



Université Mohamed Khider – Biskra  
Faculté des Sciences Exactes et Sciences de la  
nature et de la vie

جامعة محمد خيضر بسكرة  
كلية العلوم الدقيقة وعلوم الطبيعة والحياة  
قسم: علوم المادة  
المرجع:

Département : Sciences de la Matière

Réf : .....

Thèse présentée en vue de l'obtention  
Du diplôme de

## Doctorat LMD en Physique

Spécialité : Physique

### Contribution à l'étude statistique des populations pour l'amélioration du gain des lasers à puits quantique à base de nitrures dilués.

Présentée par :

**Sara HANI**

Soutenue publiquement le 15/05/2025

**Devant le jury composé de :**

Mr. H. SAIDI  
Mr. A. GUEDDIM  
Mr. A. ATTAF  
Mr. A. KHADIR  
Mr. M. NOUADJI

Professeur  
Professeur  
Professeur  
Professeur  
MCA

Président  
Rapporteur  
Co-Rapporteur  
Examineur  
Examineur

Université de Biskra  
Université de Djelfa  
Université de Biskra  
Université de Djelfa  
Université de Biskra

---

## REMERCIEMENTS

Je remercie en premier lieu, mon dieu qui a bien voulu ma donner la force pour effectuer le présent travail.

En second lieu, je tiens à remercier mon directeur de thèse, le Professeur Ahmed GUEDDIM pour avoir accepté de diriger ce travail et je le remercie beaucoup pour sa noble attitude aux obstacles que j'ai rencontrés pour terminer ma thèse, son sérieux, sa compétence et ses orientations...

Je remercie le Professeur Abdallah ATTAF de nous avoir aidés à finaliser ce travail dans les meilleures conditions...

Je remercie les membres de jury constitué de : le professeur Hanane SAIDI (président), le professeur Abdelkader KHADIR (examineur), Dr. Malika NOUADJI (examineur).

# ***DEDICACES***

*A tous ceux que j'aime*

---

## ***RESUME***

La présente thèse étudie le laser à puits quantique GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>/GaSb émettant dans la région spectrale infrarouge. La région active est constituée de GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> et les couches de gaine sont constituées de GaSb. Plusieurs propriétés physiques (électroniques, optiques et élastiques) de GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> ont été calculées et utilisées comme données d'entrée pour la simulation de notre laser à puits quantique.

Le gain optique a ensuite été étudié en fonction de la longueur d'onde, de la largeur de la région active et de la concentration des porteurs de charge. Le spectre optique du gain est calculé en utilisant la méthode k.p en considérant le modèle parabolique de la bande de conduction et le couplage des sous-bandes entre les trous lourds et les trous légers dans la bande de conduction. L'effet de la contrainte a été pris en compte.

### **Mots clés**

Laser, puits quantique, propriétés physiques, GaSbN/GaSb, gain optique.

## ***ABSTRACT***

The present thesis investigates a quantum well laser GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>/GaSb emitting in the infrared spectral region. The active region is made of GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> and the cladding layers consist of GaSb. Several physical properties (electronic, optical and elastic) of GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> were calculated and used as input data for the simulation of our quantum well laser.

The optical gain was thereafter addressed as a function of wavelength, the width of the active region and the concentration of charge carriers. The optical spectrum of the gain is calculated using the k.p method considering the parabolic model of conduction band and the subbands coupling between heavy holes and light holes in the conduction band. The effect of the strain was taken into consideration.

### **Keywords**

Laser, quantum well, physical properties, GaSbN/GaSb, optical gain.

## ملخص

نبحث في الأطروحة الحالية عن انبعاث ليزر GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>/GaSb في البئر الكمومي في المنطقة الطيفية للأشعة تحت الحمراء. المنطقة النشطة مصنوعة من GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> وتتكون طبقات الكسوة من GaSb. تم حساب العديد من الخصائص الفيزيائية (الإلكترونية والضوئية والمرنة) لـ GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> واستخدامها كتاريخ إدخال لمحاكاة ليزر البئر الكمي الخاص بنا.

تمت معالجة الكسب البصري بعد ذلك كدالة لطول الموجة وعرض المنطقة النشطة وتركيز حاملات الشحنة. يتم حساب الطيف البصري للكسب باستخدام طريقة k.p مع الأخذ في الاعتبار النموذج المكافئ لنطاق التوصيل واقتران النطاقات الفرعية بين الثقوب الثقيلة والثقوب الخفيفة في نطاق التوصيل. تم أخذ تأثير السلالة في الاعتبار.

## الكلمات المفتاحية

الليزر، بئر الكم، الخواص الفيزيائية، GaSbN/GaSb، الكسب البصري.

---

# TABLE DES MATIÈRES

Remerciement	i
Dédicaces	ii
Résumés	iii
Table des matières	vi
Liste des figures	ix
Liste des tableaux	xiii
Liste des abréviations et symboles	xiv
<b>Introduction générale</b>	<b>1</b>
<b>Chapitre I Généralité de base sur le laser</b>	
I.1.Introductions	4
I.2. Bref historique sur le laser	4
- Définition du laser	5
-Caractéristique de la lumière laser	6
* Unidirectionnel	6
*Monochromatique	6
*Cohérent	6
I .3. Gain dans un milieu matériel	6
I.4. Principe de fonctionnement du laser	7
I.4.1. La source d'énergie (le pompage)	7
I.4.2. Le milieu amplificateur	9
*Absorption	9
*Emission spontanée	10
*Emission stimulée	10
*L'inversion de population	11
I.4.3. Résonateur optique (la cavité)	11
I .5. Les applications des lasers	13
I .6. Les types de laser	16
I .6.1. Lasers à gaz	16
*Les lasers à gaz ionisé : argon, krypton	17
*Le laser à hélium-néon	18

---

*Lasers à vapeurs métalliques	19
*Le laser moléculaire à CO <sub>2</sub>	20
*Le laser chimique	21
I .6.2. Lasers liquid (colorant)	22
I .6.3. Laser solide	22
*Laser à semiconducteur ou diode laser	23
*Diode laser à homojonction(PN)	23
*Diode laser à double hétérojonction (LDH)	25
*Laser à puits quantique	25
1. Puits quantiques de type-I	28
2. Puits quantiques de type-II	28
3. Puits quantiques de type-III	29
I.7.Conclusion	30
Références	31
<b>Chapitre II Gain optique d'un laser à puits quantique</b>	
II.1. Introduction	36
II.2. Puits quantique	36
II.2.1. Introduction	36
II.2.1.1. Paramètres de maille	37
II.2.1.2. Gaps d'énergie	38
II.2.1.3. l'affinité électronique	39
II.2.2. Fonctions d'ondes et niveaux d'énergie	39
II.2.3. Discontinuité des bandes d'énergies	43
II.2.4. Notion de contrainte	44
II.2.5. Densité d'états	45
II.2.6. Détermination des pseudo-niveaux de Fermi	46
II.2.7. Transitions optiques	49
II.3. États électroniques dans le puits quantique	49
II.3.1. Théorie k.p	49
II.3.1.1. Hamiltonien des électrons dans la bande de conduction	50
II.3.1.2. Hamiltonien des trous dans la bande de valence : description matricielle	50

---

II.3.2. Le modèle de Luttinger-Kohn	50
II.3.3. L'Hamiltonien de Bir-Pikus	51
II.4. Le gain optique	55
II.5. Conclusion	59
Reference	61
<b>Chapitre III Résultats et discussion</b>	
III.1. Introduction	64
III.2. Propriétés électroniques et optique du GaSb <sub>1-x</sub> N <sub>x</sub>	64
III.2.1. Propriétés optoélectroniques	64
III.2.1.1. Gaps d'énergie	65
III.2.1.2. Largeur de la bande de valence	68
III.2.1.3. Masses effectives des électrons et des trous	68
III.2.1.4. Facteur d'ionicté	70
III.2.1.5. Indice de réfraction et constantes diélectriques	71
III.2.2. Propriétés élastiques	72
III.2.2.1. Constantes élastiques	72
III.2.2.2. Modules de compression, de cisaillement et d'Young	75
III.2.2.3. Facteur d'anisotropie et Coefficient de Poisson	78
III.2.3. Discontinuités des bandes	78
III.2.3.1. Discontinuités des bandes de conduction	78
III.2.3.2. Discontinuités des bandes de valence	80
III.2.3.3. Discontinuités de bandes au niveau des hétérointerface GaSb <sub>1-x</sub> N <sub>x</sub> /GaSb	82
III.2.3.4. Gaps énergétiques relaxé et contraints	83
III.3. Propriétés physiques du laser GaSb <sub>1-x</sub> N <sub>x</sub> /GaSb	85
III.3.1. Spectre du gain optique pour différentes injections	85
III.3.2. Spectre du gain optique pour différentes largeurs de puits	88
III.3.3. Gain maximal en fonction de l'injection	89
III.3.4. Longueur d'onde émise	90
III.4. Conclusion	91
Référence	92
<b>Conclusion générale</b>	94

---

## LISTE DES FIGURES

<b>Figure 1.1.</b>	Schéma d'un système laser.	<b>7</b>
<b>Figure 1.2.</b>	Modèle de Bohr.	<b>8</b>
<b>Figure 1.3.</b>	Transitions électroniques entre les extrema des bandes de valences et de conduction.	<b>9</b>
	a) Semiconducteur à gap direct, les transitions sont verticales et par suite radiatives.	
	b) Semiconducteur à gap indirect, les transitions sont obliques et non radiatives au premier ordre.	
	c) Absorption directe de photons dans un semiconducteur à gap indirect.	
<b>Figure 1.4.</b>	Illustration des processus d'absorption, d'émissions spontanée et stimulée.	<b>11</b>
<b>Figure 1.5.</b>	Système à deux, trois et quatre niveaux.	<b>12</b>
<b>Figure 1.6.</b>	Cavité résonante.	<b>13</b>
<b>Figure 1.7.</b>	Ablation cellulaire dans un embryon de <i>P. dumerilii</i> .	<b>15</b>
<b>Figure 1.8.</b>	Illustration des diverses applications.	<b>16</b>
<b>Figure 1.9.</b>	Représentation d'un laser à gaz et de son tube a décharge.	<b>16</b>
<b>Figure 1.10.</b>	Schéma des niveaux électroniques des atomes de Ne et d'He contribuant à l'établissement de l'effet laser.	<b>19</b>
<b>Figure 1.11.</b>	Les différents niveaux d'énergie des transitions vibrationnelles des molécules de gaz carbonique et de d'azote CO <sub>2</sub> -N <sub>2</sub> .	<b>21</b>
<b>Figure 1.12.</b>	Population des bandes d'énergie.	<b>24</b>
<b>Figure 1.13.</b>	Structure d'une diode laser à homojonction.	<b>24</b>
<b>Figure 1.14.</b>	Diagramme énergétique.	<b>25</b>
<b>Figure 1.15.</b>	Structured'une diode laser à double hétérojonction.	<b>25</b>
<b>Figure 1.16.</b>	Diagramme d'énergie.	<b>26</b>
<b>Figure 1.17.</b>	Schéma d'une structure de puits quantique selon la nature de la discontinuité de bande interdite à l'interface puits-barrière.	<b>27</b>
<b>Figure 1.18.</b>	Profil de puits quantique de type I.	<b>28</b>
<b>Figure 1.19.</b>	Profil de puits quantique de type II.	<b>28</b>
<b>Figure 1.20.</b>	Profil de puits quantique de type III.	<b>29</b>

<b>Figure 2.1.</b>	(a)Puits quantique carré de largeur $Lz$ et de hauteur $V_0$ ; (b) :Couche d'un matériau semi-conducteur A possédant un  gap inférieur à celui du matériau semi-conducteur B.	<b>37</b>
<b>Figure2.2.</b>	Diagramme présentant le gap d'énergie (en ordonnée) et le paramètre de maille (en abscisse) certains semiconducteurs.	<b>38</b>
<b>Figure 2.3.</b>	Alignement des bandes d'après Van de Walle [14].	<b>39</b>
<b>Figure 2.4.</b>	Solutions graphiques des équations 1.9 et 1.10 .Les solutions paires et impaires correspondent à  l'intersection de la droite de pente $k_0^{-1} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}}$ avec les fonctions tangente (ligne continue) et cotangente (ligne discontinue)respectivement.	<b>40</b>
<b>Figure2.5.</b>	(a) Mini-bandes d'énergie créées par le confinement à deux dimensions,(b) Densité d'états à deux dimensions (-) et à trois dimensions (- -).	<b>42</b>
<b>Figure2.6.</b>	Les discontinuités des bandes de conduction et de valence.	<b>44</b>
<b>Figure 2.7.</b>	Représentation de l'adaptation du paramètre de maille de la épitaxiée sur un substrat.	<b>45</b>
<b>Figure 2.8.</b>	Transitions verticales dans l'espace $\vec{k}$ de la bande conduction vers la bande de valence.	<b>47</b>
<b>Figure 3.1.</b>	Structure des bandes d'énergie du $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ (Ligne continue: $\text{GaSb}$ , ligne pointillée: $\text{GaSb}_{0.98}\text{N}_{0.02}$ ).	<b>65</b>
<b>Figure 3.2.</b>	Gap direct $E_F^\Gamma$ en fonction de la concentration d'azote sans et avec désordre.	<b>66</b>
<b>Figure 3.3.</b>	Gaps direct $E_F^\Gamma$ et indirects $E_F^X$ et $E_F^L$ en fonction de la concentration d'azote.	<b>67</b>
<b>Figure 3.4.</b>	Largeur de la bande de valence en fonction de la concentration d'azote.	<b>68</b>
<b>Figure 3.5.</b>	Masse effective des électrons en unité de $m_0$ en fonction de la concentration d'azote.	<b>69</b>
<b>Figure 3.6.</b>	Masse effective des trous lourds en unité de $m_0$ en fonction de la	<b>69</b>

---

	concentration d'azote	
<b>Figure 3.7.</b>	Ionicité en fonction de la concentration d'azote.	<b>70</b>
<b>Figure 3.8.</b>	Indice de réfraction en fonction de la concentration d'azote.	<b>71</b>
<b>Figure 3.9.</b>	Constants diélectriques statiques et de haute fréquence en fonction de la concentration d'azote.	<b>71</b>
<b>Figure 3.10.</b>	Constante élastique $C_{11}$ en fonction de la concentration d'azote (Ligne continue : en négligeant l'effet du désordre, ligne pointillée : en considérant l'effet du désordre).	<b>73</b>
<b>Figure 3.11.</b>	Constante élastique $C_{12}$ en fonction de la concentration d'azote (Ligne continue : en négligeant l'effet du désordre, ligne pointillée: en considérant l'effet du désordre).	<b>74</b>
<b>Figure 3.12.</b>	Constante élastique $C_{44}$ en fonction de la concentration d'azote (Ligne continue : en négligeant l'effet du désordre, ligne pointillée: en considérant l'effet du désordre).	<b>74</b>
<b>Figure 3.13.</b>	Module de compression $B_s$ en fonction de la concentration d'azote (Ligne continue: en négligeant l'effet du désordre, ligne pointillée: en considérant l'effet du désordre).	<b>75</b>
<b>Figure 3.14.</b>	Module de shear $C'$ en fonction de la concentration d'azote (Ligne continue: en négligeant l'effet du désordre, ligne pointillée: en considérant l'effet du désordre).	<b>76</b>
<b>Figure 3.15.</b>	Module d'Young $Y_0$ en fonction de la concentration d'azote.	<b>76</b>
<b>Figure 3.17.</b>	Discontinuités des bandes de valence en fonction de la composition d'azote dans le substrat (y) et dans la couche supérieure (x) (a. trous lourds, b. trous légers).	<b>81</b>
<b>Figure 3.18.</b>	Discontinuités des bandes en fonction de la composition d'azote.	<b>83</b>
<b>Figure 3.19.</b>	Gaps énergétiques du matériau $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ relaxé puis contraint $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}$ en fonction de la concentration d'azote.	<b>84</b>
<b>Figure 3.20.</b>	Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une largeur de puits quantique de 2 nm.	<b>86</b>
<b>Figure 3.21.</b>	Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour	<b>87</b>

---

---

	une composition $x=0.03$ et une largeur de puits quantique de 3 nm.	
<b>Figure 3.22.</b>	Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition $x=0.03$ et une largeur de puits quantique de 4 nm.	<b>87</b>
<b>Figure 3.23.</b>	Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition $x=0.03$ et une largeur de puits quantique de 5 nm.	<b>88</b>
<b>Figure 3.24.</b>	Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition $x=0.03$ et une densité de porteurs de $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .	<b>89</b>
<b>Figure 3.25.</b>	Variation du gain optique maximal en fonction de la densité des porteurs pour une composition $x=0.03$ et pour différentes largeurs de puits.	<b>90</b>
<b>Figure 3.26.</b>	Emitted wavelength as a function of the well width for carrier density of $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .	<b>91</b>

---

## LISTE DES TABLEAUX

<b>Tableau 3.1.</b>	Gaps d'énergie du $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ pour différentes concentrations d'azote.	<b>67</b>
<b>Tableau 3.2.</b>	Masses effectives des électrons et des trous lourds au point $\Gamma$ de la zone de Brillouin pour différentes concentrations d'azote.	<b>70</b>
<b>Tableau 3.4.</b>	Indice de réfraction $n$ et constantes diélectriques statique $\epsilon_0$ et de haute fréquence $\epsilon_\infty$ du $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ pour différentes concentrations d'azote.	<b>72</b>
<b>Tableau 3.5.</b>	Constantes élastiques $C_{11}$ , $C_{12}$ et $C_{44}$ du $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ pour différentes concentrations d'azote.	<b>75</b>
<b>Tableau 3.6.</b>	Module de compression $B_s$ , module de shear $C'$ et module d'Young $Y_0$ du $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ pour différentes concentrations d'azote.	<b>77</b>
<b>Tableau 3.7.</b>	Facteur d'anisotropie $A$ et coefficient de Poisson $\sigma_0$ du $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ pour différentes concentrations d'azote.	<b>78</b>
<b>Tableau 3.8.</b>	Discontinuités des bandes de conduction $\Delta E_c$ (eV) du $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}_{1-y}\text{N}_y$ pour différentes concentrations d'azote ( $0 \leq x, y \leq 0.05$ ).	<b>79</b>
<b>Tableau 3.9.</b>	Discontinuités des bandes de valence $\Delta E_v$ (eV) du $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}_{1-y}\text{N}_y$ pour différentes concentrations d'azote ( $0 \leq x, y \leq 0.05$ ).	<b>82</b>
<b>Tableau 3.10.</b>	Gaps contraints au niveau de l'hétérointerface $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}$ pour différentes concentrations d'azote.	<b>84</b>
<b>Tableau 3.11.</b>	Parent compounds GaSb and GaN parameters	<b>85</b>

---

## LISTE D'ABBREVIATIONS

$h$	Constant de Planck
$\alpha_i$	Coefficient d'absorption du milieu
$R_1$	Réfectivité de la première face
$R_2$	Réfectivité de la deuxième face
$\lambda$	Longueur d'onde
$L$	Longueur de la cavité
$n$	Indice de réfraction
$F_c$	Pseudo-niveau de fermi dans la bande de conduction
$F_v$	Pseudo-niveau de fermi dans la bande de valence
$c$	La vitesse de la lumière
$r_{12}$	Le taux d'absorption
$r_{21}(sp)$	Le taux d'émission spontanée
$r_{21}$	Le taux d'émission stimulée
$m^*$	Masse effective
$E_g$	La bande interdite
$\alpha_p$	La polarité
$\alpha_c$	La covalencité
$\chi$	L'affinité électronique
$L_z$	La largeur du puits quantique
$m_{xx,w}^*$	La masse effective de la particule dans le puits
$m_{xx,b}^*$	La masse effective de la particule dans la barrière
$E_{cn}$	Nième niveau dans la bande de conduction
$E_{vn}$	Nième niveau dans la bande de valence
$m_h$	Masses effectives des trous
$m_e$	Masses effectives des électrons
$k_B$	Constante de Boltzman
$\epsilon_\infty$	La constante diélectrique de haute fréquence
$\epsilon_0$	La constante diélectrique statique
$B_s$	Module de compression
$Y_0$	Module d'Young
$E_g$	La bande interdite
$a_0$	Le paramètre de la maille
$E_{tr(e-hh)}$	Energie de transition (électron – trou lourd)
$E_{tr(e-lh)}$	Energie de transition (électron – trou léger)
$\Delta_0$	Le splitting spin-orbite
$b$	Le potentiel de déformation de cisaillement
$\Delta E_c$	La discontinuité des bandes de conduction
$\Delta E_v$	La discontinuité des bandes de valence
$E_{v,av}$	L'énergie moyenne des bandes de valence
$a_v$	Le potentiel de déformation hydrostatique pour les bandes de valence
$a_c$	le potentiel de déformation hydrostatique pour les bandes de conduction
$j_s$	Courant de seuil

---

$r_p$	La durée de vie moyenne des photons dans la cavité
$E_a$	L'énergie d'activation de l'effet Auger
$T_0$	La température caractéristique
$G(E)$	Gain optique
$\alpha_i$	Les pertes
$p$	La puissance optique
$N_s$	Densité de porteur au seuil
$T$	Température
$\eta$	l'état de spin de l'électron
$V$	Le volume de la cavité
$e$	La charge élémentaire
$BC$	Bande de conduction
$BV$	Bande de valence
$E_{glh}$	Gap des trous légers
$E_{ghh}$	Gap des trous lourds
$\varepsilon_{\perp}$	Déformation dans le plan de croissance
$\varepsilon_{//}$	Déformation dans la direction croissance
$C_{ij}$	Tenseur d'élasticité
$\delta_{ij}$	Tenseur de contrainte
$E_g$	Energie de gap
$a_s$	Paramètre de maille du substrat
$a_e$	Paramètre de maille de la couche active
$E_n$	L'énergie de quantification du niveau
$x$	La composition de l'alliage

# **INTRODUCTION GENERALE**

---

## INTRODUCTION GÉNÉRALE

Les progrès récents dans la croissance et la compréhension de la physique des semi-conducteurs III-nitrures ont entraîné une expansion vertigineuse de leur domaine d'application [1]. Grâce à leur large bande interdite, les nitrures présentent un grand intérêt pour la réalisation de dispositifs de détection dans l'UV avec des applications dans l'analyse chimique et biologique, la détection des flammes et les communications inter satellitaires à  $\lambda < 280 \text{ nm}$  [2]. En particulier, les hétérostructures à base d'alliage GaSbN sont étudiées pour des applications dans le domaine infrarouge du spectre électromagnétique.

L'utilisation des nitrures pour les photodétecteurs présente des avantages liés à la bonne stabilité chimique, la résistance aux effets des radiations et à la bonne conductivité thermique [3,6]. Les aspects qui nécessitent l'amélioration sont la qualité cristalline, la mobilité des porteurs ainsi que la mise au point de procédés technologiques fiables et reproductibles pour l'élaboration des dispositifs. Les caractéristiques des nitrures (stabilité et conductivité thermique, haute vitesse de saturation pour les électrons, large bande interdite) font des nitrures de bons candidats pour la réalisation de composants électroniques de puissance ou non selon le gap d'énergie du semiconducteur [7]. Différents composants électroniques tels que les transistors à effet de champ, ceux à haute mobilité, et optoélectroniques tels que les diodes émettrices de lumière et les diodes lasers ont été proposées et caractérisées [7].

Dans le cas des diodes laser, des enjeux économiques importants sont à l'origine d'une compétition pour obtenir une longueur d'onde toujours plus courte et des seuils sans cesse plus bas avec un dopage adéquat et contrôlable qui reste malheureusement encore un verrou technologique complexe [8]. De plus, certains alliages étant très résistifs, il est très difficile d'obtenir des contacts ohmiques de qualité.

Les composés III-V nitrurés comme  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ ,  $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$  et  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  sont aussi d'un grand intérêt dans le domaine de l'optoélectronique, leurs caractéristiques sont très intéressantes, ils sont fabriqués à partir d'un ou plusieurs éléments de la colonne III du tableau périodique des éléments (bore, aluminium, galium, indium...etc.), et d'un ou plusieurs éléments de la colonne V (azote, phosphore, arsenic, antimoine...etc.). Ils sont principalement utilisés en microélectronique pour des circuits intégrés, dans les cellules

---

photovoltaïques et dans les dispositifs optoélectronique tels que les diodes laser [9]. Le plus grand intérêt des semiconducteurs III -V réside dans leur propriété, ils sont robustes, possèdent une bonne conductivité thermique et aussi une bande interdite directe [10].

Ce travail est une étude de la diode laser à puits quantique contraint GaSb/GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> qui permet une émission de longueur d'onde de 2–4 μm, dans la région d'infrarouge et infrarouge moyen du spectre électromagnétique [11,15]. Le matériau ternaire GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> constitue la zone active dans la diode laser à puits quantique contraint alors que la couche cladding est en GaSb. Nous avons calculé le gain optique en fonction de la longueur d'onde en changeant la largeur de la zone active et la concentration des porteurs de charge ainsi que les valeurs optimales de la largeur du puits, la concentration des porteurs de charge et la fraction molaire ont été faite afin d'obtenir un gain optique maximale pour une émission dans l'infrarouge. Le spectre optique du gain est calculé en utilisant la méthode de Luttinger-Kohn en considérant le modèle parabolique de la bande de conduction et le couplage des sous bandes entre les trous lourds et les trous légers de la bande de conduction. L'influence de la contrainte sur les propriétés structurale et optiques, les énergies de quantification et de transition ont été explorées.

La présente thèse est composée en trois chapitres.

Le premier chapitre présente un rappel sur les points de base de l'effet laser : définitions, principe de fonctionnement, caractéristique de la lumière, types de laser, etc.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons les propriétés électroniques, structurales et optiques des binaires III-As, les nitrures III-N, des ternaires (In, Al) GaSb et des alliages III-SbN, spécialement le GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>, ainsi que leur application.

Enfin, dans le troisième chapitre, nous présentons nos résultats de simulation des propriétés physiques de la diode laser à base GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> commentés et discutés.

---

## References

- [1] D.N.Talwar, Asses-sing the preferential Chemical Bonding of Nitrogen in Novel Dilute III-As-N Alloys;
- [2] P.S.Zory, Jr (ed.), Quantum Well Lasers, Academic Press, New York (1993).
- [3] Y.Arakawa, "Theory of gain, modulation response, and spectral linewidth in AlGaAs quantum well lasers", IEEE, Journal of Quantum Electronics, 21. 1666-1674 (1985)
- [4] S. L. Chuang, "Physics of photonic devices", Wiley&Sons, Inc., New York (2009)
- [5] N. Holonyak, "Quantum-well heterostructure lasers". IEEE J. Quantum Electron, 16, 170-186 (1980)
- [6] I. Sukhoivanov, "Nonlinear gain model and its application for numerical investigation of semiconductor lasers", Microwave & Optical Technol. Lett. 21, 474 - 477 (1999)
- [7] P. S. Zory, Jr (ed.), Quantum Well Lasers, Academic Press, New York (1993).
- [8] W. P. Risk, T. R. Gosnell, A. V. Nurmikko, "Compact blue-green lasers", Cambridge University Press 2003
- [9] M. C. Tamargo, W. Lin, S. P. Guo, Y. Luo, Y. Guo, and Y. C. Chen, "Full color light emitting diodes from ZnCdMgSe/ZnCdSe quantum well structures grown on InP substrates", J. Cryst. Growth, vol. 214/215, pp. 1058–1063, (2000)
- [10] A. Cavus, L. Zeng, M. C. Tamargo, N. Bambha, F. Semendy, and A. Gary, "ZnCdSe/ZnCdMgSe quantum wells on InP substrates for visible emitters", Appl. Phys. Lett., vol. 68, pp. 3446–3448, (1996)
- [11] C. Van de Walle, "II–VI blue/green light emitters. In Semiconductors and Semimetals", Vol. 44, ed, R. Gunshor and A. Nurmikko. San Diego: Academic Press, pp. 122–160 1997.
- [12] Seoung-Hwan Park, Polarization characteristics of 480–680 nm ( $1\bar{1}\bar{2}$ ) InGaN/GaN quantum well structures with strain relaxation effects, Superlattices and Microstructures 86 531–535 (2015)
- [13] C. Chao and S. Chuang, "Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells," Phys. Rev. B, vol. 46, no. 7, 1992.
- [14] J. Piprek, Optoelectronic Devices, Springer S. 2005.
- [15] C. Lamberti, "Characterization of Semiconductor Heterostructures and Nanostructures", Elsevier B.V 2008.

**Chapitre I**  
**GENERALITE DE BASE SUR LE**  
**LASER**

---

# Chapitre I

## GENERALITE DE BASE SUR LE LASER

### I.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous allons introduire des notions de bases sur le laser, définitions, des éléments de bases et principes de fonctionnements...

Les lasers ont contribué à changer notre vie quotidienne grâce à ses caractéristiques particulières, le laser est exploité dans de très nombreuses applications [1-6]. Parmi ses avantages résultant de ses caractéristiques, il permet d'une part d'optimiser un éclairage de cible ou une concentration d'énergie, même sur de longues distances, et d'autre part de simplifier les optiques associées et de filtrer plus efficacement les rayonnements parasites [7].

