paramètre	***Valeur***
I_{th0} *(A)*	*0,473*
T_0 *(K)*	*149*
I_{d0} *(A)*	*8,28*
T_{d0} *(K)*	*145*
η_{00} *(W/A)*	*0,224*
T_{10} *(K)*	*256*
η_{10} *(W/A)*	*0,133*
T_{11} *(K)*	*63*

Tableau.V.2 : Table des paramètres décrivant la dépendance en température des P(I) pulsés du laser émettant à 8 µm décrit par Gmachl et al., APL 79, 572 (2001)

La comparaison (Fig.V.14) des courbes expérimentales et des courbes recalculées sur la base des paramètres déterminés montre que la qualité des données expérimentales et des fits est suffisante pour pouvoir se baser sur les expressions approximées afin d'extrapoler les propriétés de ces lasers à forte puissance.

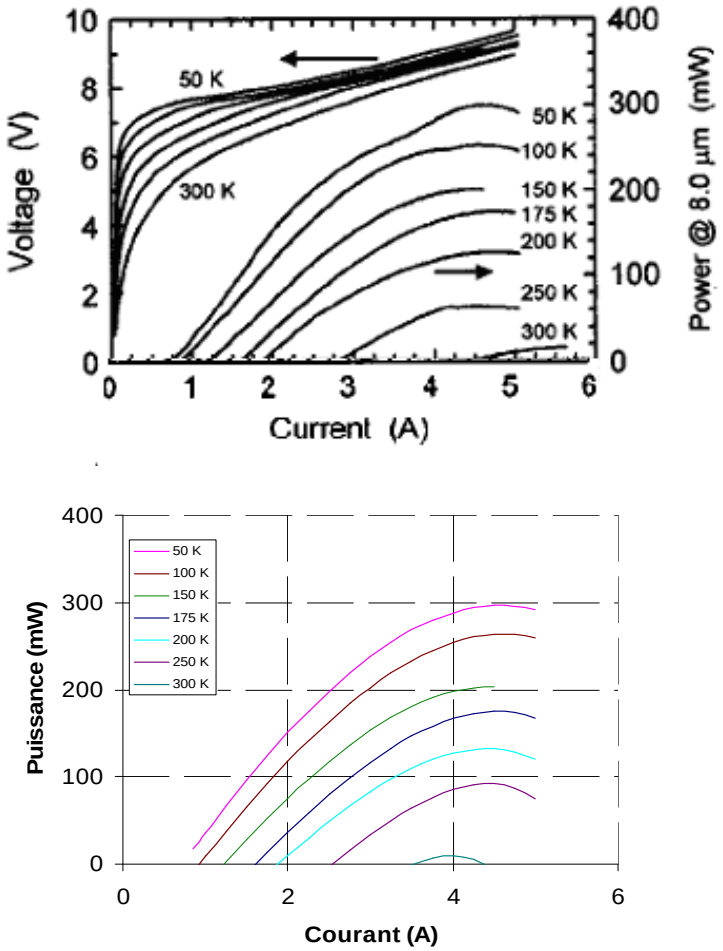


Fig.V.14 : Comparaison entre courbes expérimentales pulsées pour laser 8 µm (haut, Gmachl et al., APL 79, 572 (2001)) et courbes recalculées avec les expressions paramétriques (bas)

D. Extrapolation des puissances CW pour un émetteur unique : application au cas des lasers QCL en bande III

Connaissant les courbes P(I) et V(I) pulsées en fonction de la température, il est facile d'extrapoler la puissance en mode continu (CW) pour différentes valeurs de la résistance thermique.
Ceci se fait en calculant pour chaque valeur du courant la valeur de la température de jonction correspondante en mode continu à partir de la relation de définition de la résistance thermique:

$$T_{Jonction} = T_{Embase} + R_{th} \,.\, P_{dissipée} = T_{Embase} + R_{th} \left(V\ I - P_{optique} \right) \qquad \text{(V.8)}$$

Ici $P_{optique}$ désigne la somme des puissances optiques issues des deux facettes du laser. Connaissant la température de jonction, on calcule la puissance en utilisant la caractéristique P(I) pulsée pour cette température de jonction.

La figure.V.15 montre un exemple d'une telle extrapolation faite sur la base des résultats de simulation pour la structure LCQ émettant 9 µm (Faist et al, IEEE 38, pp 533 (2002)). Pour cette structure, les effets de saturation intrinsèque de la puissance se produisent pour des puissances dissipées relativement faibles, ce qui limite l'influence de la résistance thermique.