### I.2. Bref historique sur le laser

Il est intéressant avant tout de considérer le raisonnement qui a amené Albert Einstein à prédire et établir théoriquement, en 1917, le concept d'émission stimulée. Cet événement constitue en effet un moment particulier de l'histoire des sciences. Avant 1917 on ne connaissait pas l'existence de l'émission stimulée. Einstein fait la synthèse des travaux de Planck (quantification des niveaux d'énergie basée sur la théorie du rayonnement qui permettait d'établir la répartition spectrale de l'émission d'un matériau à l'équilibre thermique à la température  $T$ ), Boltzmann (mécanique statistique basée sur la théorie cinétique des gaz qui permettait d'établir le rapport des populations d'atomes ou de molécules dans un milieu à l'équilibre thermodynamique à la température  $T$ ) et de Bohr (quantification de la matière) qui sont des théories d'origines tout à fait différentes et qui existaient en parallèle, toutes auto-cohérentes et permettaient d'établir des relations entre populations d'atomes ou de molécules. Mais, le problème est que le rapport des populations  $N_j$  et  $N_i$  en fonction de la température calculé à partir des 2 premières théories n'était pas le même sauf pour le cas particulier où la température tend vers zéro. Einstein en a conclu qu'il manquait un terme dans les échanges rayonnement-matière. Il est obligatoire alors de rajouter l'émission stimulée aux interactions matière-rayonnement connues (l'absorption et l'émission spontanée) pour

---

résoudre les équations du corps noir, d'où le concept d'émission stimulée qu'il a établi et son célèbre article publié en 1917 [8].

En 1940, Fabrikant réalise la première inversion de population dans ses mesures' absorption de lumière entre deux états excités d'espèces gazeuses, au cours desquelles il parvient à désexciter rapidement le niveau le moins énergétique [9]. Dans les années 1952-1954 le phénomène d'amplification stimulée est observé simultanément par les deux équipes de Townes, Gordon et Zeiger (États-Unis) et de Basov et Prokhorov (URSS) [10]. En 1954, le jet moléculaire en sortie d'un four dans lequel se trouvent des molécules d'ammoniac ( $\text{NH}_3$ ) excitées par collision, passe entre deux électrodes qui effectuent le tri des espèces excitées. Ces dernières sont envoyées dans une cavité résonnante et les expérimentateurs observent une émission dans un guide d'onde à  $2,3 \times 10^{10}$  Hz, le Maser (microwave amplifier by stimulated emission of radiation) est ainsi inventé [11]. Cela conduit, en 1958, Townes et Schawlow à élaborer le concept du laser (light amplification by stimulated emission of radiation), à partir d'un milieu actif pompé optiquement placé dans un interféromètre de Fabry-Pérot, qui constitue la cavité résonnante [12]. En 1960, le physicien américain Théodore Maiman obtint pour la première fois une émission laser au moyen d'un cristal de rubis [13]. Un an plus tard Ali Javan mit au point un laser au gaz (hélium et néon) [14]. Dans les années 60, les études portent largement sur le pompage optique, en particulier grâce à N. Blombergen et A. Kastler [15]. La faisabilité d'une émission laser au sein d'un semiconducteur fut démontrée expérimentalement dans l'arséniure de gallium (GaAs) en 1962 par R.N. Hall et al. [16]. En 1966, Peter Sorokin construit le premier laser à colorant [17].

### **Définition du laser**

Le mot laser est un acronyme de l'anglais « Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation » (Amplification de la lumière par émission stimulée de radiations) [18]. Les lasers sont des dispositifs amplificateurs qui produisent des faisceaux intenses de lumière qui sont monochromes, cohérents et hautement collimatés. La longueur d'onde (couleur) de la lumière laser est extrêmement pur (monochrome) par rapport à d'autres sources de lumière. La lumière d'un laser a typiquement une très faible divergence. Elle peut voyager sur de grandes distances ou peut être portée à une très petite tâche avec une luminosité qui est supérieure à celle du Soleil [19]. En raison de ces propriétés, les lasers sont utilisés dans une grande variété d'applications dans tous les domaines de la vie [20-25].

---

## Caractéristique de la lumière laser

Un faisceau laser est unidirectionnel, intense, monochromatique et cohérente [26,27].

**Unidirectionnel** : Le faisceau se dirige dans une direction unique pour des longueurs d'onde situées dans le domaine optique du spectre électromagnétique couvrant l'infrarouge, le visible et l'ultraviolet. Cependant, il peut y avoir une divergence de 1 degré d'arc provoquée par la diffraction lorsque le faisceau se propage dans un milieu, ainsi, le diamètre du faisceau peut augmenter jusqu'à 1 mm par mètre parcouru. La divergence d'un faisceau laser dans l'aire est :

$$\theta = \frac{\lambda}{w_0} \quad (1.1)$$

$w_0$  : Longueur parcouru par le faisceau.

$\lambda$  : la longueur d'onde.

**Monochromatique** : Contrairement à la lumière émise par le soleil ou par une ampoule à incandescence qui est polychromatique (constituée de plusieurs longueurs d'onde), la lumière produite par un laser est monochromatique. Elle contient très peu de longueurs d'onde d'opération du laser.

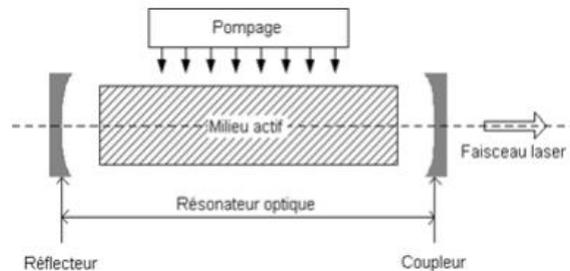
**Cohérent** : La lumière produite par un laser est ordonnée dans le temps et dans l'espace pour des longueurs d'onde couvrant l'infrarouge, le visible et l'ultraviolet. Ainsi, chaque photon qui la compose oscille en même temps de la même manière. La directivité de la lumière laser est d'ailleurs une conséquence de sa cohérence.

### I.3. Gain dans un milieu matériel

Le thème de ce premier chapitre est donc l'étude de la création et de l'amplification d'ondes électromagnétiques à l'aide du rayonnement d'émission stimulée. On sait, depuis le début du XXe siècle, que les systèmes atomiques (atomes, ions, molécules, ions moléculaires, etc..) ne peuvent exister que dans des états stationnaires. À chacun d'eux correspond une valeur de l'énergie bien définie. Les états sont caractérisés par des nombres quantiques. Les valeurs de l'énergie sont appelées niveaux du système atomique, ionique ou moléculaire (niveau 1 électronvolt (eV) par exemple). Des échanges d'énergie entre ces états stationnaires, appelés transitions, peuvent se produire. Certaines transitions peuvent être des transitions radiatives. Elles donneront lieu à une émission ou une absorption d'énergie du rayonnement (émission ou absorption de lumière sous la forme de photons). D'autres peuvent être également des transitions non radiatives. Ce sont alors des échanges dissipatifs sans intervention de photons [28].

## I.4. Principe de fonctionnement du laser

Les trois principales composantes d'un laser sont : un milieu actif dit aussi milieu amplificateur (conversion d'énergie de l'électrique à la lumineuse), un mécanisme de pompage (une source externe d'énergie) et un résonateur optique (une cavité résonante) [29].



**Figure 1.1. Schéma d'un système laser.**

### I.4.1. La source d'énergie (le pompage)

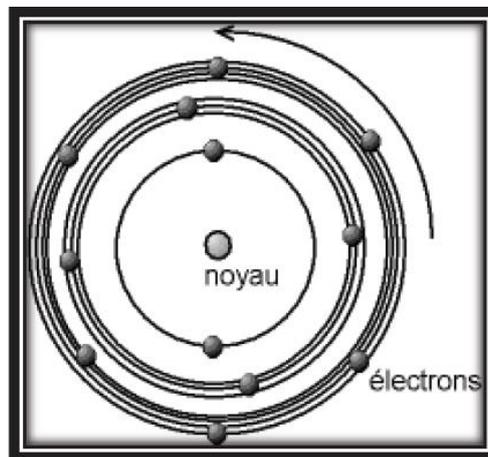
Le pompage est un système d'excitation du milieu amplificateur (aussi appelé système de pompage) : il permet de créer les conditions d'une amplification lumineuse en apportant l'énergie nécessaire au milieu pour le transfert d'une majorité d'atomes dans l'état excité. Le système de pompage peut être de différentes natures : pompage optique (le soleil, lampes flash, lampes à arc continues ou lampes à filament de tungstène, diodes laser ou autres lasers), électrique (décharges dans des tubes de gaz, courant électrique dans des semiconducteurs) ou même chimique. Le pompage permet d'amener une majorité des particules à l'état excité. Il y a ensuite accumulation d'électrons sur le niveau métastable, c'est l'inversion de population. Celle-ci favorise l'émission stimulée, chaque nature de milieu amplificateur est associée à une méthode de pompage.

### I.4.2. Le milieu amplificateur

C'est un matériau qui permet d'amplifier la lumière le traversant, où se réalise la conversion d'énergie électrique à énergie lumineuse. Pour comprendre cette conversion, il faut connaître les trois formes fondamentales de l'interaction rayon-matière et par conséquent d'introduire le concept de quantification de la matière : Les électrons sont répartis sur des niveaux d'énergie discrets c'est-à-dire que les électrons ne peuvent se trouver que sur certaines orbitales bien précises autour du ou des noyaux atomiques, ces états sont numérotés par ordre croissant d'énergie et l'état d'énergie  $n=1$  est la plus basse correspondant à un électron sur l'orbitale la plus proche du noyau .

D'après le modèle de l'atome de Bohr comme l'illustre la Figure 1.2, un atome est constitué d'un noyau positif formé par les protons et les neutrons, et d'un nuage d'électrons de charge négative sur

des orbites spécifiques autour du noyau. Toutes ces trajectoires permises des électrons correspondent à des énergies discrètes, et l'ensemble des niveaux d'énergies permises constitue le schéma de niveaux de l'atome. Les termes d'énergie  $E_n$  dépendent essentiellement de l'atome en question. Le passage d'électrons d'un niveau à un autre donne lieu aux lignes spectrales de lumière émise ou absorbée. Lors du passage d'un électron d'un niveau  $E_n$  supérieur à un niveau  $E_m$  inférieur, un photon d'énergie  $h\nu = E_n - E_m$  est émis. La largeur naturelle de ces lignes spectrales est déterminée par la relation d'incertitude de Heisenberg, qui relie la durée de vie d'un état à l'incertitude d'énergie  $\Delta E$  de cet état. Il se rajoute généralement à cette largeur naturelle un élargissement dû à d'autres effets tels que l'interaction avec le réseau cristallin dans un solide, la pression dans un gaz ou le déplacement de fréquence Doppler dû à l'agitation thermique des atomes d'un gaz. Entre deux niveaux  $E_n$  et  $E_m$  trois types d'interactions différentes peuvent se produire [30-31].



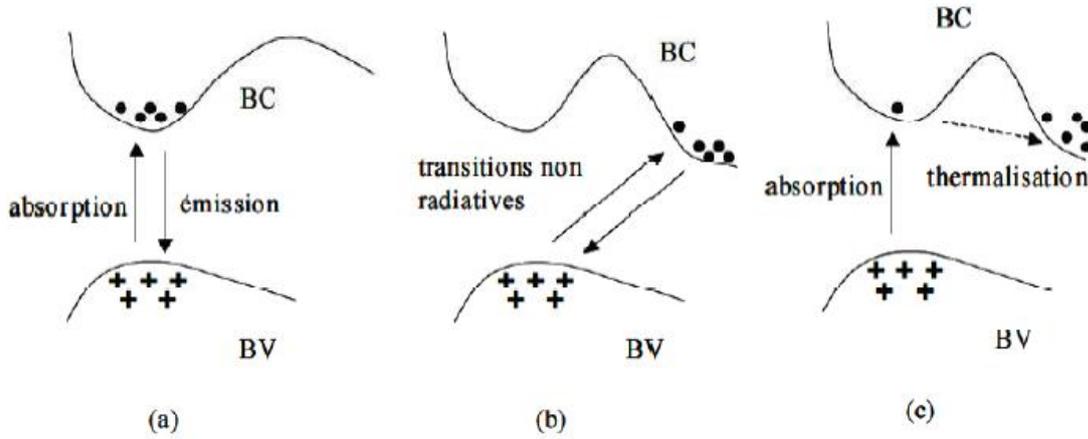
**Figure 1.2. Modèle de Bohr.**

L'interaction du rayonnement avec les électrons dans les semiconducteurs se manifeste selon trois processus distincts [32] :

- un photon peut induire le saut d'un électron, d'un état occupé de la bande de valence vers un état libre de la bande de conduction, créant une paire électron-trou. C'est le processus d'absorption.
- un électron de la bande de conduction peut retomber spontanément vers un état vide de la bande de valence avec émission d'un photon, c'est l'émission spontanée.
- un photon présent dans le semiconducteur peut induire la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de la bande de valence, avec émission d'un deuxième photon de même énergie, c'est l'émission stimulée. Ce processus sera mis à profit dans les lasers à semiconducteur.

Ces différents processus sont conditionnés par la conservation de l'énergie  $h\nu = E_{c_n} - E_{v_m}$  avec  $n=m$  et la conservation de la quantité de mouvement  $p$ . la transition d'un électron entre les bandes de valence et de conduction, se fait donc avec la conservation du vecteur d'onde (transition verticale

dans l'espace des  $k$ ). On dit que les transitions sont radiatives, c'est-à-dire accompagnées de l'absorption ou de l'émission d'un photon.



**Figure 1.3. Transitions électroniques entre les extrema des bandes de valence et de conduction. a) Semiconducteur à gap direct, les transitions sont verticales et par suite radiatives. b) Semiconducteur à gap indirect, les transitions sont obliques et non radiatives au premier ordre. c) Absorption directe de photons dans un semiconducteur à gap indirect.**

### Absorption

Un photon incident cède son énergie à un électron de la bande de valence (BV) et le fait « monter » dans la bande de conduction (BC), c'est un processus de génération radiative. Si l'électron dans un système quantique se trouve dans l'état énergétique le plus faible  $E_{v1}$ , il peut absorber un photon et donc atteindre le niveau d'énergie supérieur  $E_{c1}$ . La probabilité d'occupation de l'état d'énergie  $E_{v1}$  est donnée par la statistique de Fermi-Dirac [33] :

$$f_{v1} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{v1} - E_F}{k_b T}\right)} \quad (1.2)$$

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

La probabilité que l'état  $E_{c1}$  soit vide est  $1 - f_{c1}$ .

$$1 - f_{v1} = 1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{c1} - E_F}{k_b T}\right)} \quad (1.3)$$

La densité de photon est donnée par [34] :

$$P(E) = \frac{8\pi n^2 E^2}{h^3 c^3} \left[ 1 + \frac{E}{n} \left( \frac{dn}{dE} \right) \right] \left( \exp\left(\frac{E}{k_b T}\right) - 1 \right)^{-1} \quad (1.4)$$

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

---

Le taux d'absorption est donc

$$r_{12} = B_{12} \cdot f_{c1} (1 - f_{c1}) P(E_{21}) \quad (1.5)$$

Où  $B_{12}$  est un facteur de proportionnalité qui représente physiquement la probabilité de la transition de l'électron du niveau  $E_{v1}$  vers le niveau  $E_{c1}$ . Dans le cas où l'électron se trouve déjà dans le niveau supérieur, deux processus peuvent se produire [35].

### **Emission spontanée**

C'est le processus où l'électron descend à l'état inférieur en émettant un photon de fréquence  $\nu$ . Si la plupart des électrons émettent de cette façon, le rayonnement résultant est incohérent car il n'y a pas de relation entre les instants d'émission d'un électron à un autre. Le flux émis par émission spontanée est indépendant de l'amplitude du champ électromagnétique incident ; il est proportionnel au nombre d'électron dans l'état excité et inversement proportionnel à leur durée de vie (c'est-à-dire au temps moyen pour qu'un électron passe dans l'état excité avant de retourner au niveau le plus bas) [36]. Le taux d'émission spontanée est :

$$r_{12}(\text{sp}) = A_{21} \cdot f_{c1} (1 - f_{v1}) \quad (1.6)$$

Où  $A_{21}$  est la probabilité pour que l'électron de l'état  $E_{c1}$  retourne spontanément à l'état  $E_{v1}$ .

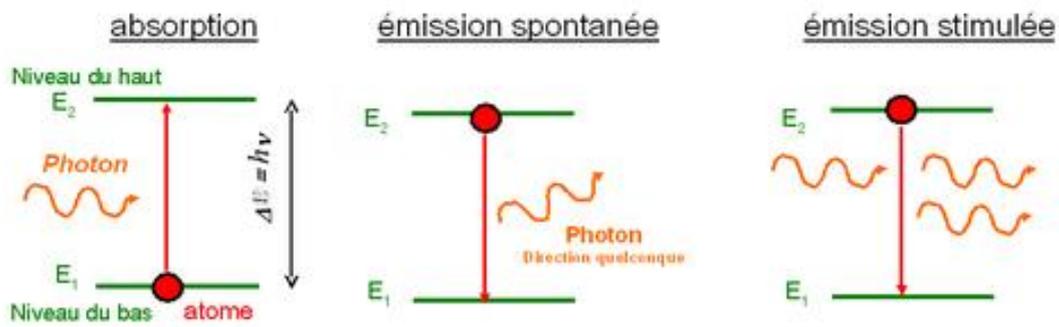
### **Emission stimulée**

L'émission stimulée d'un photon par un électron est déclenchée par la présence du rayonnement incident. Dans ce cas, l'instant où se produit l'émission est dicté par le champ excitateur. Il s'agit donc d'un processus cohérent, qui constitue le cœur même du mécanisme laser. Le taux dû à l'émission stimulée est proportionnel au nombre d'électron qui se trouvent dans l'état excité, au débit de photons incidents et à la même probabilité d'absorption que dans le cas de l'absorption [37]. Le taux d'émission stimulée est :

$$r_{21} = B_{21} \cdot f_{c1} (1 - f_{v1}) P(E_{21}) \quad (1.7)$$

Où  $B_{21}$  est un facteur de proportionnalité qui représente physiquement la probabilité de la transition de l'électron du niveau  $E_{c1}$  vers le niveau  $E_{v1}$ .

On peut donc voir qu'un milieu, dont les électrons se trouvent en plus grand nombre dans l'état fondamental que dans l'état excité, absorbera une fraction du faisceau incident, ce qui se produit obligatoirement lorsqu'il est en équilibre thermique avec son environnement. Au contraire, il y'aura production nette de rayonnement si les électrons sont plus nombreux dans l'état excité. La recherche de matériaux laser doit donc se concentrer sur des milieux qui ne soient pas en équilibre thermodynamique et pour lesquels la durée de vie du niveau excité ne soit pas trop courte ; la durée de vie de la plupart des états laser va de quelques microsecondes à des dizaines de millisecondes [38].



**Figure 1.4. Illustration des processus d'absorption, d'émissions spontanée et stimulée.**

L'absorption et l'émission stimulée sont des interactions cohérentes, en effet, pour les deux phénomènes l'échange d'énergie correspond à une onde partielle en relation de phase bien déterminée avec l'onde primaire. L'émission spontanée, par contre, est un processus incohérent car indépendant du champ de radiation environnant et statistiquement indépendant d'un atome à l'autre.

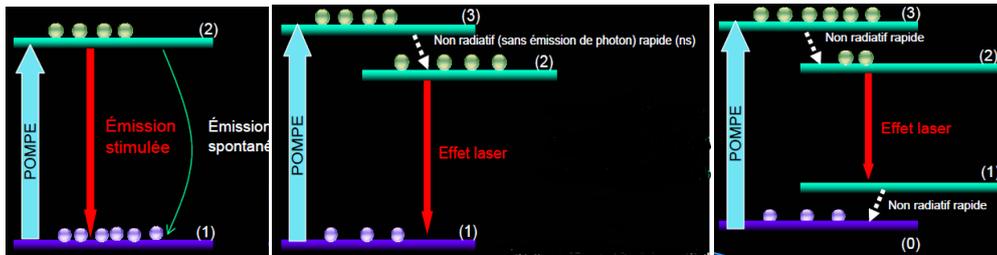
Dans les sources de lumière thermique (lampes à incandescence, lampes à arc, etc.), c'est l'émission spontanée qui livre la partie prépondérante de l'émission qui est donc incohérente.

### **L'inversion de population**

C'est un processus très important pour un dispositif laser. Pour obtenir une inversion de population suffisamment importante entre les deux niveaux impliqués dans la transition laser, le milieu doit comporter au moins 3 niveaux d'énergie, car dans un système à deux niveaux il est impossible de pomper une seule transition atomique d'obtenir une inversion de population  $N_2 > N_1$ , au maximum (fort pompage) :

$N_1 = N_2$  conséquent aux résultats de la physique atomique (Einstein 1917) « pour une transition donnée la probabilité d'émission stimulée pour un atome dans l'état excité par un photon est égale à la probabilité d'absorption pour un atome dans l'état fondamental éclairé par un photon ». Pour un système à trois niveaux : l'inversion de population est vérifiée mais elle est difficile car on peut peupler le niveau  $n=2$  mais vider le niveau fondamental  $n=1$  est plus dur, le fonctionnement en continu est difficile à atteindre (le niveau 1 se repeuple dès que le laser marche !) dans ce cas il existe un seuil de transparence (il faut pomper pour atteindre  $\Delta N=0$ ), inversement pour un système à quatre niveaux comme celui illustré sur la Figure 4 où il n'y a pas un seuil de transparence et le fonctionnement en continu est possible car on peut peupler le niveau  $n=2$  et vider le niveau  $n=1$  vite vers 0, alors l'inversion de population est facile et atteinte ( $N_1=0$ ). Pour une séparation de ces deux

niveaux  $E_2 - E_1 \gg kT$ , donc plus grande que l'énergie thermique, le niveau  $E_2$  est pratiquement inoccupé. Il suffit donc d'un pompage faible pour obtenir une inversion de population, et le seuil d'oscillation est assez bas. Au cas où la différence d'énergie des niveaux  $E_1$  et  $E_2$  est de l'ordre de l'énergie thermique  $kT$ , le seuil de pompage dépendra fortement de la température, et si  $(E_2 - E_1) < kT$ , le comportement ressemblera plutôt à celui d'un laser à trois niveaux.



**Figure 1.5. Système à deux, trois et quatre niveaux.**

Comme illustre la Figure 1.5, l'énergie perdue durant l'émission est soit sous forme de lumière (photons) qu'on appelle émission radiative ou sous forme de phonons c'est l'émission non radiative et le laser fonctionne par l'émission radiative.

L'émission stimulée d'un atome ou d'une molécule produit un nouveau photon qui a exactement la même fréquence, phase et direction que le photon incident ; dans un laser, cela se fait à grande échelle, sur un très grand nombre d'atomes ou molécules identiques. C'est pourquoi un laser a la particularité d'émettre une onde lumineuse intense dont la direction, la fréquence et la phase sont très bien déterminées.

Mais pour obtenir un effet d'émission stimulée sur un grand nombre d'atomes ou molécules, il faut fournir de l'énergie au milieu matériel afin que ses atomes ou molécules soient pour la plupart dans un niveau d'énergie excité  $E_2$ , et non dans leur niveau fondamental  $E_1$ . C'est ce qu'on appelle effectuer une inversion de population, car à l'équilibre thermodynamique la majorité des atomes se trouvent au contraire dans l'état d'énergie le plus bas (plus précisément, le rapport des populations des niveaux  $E_2$  et  $E_1$  vaut, à l'équilibre thermodynamique à la température absolue Test :

$$N_2/N_1 = \text{Exp} [-(E_2 - E_1) / kT]$$

Le mécanisme précis aboutissant à l'inversion de population fait intervenir un ou plusieurs niveaux d'énergie intermédiaires entre  $E_1$  et  $E_2$  (ce n'est pas possible s'il n'y a que ces deux niveaux). De plus, le niveau excité  $E_2$  doit être suffisamment stable pour que l'émission spontanée ne se produise pas trop rapidement ; autrement, celle-ci devancerait l'émission stimulée et l'on n'obtiendrait pas une onde lumineuse cohérente.

### I.4.3. Résonateur optique (la cavité)

Le résonateur est constitué de deux miroirs parallèles entre lesquels est placé le milieu actif. Le premier miroir, le réflecteur, est totalement réfléchissant alors que le second, le coupleur, est semi-transparent. Il permet ainsi à la lumière de sortir de la cavité, le résonateur contribue en grand partie à l'amplification de la lumière dans le laser. Les photons en étant réfléchis par les miroirs, peuvent traverser plusieurs fois le milieu actif et provoquer l'émission stimulée d'un plus grand nombre de photons. Lorsque le processus d'amplification se produit dans le laser, on dit qu'il oscille.

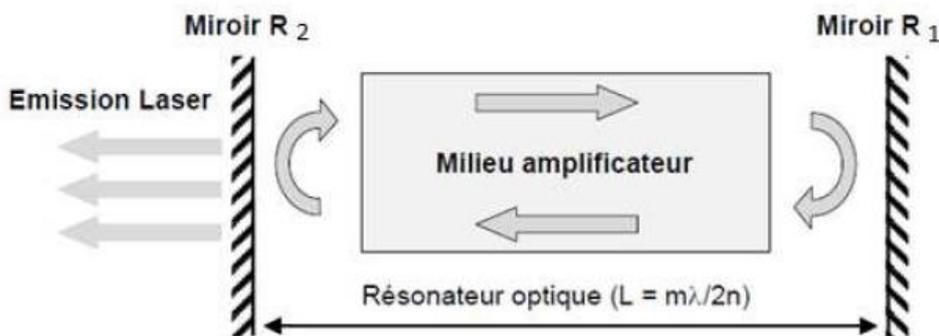


Figure 1.6. Cavité résonante.

Le gain au seuil est donné par la relation suivant :

$$g_s = \alpha_i + \frac{1}{2L} \ln \left( \frac{1}{R_1 R_2} \right) \quad (1.8)$$

$\alpha_i$ : coefficient d'absorption du milieu.

L : longueur de la cavité.

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

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

$$L = m \cdot \frac{\lambda}{2n} \quad (1.9)$$

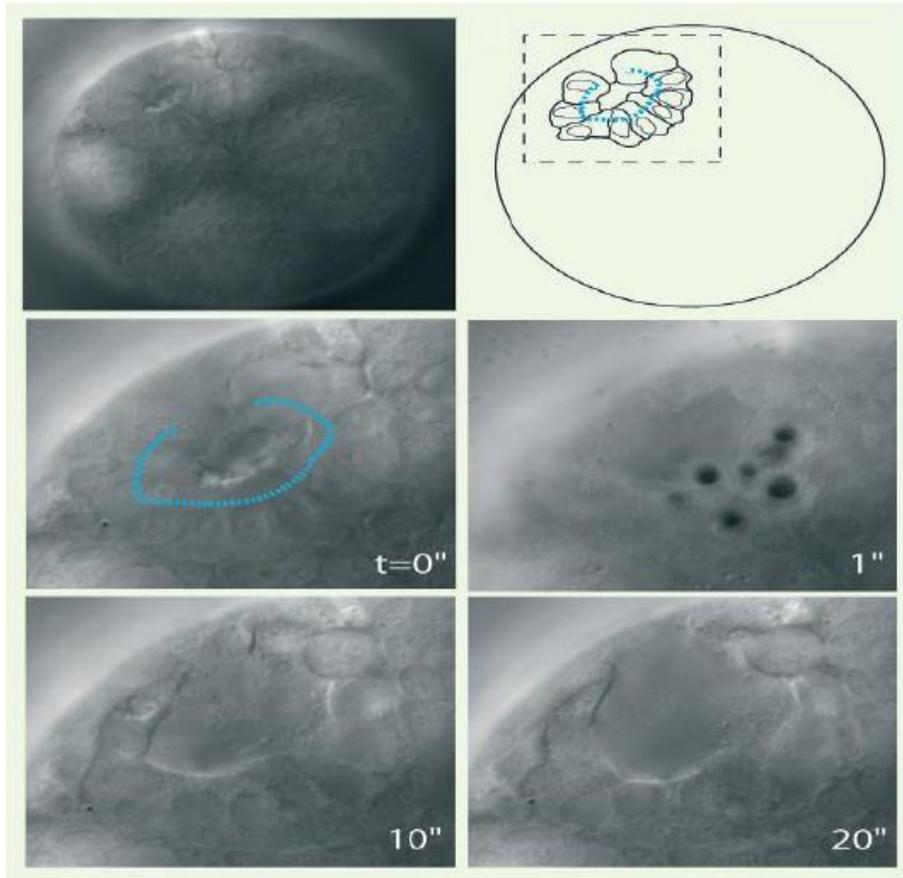
m : l'ordre des modes qui peuvent exister dans la cavité

n : indice de réfraction

---

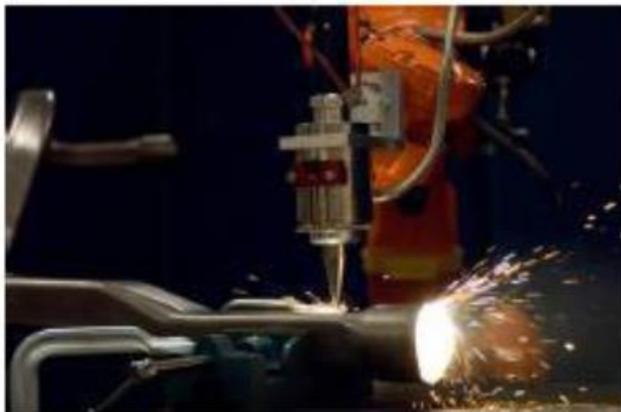
## **I.5. Les applications des lasers**

Les particularités de la lumière laser sont aujourd'hui utilisées pour des applications extrêmement variées [39-44]. Dans l'industrie, on utilise les lasers pour leur puissance et leur précision dans des opérations de marquage, soudage, découpage, perçage ou décapage. Contrairement à des outils classiques, ils ont pour avantage de ne pas s'user. En informatique et dans le domaine audiovisuel, les diodes laser permettent la lecture et l'enregistrement des données sur des supports optiques numériques comme les DVD et les CD<sub>s</sub>. Les lasers sont également employés dans le domaine des Télécommunications via les réseaux de Fibre optique et dans l'imprimerie. Enfin, les lasers ont de nombreuses applications médicales en ophtalmologie (traitement la myopie et de la cataracte), en dermatologie (épilation et dé tatouage), en dentisterie (soins des gencives et traitement des caries) et en phlébologie (traitement des varices) Cette technique est généralement beaucoup moins traumatisante que les techniques chirurgicales classiques. On constate aussi aujourd'hui, la réduction des impulsions laser en dessous de la nanoseconde permettant de mieux comprendre leur interaction avec les tissus biologiques et de contrôler des interventions chirurgicales à une résolution de l'ordre de quelques centaines de nanomètres. Utilisant l'ionisation de la matière par la lumière, cette nano chirurgie laser permet d'effectuer des interventions chirurgicales intracellulaires telles que la découpe de microtubules ou de fibres de tension, sans endommager les structures environnantes ou compromettre la viabilité cellulaire [45-47].

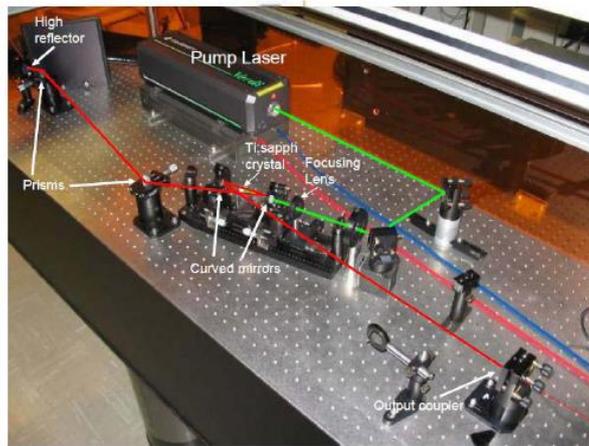


**Figure 1.7. Ablation cellulaire dans un embryon de *P. dumerilii*.**

Les photos suivantes illustrent les diverses applications.



ALAW 2009



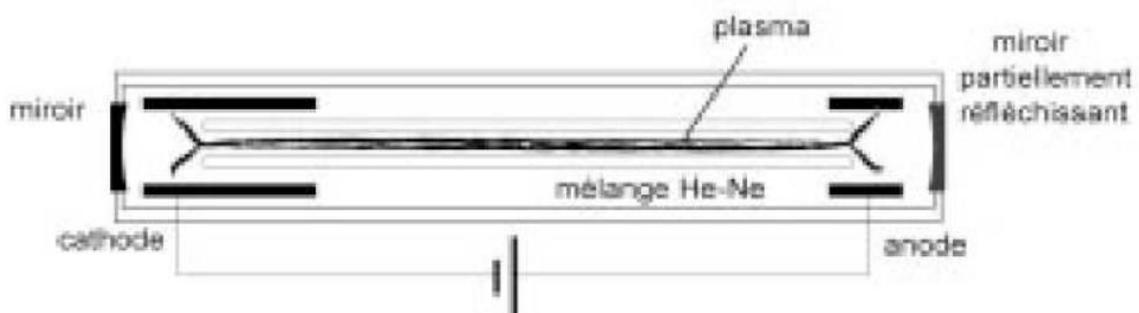
**Figure 1.8. Illustration des diverses applications.**

## I .6. Les types de laser

On peut classer les lasers par la nature du matériau actif utilisé : liquide (colorant), solide ou gazeux. La technique du pompage et la configuration du laser sont en effet étroitement liées au type de matériau actif utilisé, on distingue :

### I .6.1. Lasers à gaz

Le milieu actif est un gaz contenu dans un tube en verre ou en quartz. Le type de pompage se fait par décharge électrique et c'est presque toujours utilisé pour les gaz. Les espèces gazeuses sont portées dans l'état excité de façon directe par collision avec des électrons ou de façon indirecte par collision avec d'autres gaz, eux-mêmes excités électriquement. Le faisceau émis par ce type de laser est particulièrement étroit et la fréquence d'émission est très pure. Les lasers à gaz couvrent tout le spectre optique, depuis l'ultraviolet jusqu'à l'infrarouge lointain. Cependant, le spectre n'est pas couvert continûment : les lasers à gaz émettent des raies très fines spectralement.



**Figure 1.9. Représentation d'un laser à gaz et de son tube à décharge.**

---

Les lasers à gaz présentent des avantages par rapport à des autres types. Le milieu reste homogène, même aux fortes puissances de rayonnement, l'effet de lentille thermique créé par le gradient d'indice dans le gaz chaud est négligeable, les collisions des atomes au molécules du gaz avec les parois du tube contribuent à l'évacuation de l'énergie thermique, le refroidissement peut être effectué à l'extérieur de la cavité par circulation du gaz, le volume du matériau actif peut être considérable, il est en effet possible de considérer une cavité de plusieurs mètres ou dizaines de mètre de long repliée plusieurs fois à l'aide de miroirs plans. Pour cette raison, les lasers continus les plus puissances, disponibles commercialement sont des lasers à gaz. Les lasers à gaz présentent aussi des inconvénients. Ce sont des systèmes encombrants et fragiles. De plus, des tensions de plusieurs milliers de volts sont nécessaires à la création de la décharge.

Parmi les lasers à gaz les plus courants, on trouve (de l'UV à l'IR lointain) selon le domaine d'émission de longueur d'onde, trois catégories : lasers atomiques neutres et ionisés (visible), laser excimère (Ultraviolet) et lasers moléculaires (Infrarouge).

Dans les lasers atomiques neutres et ionisés on trouve : le laser à Argon ionisé, le laser à Krypton ionisé et le laser He-Ne, où l'on utilise une transition électronique entre deux niveaux d'un atome neutre pour les lasers atomiques et émettent généralement une lumière dans le rouge ou proche infrarouge, des transitions entre deux niveaux d'un atome ionisé.

### **Les lasers à gaz ionisé : argon, krypton**

La transition laser a lieu entre les niveaux d'énergie de l'ion  $\text{Ar}^+$ . L'excitation est obtenue par collision avec les électrons d'un courant de décharge d'une densité égale à plusieurs centaines d'ampères par  $\text{cm}^2$ . L'ion  $\text{Ar}^+$  se caractérise par un diagramme d'énergie comportant de nombreux niveaux. L'inversion de population peut être obtenue entre plusieurs paires parmi ces niveaux. Les lignes d'émission les plus souvent utilisées sont :  $0.514 \mu\text{m}$  (vert),  $0.488 \mu\text{m}$  (bleu). Il est également possible de faire fonctionner le laser à  $0.351$ ,  $0.364$ ,  $0.457$ ,  $0.476$  ou  $0.49 \mu\text{m}$ . Lorsque la cavité est formée de miroirs à large bande de réflexion, plusieurs raies oscillent simultanément. Le faisceau a un diamètre de  $1 \text{ mm}$  environ à la sortie du laser et une divergence de  $0.6 \text{ m rad}$ . Le laser à argon est essentiellement utilisé en recherche scientifique et en métrologie mais c'est aussi le laser qui offre la plus grande puissance continue dans le visible bien que le rendement ne soit que de  $0.05\%$  environ.

Les modèles commercialisés permettent d'obtenir jusqu'à  $30 \text{ W}$ . Le refroidissement est fait par air sur les modèles de puissance inférieure à  $50 \text{ mW}$  et par eau sur les autres modèles. On utilise également le fonctionnement en blocage de modes. En éjectant des impulsions de la cavité à l'aide

---

d'un dispositif électro-optique, on obtient des impulsions dont la puissance crête est de l'ordre du kilowatt. Le laser à argon est utilisé dans l'industrie électronique pour le traitement thermique des semiconducteurs [48].

Le laser à krypton est très semblable au laser à argon, et dispose également de plusieurs lignes d'émission, dont les principales sont dans le rouge ( $0.677\mu\text{m}$ ) et dans le jaune ( $0.568\mu\text{m}$ ). Le laser à hélium-cadmium est un autre laser ionique commercialisé. Il peut émettre quelques mW à  $0.325\mu\text{m}$  et quelques dizaines de mW à  $0.4416\mu\text{m}$ .

### **Le laser à hélium-néon**

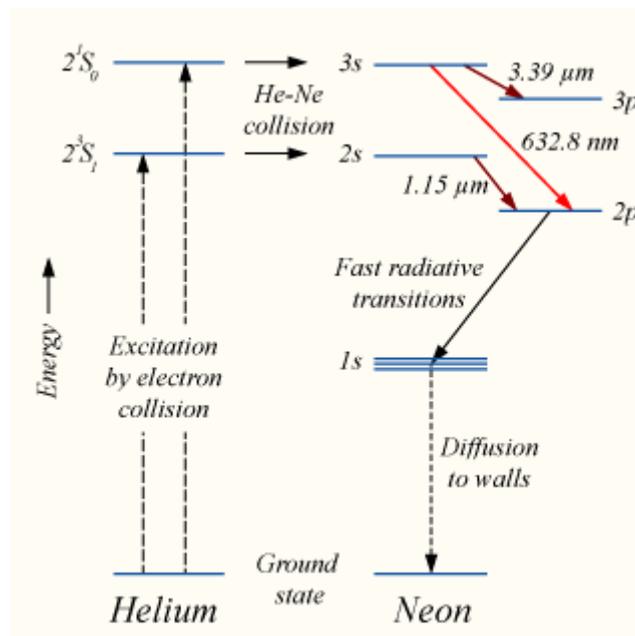
Le laser He-Ne par exemple possède des lignes d'émission laser à  $0.63\mu\text{m}$ ,  $1.15\mu\text{m}$  et  $3.39\mu\text{m}$ , il est obtenu dans un tube à décharge, qui consiste essentiellement en un tube scellé contenant le mélange gazeux [49]. Le schéma d'un montage typique est présenté à la Figure I.9. L'énergie nécessaire au maintien de l'inversion de population provient donc d'une décharge électrique dans le gaz, qui est obtenue en appliquant une haute tension électrique entre l'anode et la cathode.

L'émission laser est ainsi intrinsèquement liée à l'établissement et à la stabilité d'un plasma, dans le tube à décharge. Le plasma est généralement allumé par l'application d'une surtension transitoire entre l'anode et la cathode, ou éventuellement, par un filament chauffé qui émet des électrons dans le mélange gazeux [50]. Avec l'application d'une haute tension entre l'anode et la cathode, les quelques électrons et atomes ionisés, générés lors de la phase d'allumage du plasma, sont accélérés vers les électrodes. Lors de leurs déplacements, ils entrent ainsi en collision avec d'autres atomes encore neutres dans le mélange, les ionisant à leur tour et engendrant progressivement le plasma. Une régulation des courants ionique et électronique dans le tube permet le maintien d'un plasma stable et donc le fonctionnement continu du laser. Un contrôle approprié du plasma permet d'obtenir une émission laser pulsée lorsque celle-ci est recherchée. Un schéma des différents niveaux électroniques des atomes de Ne et d'He est présenté à la Figure I.10.

Les photons lasers correspondent à la désexcitation du Ne depuis les niveaux 2p vers les niveaux 1s. L'inversion de population est effectivement possible puisque le temps de vie des premiers niveaux est de l'ordre de 100 ns, alors qu'il n'est que d'environ 10 ns pour les seconds. La longueur d'onde la plus utilisée vaut 632.8 nm et correspond à la lumière rouge bien caractéristique du laser He-Ne. Toutefois, d'autres transitions optiques sont permises et c'est en choisissant des miroirs présentant un coefficient de réflexion approprié à une de ces longueurs d'onde que la fréquence d'émission du laser est sélectionnée dans la cavité [51]. L'occupation des niveaux 5s ou 4s du Ne

peut en principe résulter uniquement des collisions entre les atomes de Ne et les particules chargées du plasma. La probabilité d'excitation du Ne vers ces états est toutefois fortement accrue par la présence des atomes d'He. Ces derniers sont en effet aisément excités vers leurs niveaux  $2^3s$  ou  $2^1s$ .

Les atomes de Ne peuvent alors être efficacement excités dans les états métastables  $5s$  ou  $4s$ , grâce à la possibilité d'un transfert d'énergie résonnant lors des collisions avec les atomes d'He excités. L'inversion de population tend donc à s'établir et à être entretenue par le plasma. Comme il est expliqué précédemment, la désexcitation cohérente vers les niveaux inférieurs de temps de vie limité,  $3p$  ou  $4p$ , engendre l'émission stimulée de photons dans la cavité [52].



**Figure 1.10. Schéma des niveaux électroniques des atomes de Ne et d'He contribuant à l'établissement de l'effet laser.**

Les autres lasers à gaz fonctionnent selon un principe similaire, reposant sur l'établissement d'un plasma dans un tube à décharge. Les longueurs d'onde émises sont caractéristiques des atomes ou molécules composant le mélange gazeux.

### **Lasers à vapeurs métalliques**

Certains matériaux métalliques comme le cuivre ou l'or présentent à l'état de vapeur des transitions donnant lieu à l'effet laser. Le matériau actif est introduit dans un tube réfractaire, dans

---

lequel on fait d'abord le vide et que l'on chauffe ensuite jusqu'à une température suffisamment élevée pour provoquer la vaporisation du métal (environ 1000°C). Les lasers à vapeurs métalliques émettent un faisceau impulsionnel (fréquence de 5 à 20 kHz) ; les impulsions ont des énergies de quelques millijoules et une durée de 20 à 50 ns. La puissance moyenne atteint une centaine de watts. Les lasers à vapeurs de cuivre offrent deux transitions principales, l'une à 510.5 nm, l'autre à 578.2 nm ; ce faisceau vert, obtenu avec un rendement d'environ 1% est utilisé dans les applications de séparation isotopique des matériaux radioactifs. Des essais fructueux dans le domaine de l'usinage et du traitement des matériaux ont été réalisés. Les lasers à vapeurs métalliques peuvent aussi être utilisés comme sources d'éclairage dans la photographie ultra rapide ou comme source de pompage dans l'amplification d'impulsions issues de lasers à colorants organiques.

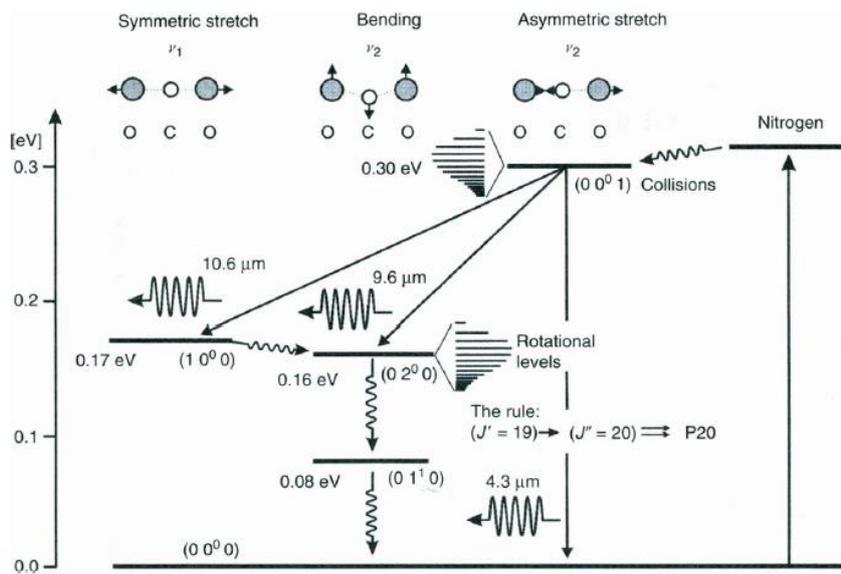
### **Le laser moléculaire à CO<sub>2</sub>**

Ce laser permet, grâce à un rendement de l'ordre de 10%, d'obtenir des puissances de plusieurs dizaines de kilowatts. Il est largement utilisé en laboratoire et dans l'industrie [53]. Les densités de puissance obtenues après focalisation sont suffisantes pour vaporiser ou faire fondre la plupart des matériaux connus. Les lasers à CO<sub>2</sub> fonctionnent en réalité avec un mélange de CO<sub>2</sub>, d'azote et d'hélium, des concentrations d'environ 15 % pour le CO<sub>2</sub> et le N<sub>2</sub>, et de 70 % pour l'He et de pression totale du mélange entre 10 et 50 Torr pour un laser continu standard. L'énergie du rayonnement émis provient d'une transition entre deux niveaux d'énergie de vibration de la molécule de gaz carbonique. Cette molécule, composée d'un atome de carbone et de deux atomes d'oxygène peut vibrer selon trois différents modes.

L'inversion de population correspond à exciter majoritairement les molécules dans le mode de vibration longitudinale asymétrique à 2347 cm<sup>-1</sup>. En se désexcitant vers les modes de déformation (Flexion) à 667 cm<sup>-1</sup> ou vibration longitudinale symétrique à 1337 cm<sup>-1</sup>, les molécules de CO<sub>2</sub> émettent des photons de 9.4 et 10.6 μm, respectivement [54].

L'énergie de vibration est quantifiée : l'énergie d'un mode de vibration ne peut changer que par quantités discrètes. Un état quelconque de vibration de la molécule est noté *ijk* ; l'état de repos de la molécule est noté 000. Le rayonnement à 10.6 microns utilisé en usinage, naît de la transition de l'état 001 à l'état 100. La Figure 1.11 montre également le premier niveau d'énergie de vibration de la molécule d'azote. L'énergie de ce niveau est sensiblement la même que l'énergie du mode 001 de la molécule de CO<sub>2</sub>. La molécule d'azote, présente dans les collisions avec les électrons, a une section efficace plus grande que celle de la molécule de CO<sub>2</sub> et l'énergie d'excitation de l'azote est facilement transférée au dioxyde de carbone. Au mélange N<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub>, on ajoute de l'hélium afin d'accélérer le retour des molécules de CO<sub>2</sub> à l'état de repos, ainsi qu'un refroidissement rapide.

Aussi, une alimentation continue en mélange gazeux suivant l'axe de la cavité évite les problèmes de dégradation du mélange par décomposition du CO<sub>2</sub> et de surchauffe du gaz, donc pour amener une circulation du gaz, plusieurs solutions existent : un tube scellé avec ou sans guide d'onde pour les faibles puissances (quelque Watts à une dizaine de Watts), un flux axial lent pour les puissances moyennes (quelques centaines de Watts), un flux axial rapide pour les fortes puissances (1 à quelques kW), un flux transverse pour les fortes à très fortes puissances (dizaines de kW)[55].



**Figure 1.11. Les différents niveaux d'énergie des transitions vibrationnelles des molécules de gaz carbonique et de d'azote CO<sub>2</sub>-N<sub>2</sub>.**

### Le laser chimique

Pour le laser chimique, l'énergie est apportée par une réaction chimique exothermique qui excite les molécules dans un état vibrationnel [56]. Le laser HF est le plus connu. Une puissance continue supérieure à 5 kW dans le proche infrarouge peut être obtenue en mettant en œuvre la réaction suivante :



La réaction implique un transfert de charge entre les atomes. Celui-ci est très rapide et se réalise avant même que la distance d'équilibre pour former la liaison ionique entre l'hydrogène et le fluor

---

ne soit atteinte. La molécule de HF est donc laissée dans un état vibrationnel très excité pouvant correspondre à une dizaine de photons [57].

### **I.6.2. Lasers liquide (colorant)**

Le milieu actif est un colorant (des molécules organiques fluorescentes, diluées dans un solvant (en général alcoolique, comme l'éthylène glycol ou le méthanol). Le pompage se fait optiquement soit par des lampes à arc, soit, dans la majorité des cas par d'autres lasers (lasers à gaz ou laser à solide). Ces lasers sont peu pratiques (remplacement régulier de colorant, produits toxiques, etc.) et sont surtout utilisés pour la recherche. La longueur d'ondes est accessible selon le colorant.

L'accordable (pour un colorant donné) est obtenue avec un réseau intracavité par exemple. Le spectre couvert est l'intégralité du visible. En effet, les colorants sont des molécules organiques complexes qui possèdent une multitude de niveaux d'énergie. Les niveaux sont tellement serrés qu'on parle plutôt de bande d'énergie. Une molécule de colorant couvre en général continûment une région du visible de l'ordre d'une cinquantaine de nanomètres. Les lasers à colorant sont les seuls lasers à couvrir entièrement le spectre visible, malgré ces propriétés intéressantes, les lasers à colorant sont peu utilisés car leur mise en œuvre est lourde : pour éviter de détruire les molécules à cause du pompage, le colorant circule dans la zone de pompage à partir d'un réservoir. De plus, le mélange colorant + solvant se dégrade dans le temps et doit être changé régulièrement.

### **I.6.3. Laser solide**

Le milieu actif est un cristal ou verre dopé avec des ions métalliques ou de terres rares pour le dopage (Néodyme ( $\text{Nd}^{3+}$ ), titane  $\text{Ti}^{3+}$ , ytterbium...) [58]. Ces lasers sont caractérisés par 3 ou 4 niveaux. Le pompage optique se fait par des lampes flash ou par diode laser (lasers de forte puissance). Leurs transitions laser se situent généralement dans le visible (le rouge) ou proche infrarouge. On notera en particulier la longueur d'onde du  $\text{Nd}^{3+}$  : YAG ( $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ ) qui est un grenat d'aluminium et d'yttrium émettant principalement à 1064 nm. Suivant l'ion et la matrice utilisés, les bandes d'émissions peuvent être étroites ou larges. Le record appartenant au saphir dopé au titane ( $\text{Ti}^{3+} : \text{Al}_2\text{O}_3$ ), pouvant émettre entre 700 nm et 1100 nm. Grâce à l'optique non linéaire, il est possible de convertir la longueur d'onde des lasers à solide dans le visible et dans l'ultraviolet. En fait, lorsque les champs électriques sont très intenses, comme c'est le cas pour les ondes lasers, la matière ne répond pas linéairement à l'excitation électromagnétique de la lumière. Elle répond en émettant de nouvelles fréquences.

---

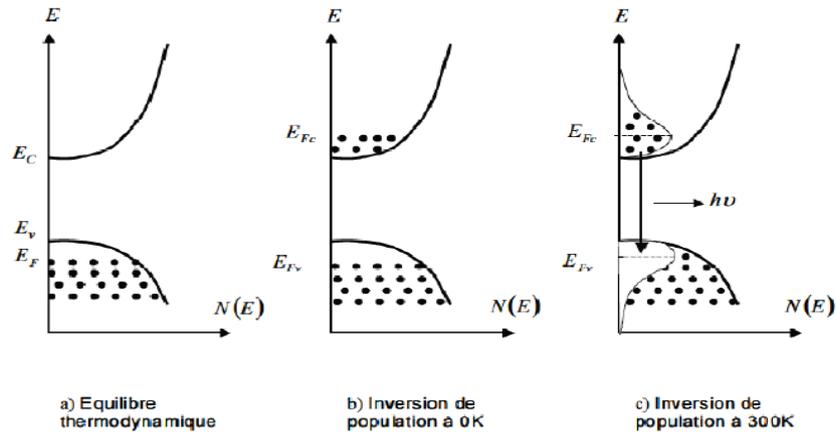
## **Laser à semiconducteur ou diode laser**

C'est en effet un cas à part dans les lasers solides. Dans le laser à semiconducteur ou diode laser, le pompage est électrique et se fait par un courant électrique qui provoque la transition des électrons entre les bandes d'énergie (inversion de population + énergie suffisante). Le milieu actif est un cristal semiconducteur constitué d'atomes neutres arrangés dans le réseau cristallin correspondant au matériau considéré. Les diodes lasers ont des caractéristiques qui les différencient des lasers conventionnels par une émission d'une lumière cohérente, très intense, facilement accordable et modulable [59]. La puissance maximale de ce type de Lasers (environ 2kW au lieu de 20 kW) avec un rendement qui peut atteindre 60%. Selon les matériaux choisis (GaN, GaAlInP, AlGaAs, ...), les longueurs d'onde peuvent couvrir du proche UV à l'infrarouge proche [60]. Ce sont les lasers les plus compacts (la cavité utilise les faces clivées du semiconducteur et mesure à peine 1mm de longueur) et les plus efficaces qui existent. La puissance peut maintenant atteindre plusieurs kilowatts en associant des centaines de diodes lasers et en les combinant dans une même fibre optique. Les seuls défauts des diodes laser sont la mauvaise qualité spatiale du faisceau émis et l'impossibilité de fonctionner en régime déclenché (à cause d'un débit d'émission spontanée trop important).

### **Diode laser à homojonction (PN)**

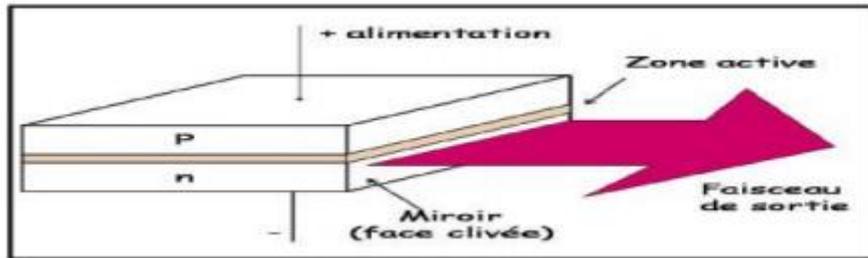
Les premiers lasers à semiconducteur étaient constitués de deux couches fabriquées à partir du même composé, généralement de l'arséniure de gallium. L'effet laser se produit dans ce type de lasers, en appliquant une différence de potentiel direct aux bornes de la jonction PN. Entre les états du bas de la bande de conduction où se trouvent les électrons injectés dans cette bande et les états du sommet de la bande de valence où se focalisent les trous créés dans cette bande, la Figure 1.12 illustre un diagramme qui traduit ce processus. Les électrons et les trous vont migrer vers la zone intermédiaire. La densité de ces derniers (électrons et trous) va augmenter et le nombre des recombinaisons (électrons/trous) augmente aussi. La condition d'inversion de population entre ces deux ensembles d'états s'écrit :

$$E_{FC} - E_{FV} > E_g \quad (1.11)$$



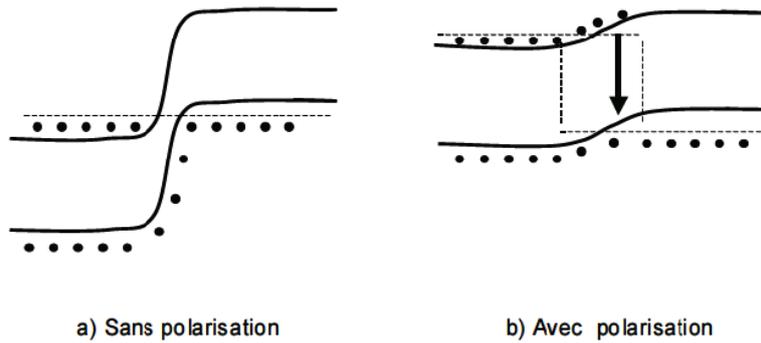
**Figure 1.12. Population des bandes d'énergie.**

Les photons créés lors de la recombinaison constituent une source de lumière comme on le voit sur la Figure 1.13 [61].



**Figure 1.13. Structure d'une diode laser à homojonction.**

La configuration de la jonction PN est représentée sur la Figure 1.14 [62]. Sous l'effet d'une polarisation directe, un courant circule dans la jonction qui correspond au passage des électrons de la région n vers la région p et inversement pour les trous. A l'interface de la jonction, c'est-à-dire au niveau de la zone active, il y a confinement puis recombinaison radiative des porteurs électrons et trous (processus de l'électroluminescence) et émission d'un rayonnement [63].



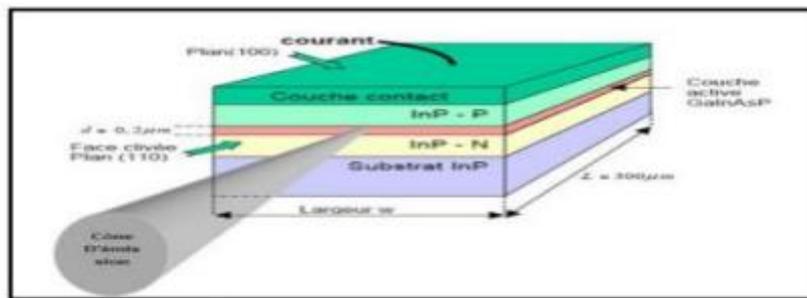
**Figure 1.14. Diagramme énergétique.**

Dans le laser semiconducteur à homojonction [64] :

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

### Diode laser à double hétérojonction (LDH)

En microélectronique, une double hétérostructure consiste en la juxtaposition de deux hétérostructures. Elle présente un intérêt tout particulier pour la réalisation de sources laser à semiconducteur qui a connu un essor commercial important, créant une double barrière de potentiel pour les porteurs minoritaires injectés [65]. Le confinement de porteurs résultant, conduit alors à une grande facilité d'inversion de population. Dans ces structures, la distance entre les barrières est typiquement de l'ordre de  $0.2 \mu\text{m}$ . Il en résulte un bon confinement des photons mais pas un confinement optimisé des porteurs. Pour obtenir des densités de porteurs élevées et donc un gain élevé, avec des courants de faible valeur, on a été amené à réaliser des structures du type double hétérojonction ou structure DH, dont le schéma de principe est donné ci-dessous [66] :



**Figure 1.15. Structure d'une diode laser à double hétérojonction.**

Un des grands avantages de la structure à double hétérojonction, est le guidage optique qu'elle offre naturellement [67]. En effet, les indices de réfraction des couches à grande bande interdite sont plus faibles que celui de la couche confinée à petit gap. La zone active est également un guide d'onde. Il s'ensuit que même les photons émis en dehors de l'axe de la cavité peuvent être guidés et donc être également amplifiés pour participer au rayonnement laser [68].