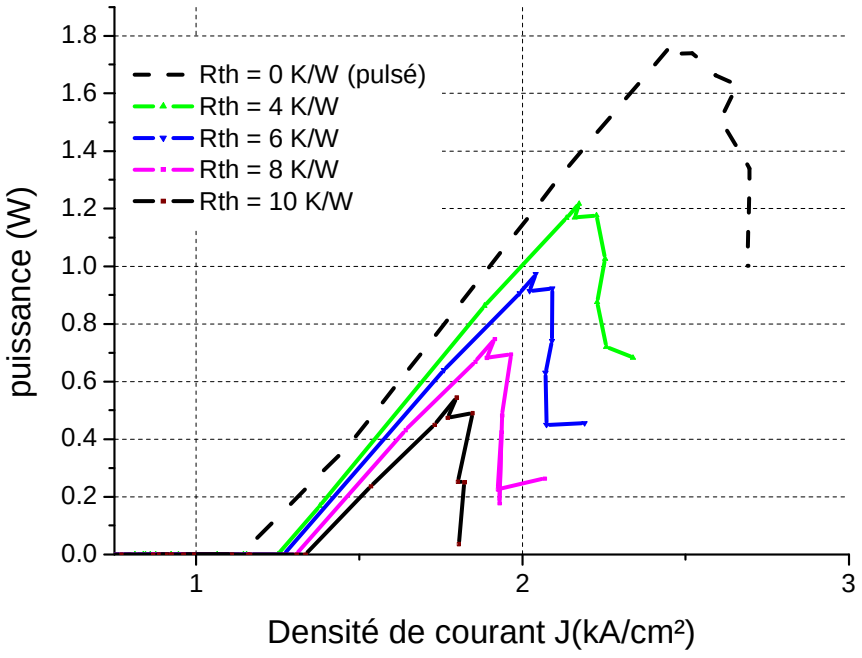


Fig.V.15 : Effet de la variation de la résistance thermique Rth sur la courbe Puissance-Courant pour un fonctionnement continu à température ambiante (simulation sur la structure 9 µm Faist et al, IEEE 38, pp 533 (2002))

La figure.V.16 montre un autre exemple d'une extrapolation au fonctionnement CW faite à partir des données du papier de Tahraoui et al., APL 78, 416 (2001) pour une température d'embase de 200K. Ceci a été fait en utilisant pour les P(I) les expressions déduites du tableau Tab.V.1

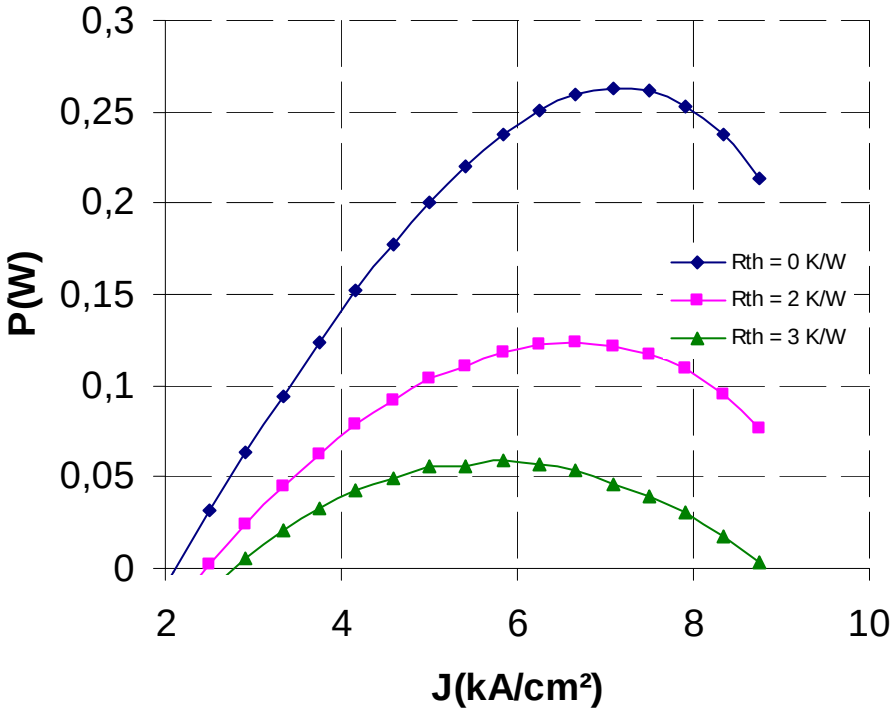


Fig.V.16 : Extrapolation du fonctionnement CW du laser émettant à 11 µm à partir des paramètres du tableau.V.1 pour une température d'embase de 200K en fonction de la résistance thermique R_{th} de l'assemblage

On constate que pour une résistance thermique supérieure à 4 K/W, le laser n'émet pas en CW à cette température. Etant donné que les résistances thermiques envisageables pour un émetteur simple sont dans la gamme 3 à 30 K/W, ceci veut dire que ce type de laser ne peut pas émettre en CW à des températures proches de la température ambiante. Ceci est surtout dû à la valeur élevée du courant de seuil. Ainsi, les meilleurs résultats de puissance continue publiés aujourd'hui en bande III (environ 200 mW à 8,4 µm à 300 K, Diehl et al, APL 88, 201115 (2006)) ont été obtenus avec des lasers qui présentent des courants de seuil à température ambiante faibles (0,1 à 0,2 A).

Nous allons maintenant déterminer quels seraient des paramètres optimisés réalistes en mode pulsé pour un laser virtuel qui bénéficierait de l'ensemble des améliorations envisageables et nous extrapolerons ensuite les performances de ce laser en fonctionnement CW. Nous sommes partis des paramètres de Tahraoui et al. et nous avons considéré des améliorations pour les paramètres liés au courant de seuil et au rendement différentiel. Pour les rendements différentiels, nous sommes partis des records actuels constatés pour les lasers en bande II (de l'ordre de 3 W/A), que nous avons divisé par 2 pour tenir compte du fait que chaque photon en bande III porte deux fois moins d'énergie qu'un photon en bande III, puis encore par 2 pour tenir compte du fait que l'absorption résiduelle par les porteurs libres est plus importante en bande III qu'en bande II. Pour les courants de seuil, nous sommes partis des faibles courants de seuil obtenus par Diehl et al. que nous avons multipliés par 2 pour tenir compte du fait que pour obtenir les puissances les plus élevées, les puces doivent être longues pour réduire au maximum la résistance thermique. Nous avons considéré une dépendance en température légèrement améliorée mais réaliste. On reviendra plus tard sur l'effet du T0 sur les puissances extrapolées.

L'ensemble des choix de paramètres est résumé sur la table suivante et comparée à celle utilisée aux sections précédentes. Nous considérons que ce choix tout à fait arbitraire est cependant réaliste. Les améliorations correspondent à une augmentation du nombre de périodes, à l'utilisation d'une structure enterrée, à une optimisation de la largeur de ridge tout en restant compatible d'un fonctionnement monomode, à une optimisation des dopages pour réduire les pertes, à une optimisation des revêtements de facette HR et AR. Une étude plus approfondie est évidemment nécessaire pour valider quantitativement l'ensemble des améliorations que l'on peut espérer.

Paramètre	***APL 79, 572 (2001)***	***APL 78, 416 (2001)***	***virtuel***
I_{th0} *(A)*	*0,473*	*0,412*	*0,1*
T_0 *(K)*	*149*	*178*	*218*
I_{d0} *(A)*	*8,28*	*5,58*	*5,58*
T_{d0} *(K)*	*145*	*238*	*238*
η_{00} *(W/A)*	*0,224*	*0,843*	*3,3*
T_{10} *(K)*	*256*	*208*	*220*
η_{10} *(W/A)*	*0,133*	*0,476*	*0,476*
T_{11} *(K)*	*63*	*53*	*53*

Tableau.V.3: Table des paramètres décrivant la dépendance en température des P(I) pulsés d'un laser optimisé virtuel émettant dans la bande III

A partir des paramètres de ce laser virtuel, les résultats d'extrapolation au fonctionnement CW pour une température d'embase de 250 K sont présentés sur la figure.V.17 pour différentes valeurs de la résistance thermique.