Le diagramme énergétique et la variation de l'indice de réfraction d'une telle structure sont schématisés dans la Figure 1.15. Le matériau de la couche active est non dopé et il est confiné par deux couches dopées respectivement N et P. L'énergie de la bande interdite des couches de confinement est supérieure à l'énergie des photons générés dans la couche active pour éviter leur absorption et assurer un confinement du champ électromagnétique. Lorsque la diode est polarisée en direct, la jonction p-i-n apporte un maximum de porteurs dans la couche active (i) et le confinement augmente la probabilité de recombinaisons. Ce double confinement (photons et porteurs) entraîne un bon recouvrement entre le mode optique et la zone d'injection des porteurs. Le paramètre, évaluant ce taux de recouvrement, est appelé le facteur de confinement.

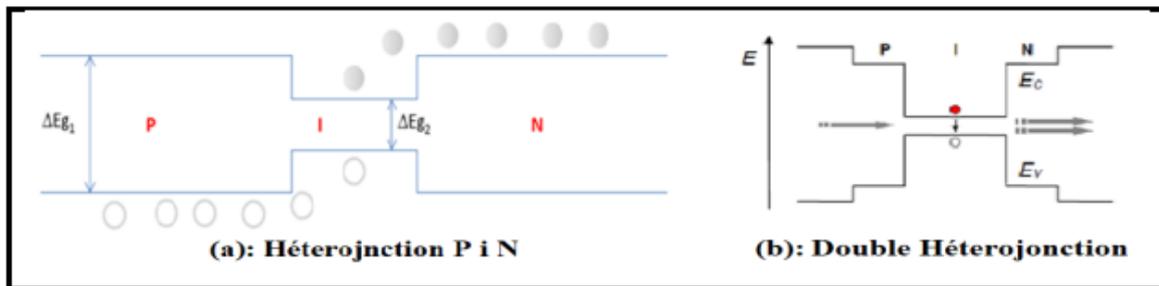


Figure 1.16. Diagramme d'énergie.

### Laser à puits quantique

Une diode laser à puits quantique contraint est constituée d'un empilement de couches sur substrat. La structure du composant comporte [69] :

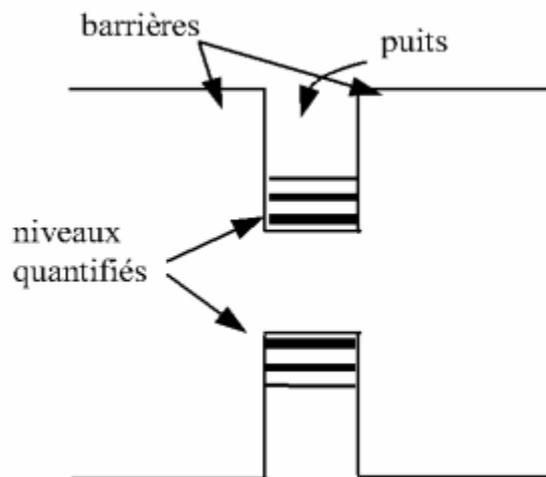
1. Une couche active constituée par un ou plusieurs puits quantiques contraints de quelques dizaines d'Angströms d'épaisseur.
2. Un guide optique constitué de deux couches barrières de quelques dizaines d'Angströms d'épaisseur.
3. Centaines d'Angströms entourées de deux couches de confinement de 1  $\mu\text{m}$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

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

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

De plus, compte tenu de l'épitaxie du matériau de la couche active sur le matériau de paramètre de maille initialement différent, le puits quantique est contraint, ce qui modifie également les énergies des particules et conféré au puits des propriétés électroniques particulières [70].

L'utilisation d'un puits quantique permet d'amener le maximum du gain au gap pour ajuster le nombre d'états utiles à l'inversion de population. Un laser à puits quantique est formé par une fine couche (quelques nm) d'un matériau semiconducteur de faible gap entouré de matériaux de plus grand gap (Figure 1.16). On réalise ainsi un puits de potentiel artificiel de taille quantique dans lequel les porteurs libres du semiconducteur (électrons et trous) vont se retrouver confinés sur des niveaux d'énergie discrets. A chacune des énergies liées permises à l'intérieur du puits est associée une fonction d'onde dont le carré représente la densité de probabilité de présence sur le niveau d'énergie quantifiée. L'utilisation de puits quantiques au sein de la zone active engendre un confinement des électrons et des trous dans un plus faible volume, ce qui pour une injection donnée, permet d'augmenter la densité de porteurs et donc d'atteindre l'inversion de population plus facilement [71].



**Figure 1.17. Schéma d'une structure de puits quantique selon la nature de la discontinuité de bande interdite à l'interface puits-barrière.**

Trois types de puits quantiques existent :

### 1. Puits quantiques de type-I

Dans les puits quantiques de type-I, les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits (Figure 1.17).

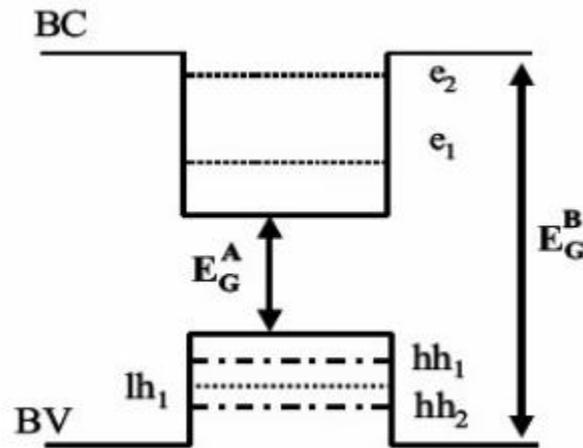


Figure 1.18. Profil de puits quantique de type I.

### 2. Puits quantiques de type-II

Dans les puits quantiques de type-II, les porteurs sont confinés dans deux matériaux adjacents. Dans ce cas, l'énergie du photon est fonction des énergies de confinement des porteurs mais aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure comme le montre la Figure 1.18.

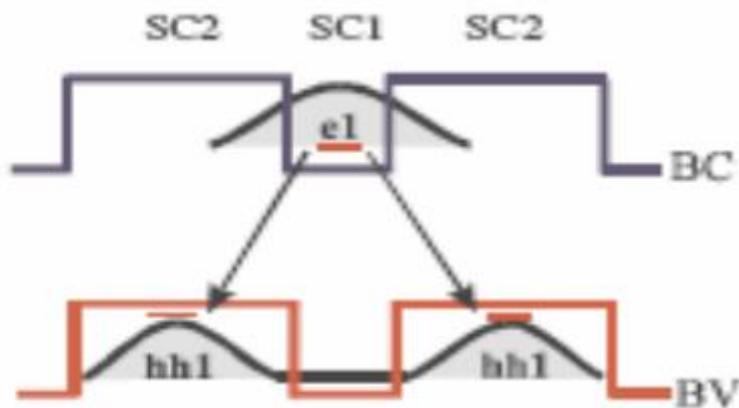
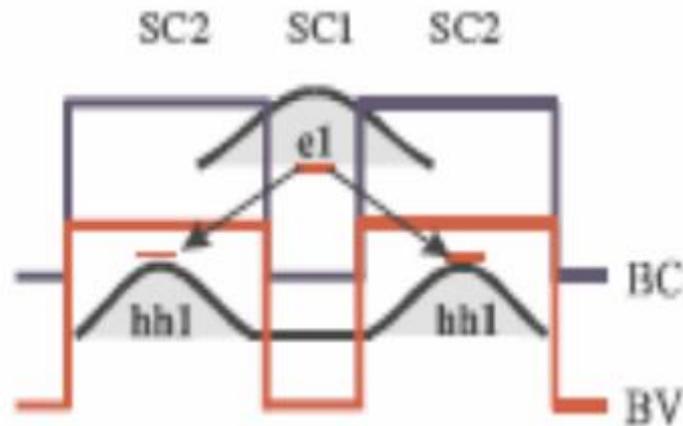


Figure 1.19. Profil de puits quantique de type II.

### 3. Puits quantiques de type-III

La configuration dite de type-III, montrée sur la Figure 1.18, est un cas particulier du type-II dans lequel le bas de la bande de conduction se trouve en dessous du haut de la bande de valence. Cette situation appelée aussi configuration semi-métallique, offre une grande souplesse dans le choix de la longueur d'onde d'émission puisque l'énergie du photon émis n'est alors fonction que des énergies de confinement des électrons et des trous, donc des épaisseurs des couches.



**Figure 1.20. Profil de puits quantique de type III.**

Au début des années 1980, on a commencé à examiner l'idée d'introduire de faibles contraintes dans les puits, ouvrant la voie à de nouvelles possibilités pour la conception des composants, notamment ceux à base des nouveaux matériaux (Ga, In) et (N, As, Sb) [72]. Ainsi, dans les dernières années, l'apparition des puits quantiques sous contraintes a apporté une flexibilité supplémentaire au design des dispositifs optoélectroniques. Les effets de la contrainte sur les propriétés électroniques et optiques des semiconducteurs ont fait l'objet de plusieurs études récentes [73] dans le but de réaliser des dispositifs optoélectroniques plus performants.

Vu le désaccord des paramètres de mailles du substrat et de couche épitaxiale, la contrainte modifie les caractéristiques intrinsèques du semiconducteur, comme l'énergie du gap, les potentiels de déformation ainsi que les paramètres de structure de bande comme les masses effectives [72]. Ces changements présentent plusieurs intérêts pour la réalisation de composants plus performants. A titre d'exemple, on a réussi à exploiter la levée de dégénérescence dans la bande de valence grâce à la contrainte, pour réaliser des amplificateurs optiques insensibles à la polarisation de la lumière [74] et d'autres études ont porté sur la diminution du courant de seuil avec la contrainte [75].

---

## **I.7.Conclusion**

Dans ce premier chapitre, nous avons présenté les notions de base des lasers (principe de fonctionnement, propriété de lumière, types de laser...). Nous avons introduit également les lasers à semiconducteur. Parmi ces derniers on a cité les lasers à semiconducteur homo-jonction, à double-hétérojonction et particulièrement les lasers à puits quantique come le GaSbN/GaSb sur lesquels porte notre travail. Nous verrons dans le chapitre suivant les propriétés physiques du matériau GaSbN qui représente pour nous la couche active de notre diode laser à puits quantique.

---

## References

- [1] L. Esaki & R. Tsu, "Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors", IBM J. Res. Dev. 14, 61, 1970.
- [2] E. Burstein & C. Weisbuch, "Confined Electrons and Photons: New Physics and Devices", 1995.
- [3] C. H. Townes: "The laser's roots: Townes recalls the early days", Laser Focus 14(8):52–58, August, 1978.
- [4] M. A. Haase, J. Qiu, J. M. De Puydt and H. Cheng, "Blue-green diode lasers", Appl. Phys. Lett., 59, 1272–1274, 1991.
- [5] W. P. Risk, T. R. Gosnell, A. V. Nurmikko, "Compact blue-green lasers", Cambridge University Press, 2003
- [6] S. H. Park, Yong-Tae Moon, Dae-Seob Han, Joong Seo Park, Myeong-Seok Oh and Doyeol Ahn, "Light emission enhancement in blue InGaAlN/InGaN quantum well structures", Appl. Phys. Lett. 99, 181101 (2011)
- [7] S. Nakamura and G. Fasol, "The blue laser diode", Springer, Berlin, 1997.
- [8] Albert Einstein: Mitt. Phys. Ges. Zurich 16(18):47, 1916. English translations appear in B.L. van der Waerden (ed.), Sources of Quantum Mechanics, North-Holland, Amsterdam, 1967; and in D. ter Haar (ed.), The Old Quantum Theory, Pergamon, Oxford and New York, 1967.
- [9] fabrikant
- [10] N.G. Basov and A.M. Prokhorov: "3-level gas oscillator". Zh. Eksp. Teor. Fiz. (JETP) 27:431, 1954.
- [11] B. Lengyel: "Evolution of masers and lasers", American Journal of Physics 34(10): 903–913, October, 1966.
- [12] A. L. Schawlow and C. H. Townes: "Infrared and optical masers", Physical Review 112:1940,; also U.S. patent 2,929,922, 1958
- [13] T. H. Maiman: "Stimulated optical radiation in ruby", Nature 187:493, 1960. 15. Arthur L. Schawlow, "Masers and lasers," IEEE Transactions on Electron Devices", ED 23:773–779, July 1976.
- [14] Ali Javan, W.R. Bennett Jr., and D.R. Herriott: "Population inversion and continuous optical maser oscillation in a gas discharge containing a He-Ne mixture", Physical Review Letters 6:106, 1961.

- 
- [15] R. W. G. Brown, E.R. Pike: "A history of optical and optoelectronic physics in the twentieth century", Brown, L.M., Pais, A., Pippard, B., (eds.), in: Twentieth Century Physics, Vol. III, Bristol, Philadelphia: IOP Publishing, and New York: AIP Press, p. 1385, 1995.
- [16] R. N. Hall, G. E. Fenner, J. D. Kingsley, T. J. Soltys, and R. O. Carlson, Phys. Rev. Lett., 9, 366,1962.
- [17] P.Sorokin and J.R.Lankard: "Stimulated emission observed from an organic dye, chloroaluminum phtatocyanine", IBM Journal of Research & Development 10: 162, 1966.
- [18] Professeur Gilbert Mouthon,Professeur Pierre Ravussin « Introduction aux lasers »Ecole Nationale Vétérinaire d'Alfort 2006.
- [19] S. Nakamura and G. Fasol, "The blue laser diode", Springer, Berlin, 1997.
- [20] L. Esaki & R. Tsu, "Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors", IBM J. Res. Dev. 14, 61,1970.
- [21] E. Burstein & C. Weisbuch, "Confined Electrons and Photons: New Physics and Devices", 1995.
- [22] C. H.Townes: "The laser's roots: Townes recalls the early days", Laser Focus 14(8):52–58, August, 1978.
- [23] M. A. Haase, J. Qiu, J. M. De Puydt and H, Cheng, "Blue-green diode lasers", Appl. Phys. Lett., 59, 1272–1274, 1991.
- [24] W. P. Risk, T. R. Gosnell, A. V. Nurmikko, "Compact blue-green lasers", Cambridge University Press, 2003.
- [25] S. H. Park, Yong-Tae Moon, Dae-Seob Han, Joong Seo Park, Myeong-Seok Oh and Doyeol Ahn, "Light emission enhancement in blue InGaAlN/InGaN quantum well structures", Appl. Phys. Lett. 99, 181101 (2011).
- [26] J.C.Dainty (ed.): "Laser Speckle and Related Phenomena", 2d ed., Springer-Verlag, Berlin and New York, 1984.
- [27] K.Thyagarajan and A.K.Ghatak: "Lasers Theory & Application", Plenum, New York, pp. 365–402, 1982.
- [28] LES ARMES A ENERGIE DIRIGEE, MYTHE OU REALITE ?
- [29] Koichi Shimoda: "Introduction to Laser Physics", Springer-Verlag, Berlin and New York, 1984.
- [30] William B.Bridges: "Laser oscillation in singly ionized argon in the visible spectrum". Applied Physics Letters 4:128–130, 1964; erratum, Applied Physics Letters 5:39, 1964.
- [31] D.A.G.Deacon, et al.: "First operation of a free-electron laser", Physical Review Letters 38:892, 1977.

- 
- [32] L. V. Tung, H. V. Phuc: "Nonlinear optical absorption via two-photon process in asymmetrical semi-parabolic quantum wells", *Superlattices and Microstructures* 89 288-295, 2016
- [33] R. Dupuis: "An introduction to the development of the semiconductor laser", *IEEE J, Quantum Electron.* QE-23 651–7, 1987.
- [34] G. Bastard and J.A. Brum: "Electronic states in semiconductor heterostructures", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 22(9), September, 1986.
- [35] C. Sibia, T.M. Benson, M. Marciniak · T. Szoplik, "Photonic Crystals: Physics and Technology", Springer, 2008
- [36] T. Ando, "Hole Subbands at GaAs/AlGaAs Heterojunctions and Quantum Wells", *Journal of the Physical Society of Japan*, 54(4), april 1985.
- [37] M. Altarelli, "Electronic structure and semiconductor-semimetal transition in InAs-GaSb superlattices", *Physical Review B*, 28(2), july 1983.
- [38] M. Asada, A. Kameyama, and Y. Suematsu, "Gain and Intervalence Band Absorption in Quantum-Well Lasers", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, QE-20(7), july 1984.
- [39] H. C. Casey, Jr, and M. B. Panish, "Heterostructure Lasers", Academic Press, New York, 1978.
- [40] Y. Suematsu, "Semiconductor Lasers and Optical Integrated Circuits" (in Japanese), Ohmsha, Tokyo, 1984.
- [41] Japan Society of Applied Physics (ed.), "Fundamentals of Semiconductor Lasers" (in Japanese), Ohmsha, Tokyo, 1987.
- [42] R. Ito and M. Nakamura, "Semiconductor Lasers—Fundamentals and Applications" (in Japanese), Baifukan, Tokyo, 1989.
- [43] G. P. Agrawal and N. K. Dutta, "Semiconductor Lasers", second edition, Van Nostrand Reinhold, New York, 1993.
- [44] W. W. Chow, S. W. Koch, and M. Sergeant, "Semiconductor Laser Physics", Springer, Berlin (1993).
- [45] Japan Society of Applied Physics (ed.), K. Iga (ed.), "Semiconductor Lasers" (in Japanese), Ohmsha, Tokyo (1994).
- [46] L. A. Coldren and S. W. Corzine, "Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits", John Wiley, New York (1995).
- [47] K. Iga and F. Koyama, "Surface Emitting Lasers" (in Japanese), Ohmsha (1990).
- [48] H. Belaidi, M. Himbert, Y. Millerieux, A. Razet, and P. Juncar, "Stability Transfer of Stabilized Ar<sup>+</sup> Laser on Optically Pumped 12 Laser Towards a Frequency Standard Around 1.3  $\mu\text{m}$ ", *IEEE transactions on instrumentation and measurement*, vol 44, no 2, april 1995
- [49] C.G.B. Garrett, , "Gas Lasers", McGraw-Hill, pp.62-75, 1967

- 
- [50] D.C.Sinclair, , W.E.Bell, "Gas Laser Technology", Holt Rinehart, 1980
- [51] J.B.Ferguson, , R.H. Morris: "Single Mode Collapse in 6238 Angstrom Helium Neon Lasers", Applied Optics, 1978
- [52] M.J. Beesley, "Lasers and their applications", Taylor & Francis LTD, 1976.
- [53] D. N. Dederich, "CO2 laser fusion of a vertical root fracture", J Am Dent Assoc, 130(8),1195-1199, 1999
- [54] S. Gouw-Soares,, A. Stabholz, , J. L. Lage-Marques, , D. M. Zezell, , E. B. Groth, , & C. P. Eduardo, , "Comparative study of dentine permeability after apicectomy and surface treatment with 9.6 microm TEA CO2 and Er:YAG laser irradiation". Research Support, Non-U.S. Gov't. J Clin Laser Med Surg, 22(2), 129-139, 2004
- [55] J. M. Auerhammer, R. Walker, A. F. G. Meer, B. Jean, "Longitudinally excited CO2", Laser applied physics B, 1999.
- [56] R.A.Meinzer: Proc. 3rd Int. "Symposium on Gas-Flow and Chemical Lasers", Journal de Physique, Supplément Colloque (ISBN 2-902731-23-X), 1980, p. 155, 1980
- [57] V.I.Lvov, , A.A.Stepanov, , V.A.Shcheglov,: Proc. 4th Int. "Symposium on Gas-Flow and Chemical Lasers 1982", Onorato, M. (ed.), New York, London: Plenum Press., p. 471, 1984
- [58] F. M. Mitschke, L.F. Mollenauer: "Ultrashort pulses from the soliton laser", Opt. Lett. 12 407–409, 1987
- [59] Y.H.Wu. Structure -Dependent Threshold Current Density for Cd Zn Se-Based II VI semiconductor lasers – IEEEJ. Quantum Electron. 30(1996)1562-1569
- [60] J. V. Moloney et al., "Quantum design of semiconductor active materials: laser and amplifier applications", Laser & Photon. Rev. 1 (1), 24, 2007
- [61] <https://www.researchgate.net/figure/schema-de-base-d'un-laser-homojonction-lineaire-devient-superieur-aux-pertes-de-la-fig17-280682441,02/07/2019>
- [62] Z. I. Alferov, "The History and future of semiconductor heterostructures from the Point of View of a Russian Scientist", Physica Scripta, T 68, 32, 1996.
- [63] Z. I. Alferov and R. F. Kazarinov, Russian patent application N950840 "Semiconductor Laser with Electrical Pumping", priority March 30, 1963.
- [64] D. Sands, "Diode Lasers", IOP Publishing Ltd 2005.
- [65] R. Dingle and C. H. Henry, "Quantum effects in heterostructure lasers", US Patent 3.982.207, 1976.
- [66] P.Zoory and L.D Comerford, "Grating- Coupled double – heteroststructure Al GaAs diode lasers" IEEEJ, Quantum Electron. 11451-57, 1974.B. Khaled, <<Etude des lasers à base des semi-

---

conducteurs III V>>, mémoire de master university El hadje Lakhder – Batna Soutenu le 14/12/2011

[67] R. Dingle, W. Wiegmann, and C. H. Henry, "Quantized states of confined carriers in very thin Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As heterostructures", *Phys. Rev. Lett.* **33**, 827, 1974.

[68] Z. I. Alferov, V. M. Andreev, E. L. Portnoi and M. K. Trukan, "AlAs-GaAs heterojunction injection laser with a low room-temperature threshold", *Fiz Tekh Poluprovodn.* **3** 1328–32, 1969.

[69] L.C. Andreani, A. Pasquarello, and F. Bassani, "Hole subbands in strained GaAsGa<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells: Exact solution of the effective-mass equation", *Physical Review B*, **36**(11), october 1987.

[70] A. V. Kavokin, V. P. Kochereshko, G. R. Posina, and I. N. Uraltsev, D. R. Yakovlev, G. Landwehr, R. N. Bicknell-Tassius, and A. Waag, "Effect of the electron Coulomb potential on hole confinement in II-VI quantum wells", *Physical review B* Volume 46, Number 15 October 1992.

[71] P. S. Zory, Jr (ed.), "Quantum Well Lasers", Academic Press, New York (1993).

[72] SEGhilANI Mohamed Seghir : "Modélisation et simulation d'une structure à multi puits quantiques à base de GaInAs (N,Sb)/GaAs". Thèse de magistère. Université de Blida. Département d'électronique.

[73] A.Fisher, H.Kuhn and H.Richter: "New approach in equilibrium theory for strained layer relaxation". *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2712-2715 (1994).

[74] Philippe Mercure : "Calcul de gain optique de structures à puis quantiques sous contraintes". Thèse de doctorat. Ecole polytechnique de Montréal (2006).

[75] ROBERT P. SARZALA: "Physical analysis of an operation of GaInAs/GaAs qantum-well vertical-cavitys tirface-emitting diode lasers emitting in the 1.3-irn wavelength range". *Optica Applicata*, Vol. XXXV No. 2. pp 225-240 2005.



**Chapitre II**  
**GAIN OPTIQUE D'UN LASER A Puits**  
**QUANTIQUE**

---

## Chapitre II

### GAIN OPTIQUE D'UN LASER A PUIITS QUANTIQUE

#### II.1. Introduction

Le gain optique d'un laser à puits quantique avec ou sans contraintes dans les matériaux constituant le laser a été le sujet d'un grand nombre de travaux de recherches aussi bien théoriques qu'expérimentaux [1-6]. Dans ce chapitre, nous étalons le calcul du gain optique d'un laser à puits quantique. La résolution de l'équation de Schrödinger permet la détermination via l'approximation de la fonction enveloppe [7]. Le décalage éventuel des niveaux énergétiques sous l'effet des contraintes éventuelles est pris en considération. L'on note que dans la méthode k.p, on utilise une structure des bandes paraboliques et anisotropes pour représenter les bandes de valence [8]. Ceci facilitera par la suite la simulation de notre structure. Le problème est de déterminer le rapport du nombre net de photons à celui des photons injectés dans la zone active de notre laser.

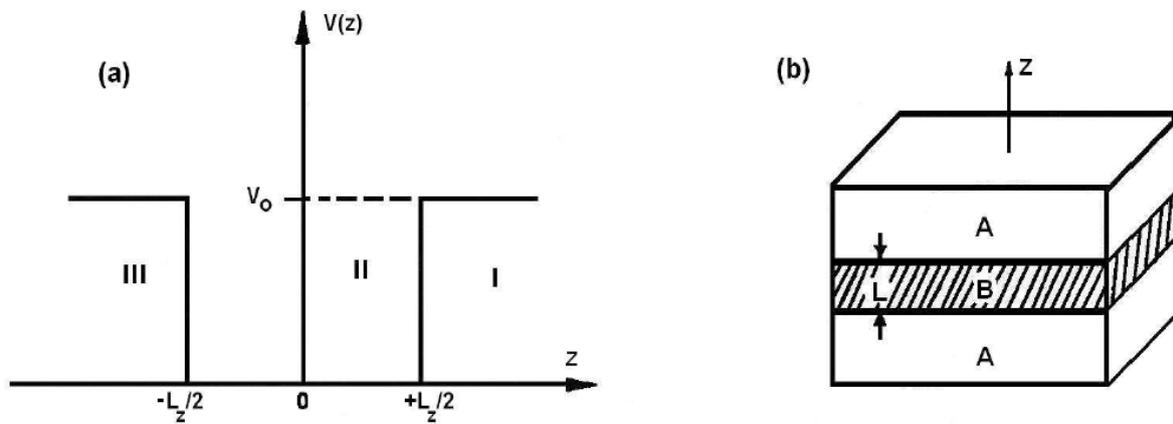
#### II.2. Puits quantique

##### II.2.1. Introduction

Grâce au développement de la croissance, il est devenu possible d'élaborer des structures de types puits quantiques [9]. Par ces propriétés optiques et électroniques fort intéressantes du fait que le comportement physique de la structure est quantique, il a suscité un intérêt considérable et a été l'objet de nombreuses études durant les dernières décennies [10].

On forme un puits de potentiel par la superposition d'une fine couche de matériau semi-conducteurs (quelques nanomètres) de faible gap  $E_{gq}$  entre deux barrières de matériaux semiconducteurs de plus grand gap  $E_{gB}$ . Il en résulte une discontinuité des bandes de valence et de conduction à l'origine de la création d'un puits de potentiel aussi bien pour les trous que pour les électrons. Une telle structure permet le confinement des porteurs. Les états électroniques ne se situent plus ni au sommet de la bande de valence ni au minimum de la bande de conduction mais sont quantifiés en niveaux d'énergie discrets qui ont pour origine la

basse dimensionnalité de la zone active du laser, c'est-à-dire pour des épaisseurs de puits inférieures typiquement à 300 Å.

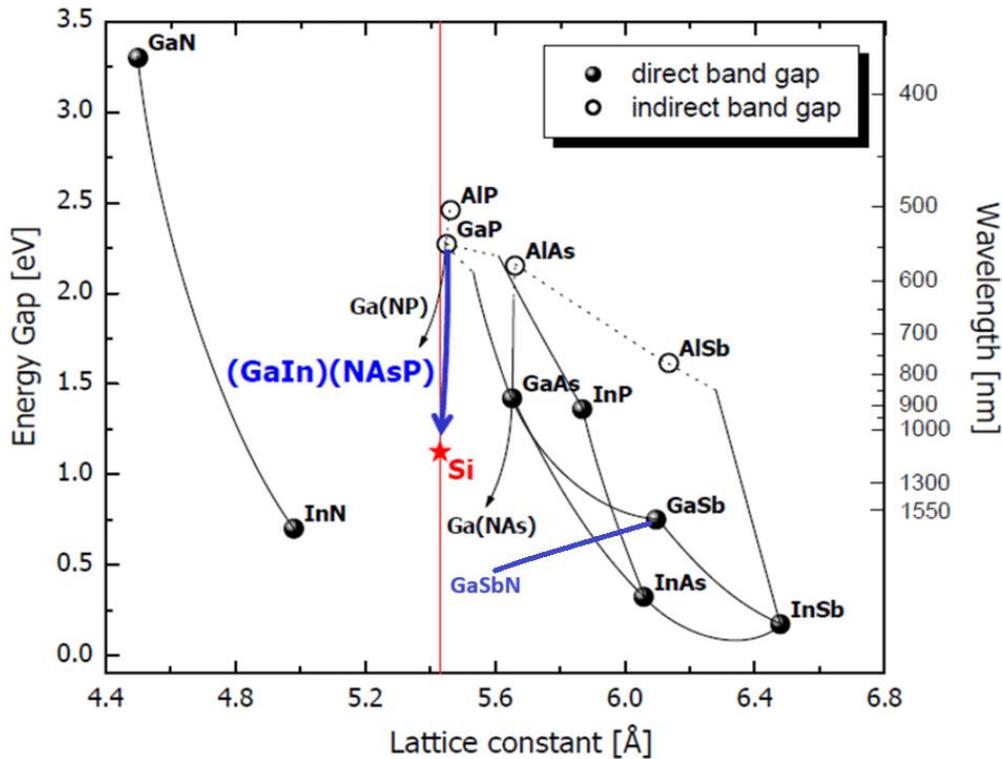


**Figure 2.1. (a) Puits quantique carré de largeur  $L_z$  et de hauteur  $V_0$  ; (b) : Couche d'un matériau semi-conducteur A possédant un gap inférieur à celui du matériau semi-conducteur B.**

Dans les systèmes à puits quantiques le mouvement de l'électron est libre dans le plan de la couche mais n'est pas possible suivant la direction de croissance. Nous parlons ainsi d'une structure bidimensionnelle [11,12]. En raison de la faible largeur du puits, les niveaux d'énergie des porteurs sont quantifiés suivant la direction de croissance.