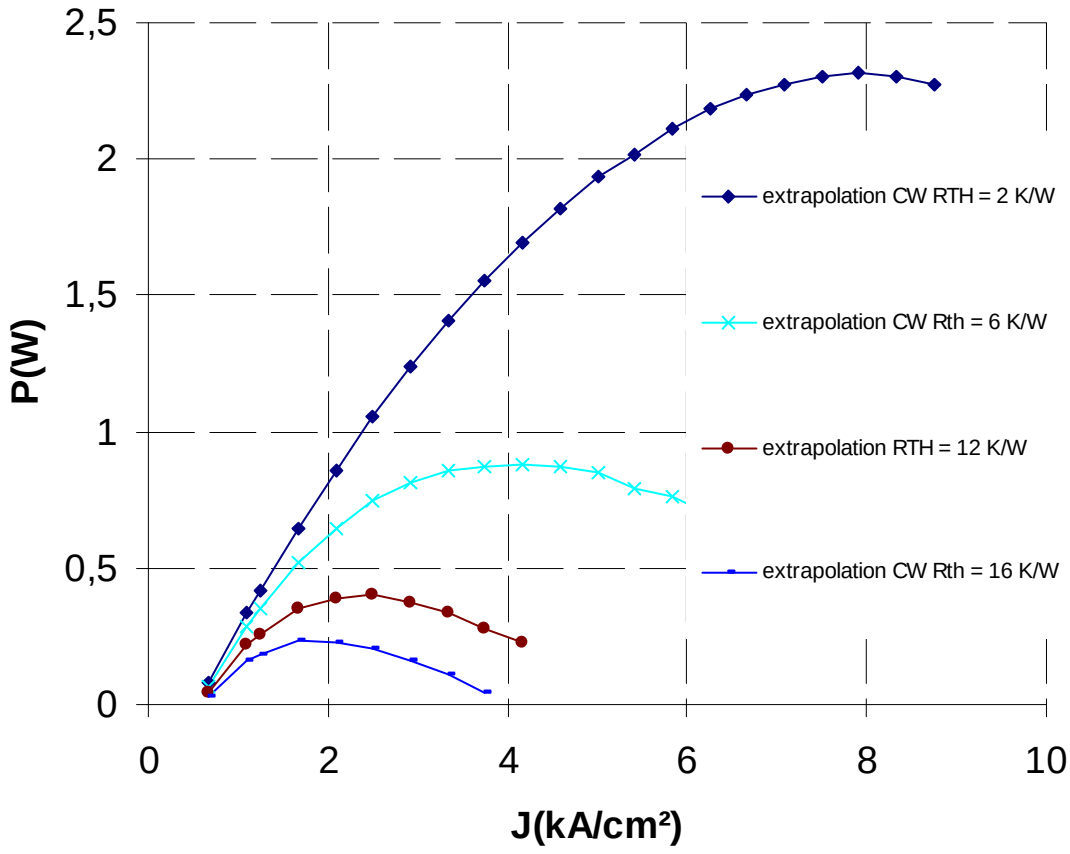


Fig.V.17 : Extrapolation du fonctionnement CW d'un laser optimisé virtuel pour une température d'embase de 250 K en fonction de la résistance thermique R_{th} de l'assemblage

Nous constatons que la résistance thermique de l'assemblage joue un rôle dominant dans la puissance maximale obtenue. Des puissances émises de l'ordre de 1 W par émetteur apparaissent comme tout à fait réalistes.

La dépendance en température du courant de seuil joue un rôle important. Celui-ci est précisé sur la figure.V.18 qui présente le P(I) extrapolé CW pour une température d'embase de 250 K et une résistance thermique de 8 K/W pour trois valeurs de T_0.

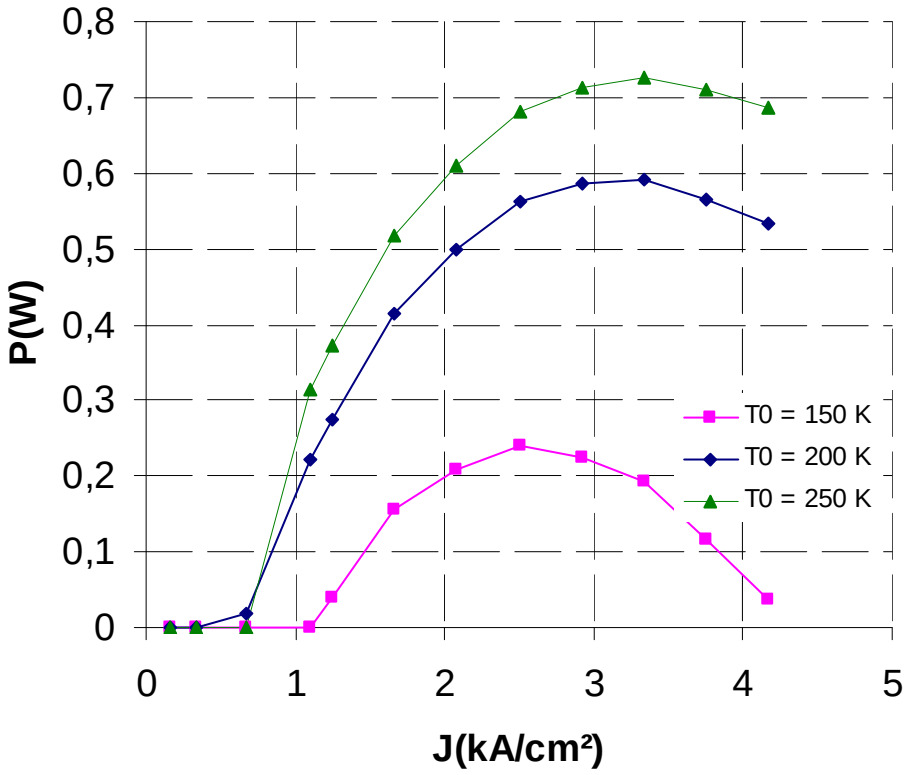


Fig.V.18 : Effet de la température caractéristique T_0 cavité laser sur la courbe Puissance-Courant pour un laser optimisé virtuel à une température d'embase de 250K (Rth = 8 K/W)

E. Extrapolation au fonctionnement CW de barrettes multi-émetteurs en bande III

Nous allons maintenant extrapoler au cas de barrettes multi-émetteurs : à partir des résultats des simulations d'émetteur simple pour le laser optimisé virtuel de la section précédente, nous effectuons une simple mise à l'échelle en considérant qu'une barrette de N émetteurs correspond à la même tension que l'émetteur simple, à un courant et à une puissance multipliés par N.
Le calcul est présenté ci-dessous pour une température d'embase de 250 K pour deux valeurs de résistance thermique pour la barrette de 1 K/W et de 0,5 K/W, ce qui correspond à des nombres réalistes pour une barrette de largeur 1 cm, avec respectivement un refroidissement passif et actif.

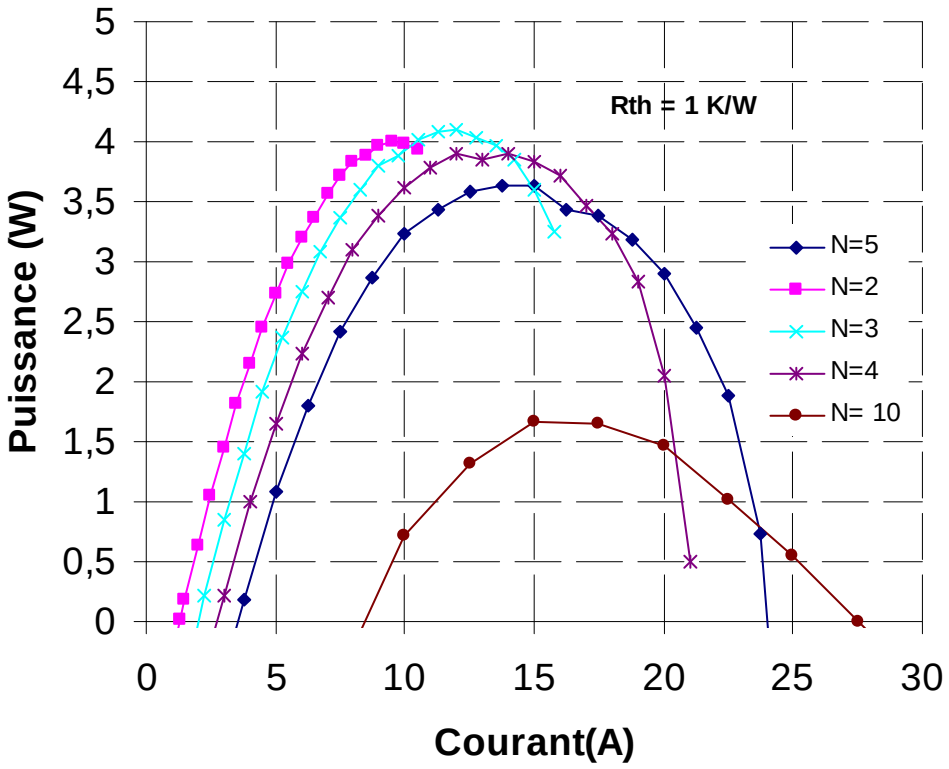


Fig.V.18 : effet du nombre d'émetteurs dans une barrette (R_{th} = 1 K/W)