### II.2.1.1. Paramètres de maille

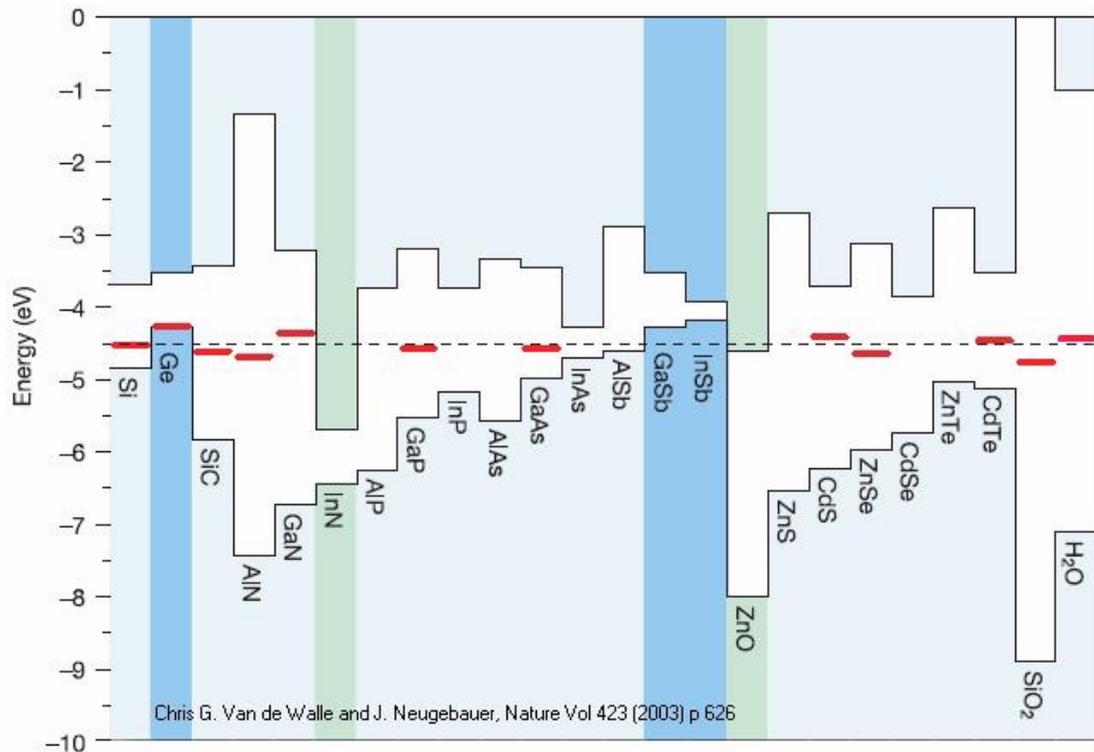
Pour l'élaboration des puits quantiques, on cherche à accorder les paramètres de maille des couches successives, afin de limiter les contraintes et les défauts. La Figure 2.2 reporte les énergies de bandes interdites en fonction du paramètre de maille pour quelque semi-conducteur [12] : II-VI, III-V et IV-IV. Ce tableau nous permet de voir toutes les combinaisons possibles ainsi que leur efficacité du point de vue des énergies pour les études optiques.



**Figure 2.2. Diagramme présentant le gap d'énergie (en ordonnée) et le paramètre de maille (en abscisse) certains semiconducteurs.**

### II.2.1.2. Gaps d'énergie

Les gaps d'énergie des matériaux constituant une hétérostructure conditionne les discontinuités des bandes d'énergie au niveau des interfaces. En fait, les positions relatives des bas de bandes de conduction et des hauts de bande de valence sont d'une importance capitale pour les propriétés optiques et optoélectroniques [13]. Le choix des matériaux d'un composant repose essentiellement sur l'alignement des bandes de conduction et de valence. Van de Wall al.[14] ont étudié l'alignement de bandes d'une large famille des matériaux présentée sur la Figure 2.3.



**Figure 2.3. Alignement des bandes d'après Van de Waller [14].**

On constate la présence de deux principaux types d'alignement : alignement de type I et alignement de type II. Dans une structure de type I : les électrons et les trous se trouvent confinés dans la même couche et la répartition des différences de gap entre la bande de valence et la bande de conduction dépend de la nature des deux différents matériaux considérés. Dans le cas de l'hétérointer face GaSbN/GaSb, la discontinuité de bande de valence est de l'ordre de 10% du gap, Par contre celle de la bande de conduction est d'environ 90% pour une concentration d'azote de 0.03 selon nos calculs.

### II.2.1.3. 1'affinité électronique

Une autre propriété physique conditionnant aussi l'alignement des bandes est l'affinité électronique. L'affinité électronique est un paramètre non encore mûrement déterminé pour le GaSbN. Elle dépend de la concentration d'azote. Ont opté généralement pour des relations d'interpolation ou parfois semi-empiriques employant celle des matériaux parents.

---

## II.2.2. Fonctions d'ondes et niveaux d'énergie

Sur la Figure 2.1 est représenté le schéma d'un puits quantique carré ayant une profondeur finie  $V_0$  et de largeur  $L_z$ .

Le potentiel  $V(z)$  est défini par la relation :

$$V(w) = \begin{cases} 0 & \text{si } |z| < L_z/2 \\ V_0 & \text{si } |z| > L_z/2 \end{cases} \quad (2.1)$$

L'équation de Schrödinger en l'absence d'effets excitoniques s'écrit :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(z) \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (2.2)$$

Où  $m_{xx}^*$  est la masse effective de la particule (électron ou trou),  $E$  et  $\psi$  sont, respectivement, la valeur propre de l'énergie et la fonction d'onde de la particule.

Le potentiel  $V$  est supposé être fonction de la coordonnée  $z$  seulement, auquel cas la fonction d'onde peut être séparée en deux fonctions, la première  $\Phi(x, y)$  décrivant le mouvement de la particule dans le plan  $xy$  du puit quantique et la deuxième  $\zeta(z)$  fonction uniquement de la variable  $z$  pour le mouvement dans la direction  $z$ , soit :

$$\psi(x, y, z) = \Phi(x, y) \cdot \zeta(z) \quad (2.3)$$

L'énergie de la particule est la somme de deux termes et s'écrit :

$$E = E_z^n + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_{xx}^*} \quad (2.4)$$

Où  $xx = e, hh, lh$

Le premier terme  $E_z^n$  représente l'énergie de la particule suivant  $z$  et le deuxième terme représente son énergie cinétique dans le plan  $xy$ .

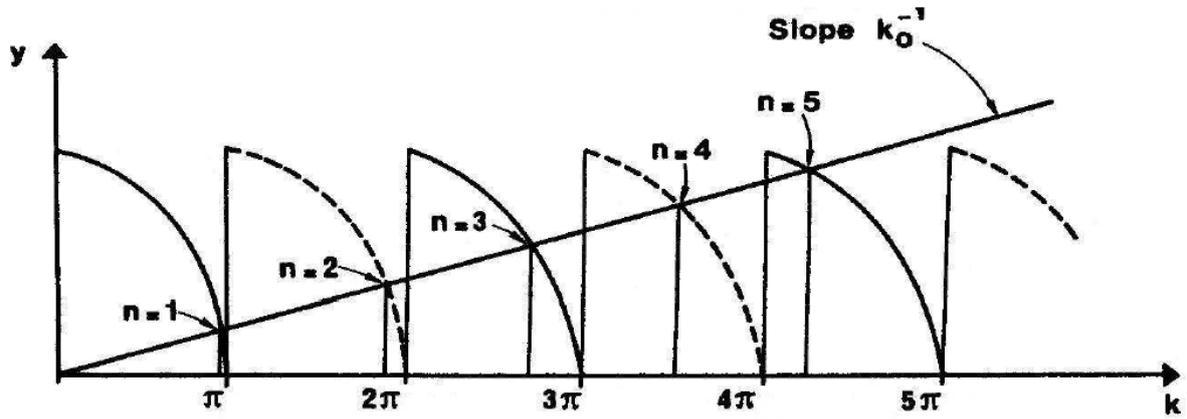


Figure 2.4. Solutions graphiques des équations 2.7 et 2.8. Les solutions paires et impaires correspondent à l'intersection de la droite de pente  $k_0^{-1} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}}$  avec les fonctions tangente (ligne continue) et cotangente (ligne discontinue) respectivement.

La résolution de l'équation de Schrödinger 2.2, donne pour  $\zeta(z)$  les solutions suivantes :

- États avec n pairs :

$$\zeta(z) = \begin{cases} B\sin(k_z z) & \text{si } |z| < L_z/2 \\ \pm C\sin(\pm \kappa z) & \text{si } |z| > L_z/2 \end{cases} \quad (2.5)$$

- États avec n impairs :

$$\zeta(z) = \begin{cases} A\cos(k_z z) & \text{si } |z| < L_z/2 \\ C\sin(\pm \kappa z) & \text{si } |z| > L_z/2 \end{cases} \quad (2.6)$$

Avec :

$$\kappa^2 = \frac{2m_{xx,b}^*}{\hbar^2} (V - E_z^n)$$

Et

$$k_z^2 = \frac{2m_{xx,w}^*}{\hbar^2} (E_z^n)$$

$m_{xx,w}^*$  et  $m_{xx,b}^*$  étant les masses effectives de la particule dans le puits et la barrière respectivement. L'énergie est la solution des équations séculaires suivantes :

$$\tan \left[ \sqrt{\frac{m_{xx,w}^* E_z^n}{2\hbar^2}} L_z \right] = \sqrt{\frac{V - E_z^n}{E_z^n}} \quad \text{si } n \text{ est pair} \quad (2.7)$$

$$\cot \left[ \sqrt{\frac{m_{xx,w}^* E_z^n}{2\hbar^2}} L_z \right] = -\sqrt{\frac{V - E_z^n}{E_z^n}} \quad \text{si } n \text{ est impair} \quad (2.8)$$

On note l'inexistence de solution analytique pour les équations 2.7 et 2.8, leur résolution graphique (Figure 2.4) ou numérique donne les valeurs propres de l'énergie  $E_z^n$ . Dans le cas particulier d'un puits infini  $V_0 \approx \infty$ , la solution analytique existe et l'énergie, dans ce cas, est donnée par :

$$E_z^n = \frac{\hbar^2}{2m_{xx,w}^*} \left[ \frac{n\pi}{L_z} \right]^2 \quad (2.9)$$

Le nombre d'états à l'intérieur d'un puits fini est égal à :

$$1 + \text{Int} \left[ \left( \frac{2m_{xx,w}^* V_0 L_z^2}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{1/2} \right] \quad (2.10)$$

Où  $\text{Int}(x)$  est la partie entière de  $x$ .

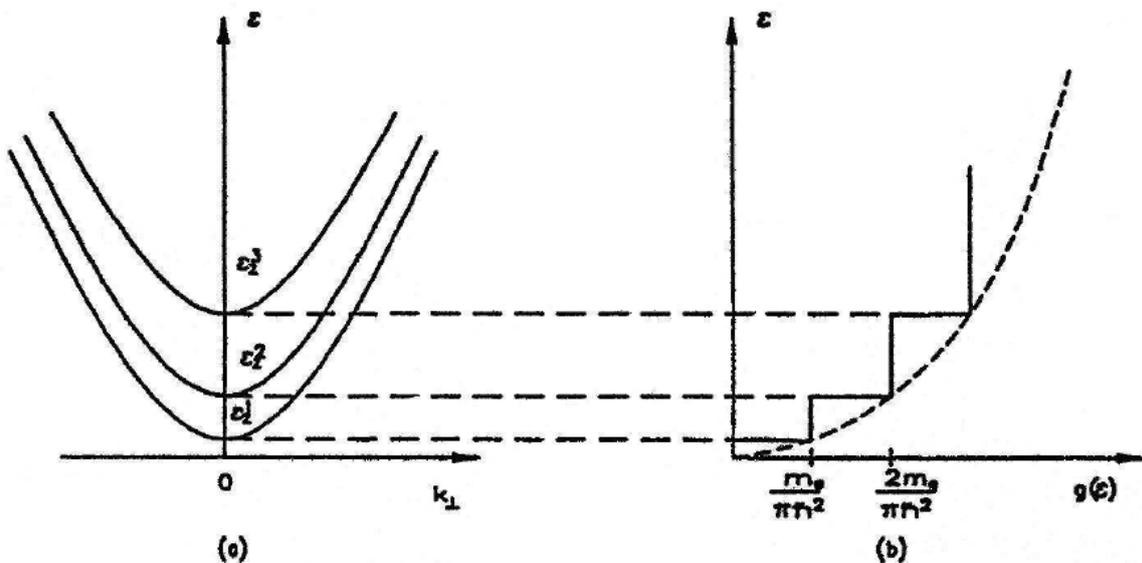


Figure 2.5. (a) Mini-bandes d'énergie créées par le confinement à deux dimensions, (b) Densité d'états à deux dimensions (-) et à trois dimensions (- -).

### II.2.3. Discontinuité des bandes d'énergies

La Figure 2.5 montre les bandes d'énergie créées par le confinement dans un puits quantique ainsi que la densité d'états à deux dimensions et à trois dimensions.

Les niveaux d'énergie dans la bande de conduction et la bande de valence dans un puits quantique peuvent être écrits :

$$E_{xx, \text{str}}^n = E_{xx, \text{b}}^n + \Delta E_{xx, \text{str}} \quad (2.11)$$

En incluant l'influence de la barrière [15]

$$E_{xx, \text{b}}^n = E_{xx}^n n^2 \left( n + \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{m_{xx, \text{b}}^* E_{xx}^n}{m_{xx, \text{w}}^* (\Delta E_{xx} + \Delta E_{xx, \text{str}})}} \right)^{-2} \quad (2.12)$$

$$E_{xx}^n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_{xx, \text{w}}^* L_z^2} \quad (2.13)$$

Où  $E_{xx}^n$  est le niveau quantique dans une barrière infinie,  $n$  est le nombre du niveau quantique,  $m_{xx, \text{b}}^*$  est la masse effective de la barrière,  $\Delta E_c$  et  $\Delta E_v$  sont les hauteurs de la barrière de potentiel pour les bandes de conduction et de valence respectivement calculés en utilisant l'affinité électronique [5] :

$$\Delta E_c = \chi_0^{\text{qw}} - \chi_0^{\text{bar}} \quad (2.14)$$

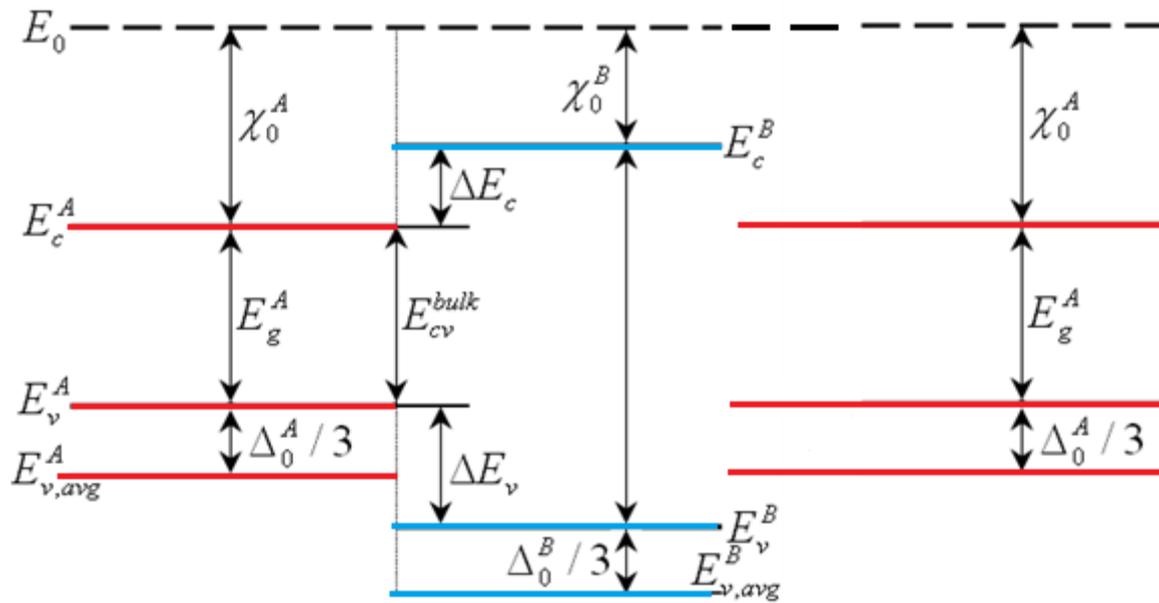
$$\Delta E_v = E_g^{\text{bar}} - E_g^{\text{qw}} - \Delta E_c \quad (2.15)$$

La hauteur de la barrière peut être trouvée à travers le modèle de la théorie de solide, ou la structure de bande peut être écrite comme [1,2] :

$$E_{v, \text{av}}^0 = E_v^0 - \Delta_0/3 \quad (2.16)$$

$$\Delta E_v = E_{v, \text{avg}}^{\text{qw}} - E_{v, \text{avg}}^{\text{bar}} + \Delta_0^{\text{qw}}/3 - \Delta_0^{\text{bar}}/3 \quad (2.17)$$

Si  $\chi_0^A > \chi_0^B$ ,  $\Delta E_c$  est positive et l'alignement est de type I. La structure est présentée sur la Figure 2.6.



**Figure 2.6. Les discontinuités des bandes de conduction et de valence.**

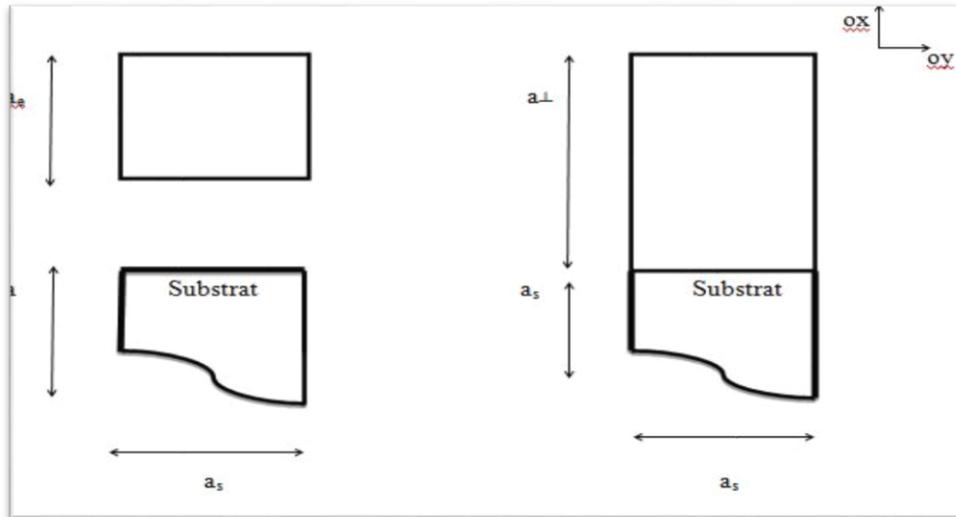
#### II.2.4. Notion de contrainte

La succession des couches formant le laser à puits quantique  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}$  impose l'épitaxie de deux matériaux de paramètre de mailles différents constituant respectivement le puits et les barrières. Deux cas peuvent se présenter :

1. Si l'épaisseur de la couche active est supérieure à une certaine épaisseur appelée épaisseur critique, les déformations induites par le désaccord de maille sont telles que la génération de dislocations au sein de la couche GaSb devient énergiquement favorable, autorisant ainsi la relaxation de la contrainte. Cette situation est catastrophique quant aux propriétés électroniques du matériau.
2. Si l'épaisseur de la couche active reste inférieure à l'épaisseur critique, le paramètre de maille du matériau GaSb peut s'adapter à celui du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  dans le plan de croissance comme le représente la Figure 2.6 grâce à une déformation élastique tétragonale de sa maille cristalline. La couche  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ , plus épaisse, reste non déformée.

De l'adaptation du paramètre de maille du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  à celui du GaSb résulte une contrainte biaxiale dans le plan de l'interface de composantes  $\sigma_{yy}$  et  $\sigma_{zz}$ .

Dans ce qui suit, on calculera d'abord la déformation de la couche GaSb épitaxiée sur  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ . On analysera ensuite l'impact de cette déformation sur les bandes de valence et de conduction et on déterminera ensuite les gaps contraints et relaxés.



**Figure 2.7. Représentation de l'adaptation du paramètre de maille de la couche épitaxiée sur un substrat.**

### II.2.5. Densité d'états

La densité d'état bidimensionnelle  $\rho^{2D}(E)$  est définie comme étant le nombre d'états par unité d'énergie et par unité de surface du plan de la couche [16]. Pour un puits infini, dans l'approximation des bandes paraboliques, la courbe de dispersion  $E(k)$ , consiste en une série de paraboles (Figure 2.5.b) séparées par la quantité :

$$E_z^n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_{xx}^* L_z^2} \quad \text{avec } n = \text{entier} \neq 0 \quad (2.18)$$

Chaque parabole donne lieu à une densité d'état constante égale à :

$$\frac{m_{xx}^*}{\pi \hbar^2} \quad (2.19)$$

La densité d'état totale dans le puits est donnée par [4]:

$$\rho^{2D}(E) = 2 \sum_{n, k_x, k_y} \delta \left[ E - E_z^n - \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_{xx}^*} \right] \quad (2.20)$$

Où sous forme compacte en utilisant la fonction escalier  $\Theta(E)$  :

$$\rho^{2D}(E) = \frac{m_{xx}^*}{\pi\hbar^2} \sum_n \Theta(E - E_z^n) \quad (2.21)$$

### II.2.6. Détermination des pseudo-niveaux de Fermi

Quand la non-parabolicité des bandes peut être omise, la densité (par unité de volume) des électrons et des trous dans un puits quantique de largeur  $L_w$  s'écrit [17] :

$$n = \int \frac{\rho_{2Dc}(E_2)f_2 dE_2}{L_w} \quad (2.22)$$

$$p = \int \frac{\rho_{2Dv}(E_1)(1 - f_1)dE_1}{L_w} \quad (2.23)$$

Où  $\rho_{2Dc}$  et  $\rho_{2Dv}$  sont les densités d'états des électrons et des trous respectivement dans le puits quantique,  $f_1$  et  $f_2$  sont les probabilités d'occupation des électrons dans la bande de valence et de conduction respectivement. Après l'intégration et en remplaçant les densités d'états et les probabilités par leurs formules nous obtenons :

$$n = \frac{m_e k_B T}{\pi\hbar^2 L_w} \sum_n \ln \left[ \exp \left( \frac{F_c - E_{cn}}{k_B T} \right) + 1 \right] \quad (2.24)$$

$$p = \frac{m_h k_B T}{\pi\hbar^2 L_w} \sum_n \ln \left[ \exp \left( \frac{E_{vn} - F_v}{k_B T} \right) + 1 \right] \quad (2.25)$$

Où  $m_e$  et  $m_h$  sont les masses effectives des électrons et des trous respectivement,  $F_c$  et  $F_v$  sont les pseudo-niveaux de Fermi dans la bande de conduction et de valence. On peut en déduire :

$$\frac{F_c - E_{c1}}{k_B T} = \ln \left[ \exp \left( \frac{\pi\hbar^2 n L_w}{m_e k_B T} \right) - 1 \right] \quad (2.26)$$

$$\frac{E_{v1} - F_v}{k_B T} = \ln \left[ \exp \left( \frac{\pi\hbar^2 p L_w}{m_h k_B T} \right) - 1 \right] \quad (2.27)$$

Les pseudo-niveaux de Fermi peuvent être retrouvés de ces deux formules et la condition de neutralité électrique :

$$n + N_A^- = p + N_D^+ \quad (2.28)$$

$$F_c - F_v > \hbar\omega \quad (2.29)$$

Où  $\hbar\omega$  est plus grande que l'énergie de la bande interdite.

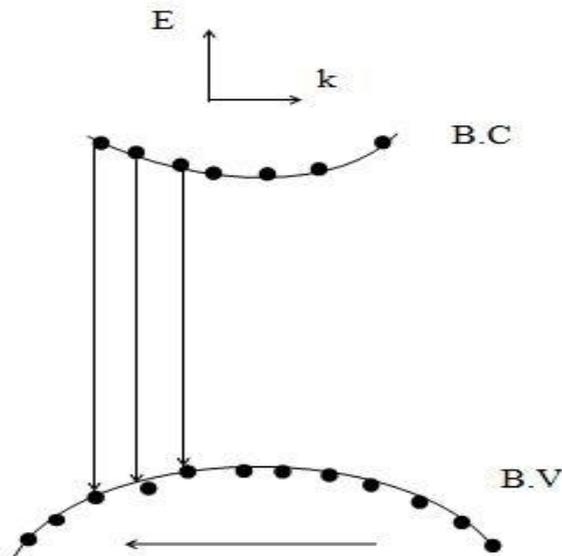
### II.2.7. Transitions optiques

La règle d'or de fermi donne le taux de la transition pour une seule paire d'états de la bande de conduction et de la bande de valence [18]. Nous savons que beaucoup d'états  $k$  existent dans les bandes de conduction et de valence. Pour trouver le taux de transition totale, nous devons additionner les taux de transition permises sur toutes les paires, c'est-à-dire les transitions verticales dans l'espace  $k$  [19]. Nous pouvons alors sommer sur tous les états électroniques  $N_s$  entre les bandes comme l'illustre la Figure 2.3. Le taux de transition totale par unité de volume (une unité  $s^{-1} \text{ cm}^{-1}$ ) est donné par

$$\begin{aligned} W_{c \rightarrow v} &= \frac{1}{V} \int W_{e \rightarrow h} dN_s = \frac{1}{V} \int W_{e \rightarrow h} \frac{1}{V} \frac{dN_s}{dk} dk \\ &= \frac{2\pi}{\hbar} \int |H'_{eh}|^2 \delta(E_{eh} - \hbar\omega) \rho(k) dk \end{aligned} \quad (2.30)$$

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

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



**Figure 2.8. Transitions verticales dans l'espace  $\vec{k}$  de la bande conduction vers la bande de valence.**

En utilisant le changement de variable dans la fonction delta,  $x = E_{eh} - \hbar\omega$ , l'expression 3.30 devient :

$$W_{c \rightarrow v} = \frac{2\pi}{\hbar} \int |H'_{eh}|^2 \delta(x) \rho(k) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{eh}|^2 \left[ \frac{\rho(k)}{dE_{eh}/dk} \right]_{E_{eh}=\hbar\omega} \quad (2.31)$$

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

$$E_e(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e}, \quad E_h(k) = E_v - \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} \quad (2.32)$$

Et

$$E_g = E_c - E_v$$

On aura

$$E_{eh} = E_e - E_h = \left[ E_c + \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e} \right] - \left[ E_v - \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} \right] = E_g + \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} \quad (2.33)$$

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

L'énergie de gap  $E_g = E_c - E_v$ , est bien définie comme le gap entre deux sous-bandes d'énergie dans le puits quantique et correspond aux bords du matériau massif. Avec l'usage de la masse réduite  $m_r$ , on eut écrit :

$$W_{c \rightarrow v} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{eh}|^2 \rho_{red}(E_{eh} - E'_g), \quad \text{ou} \quad E_{eh} = \hbar\omega \quad (2.34)$$

Pour des bandes paraboliques et en utilisant la masse réduite  $m_r$ , les énergies individuelles  $E_e$  et  $E_h$  sont reliées avec l'énergie de transition  $E_{eh}$  par

$$E_e = E_c + \frac{m_r}{m_e} (E_{eh} - E_g) \quad (2.35)$$

$$E_h = E_v - \frac{m_r}{m_h} (E_{eh} - E_g) \quad (2.36)$$

---

## II.3. États électroniques dans le puits quantique

### II.3.1. Théorie k.p

La théorie k.p consiste à construire, sous forme de matrice, des Hamiltoniens dont les valeurs propres donnent la structure de bande au voisinage du centre de la zone de Brillouin [20]. Pour construire ces matrices, il est évidemment primordial de savoir sur quelles bases on les construit et donc de connaître les fonctions d'onde qui servent de base.

En partant des fonctions et énergies propres au centre de la zone de Brillouin ( $k=0$ ) pour un semiconducteur donné, et en négligeant l'effet des excitons, on peut déterminer la relation de dispersion locale des bandes de conduction et de valence pour des valeurs du vecteur d'onde voisins de  $k=0$  avec la méthode k.p[21] avec la contrainte de Pikus et Bir [22].

L'hamiltonien d'un électron dans un cristal massif s'écrit :

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m_0} + V(r) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\nabla}V \wedge \vec{P}) \cdot \vec{\sigma} \quad (2.37)$$

Où  $\vec{P} = i\hbar\nabla$  est l'impulsion,  $m_0$  est la masse de l'électron libre,  $V(r)$  représente le potentiel cristallin périodique et  $\vec{\sigma}$  est le spin de l'électron représenté par les matrices de Pauli. L'équation de Schrödinger qu'il faudra résoudre est :

$$H\psi_{n\vec{k}} = E\psi_{n\vec{k}} \quad (2.38)$$

Les fonctions d'onde  $\psi_{n\vec{k}}$  s'écrivent comme :

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \cdot \exp(i\vec{k}\vec{r}) \quad (2.39)$$

$u_{n\vec{k}}(\vec{r})$  est la partie périodique de la fonction de Bloch et  $\exp(i\vec{k}\vec{r})$  représente une onde plane.  $n$  représente l'indice de bande et  $\vec{k}$  le vecteur d'onde de l'électron.

On a :

$$\vec{P}\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r})(\vec{P} + \hbar\vec{k})u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.40)$$

$$\vec{P}^2\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r})(\vec{P}^2 + 2\hbar\vec{k}\vec{P} + \hbar^2\vec{k}^2)u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.41)$$

### II.3.1.1. Hamiltonien des électrons dans la bande de conduction

Lorsque le gap  $E_g$  est suffisamment élevé, on peut négliger le couplage entre la bande de conduction et la bande de valence. Cette approximation est notamment valable pour les matériaux à base de GaAs ou d'In P, très utilisés dans les composants optoélectroniques. Pour calculer l'onde enveloppe des états de conduction, il faut résoudre l'équation de Schrödinger selon l'approximation de Ben-Daniel-Duke [23] :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{m_e} \frac{\partial}{\partial z} \right) + \frac{\hbar^2 k_\rho^2}{2m_e} + V_c(z) \right) \Psi(z) = E \Psi(z) \quad (2.42)$$

Où  $V_c$  est le potentiel de conduction donné en (1.36),  $m_e$  est la masse effective de l'électron.

Cette formulation prend en compte la dispersion en énergie selon le plan parallèle aux couches ainsi que la contribution à l'affinité et la variation hydrostatique de l'énergie de conduction. Sans couplage, la relation de dispersion en énergie selon  $k_\rho$  est donnée selon l'approximation parabolique :

$$E_c(k_\rho) = E_c(0) + \frac{\hbar^2}{2m_e} k_\rho^2 \quad (2.43)$$

Pendant cette approximation n'est pas toujours valable surtout quand la structure comporte des matériaux dont la masse effective dans chaque matériau est très différente.

### II.3.1.2. Hamiltonien des trous dans la bande de valence : description matricielle

Le problème des états de valence est plus complexe en raison de la dégénérescence des trous lourds et des trous légers et de la proximité de la bande split-off (spin-orbite). Les deux bandes de trous lourds et de trous légers se trouvent alors découplées à la fois par la quantification du mouvement dans la direction  $z$  et par la contrainte biaxiale. Le modèle faisant intervenir ces deux contributions est le modèle de Pikus-Bir.

### II.3.2. Le modèle de Luttinger-Kohn

L'Hamiltonien Luttinger-Kohn dans la base des fonctions d'onde  $|J, m_j\rangle$  pour  $J = 3/2$ ,  $\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle$ ,  $\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$ ,  $\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$ ,  $\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle$  sans contrainte est :

$$H_0 = \begin{bmatrix} P + Q & \tilde{R} & -S & 0 \\ \tilde{R}^\dagger & P - Q & 0 & S \\ -S^\dagger & 0 & P - Q & \tilde{R} \\ 0 & S^\dagger & \tilde{R}^\dagger & P + Q \end{bmatrix} \quad (2.44)$$

Avec

$$\tilde{R} = |R| - i|S|$$

$$\tilde{R}^\dagger = |R| + i|S|$$

$$P = \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar^2}{m} \right) \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$Q = \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar^2}{m} \right) \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2)$$

$$S = \sqrt{3} \left( \frac{\hbar^2}{m} \right) \gamma_3 k_z (k_x - ik_y)$$

$$R = - \left( \frac{\hbar^2}{m} \right) \left[ \frac{\sqrt{3}}{2} \bar{\gamma} (k_x - ik_y)^2 - \frac{\sqrt{3}}{4} (\gamma_3 - \gamma_2) (k_x + ik_y)^2 \right]$$

Nous définissons les phases  $\theta_S$  et  $\theta_R$  de R et S par :

$$R = |R| e^{i\theta_R}$$

$$S = |S| e^{i\theta_S}$$

### II.3.3. L'Hamiltonien de Bir-Pikus

La déformation  $\xi$  entraîne un changement d'énergie décrite par un hamiltonien. La contrainte uniaxiale introduit un Hamiltonien de contrainte  $H_\xi$  donné par :

$$H_\xi = \begin{bmatrix} \xi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\xi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\xi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \xi \end{bmatrix} \quad (2.45)$$

Où  $\xi$  est le potentiel de contrainte. La base pour la matrice 1 est :

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY) \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow\rangle$$

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} |(X + iY) \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle$$

Pour simplifier le problème, nous mettons une transformation unitaire de la matrice 4x4  $H = H_0 + H_\xi$  suivant la méthode de Broido et Sham [24] et Twardowski et Herman [25] dans :

$$\bar{H} = \bar{U}H\bar{U}^\dagger \quad (2.46)$$

$$\bar{H} = \begin{bmatrix} H^U & 0 \\ 0 & H^L \end{bmatrix} \quad (2.47)$$

Où le block bas  $H^L$  et haut  $H^U$  sont donnés par :

$$H^\sigma = \begin{bmatrix} P \pm Q \pm \xi & R \\ R^* & P \mp Q \mp \xi \end{bmatrix} \quad (2.48)$$

$$R = |R| - i|S|$$

Où  $\sigma=U$  (L) refaire à haut (ou bas) avec le signe  $\pm$  et la transformation entre les anciennes bases  $\left| \frac{3}{2}, v \right\rangle$  ( $v = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$ ) et les nouvelles bases est :

$$|1\rangle = \alpha \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle - \alpha^* \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle$$

$$|2\rangle = -\beta^* \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$|3\rangle = \beta^* \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$|1\rangle = \alpha \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle + \alpha^* \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle$$

La transformation unitaire  $\bar{U}$  est définie par :

$$\bar{U} = \begin{bmatrix} \alpha^* & 0 & 0 & -\alpha \\ 0 & -\beta & \beta^* & 0 \\ 0 & \beta & \beta^* & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & \alpha \end{bmatrix} \quad (2.49)$$

Où

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left[ i \left( \frac{3\pi}{4} - \frac{3\phi}{2} \right) \right]$$

$$\beta = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left[ i \left( -\frac{\pi}{4} + \frac{\phi}{2} \right) \right]$$

$$\phi = \tan^{-1} \left( \frac{k_y}{k_x} \right)$$

Nous considérons un puits quantique de largeur  $L$ , suivant la direction (001), nous choisissons l'origine dans le centre du puits. Pour calculer la structure de bande et les fonctions d'ondes des électrons et des trous, nous allons utiliser la méthode k.p. Pour simplifier les calculs, nous supposons que les bandes de conduction et de valence sont découplées. Pour la bande de conduction, une bande parabolique et isotrope est utilisée. Pour la bande de valence, nous avons utilisé l'Hamiltonien 4x4 de Luttinger-Kohn dont les éléments sont dérivés de la méthode k.p.

$$H = \begin{bmatrix} P + Q + \xi & R & 0 & 0 \\ R^\dagger & P - Q - \xi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P - Q - \xi & R \\ 0 & 0 & R^\dagger & P + Q + \xi \end{bmatrix} + V(z) \quad (2.50)$$

Avec

$$P = \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar^2}{m} \right) \gamma_1 \left( k_x^2 + k_y^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

$$Q = \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar^2}{m} \right) \gamma_2 \left( k_x^2 + k_y^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

$$R = \frac{\hbar^2}{m} \left[ \frac{\sqrt{3}}{2} \bar{\gamma} (k_x^2 + k_y^2) - \sqrt{3} \gamma_3 (k_x^2 + k_y^2)^{1/2} \frac{\partial}{\partial z} \right]$$

$V(z)$  Est le potentiel des trous ;  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  sont les paramètres de Luttinger ;  $m$  est la masse de l'électron libre ;  $\bar{\gamma} = \frac{1}{2} (\gamma_1 + \gamma_2)$ ,  $R^\dagger$  est l'adjoint de  $R$  ; et  $\xi$  est le potentiel de la contrainte donné par :

$$\xi = b \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}} X \quad (2.51)$$

Où  $\epsilon$  est le potentiel de déformation,  $C_{11}$  et  $C_{12}$  sont les constantes diélectriques, et  $X$  est le stress effectif.

$$\Psi_{m\vec{k}_{\parallel}}^U(\vec{r}) = \sum_{v=1,2} g_m^{(v)}(\vec{k}_{\parallel}, z) e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{\rho}} |v\rangle \quad (2.52)$$

$$\Psi_{m\vec{k}_{\parallel}}^L(\vec{r}) = \sum_{v=3,4} g_m^{(v)}(\vec{k}_{\parallel}, z) e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{\rho}} |v\rangle \quad (2.53)$$

Où  $g_m^{(v)}(\vec{k}_{\parallel}, z)$  sont les fonctions enveloppes,  $|v\rangle$  représente la transformation de la fonction enveloppe dans le centre de la zone,  $m$  est l'indice des sous bandes du puits quantique,  $\vec{k}_{\parallel} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$ ,  $\vec{\rho} = x\hat{x} + y\hat{y}$ , et  $U$  et  $L$  représente les blocks haut et bas, respectivement. La fonction enveloppe  $g_m^{(v)}$  satisfait :

$$\begin{aligned} & \sum_{v'=1,2} \left[ H_{vv'}^U(\vec{k}_{\parallel}, -i \frac{\partial}{\partial z}) + V(z) \delta_{vv'} \right] g_m^{(v')}(\vec{k}_{\parallel}, z) \\ & = E_m^U(\vec{k}_{\parallel}) g_m^{(v)}(\vec{k}_{\parallel}, z) \end{aligned} \quad (2.54)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{v'=1,2} \left[ H_{vv'}^L(\vec{k}_{\parallel}, -i \frac{\partial}{\partial z}) + V(z) \delta_{vv'} \right] g_m^{(v'+2)}(\vec{k}_{\parallel}, z) \\ & = E_m^L(\vec{k}_{\parallel}) g_m^{(v+2)}(\vec{k}_{\parallel}, z) \end{aligned} \quad (2.55)$$

Pour  $v=1,2$ . Les blocks Hamiltoniens  $H^U$  et  $H^L$  sont donnés par :

$$H^{\sigma} = \begin{bmatrix} P \pm Q \pm \xi & R \\ R^{\dagger} & P \mp Q \mp \xi \end{bmatrix} \quad (2.56)$$

Où  $\sigma = U$  (ou  $L$ ) représente le haut (ou le bas) signe. Nous résolvons numériquement les problèmes du couplage des valeurs propre donnés par 6a et 6b en utilisant la méthode des différences finies.

---

#### II.4. Le gain optique

L'interaction entre les photons et les électrons dans un semiconducteur est décrite par l'hamiltonien [26,27] :

$$H = \frac{1}{2m_0} (p - eA)^2 + V(r) \quad (2.57)$$

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(r) - \frac{1}{2m_0} (pA + Ap) + \frac{e^2 A^2}{2m_0} \quad (2.58)$$

Cet hamiltonien peut s'écrire :

$$H = H_0 + H_{\text{int}} \quad (2.59)$$

$$\text{Avec } H_{\text{int}} \simeq -\frac{e}{m_0} A \cdot p$$

Où le terme  $e^2 A^2 / 2m_0$  a été négligé car  $|eA| \ll |p|$ .

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

$$N_{\text{inj}} = \frac{S}{\hbar\omega} \quad (2.60)$$

Le potentiel vecteur  $A$  du champ optique est de la forme :

$$A = A_0 \cos(kr - \omega t) \hat{e} \quad (2.61)$$

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

$$E(r, t) = -\frac{\partial A}{\partial t} = -\omega A_0 \sin(kr - \omega t) \hat{e} \quad (2.62)$$

$$H(r, t) = \frac{1}{\mu} \nabla \times A = -\frac{1}{\mu} A_0 \sin(kr - \omega t) k \times \hat{e} \quad (2.63)$$

L'intensité optique est la moyenne du vecteur de Poynting :

$$S = \langle E(r, t) \times H(r, t) \rangle = \frac{n_r c \epsilon_0 \omega^2 A_0^2}{2} \quad (2.64)$$

$n_r$  est l'indice de réfraction du matériau considéré,  $\mu$  la perméabilité magnétique,  $\epsilon_0$  la constante diélectrique du vide et  $c$  la vitesse de la lumière dans le vide.

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

$$N_{inj} = \frac{S}{\hbar\omega} = \frac{n_r c \epsilon_0 \omega A^2}{2\hbar} \quad (2.65)$$

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

$$R_{v \rightarrow c} = \frac{2}{V} \sum_{l,m} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\eta} | H_{int} | \psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\sigma} \rangle \right|^2 \delta(E_l^c(\vec{k}_{\parallel}) - E_m^{h,\sigma}(\vec{k}_{\parallel}) - \hbar\omega) f_{h,\sigma}^m (1 - f_c^l) \quad (2.66)$$

$$R_{c \rightarrow v} = \frac{2}{V} \sum_{l,m} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\eta} | H_{int} | \psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\sigma} \rangle \right|^2 \delta(E_m^{h,\sigma}(\vec{k}_{\parallel}) - E_l^c(\vec{k}_{\parallel}) - \hbar\omega) f_c^l (1 - f_{h,\sigma}^m) \quad (2.67)$$

$l$  Parcourant les états de conduction et  $m$  les états de valence. Le premier facteur 2 vient du fait que l'on prend en compte les deux états de spin possibles pour l'électron [28-30]. La règle de conservation des moments implique que les moments de deux états électroniques permettant une transition via l'émission ou l'absorption d'un photon doivent être identiques.

C'est pour cela que, dans les expressions de  $R_{v \rightarrow c}$  et  $R_{c \rightarrow v}$ , la somme est faite sur le même moment  $k_{\rho}$  pour les états de conduction et de valence.

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

$$\psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\eta}(\vec{r}) = \frac{e^{ik_{\rho} \cdot r}}{\sqrt{C}} g_l^{(v)}(\vec{k}_{\parallel}, z) |s\eta\rangle \quad (2.68)$$

Où  $\eta = \uparrow$  ou  $\downarrow$ , la constante  $C$  étant choisie de manière à normer la fonction d'onde :  $|\Psi_{c,n}^{\sigma}|^2 = 1$

Pour un trou, s'agissant de la partie haute de l'hamiltonien, on a :

$$\Psi_{m\vec{k}_{\parallel}}^U(\vec{r}) = \frac{e^{ik_{\rho} \cdot r}}{\sqrt{C}} \left[ g_m^{(hh)}(\vec{k}_{\parallel}, z) |1\rangle + g_m^{(lh)}(\vec{k}_{\parallel}, z) |2\rangle + g_m^{(sh)}(\vec{k}_{\parallel}, z) |3\rangle \right] \quad (2.69)$$

Pour un état de la partie basse de l'hamiltonien :

$$\Psi_{m\vec{k}_{\parallel}}^L(\vec{r}) = \frac{e^{ik_{\rho} \cdot r}}{\sqrt{C}} \left[ g_m^{(hl)}(\vec{k}_{\parallel}, z) |4\rangle + g_m^{(ll)}(\vec{k}_{\parallel}, z) |5\rangle + g_m^{(sl)}(\vec{k}_{\parallel}, z) |6\rangle \right] \quad (2.70)$$

U et L représentant les parties haute et basse de l'hamiltonien des trous de la bande de valence (1.46). Les facteurs d'occupation des bandes de conduction et de valence  $f_c^l$  et  $f_{h,\sigma}^m$  sont donnés par les relations suivantes :

$$f_c^l = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_l^c(\vec{k}_{\parallel}) - E_{fc}}{k_B T}\right)} \quad \text{Et} \quad f_{h,\sigma}^m = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_m^{h,\sigma}(\vec{k}_{\parallel}) - E_{fv}}{k_B T}\right)}$$

$f_c^l$  Et  $1 - f_c^l$  représentent, respectivement, l'occupation des électrons et des trous dans la bande de conduction. De même,  $f_{h,\sigma}^m$  et  $1 - f_{h,\sigma}^m$  représentent, respectivement, l'occupation des électrons et des trous dans la bande de valence.

Le nombre net de photons  $N_{\text{net}}$  est donc :

$$N_{\text{inj}} = R_{v \rightarrow c} - R_{c \rightarrow v} = \frac{2}{V} \sum_{l,m} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \Psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\eta} | H_{\text{int}} | \Psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\sigma} \rangle \right|^2 \delta(E_v^m - E_c^n - \hbar\omega) (f_v - f_c) \quad (2.71)$$

Or :

$$\langle \Psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\eta} | H_{\text{int}} | \Psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\sigma} \rangle = -\frac{eA_0}{2m_0} \hat{\epsilon} \cdot \vec{M}_{lm}^{\sigma\eta}(\vec{k}_{\parallel}) \quad (2.72)$$

L'élément de matrice  $p_{cv}$  dépendant des fonctions de Bloch, incluant également les fonctions enveloppes est donné par :

$$\hat{\epsilon} \cdot \vec{M}_{lm}^{\sigma\eta}(\vec{k}_{\parallel}) = \begin{cases} \sum_{v=1,2} \langle g_m^{(v)} | \phi_l \rangle \langle v | \hat{\epsilon} \cdot e\vec{r} | S, \eta \rangle & \text{for } \sigma = U \\ \sum_{v=3,4} \langle g_m^{(v)} | \phi_l \rangle \langle v | \hat{\epsilon} \cdot e\vec{r} | S, \eta \rangle & \text{for } \sigma = L \end{cases} \quad (2.73)$$

Où  $\phi_1$  est la fonction enveloppe pour la bande de conduction et S représente la partie à symétrie sphérique de la fonction périodique de Bloch pour la bande de conduction au centre de la zone. Après quelques manipulations mathématiques, nous pouvons obtenir  $|\hat{e} \cdot \vec{M}_{1m}^{\eta\sigma}(\vec{k}_{\parallel})|^2$  pour la polarisation TM et la polarisation TE :

- Pour le mode TM ( $\hat{e} = \hat{z}$ )

$$|\hat{e} \cdot \vec{M}_{1m}^{\eta U}(\vec{k}_{\parallel})|^2 = \frac{1}{3} \langle S|ez|Z \rangle^2 \langle \phi_1 | g_m^{(2)} \rangle^2 \quad (2.74)$$

$$|\hat{e} \cdot \vec{M}_{1m}^{\eta L}(\vec{k}_{\parallel})|^2 = \frac{1}{3} \langle S|ez|Z \rangle^2 \langle \phi_1 | g_m^{(3)} \rangle^2 \quad (2.75)$$

- Pour le mode TM ( $\hat{e}$  est sur le plan x-y)

$$\begin{aligned} |\hat{e} \cdot \vec{M}_{1m}^{\eta U}(\vec{k}_{\parallel})|^2 &= \frac{1}{4} \langle S|ex|X \rangle^2 \cdot \left\{ \langle \phi_1 | g_m^{(1)} \rangle^2 + \frac{1}{3} \langle \phi_1 | g_m^{(2)} \rangle^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{\sqrt{3}} \langle \phi_1 | g_m^{(1)} \rangle \langle \phi_1 | g_m^{(2)} \rangle \cos 2\phi \right\} \end{aligned} \quad (2.76)$$

$$\begin{aligned} |\hat{e} \cdot \vec{M}_{1m}^{\eta L}(\vec{k}_{\parallel})|^2 &= \frac{1}{4} \langle S|ex|X \rangle^2 \cdot \left\{ \langle \phi_1 | g_m^{(4)} \rangle^2 + \frac{1}{3} \langle \phi_1 | g_m^{(3)} \rangle^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{\sqrt{3}} \langle \phi_1 | g_m^{(4)} \rangle \langle \phi_1 | g_m^{(3)} \rangle \cos 2\phi \right\} \end{aligned} \quad (2.77)$$

Où  $\phi = \tan^{-1}(k_y/k_x)$ , et  $\eta = \uparrow$  ou  $\downarrow$  pour les deux états de spin.

Dans ce calcul, nous avons utilisé pour le matériau massif la valeur  $\langle S|ez|Z \rangle$  qui est donné par :

$$\langle S|ex|X \rangle = \langle S|ez|Z \rangle = -\frac{eh}{\sqrt{2}} \left[ \frac{E_g + \Delta}{E_g(E_g + 2\Delta/3)m_c^*} \right]^{1/2} \quad (2.78)$$

Où  $\Delta$  est l'énergie de spin-orbite et  $m_c^*$  est la masse effective de la bande de conduction.

On peut donc exprimer le nombre net de photons émis en fonction de  $A_0$  :

$$N_{\text{net}} = \frac{\pi e^2 A_0^2}{V \hbar m_0^2} \sum_{l,m} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} |\hat{\epsilon} \cdot \vec{M}_{lm}^{\sigma\eta}(\vec{k}_{\parallel})|^2 \delta(E_m^{h,\sigma}(\vec{k}_{\parallel}) - E_l^c(\vec{k}_{\parallel}) - \hbar\omega) (f_{h,\sigma}^m - f_c^l) \quad (2.79)$$

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

$$g_{\text{mat}} = -\frac{N_{\text{net}}}{N_{\text{inj}}} = \frac{\pi e^2}{n_r \epsilon_0 c m_0^2 \omega} \frac{2}{V} \sum_{l,m} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} |\hat{\epsilon} \cdot \vec{M}_{lm}^{\sigma\eta}(\vec{k}_{\parallel})|^2 \delta(E_m^{h,\sigma}(\vec{k}_{\parallel}) - E_l^c(\vec{k}_{\parallel}) - \hbar\omega) (f_{h,\sigma}^m - f_c^l) \quad (2.80)$$

Où  $\sigma$  représente les blocs haut et bas de l'Hamiltonien,  $\eta$  est l'état de spin de l'électron,  $l$  et  $m$  sont les indices des sous bandes pour la bande de conduction et de valence, respectivement,  $\hat{\epsilon}$  est le vecteur de polarisation,  $\epsilon_0$  est la permittivité de l'espace libre,  $\vec{M}_{lm}^{\sigma\eta}$  est l'élément de la matrice du dipôle optique entre le  $l^{\text{ième}}$  sous bande dans la bande de conduction avec l'état de spin  $\eta$  et le  $m^{\text{ième}}$  sous bande dans la bande de valence d'Hamiltonien  $H^\sigma$  2x2,  $f_c^l$  et  $f_{h,\sigma}^m$  sont les fonctions de Fermi,  $E_l^c(\vec{k}_{\parallel})$  et  $E_m^{h,\sigma}(\vec{k}_{\parallel})$  sont les énergies de la  $l^{\text{ième}}$  sous bande dans la bande de conduction et  $m^{\text{ième}}$  sous bande dans la bande de valence de  $H^\sigma$  à  $(\vec{k}_{\parallel})$ , respectivement.  $\omega$  est la pulsation du photon,  $V$  est le volume. Les pseudo-niveaux de Fermi sont déterminés numériquement pour chaque densité de porteurs par la somme des fonctions de Fermi sur  $k_x$ ,  $k_y$  et les indices des sous bandes.

---

## **II.5. Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons rappelé d'abord la résolution de l'équation de Schrödinger pour un puits quantique fini ce qui nous a permis de trouver les niveaux d'énergies en utilisant l'approximation de la fonction enveloppe, nous avons présenté ensuite les principaux paramètres pilotant le choix du matériau, Par la suite nous avons décrit brièvement la notion de contrainte qui améliorerait le gain optique Nous avons donné notamment les éléments clefs menant à la compréhension de la densité d'états et des transitions optiques dans un puits quantique. Enfin, nous avons détaillé la méthode du calcul du gain optique dans un puits quantique qui sera utilisée dans nos simulations dont les résultats seront présentés dans le chapitre suivant.

---

## Références

- [1] M. Yamanishi, "Comment on Polarization Dependent Momentum Matrix Elements in Quantum Well Lasers", *Jpn. J. Appl. Phys.* 23, L35-L36, 1984.
- [2] D. Kasemset, "Graded barrier single quantum well lasers-Theory and experiment", *IEEE J. Quantum Electron.* 19, 1025-1030, 1983.
- [3] A. Sugimura, "Threshold current for AlGaAs quantum well lasers", *IEEE J. Quantum Electron.* 20, 336-343, 1984.
- [4] S. L. Chuang, "Physics of optoelectronic devices", Wiley&Sons, Inc., New York, 1995.
- [5] J. Piprek, "Semiconductor optoelectronics devices, Introduction to physics and simulation", Academic Press, Amsterdam, 2003.
- [6] S. L. Chuang, "Physics of photonic devices", Wiley&Sons, Inc., New York, 2009.
- [7] M. G. Burt, "Fundamentals of envelope function theory for electronic states and photonic modes in nanostructures", *J. Phys Condensed Matter*, 9: R53, 1999.
- [8] J. Luttinger, "Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields", *Phys. Rev.* 97, 869–883, 1955.
- [9] N. Holonyak, "Quantum-well heterostructure lasers", *IEEE J. Quantum Electron.* 16, 170-186, 1980.
- [10] A. Pawlis, T. Berstermann, C. Bruggemann, M. Bombeck, D. Dunker, D. R. Yakovlev, N. A. Gippius, K. Lischka and M. Bayer, "Exciton states in shallow ZnSe/(Zn,Mg)Se quantum wells: Interaction of confined and continuum electron and hole states", *Physical review B* 83, 115302, 2011.
- [11] C. Van de Walle, "II–VI blue/green light emitters. In *Semiconductors and Semimetals*", Vol. 44, ed, R. Gunshor and A. Nurmikko. San Diego: Academic Press, pp. 122–160, 1997.
- [12] P. Y. Dang and Y. R. Wu, Optical polarization anisotropy of tensile strained InGaN/AlInN quantum wells for TM mode lasers, *J. Appl. Phys.* 108, 083108 (2010)
- [13] D. Kleinman, "Band-gap renormalization in semiconductor quantum wells containing carriers", *Phys. Rev. B.* 32, 2266-2272, 1985.

- 
- [14] C. Van De Walle, "Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory", *Phys. Rev. B* 39, 1871-1883, 1989.
- [15] V. Kononenko, "Laser parameters of quantum-well heterostructures", ICTP, Trieste, IC/91/63, 26 -36, 1991.
- [16] D. Shaw, "Diffusion mechanisms in II-VI materials", *Journal of Crystal Growth*, 86:778, 1988.
- [17] C.S. Chang and S.L. Chuang, "Modeling of strained quantum-well lasers with spin-orbit coupling", *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 1995.
- [18] M. Yamanishi, "Comment on Polarization Dependent Momentum Matrix Elements in Quantum Well Lasers", *Japan. J. Appl. Phys.* 23, L35-L36, 1984.
- [19] V. Kladko, A. Kuchuk, A. Naumov, N. Safriuk, O. Kolomys, S. Kryvyi, H. Stanchu, A. Belyaev, V. Strelchuk, B. Yavich, Yu.I. Mazur, M.E. Ware, G.J. Salamo, "Effect of strain-polarization fields on optical transitions in AlGaIn/GaN multi-quantum well structures", *Physica E* 76 140–145, 2016.
- [20] G. Bastard, "Wave mechanics applied to semiconductor heterostructure. Les Éditions de Physique", Les Ulis, France, 1988.
- [21] J.M. Luttinger and W. Kohn. "Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields», *Physical Review*, Vol. 97, N° 4, pp. 869-883, 1955.
- [22] G.L. Bir and G.E. Pikus, "Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors», Wiley, New-York, 1974.
- [23] G. Bastard and J.A. Brum, "Electronic states in semiconductor heterostructures". *IEEE, Journal of Quantum Electronics*, Vol. 22, N° 9, pp. 1625 – 1644, 1986.
- [24] D.A. Broido and L.J. Sham, "Effective masses of holes at GaAs-AlGaAs heterojunctions", *Physical Review B*, 31(2), 1985.
- [25] A Twardowski, C Hermann, "Variational calculation of polarization of quantum-well photoluminescence", *Physical review. B, Condensed matter* 35(15):8144-8153, 1987.
- [26] M. Yamada, Anisotropy and broadening of optical gain in a GaAs/AlGaAs multi quantum-well laser, *IEEE J. Quantum Electron.* 21, 640-645 (1985)

- 
- [27] V. Lysak, Determination of the Optical Gain of III-V Group Compounds for Simulation of Laser Dynamic Characteristics Over a Wide Range of Radiation Frequency, *Telecommunications and Radio Engineering*. 58, 142-147 (2002)
- [28] H.K. Nirmal, S.G. Anjumb, PyareLal, Amit Rathi, S. Dalela, M.J. Siddiqui, P.A. Alvi, Field effective band alignment and optical gain in type-I Al<sub>0.45</sub>Ga<sub>0.55</sub>As/GaAs<sub>0.84</sub>P<sub>0.16</sub> nano-heterostructures, *Optik* 127 7274–7282 (2016)
- [29] E.L. Albuquerque a, U.L. Fulco, M.S. Vasconcelos, P.W. Mauriz, Optical gain spectra of unstrained graded GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum well laser, *Physics Letters A* 377 582–586 (2013)
- [30] I. Sukhoivanov, Nonlinear gain model and its application for numerical investigation of semiconductor lasers, *Microwave & Optical Technol. Lett.* 21, 474 - 477 (1999)

**Chapitre III**  
**Résultats Et discussions**

---

## Chapitre III

### Résultats Et discussions

#### III.1. Introduction

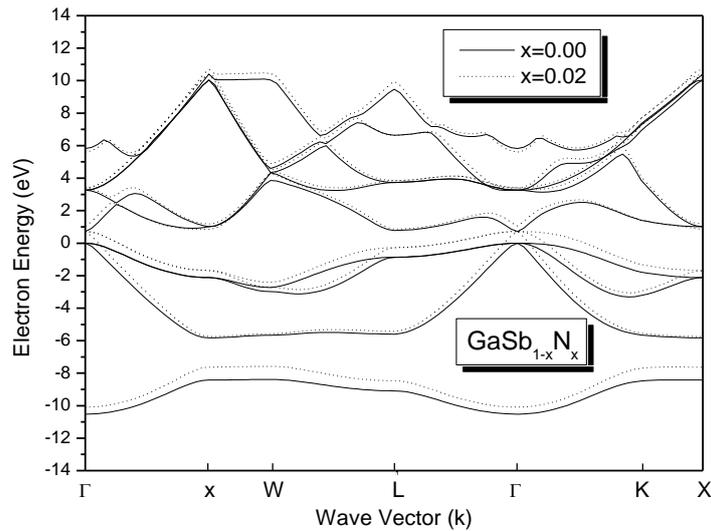
Dans ce chapitre, nous présentons l'essentiel de nos résultats de simulation par MATLAB des propriétés électroniques et optiques du nitrure ternaire  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  moyennant la méthode du pseudopotentiel, dans une première partie, puis dans une seconde partie, les résultats concernant les propriétés physique du laser  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}$  seront exposés et discutés. Ces résultats sont obtenus via l'utilisation de la méthode k.p.