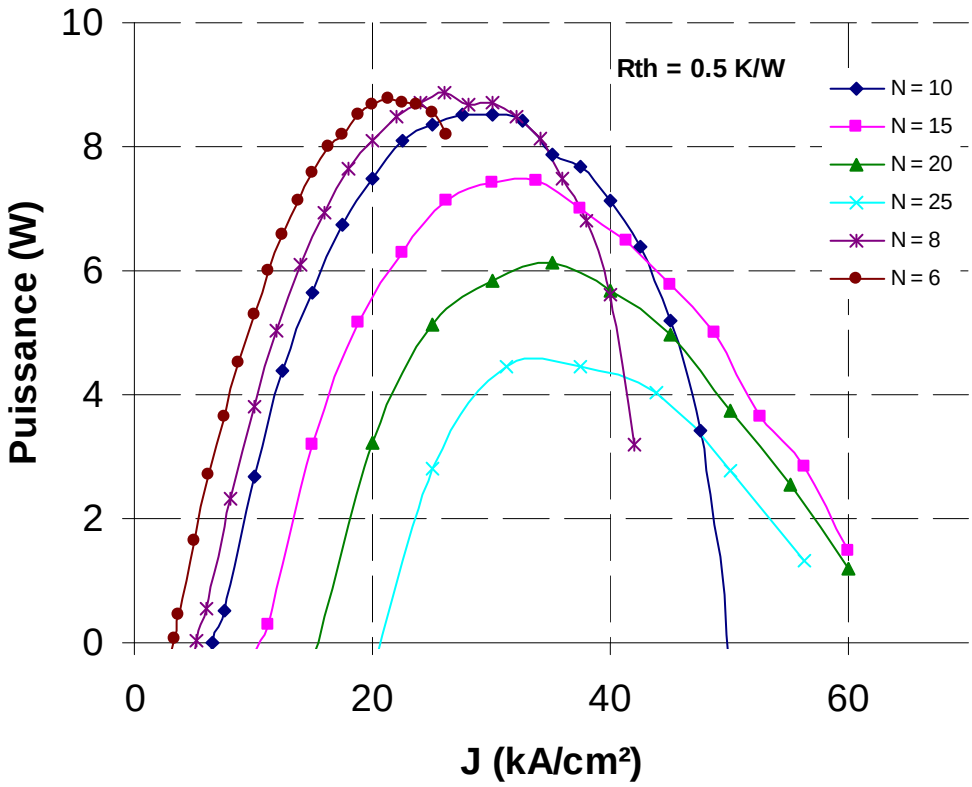


Fig.V.19: Effet du nombre d'émetteurs dans une barrette (Rth = 0,5 K/W)

Ce modèle simplifié n'est pas réaliste pour le cas d'un faible nombre d'émetteurs, car il considère que la résistance thermique est constante quelque soit le nombre d'émetteurs. En fait la résistance thermique augmente quand le nombre d'émetteurs diminue. Les puissances obtenues pour les faibles nombres d'émetteurs sont donc surestimées dans les figures.V.18 et V.19. Les deux figures montrent que pour une valeur de résistance thermique donnée, il existe une valeur optimale du nombre d'émetteurs par barrette pour laquelle il est possible d'extraire une puissance maximale.

En considérant des valeurs très faibles de résistance thermique de 0,1 K/W, une puissance de 40 W est extrapolée pour une barrette de 25 émetteurs. Ces valeurs de résistance sont atteignables théoriquement à condition d'utiliser un refroidissement actif sur les deux faces de la barrette et d'amincir l'épaisseur des barrettes en-dessous des 100 µm habituels.

F. Conclusion

Nous avons montré qu'il est possible de représenter les courbes P(I) des lasers sous une forme simplifiée qui permet de reproduire précisément les évolutions en température des résultats expérimentaux et théoriques. Sur la base de ces expressions, en prenant en compte les effets thermiques dans une approche simplifiée, nous avons évalué l'ordre de grandeur des puissances que l'on peut espérer extraire de lasers cascade en bande III en fonction de différents facteurs. Nous montrons qu'il est tout à fait réaliste d'envisager une émission de l'ordre de 1 W pour un émetteur QCL unique en bande III et de l'ordre de 10 W pour une barrette d'émetteurs dans la bande III.