#### III.2. Propriétés électroniques et optique du $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$

##### III.2.1. Propriétés optoélectroniques

La structure des bandes d'énergie du ternaire  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  dans la phase zinc-blende a été déterminée moyennant l'EPM couplée à l'approximation du cristal virtuel améliorée [1].

La Figure 3.1 représente le spectre d'énergie obtenu avec le sommet de la première bande de valence du GaSb comme origine des énergies. On remarque que l'introduction d'azote dans le GaSb décale toutes les bandes de conduction et de valence vers le haut. Les bandes de conduction sont aussi affectées que celles de valence. On note toutefois que la première bande de valence et la première bande de conduction du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  sont plus influencées par l'incorporation d'azote que leurs homologues du  $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$  rapportées par Ashley et al [1], pour la même concentration d'azote. Le gap fondamental  $E_F^\Gamma$  ainsi que les gaps  $E_F^X$  et  $E_F^L$  diminuent du fait du décalage non uniforme des bandes de conduction et de valence.

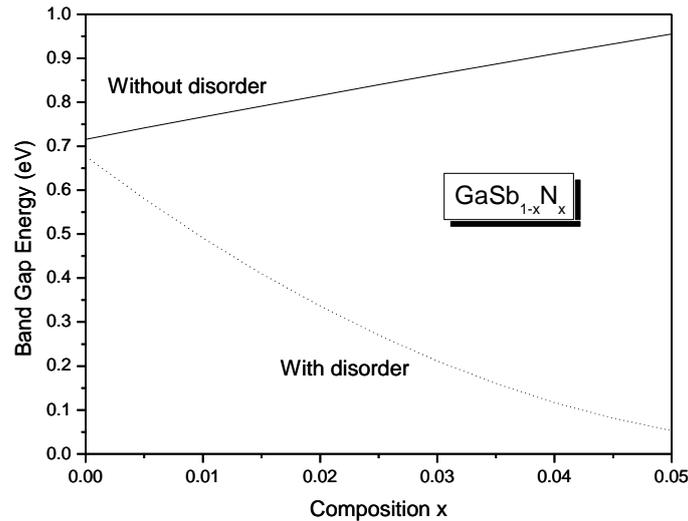


**Figure 3.1. Structure des bandes d'énergie du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$   
(Ligne continue : GaSb, ligne pointillée :  $\text{GaSb}_{0.98}\text{N}_{0.02}$ ).**

### III.2.1.1. Gaps d'énergie

La variation du gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  du nitrure dilué  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ , pris comme étant la transition  $\Gamma_v \rightarrow \Gamma_c$  entre les extrema respectifs des bandes de valence et de conduction au centre de la zone de Brillouin, en fonction de la composition d'azote  $x$  avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel est représentée sur la Figure 3.2. Lorsque l'effet du désordre compositionnel est ignoré, l'augmentation de  $x$  de 0 à 0.05 entraîne l'augmentation de  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  présentant ainsi un paramètre de bowing optique négatif. Or, des études précédentes de ce même gap avaient prévu que l'insertion de 1% seulement d'azote le réduirait de 230 meV [2-4]. Ces prévisions ont été très récemment confirmées par le travail expérimental de Buckleet al. [2] qui ont rapporté que leurs mesures FTIR (Fourier Transform InfraRed) sur une couche  $\text{GaSb}_{0.985}\text{N}_{0.015}$  d'épaisseur  $2 \mu\text{m}$  ont révélé un pic près de la longueur d'onde  $3 \mu\text{m}$ , ce qui est en bon accord avec les calculs rapportés par O'Reilly et Lindsay [3,4]. Le comportement de  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  en fonction de la concentration d'azote selon ces travaux théorique et expérimental est en désaccord avec nos résultats obtenus en utilisant la VCA seule qui ignore l'effet du désordre compositionnel. L'introduction de ce dernier donne un comportement de  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  très similaire à celui rapporté dans les Références [2-4], avec un paramètre de courbure positif très élevé signifiant de très fortes réductions du gap. Un comportement qualitativement identique a été signalé par Ashley et al [1] pour l'alliage dilué  $\text{InSb}_{1-x}\text{N}_x$ .

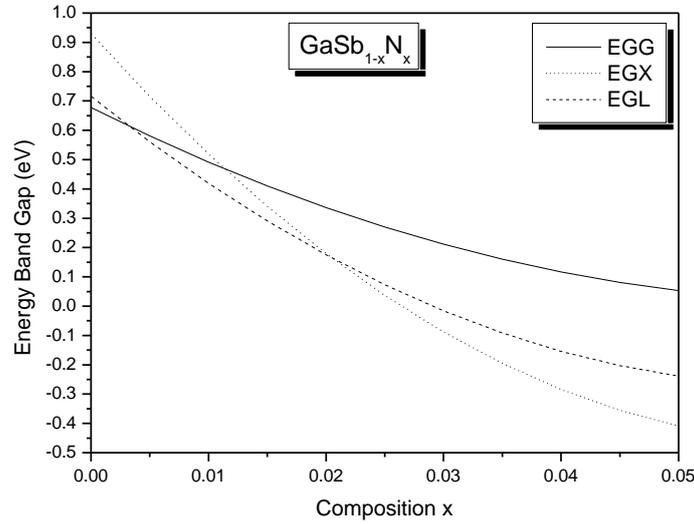
La forte réduction du gap démontre la convenance du matériau sous investigation aux applications optoélectroniques dans les régions spectrales de l'infrarouge et l'infrarouge moyen. En outre, vu qu'une faible quantité d'azote change considérablement le gap, notre alliage peut être quasi-accordé aux substrats déjà existants permettant de la sorte la croissance épit axiale d'alliages de haute qualité servant à la réalisation de dispositifs optoélectroniques.



**Figure 3.2. Gap direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  en fonction de la concentration d'azote sans et avec désordre.**

L'évolution des gaps  $E_{\Gamma}^X$  et  $E_{\Gamma}^L$  lorsque la concentration  $x$  d'azote varie de 0 à 0.05 a été aussi étudiée à côté de celle du gap fondamental  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  et ce prenant en considération l'effet du désordre compositionnel. Les résultats obtenus sont montrés sur la Figure 3.3 Les lignes continues, pointillée et tiretée indiquent les fit quadratiques de nos résultats. On note que lorsque la concentration d'azote varie de  $x = 0$  à 0.05, tous les gaps énergétiques diminuent non linéairement. Cependant, le taux de diminution de  $E_{\Gamma}^X$  semble plus accentué que celui de  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  ou de  $E_{\Gamma}^L$ . Ainsi une transition du système d'une structure directe ( $\Gamma \rightarrow \Gamma$ ) à une autre indirecte ( $\Gamma \rightarrow L$ ) se produit pour une composition  $x \cong 0.003$  correspondant à un gap de croisement de l'ordre de 0.61 eV. Néanmoins, au-delà de la composition  $x \cong 0.021$  correspondant à un gap de croisement de 0.16 eV, notre matériau demeure à gap indirect mais avec une transition provenant de la bande de conduction X. Notre matériau est alors à gap direct dans l'intervalle de composition  $0 \leq x \leq 0.003$  et à gap indirect dans la gamme  $0.003 \leq x \leq 0.05$ . Aussi est-il important de noter que lorsque la concentration d'azote excède  $\sim 0.026$ ,

le gap d'énergie fondamental ( $E_{\Gamma}^X$ ) devient négatif. Un tel gap négatif a été rapporté par Veal et al. [5] dans l'alliage  $\text{InSb}_{1-x}\text{N}_x$  obtenu par implantation d'azote dans l'In Sb. L'existence d'un gap négatif trouve son origine dans le changement qu'induit l'incorporation d'azote et peut être intéressante en vu de la réalisation de contacts métal-semiconducteur.



**Figure 3.3. Gaps direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  et indirects  $E_{\Gamma}^X$  et  $E_{\Gamma}^L$  en fonction de la concentration d'azote.**

Le Tableau 3.1 rassemble quelques gaps d'énergie du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  pour différentes concentrations  $x$ . Sont rapportés aussi les valeurs correspondantes estimées à partir de la courbe donnée dans la Référence [2] avec lesquelles nos résultats sont en bon accord.

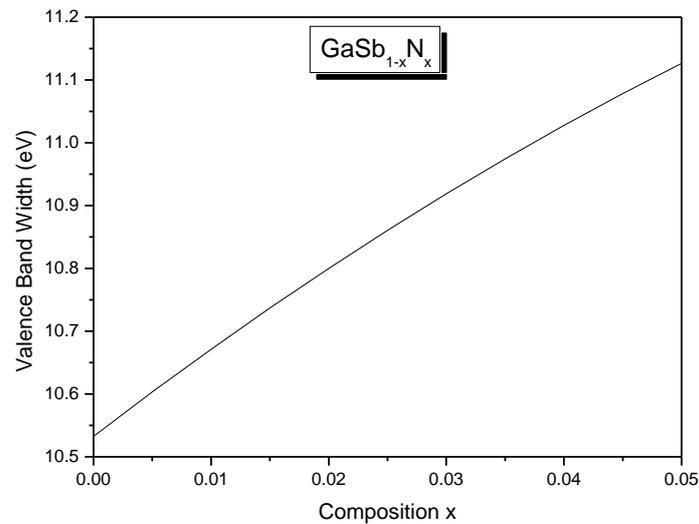
**Tableau 3.1. Gaps d'énergie du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  pour différentes concentrations d'azote.**

Matériau	Gap d'énergie (eV)		
	$E_{\Gamma}^{\Gamma}$	$E_{\Gamma}^X$	$E_{\Gamma}^L$
GaSb	0.72 <sup>a</sup> ; 0.70 <sup>b</sup>	1.04 <sup>a</sup> ; 1.03 <sup>c</sup>	0.77 <sup>a</sup> ; 0.76 <sup>d</sup>
$\text{GaSb}_{0.99}\text{N}_{0.01}$	0.49 <sup>a</sup> ; 0.47 <sup>b</sup>	0.52 <sup>a</sup>	0.42 <sup>a</sup>
$\text{GaSb}_{0.98}\text{N}_{0.02}$	0.34 <sup>a</sup> ; 0.34 <sup>b</sup>	0.18 <sup>a</sup>	0.17 <sup>a</sup>
$\text{GaSb}_{0.97}\text{N}_{0.03}$	0.21 <sup>a</sup> ; 0.23 <sup>b</sup>	-0.09 <sup>a</sup>	-0.02 <sup>a</sup>
$\text{GaSb}_{0.96}\text{N}_{0.04}$	0.12 <sup>a</sup> ; 0.12 <sup>b</sup>	-0.28 <sup>a</sup>	-0.15 <sup>a</sup>
$\text{GaSb}_{0.95}\text{N}_{0.05}$	0.05 <sup>a</sup> ; 0.03 <sup>b</sup>	-0.41 <sup>a</sup>	-0.24 <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Nos calculs, <sup>b</sup> Estimé à partir de la courbe rapportée dans Réf. [2], <sup>c</sup> Réf. [6], <sup>d</sup> Réf. [7].

### III.2.1.2. Largeur de la bande de valence

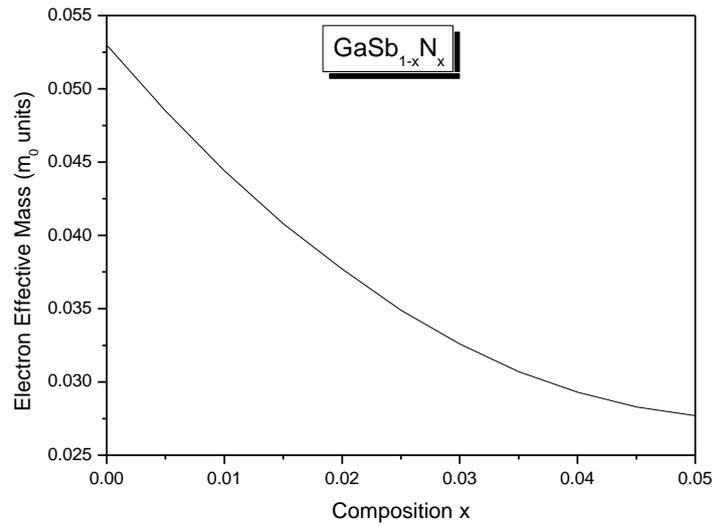
La variation de la largeur de la bande de valence (VBW) en fonction de la concentration  $x$  d'azote dans l'alliage dilué  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  est représentée sur la Figure 3.4. La VBW augmente de manière monotone quand la concentration  $x$  augmente de 0 à 0.05. Ceci pourrait être le résultat de l'interaction des électrons  $s$  et  $p$  de l'azote avec les électrons  $d$  du système, et de la variation de l'énergie de liaison (binding Energy) des électrons de valence. Ce comportement est qualitativement similaire à celui de la VBW du  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y}$  accordé au GaAs [8].



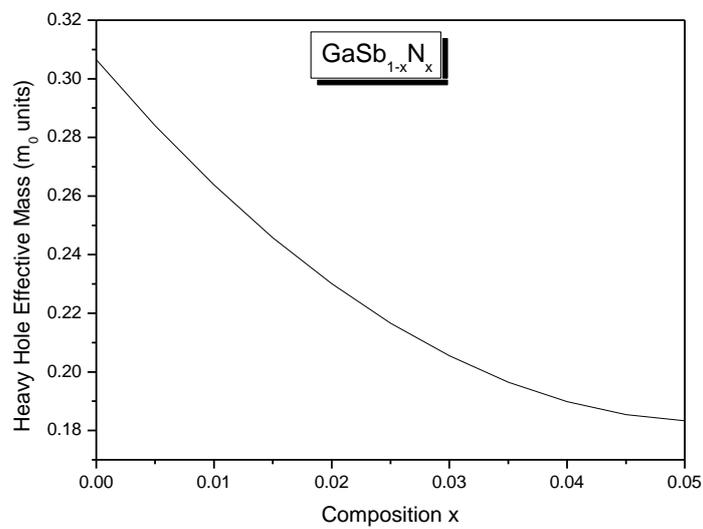
**Figure 3.4. Largeur de la bande de valence en fonction de la concentration d'azote.**

### III.2.1.3. Masses effectives des électrons et des trous

Nous avons également calculé les masses effectives des porteurs dans le cadre de l'approximation des bandes paraboliques. Les Figures 3.5 et 3.6 montrent les variations des masses effectives des électrons et des trous lourds au point  $\Gamma$  de la zone de Brillouin, en fonction de la composition d'azote. Ces masses effectives diminuent rapidement et de façon non linéaire lorsque la concentration augmente de 0 à 0.05. Leurs mobilités s'en trouveraient par conséquent améliorées.



**Figure 3.5. Masse effective des électrons en unité de  $m_0$  en fonction de la concentration d'azote.**



**Figure 3.6. Masse effective des trous lourds en unité de  $m_0$  en fonction de la concentration d'azote.**

Nos résultats en unité de  $m_0$  ( $m_0$  étant la masse au repos de l'électron) sont récapitulés dans le Tableau 3.2

**Tableau 3.2. Masses effectives des électrons et des trous lourds au point  $\Gamma$  de la zone de Brillouin pour différentes concentrations d'azote.**

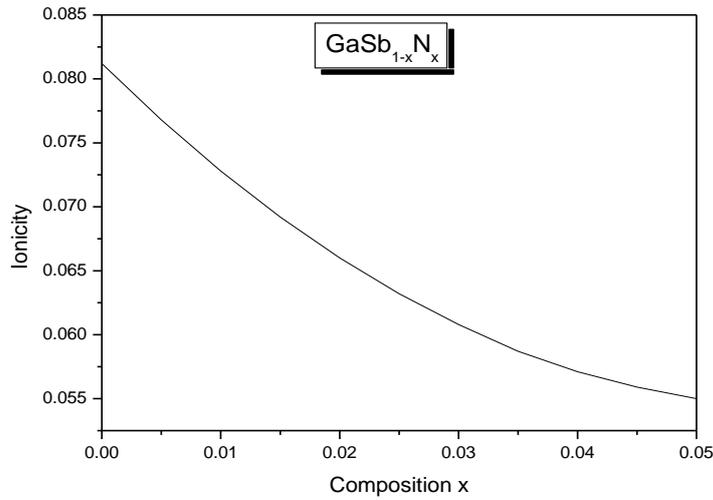
Matériau	$m_e^*$ ( $m_0$ )	$m_{hh}^*$ ( $m_0$ )
GaSb	0.053 <sup>a</sup> ; 0.047 <sup>b</sup>	0.31 <sup>a</sup> ; 0.3 <sup>b</sup>
GaSb <sub>0.99</sub> N <sub>0.01</sub>	0.044 <sup>a</sup>	0.26 <sup>a</sup>
GaSb <sub>0.98</sub> N <sub>0.02</sub>	0.038 <sup>a</sup>	0.23 <sup>a</sup>
GaSb <sub>0.97</sub> N <sub>0.03</sub>	0.033 <sup>a</sup>	0.21 <sup>a</sup>
GaSb <sub>0.96</sub> N <sub>0.04</sub>	0.029 <sup>a</sup>	0.19 <sup>a</sup>
GaSb <sub>0.95</sub> N <sub>0.05</sub>	0.028 <sup>a</sup>	0.18 <sup>a</sup>

<sup>a</sup> Nos calculs, <sup>b</sup> Rapporté dans Réf. [9].

La comparaison de nos résultats pour le GaSb (i.e., pour  $x = 0$ ) avec ceux expérimentaux rapportés dans la Référence [9] montre un accord raisonnable pour les masses effectives des électrons, et excellent pour les masses effectives des trous.

#### III.2.1.4. Facteur d'ionicté

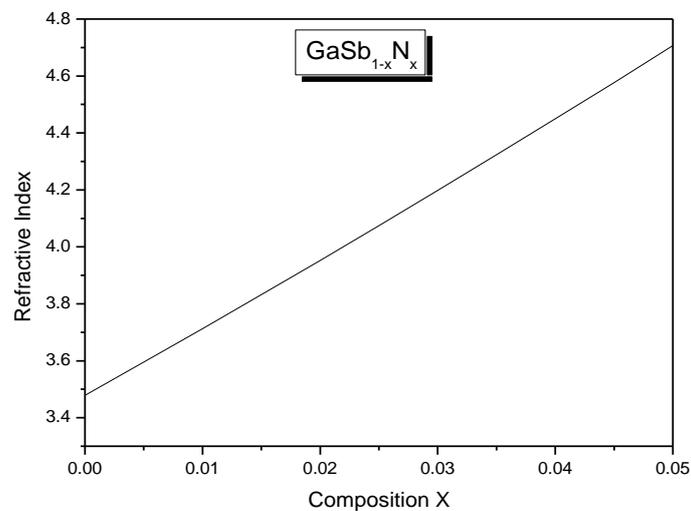
L'ionicté d'un semiconducteur est une mesure de la tendance de ses liaisons chimiques vers le caractère covalent ou ionique. Sur la Figure 3.7 est représentée la variation de l'ionicté du GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> pour des concentrations d'azote allant de 0 à 0.05. Cette ionicté diminue non linéairement à mesure que la composition d'azote augmente indiquant que le caractère ionique de notre matériau diminue au fur et à mesure qu'on y incorpore davantage d'atomes d'azote.



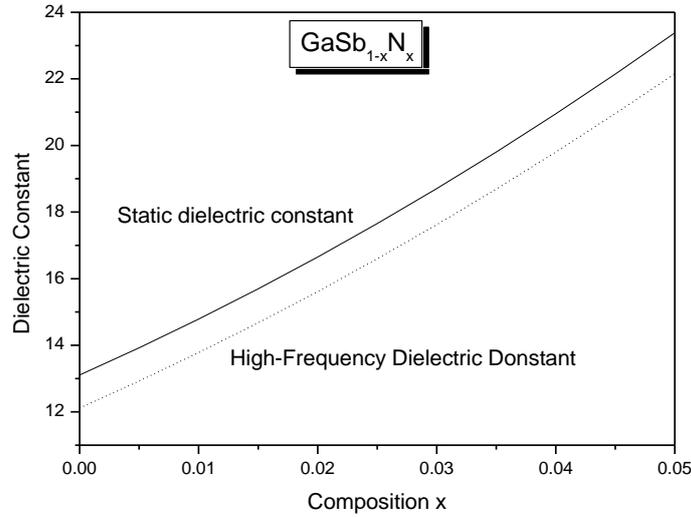
**Figure 3.7. Ionicité en fonction de la concentration d'azote.**

### III.2.1.5. Indice de réfraction et constantes diélectriques

Les Figures 3.8 et 3.9 représentent l'indice de réfraction, la constante diélectrique statique et la constante diélectrique de haute fréquence en fonction de la concentration d'azote. On remarque que l'ajout de quelques pourcents seulement d'azote dans le ternaire  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  fait augmenter visiblement les trois grandeurs. Ainsi, toute augmentation de la concentration d'azote réduit considérablement le gap d'énergie de notre matériau et augmente sensiblement son indice de réfraction et ses constantes diélectriques.



**Figure 3.8. Indice de réfraction en fonction de la concentration d'azote.**



**Figure 3.9. Constants diélectriques statiques et de haute fréquence en fonction de la concentration d'azote.**

Dans le Tableau 3.4 sont rassemblées les valeurs calculées de l'indice de réfraction et des constantes diélectriques statique et de haute fréquence pour quelques concentrations d'azote avec les valeurs expérimentales disponibles pour comparaison.

**Tableau 3.4. Indice de réfraction  $n$  et constantes diélectriques statique  $\epsilon_0$  et de haute fréquence  $\epsilon_\infty$  du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  pour différentes concentrations d'azote.**

Matériau	$n$	$\epsilon_0$	$\epsilon_\infty$
GaSb	3.5 <sup>a</sup> ; 3.8 <sup>b</sup>	13.1 <sup>a</sup> ; 15.7 <sup>b</sup>	12.1 <sup>a</sup> ; 14.4 <sup>b</sup>
GaSb <sub>0.99</sub> N <sub>0.01</sub>	3.7 <sup>a</sup>	14.8 <sup>a</sup>	13.8 <sup>a</sup>
GaSb <sub>0.98</sub> N <sub>0.02</sub>	4.0 <sup>a</sup>	16.7 <sup>a</sup>	15.6 <sup>a</sup>
GaSb <sub>0.97</sub> N <sub>0.03</sub>	4.2 <sup>a</sup>	18.7 <sup>a</sup>	17.6 <sup>a</sup>
GaSb <sub>0.96</sub> N <sub>0.04</sub>	4.4 <sup>a</sup>	21.0 <sup>a</sup>	19.8 <sup>a</sup>
GaSb <sub>0.95</sub> N <sub>0.05</sub>	4.7 <sup>a</sup>	23.4 <sup>a</sup>	22.2 <sup>a</sup>

<sup>a</sup>Nos calculs, <sup>b</sup> Rapporté dans Réf. [10].

L'accord de nos résultats concernant le GaSb ( $x = 0$ ) avec ceux d'autres travaux [10] est satisfaisant.

### III.2.2. Propriétés élastiques

Nous avons procédé à l'investigation des propriétés mécaniques du ternaire  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ . Pour ce faire nous avons utilisé la méthode du pseudopotentiel couplée au modèle du champ de forces de valence généralisé par Martin et l'approche améliorée de Baranowski [11,12].

#### III.2.2.1. Constants élastiques

Lorsque la concentration  $x$  d'azote varie de 0 à 0.05, toutes les constantes élastiques, avec et sans tenir compte de l'effet du désordre compositionnel, augmentent avec des taux différents mais en gardant toujours le même comportement qualitatif comme l'illustrent les Figures 3.10, 3.11 et 3.12. Un fit quadratique de nos résultats donne :

$$C_{11}(\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2}) = 9.07 + 9.17x + 5.98x^2 \quad (\text{Sans désordre}) \quad (3.23a)$$

$$C_{11}(\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2}) = 9.09 + 21.40x - 64.51x^2 \quad (\text{Avec désordre}) \quad (3.23b)$$

$$C_{12}(\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2}) = 3.91 + 4.02x + 2.73x^2 \quad (\text{Sans désordre}) \quad (3.24a)$$

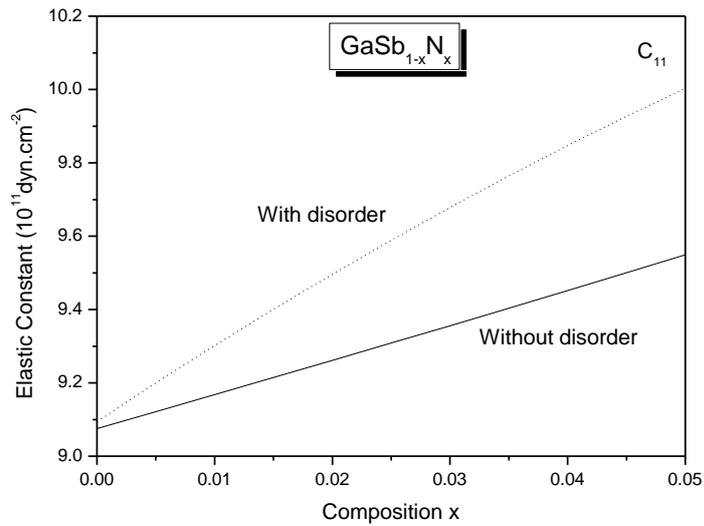
$$C_{12}(\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2}) = 3.92 + 8.99x - 26.01x^2 \quad (\text{Avec désordre}) \quad (3.24b)$$

$$C_{44}(\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2}) = 4.14 + 4.14x + 2.70x^2 \quad (\text{Sans désordre}) \quad (3.25a)$$

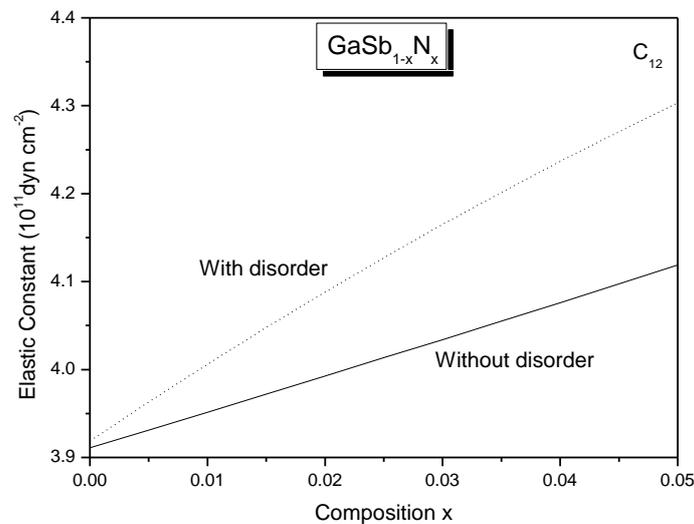
$$C_{44}(\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2}) = 4.15 + 9.88x - 30.47x^2 \quad (\text{Avec désordre}) \quad (3.25b)$$

Le désordre compositionnel influence donc les constantes élastiques. Sa prise en compte résulte en une augmentation des paramètres de courbure des grandeurs étudiées. Ceci peut être relié à la différence d'électronégativité entre les atomes d'azote et les anions dans le cristal. L'existence de paramètres de courbure, contrairement aux prédictions théoriques, lorsque le désordre compositionnel est ignoré peut-être expliquée par la non-linéarité des éléments matriciels du potentiel dont dépend la polarité de laquelle dépendent les constantes élastiques.

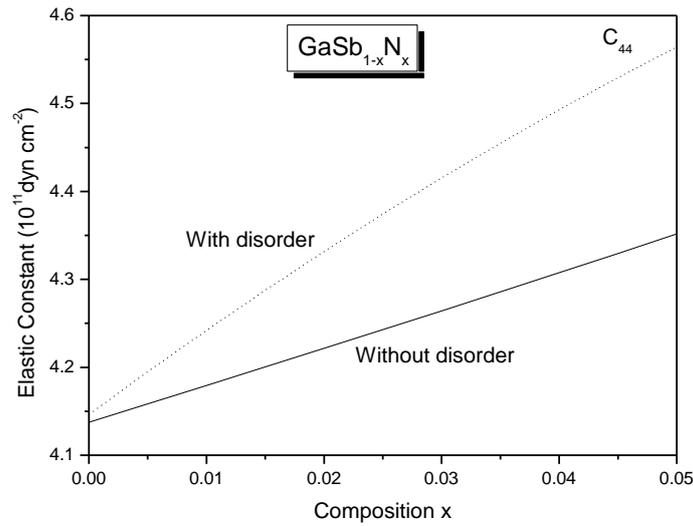
Nos constantes élastiques calculés  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  pour différentes concentrations d'azote entre 0 et 0.05 sont montrées dans le Tableau 3.16 dans lequel figurent aussi les données expérimentales disponibles pour le GaSb pour comparaison. L'accord entre nos résultats et ceux expérimentaux est généralement satisfaisant.



**Figure 3.10. Constante élastique  $C_{11}$  en fonction de la concentration d'azote (Ligne continue : en négligeant l'effet du désordre, ligne pointillée : en considérant l'effet du désordre).**



**Figure 3.11. Constante élastique  $C_{12}$  en fonction de la concentration d'azote (Ligne continue : en négligeant l'effet du désordre, ligne pointillée : en considérant l'effet du désordre).**



**Figure 3.12. Constante élastique  $C_{44}$  en fonction de la concentration d'azote (Ligne continue : en négligeant l'effet du désordre, ligne pointillée : en considérant l'effet du désordre).**

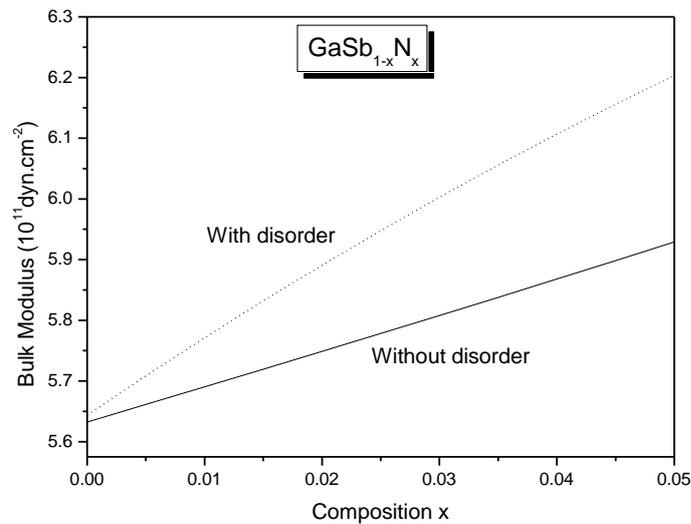
**Tableau 3.5. Constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  pour différentes concentrations d'azote.**

Matériau	$C_{11}$ ( $\times 10^{11}$ dyn.cm $^{-2}$ )		$C_{12}$ ( $\times 10^{11}$ dyn.cm $^{-2}$ )		$C_{44}$ ( $\times 10^{11}$ dyn.cm $^{-2}$ )	
	Calculé	Connu	Calculé	Connu	Calculé	Connu
GaSb	9.07 <sup>a</sup>	8.84 <sup>b</sup>	3.91 <sup>a</sup>	4.03 <sup>b</sup>	4.14 <sup>a</sup>	4.32 <sup>b</sup>
GaSb <sub>0.99</sub> N <sub>0.01</sub>	9.17 <sup>c</sup>		3.95 <sup>c</sup>		4.18 <sup>c</sup>	
	9.30 <sup>d</sup>		4.01 <sup>d</sup>		4.24 <sup>d</sup>	
GaSb <sub>0.98</sub> N <sub>0.02</sub>	9.26 <sup>c</sup>		3.99 <sup>c</sup>		4.22 <sup>c</sup>	
	9.50 <sup>d</sup>		4.09 <sup>d</sup>		4.33 <sup>d</sup>	
GaSb <sub>0.97</sub> N <sub>0.03</sub>	9.36 <sup>c</sup>		4.03 <sup>c</sup>		4.26 <sup>c</sup>	
	9.68 <sup>d</sup>		4.16 <sup>d</sup>		4.41 <sup>d</sup>	
GaSb <sub>0.96</sub> N <sub>0.04</sub>	9.45 <sup>c</sup>		4.08 <sup>c</sup>		4.31 <sup>c</sup>	
	9.85 <sup>d</sup>		4.24 <sup>d</sup>		4.49 <sup>d</sup>	
GaSb <sub>0.95</sub> N <sub>0.05</sub>	9.55 <sup>c</sup>		4.12 <sup>c</sup>		4.35 <sup>c</sup>	
	10.00 <sup>d</sup>		4.30 <sup>d</sup>		4.56 <sup>d</sup>	

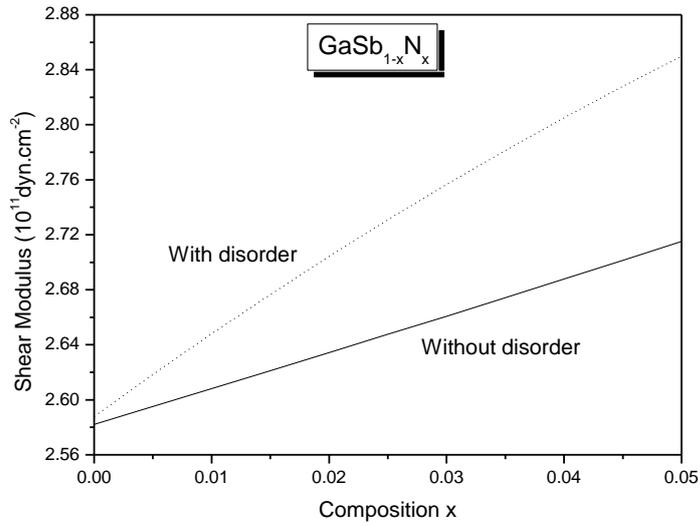
<sup>a</sup> Nos calculs, <sup>b</sup> Rapporté dans Réf. [13], <sup>c</sup> Nos calculs sans désordre, <sup>d</sup> Nos calculs avec désordre.

### III.2.2.2. Modules de compression, de cisaillement et d'Young

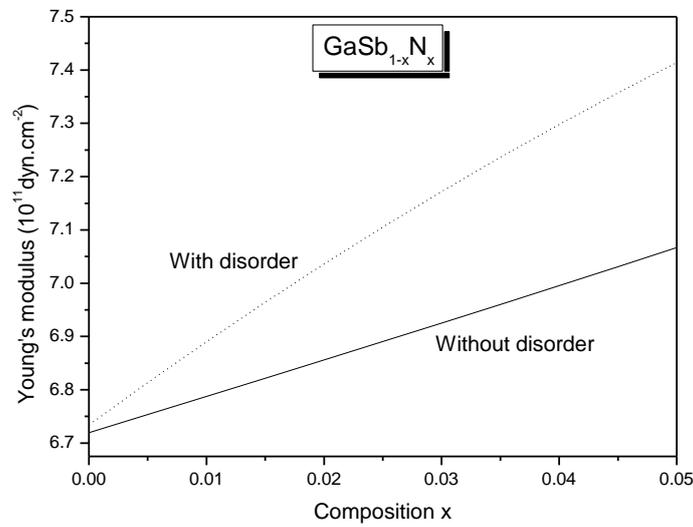
Le modules de compression  $B_s$ , cisaillement  $C$  et d'Young  $Y_0$  ont été calculés à partir des constantes élastiques. Leurs variations en fonction de la composition d'azote variant de 0 à 0.05 sont montrées sur les Figures 3.13, 3.14 et 3.15. Les trois grandeurs augmentent de façon monotone avec l'augmentation de la teneur en azote. Ainsi, l'incorporation de faibles quantités d'azote dans le GaSb améliorerait sa rigidité et sa stabilité.



**Figure 3.13. Module de compression  $B_s$  en fonction de la concentration d'azote (Ligne continue : en négligeant l'effet du désordre, ligne pointillée : en considérant l'effet du désordre).**



**Figure 3.14. Module de shear  $C'$  en fonction de la concentration d'azote (Ligne continue : en négligeant l'effet du désordre, ligne pointillée : en considérant l'effet du désordre).**



**Figure 3.15. Module d'Young  $Y_0$  en fonction de la concentration d'azote (Ligne continue : en négligeant l'effet du désordre, ligne pointillée : en considérant l'effet du désordre).**

Les meilleurs faits de nos résultats donnent :

$$B_s (\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2}) = 5.63 + 5.74x + 3.81x^2 \quad (\text{Sans désordre}) \quad (3.26a)$$

$$B_s (\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2}) = 5.64 + 13.13x - 38.99x^2 \quad (\text{avec désordre}) \quad (3.26b)$$

$$C' (\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2}) = 2.58 + 2.57x + 1.67x^2 \quad (\text{sans désordre}) \quad (3.27a)$$

$$C' (\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2}) = 2.59 + 6.21x - 19.39x^2 \quad (\text{avec désordre}) \quad (3.27b)$$

$$Y_0 (\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2}) = 6.72 + 6.72x + 4.37x^2 \quad (\text{sans désordre}) \quad (3.28a)$$

$$Y_0 (\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2}) = 6.73 + 16.09x - 49.74x^2 \quad (\text{avec désordre}) \quad (3.28b)$$

Dans le Tableau 3.17 sont rassemblés nos résultats avec des données de la littérature. L'accord entre ces dernières et nos calculs est raisonnable.

**Tableau 3.6. Module de compression  $B_s$ , module de shear  $C'$  et module d'Young  $Y_0$  du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  pour différentes concentrations d'azote.**

Matériau	$B_s (\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2})$		$C' (\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2})$		$Y_0 (\times 10^{11} \text{ dyn.cm}^{-2})$	
	Calculé	Connu	Calculé	Connu	Calculé	Connu
GaSb	5.63 <sup>a</sup>	5.62 <sup>b</sup>	2.58 <sup>a</sup>	2.41 <sup>b</sup>	6.72 <sup>a</sup>	6.32 <sup>b</sup>
$\text{GaSb}_{0.99}\text{N}_{0.01}$	5.69 <sup>c</sup>		2.61 <sup>c</sup>		6.79 <sup>c</sup>	
	5.77 <sup>d</sup>		2.65 <sup>d</sup>		6.89 <sup>d</sup>	
$\text{GaSb}_{0.98}\text{N}_{0.02}$	5.75 <sup>c</sup>		2.63 <sup>c</sup>		6.86 <sup>c</sup>	
	5.89 <sup>d</sup>		2.70 <sup>d</sup>		7.04 <sup>d</sup>	
$\text{GaSb}_{0.97}\text{N}_{0.03}$	5.81 <sup>c</sup>		2.66 <sup>c</sup>		6.92 <sup>c</sup>	
	6.00 <sup>d</sup>		2.76 <sup>d</sup>		7.17 <sup>d</sup>	
$\text{GaSb}_{0.96}\text{N}_{0.04}$	5.87 <sup>c</sup>		2.69 <sup>c</sup>		6.99 <sup>c</sup>	
	6.11 <sup>d</sup>		2.80 <sup>d</sup>		7.30 <sup>d</sup>	
$\text{GaSb}_{0.95}\text{N}_{0.05}$	5.93 <sup>c</sup>		2.71 <sup>c</sup>		7.07 <sup>c</sup>	
	6.20 <sup>d</sup>		2.80 <sup>d</sup>		7.41 <sup>d</sup>	

<sup>a</sup>Nos calculs, <sup>b</sup>Estimés à partir des données rapportées dans Réf. [13], <sup>c</sup>Nos sans désordre, <sup>d</sup>Nos calculs avec désordre.

### III.2.2.3. Facteur d'anisotropie et Coefficient de Poisson

Le facteur d'anisotropie et le coefficient de Poisson ont été calculés à partir des constantes élastiques. Ils ne sont pas affectés par le désordre compositionnel et leurs valeurs restent

inchangées quel que soit la concentration d'azote. Les résultats calculés sont présentés sur le Tableau 3.18 et montrent pour le GaSb un bon accord avec les valeurs expérimentales.

**Tableau 3.7. Facteur d'anisotropie A et coefficient de Poisson  $\sigma_0$  du GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> pour différentes concentrations d'azote.**

Matériau	A		$\sigma_0$	
	Calculé	Connu	Calculé	Connu
GaSb	0.62 <sup>a</sup>	0.56 <sup>b</sup>	0.30	0.31 <sup>b</sup>
GaSb <sub>0.99</sub> N <sub>0.01</sub>	0.62 <sup>c</sup> ; 0.62 <sup>d</sup>		0.30 <sup>c</sup> ; 0.30 <sup>d</sup>	
GaSb <sub>0.98</sub> N <sub>0.02</sub>	0.62 <sup>c</sup> ; 0.62 <sup>d</sup>		0.30 <sup>c</sup> ; 0.30 <sup>d</sup>	
GaSb <sub>0.97</sub> N <sub>0.03</sub>	0.62 <sup>c</sup> ; 0.62 <sup>d</sup>		0.30 <sup>c</sup> ; 0.30 <sup>d</sup>	
GaSb <sub>0.96</sub> N <sub>0.04</sub>	0.62 <sup>c</sup> ; 0.62 <sup>d</sup>		0.30 <sup>c</sup> ; 0.30 <sup>d</sup>	
GaSb <sub>0.95</sub> N <sub>0.05</sub>	0.62 <sup>c</sup> ; 0.62 <sup>d</sup>		0.30 <sup>c</sup> ; 0.30 <sup>d</sup>	

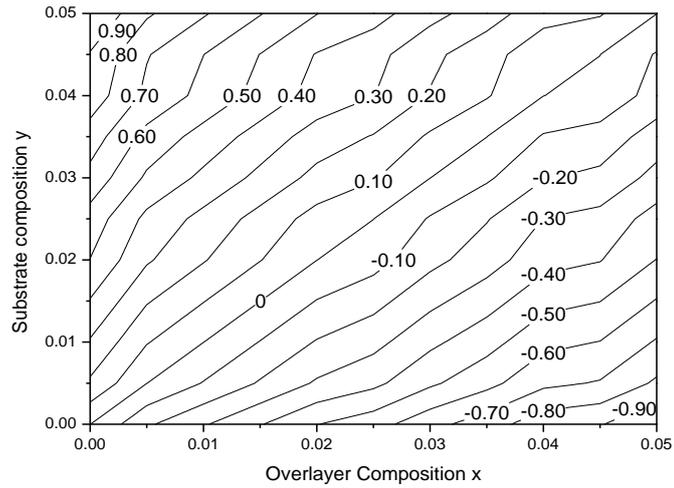
<sup>a</sup> Nos calculs, <sup>b</sup> Estimés à partir de la Réf. [13], <sup>c</sup> Nos calculs sans désordre, <sup>d</sup> Nos calculs avec désordre.

### III.2.3. Discontinuités des bandes

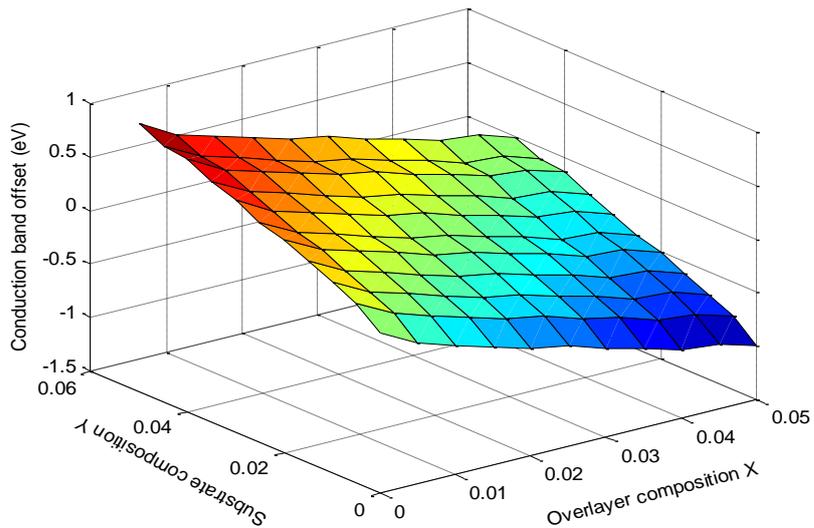
Les discontinuités des bandes de conduction et de valence sont des paramètres caractéristiques des hétérostructures. Elles conditionnent le transport des porteurs et déterminent les performances des dispositifs à hétérojonctions. Ainsi, s'impose leur détermination précise et fiable au niveau de l'hétérointerface GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>/GaSb<sub>1-y</sub>N<sub>y</sub>. Pour ce faire, nous avons utilisé la méthode dupseudopotentiel couplée à la théorie du modèle du solide (Solid-Model Theory). Les compositions d'azotes (x et y) sont considérées comme variant dans l'intervalle 0-0.05.

#### III.2.3.1. Discontinuités des bandes de conduction

Les discontinuités des bandes de conduction (CBO : Conduction Band Offsets) au niveau de l'interface GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>/GaSb<sub>1-y</sub>N<sub>y</sub> ont été déterminées pour différentes concentrations d'azote dans l'intervalle 0-0.05. Ces discontinuités de bandes sont de signe négatif lorsque la concentration d'azote dans le substrat est inférieure à la concentration d'azote dans la couche supérieure (i.e.  $y < x$ ) et changent de signe dans le cas contraire comme le montre la Figure 3.16 (a et b).



a.



b.

**Figure 3.16. Discontinuités des bandes de conduction en fonction de la concentration d'azote dans le substrat (y) et dans la couche supérieure (x) (a. Sous forme de contour, b. en représentation tridimensionnelle).**

Les résultats obtenus sont résumés dans le Tableau 3.20.

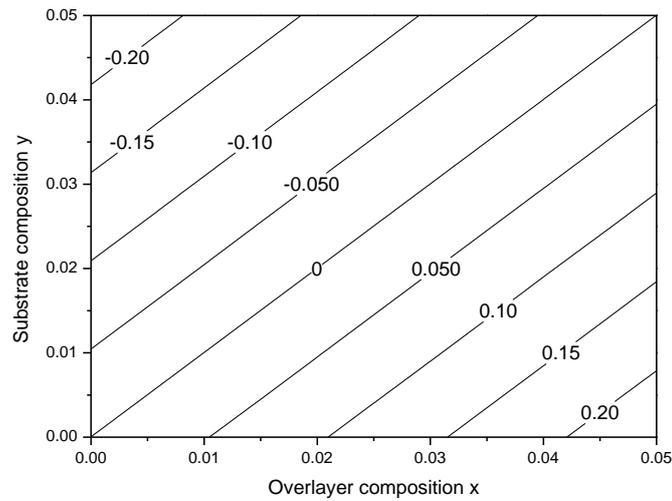
**Tableau 3.8. Discontinuités des bandes de conduction  $\Delta E_c$  (eV) du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}_{1-y}\text{N}_y$  pour différentes concentrations d'azote ( $0 \leq x, y \leq 0.05$ ).**

		x : composition d'azote dans la couche supérieure $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$					
		0.00	0.010	0.020	0.030	0.040	0.050
y : composition d'azote dans le substrat $\text{GaSb}_{1-y}\text{N}_y$	0.00	0	-0.2900	-0.4973	-0.6674	-0.8612	-1.0003
	0.010	0.2900	0	-0.2072	-0.3773	-0.5711	-0.7101
	0.020	0.4970	0.2071	0	-0.1700	-0.3638	-0.5027
	0.030	0.6669	0.3770	0.1700	0	-0.1937	-0.3326
	0.040	0.8603	0.5706	0.3636	0.1936	0	-0.1389
	0.050	0.9989	0.7092	0.5022	0.3324	0.1388	0

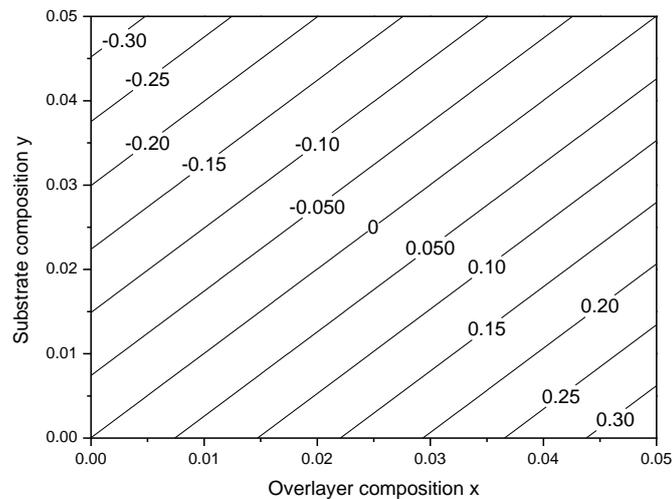
### III.2.3.2. Discontinuités des bandes de valence

Contrairement aux discontinuités des bandes de conduction, les discontinuités des bandes de valence (VBO : Valence Band Offsets) restent positives pour des concentrations d'azote dans le substrat inférieur à celles dans la couche supérieure et inversent leur signe dans le cas contraire. Ce comportement est qualitativement le même pour les trous lourds et légers comme en témoigne la Figure 3.17 (a et b).

On note que le gap de la couche supérieure  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  est complètement contenu dans celui du substrat  $\text{GaSb}_{1-y}\text{N}_y$  de manière que l'alignement est de type I (straddling) pour  $y < x$ . Si  $y > x$  l'alignement reste de type I mais cette fois c'est le gap du substrat  $\text{GaSb}_{1-y}\text{N}_y$  qui tombe totalement dans celui de la couche supérieure  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ .



a.



b.

**Figure 3.17. Discontinuités des bandes de valence en fonction de la composition d'azote dans le substrat (y) et dans la couche supérieure (x) (a. Trous lourds, b. trous légers).**

De même que pour les discontinuités des bandes de conduction, le Tableau 3.21 rassemble les valeurs calculées des discontinuités des bandes de valence.

**Tableau 3.9. Discontinuités des bandes de valence  $\Delta E_v$  (eV) du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}_{1-y}\text{N}_y$  pour différentes concentrations d'azote ( $0 \leq x, y \leq 0.05$ ).**

		x: composition d'azote dans la couche supérieure $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$					
		0.00	0.010	0.020	0.030	0.040	0.050
y: composition d'azote dans le substrat $\text{GaSb}_{1-y}\text{N}_y$	0.00	0	0.0478	0.0954	0.1429	0.1903	0.2376
	0.010	-0.0478	0	0.0477	0.0953	0.1427	0.1901
	0.020	-0.0957	-0.0478	0	0.0476	0.0952	0.1425
	0.030	-0.1435	-0.0955	-0.0477	0	0.0476	0.0950
	0.040	-0.1913	-0.1433	-0.0954	-0.0476	0	0.0475
	0.050	-0.2392	-0.1911	-0.1431	-0.0953	-0.0476	0

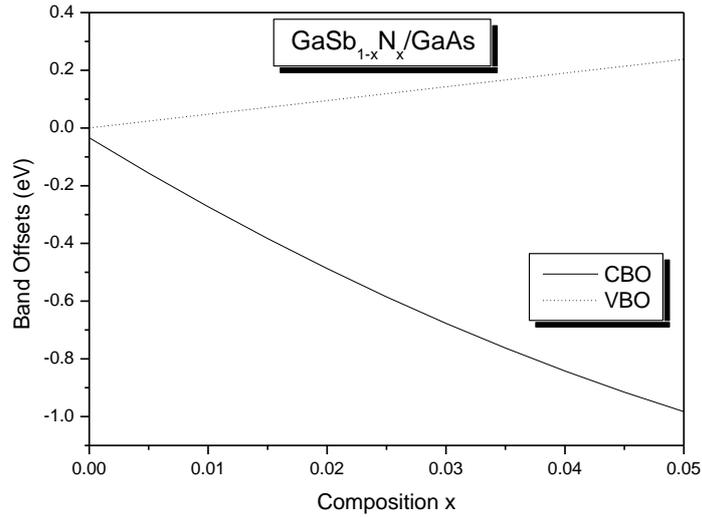
### III.2.3.3. Discontinuités de bandes au niveau des hétérointerface $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}$

Les discontinuités des bandes de conduction et de valence au niveau de l'hétérointerface  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}$  est représentée sur la Figure 3.18. La CBO est négative et diminue non linéairement lorsque la concentration x d'azote augmente de 0 à 0.05. Par contre la VBO augmente linéairement et est de signe positif. Les CBO et VBO sont respectivement de signe positif et négatif pour  $x < 0.02$  et changent de signe pour  $x > 0.02$ .

Le meilleur fit quadratique de nos résultats donne :

$$\Delta E_c (\text{eV}) = 122.98x^2 - 25.12x - 0.03 (\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}) \quad (3.29)$$

$$\Delta E_v (\text{eV}) = 4.75x (\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}) \quad (3.30)$$

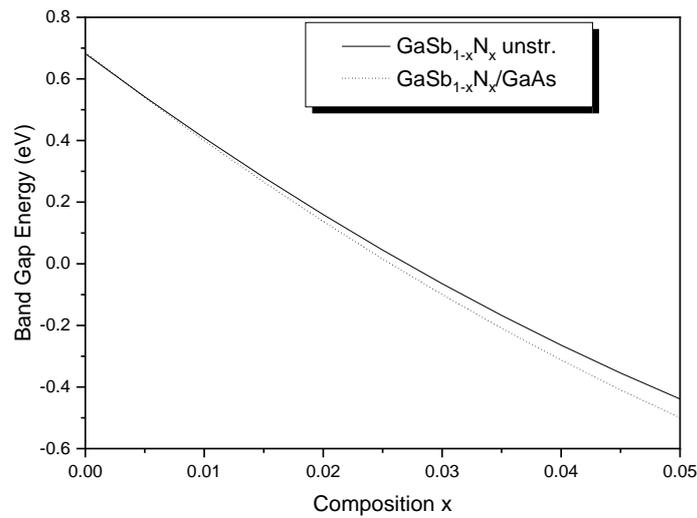


**Figure 3.18. Discontinuités des bandes en fonction de la composition d'azote.**

#### III.2.3.4. Gaps énergétiques relaxé et contraints

Le gap énergétique du matériau  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  relaxé ainsi que celui contraint du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}$  sont représentés sur la Figure 3.19 comme fonction de la composition d'azote  $x$ . Le gap contraint du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}$  diminue de façon non linéaire lorsque la composition d'azote varie de 0 à 0.05 et est plus faible que le gap du matériau  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  relaxé sur tout l'intervalle de compositions  $x$ . Un fit quadratique de nos valeurs calculées donne :

$$E_g^{str} (eV) = 123.57x^2 - 29.90x + 0.69 \quad (\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}) \quad (3.33)$$



**Figure 3.19. Gaps énergétiques du matériau  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  relaxé puis contraint  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}$  en fonction de la concentration d'azote.**

Le Tableau 3.10 rapporte nos valeurs calculées des gaps contraints au niveau des hétérointerfaces  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}$  et  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}_{0.98}\text{N}_{0.02}$ .

**Tableau 3.10. Gaps contraints au niveau de l'hétérointerface  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x/\text{GaSb}$  pour différentes concentrations d'azote.**

Matériau	Gap contraint	
	Substrat	
	GaSb	$\text{GaSb}_{0.98}\text{N}_{0.02}$
GaSb	0.72 <sup>a</sup>	1.28 <sup>a</sup>
$\text{GaSb}_{0.99}\text{N}_{0.01}$	0.40 <sup>a</sup>	0.99 <sup>a</sup>
$\text{GaSb}_{0.98}\text{N}_{0.02}$	0.14 <sup>a</sup>	0.72 <sup>a</sup>
$\text{GaSb}_{0.97}\text{N}_{0.03}$	-0.10 <sup>a</sup>	0.49 <sup>a</sup>
$\text{GaSb}_{0.96}\text{N}_{0.04}$	-0.31 <sup>a</sup>	0.28 <sup>a</sup>
$\text{GaSb}_{0.95}\text{N}_{0.05}$	-0.50 <sup>a</sup>	0.09 <sup>a</sup>

<sup>a</sup>Nos calculs.

### III.3. Propriétés physiques du laser GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>/GaSb

#### III.3.1. Spectre du gain optique pour différentes injections

La Figure 3.20 présente l'évolution du gain optique du puits quantique en fonction de la longueur d'onde pour différentes densités de porteurs et des largeurs de puits  $L_p=2$  nm, 3 nm, 4 nm et 5 nm, nous observons un très faible décalage du maximum de gain vers les courtes longueurs d'ondes, lorsque la densité de porteurs augmente et que le maximum de gain augmente avec l'augmentation de la concentration des porteurs de charge avec toutefois une diminution de la longueur d'onde correspondante. Ce phénomène est lié au remplissage des états de plus en plus élevés dans les bandes de valence et de conduction au fur et à mesure de l'augmentation du nombre de porteurs [14,18].

Les données d'entrée pour le calcul du gain optique de notre laser à puits quantique sont rassemblées dans le tableau 3.11

**Tableau 3.11. Parent compounds GaSb and GaN parameters**

Parameter	GaSb	GaN
Energy band gap $E_g$ (eV)	0.812	3.3
Lattice constant $a_0$ (Å)	6.0954	4.50
Elastic constant $C_{11}$ (GPa)	8.80	29.3
Elastic constant $C_{12}$ (GPa)	4.00	15.9
Hydrostatic deformation potential $a_v$ (eV)	-0.79	-5.20
Tetragonal deformation potential $b_v$ (eV)	-2	-2.20
Electron effective mass $m_e^*$ ( $m_0$ )	0.039	0.15
Heavy hole effective mass $m_{hh}^*$ ( $m_0$ )	0.28	0.85
Light hole effective mass $m_{lh}^*$ ( $m_0$ )	0.05	0.239
Luttinger parameters $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$	11.79, 4.11, 6.00	.267, 0.75, 1.10

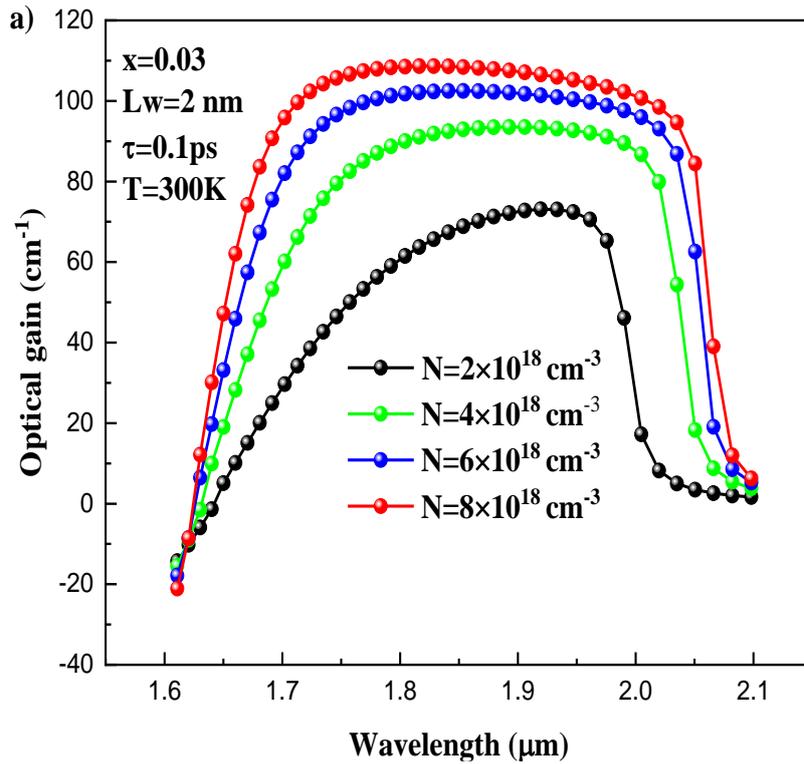


Figure 3.20. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une largeur de puits quantique de 2 nm.

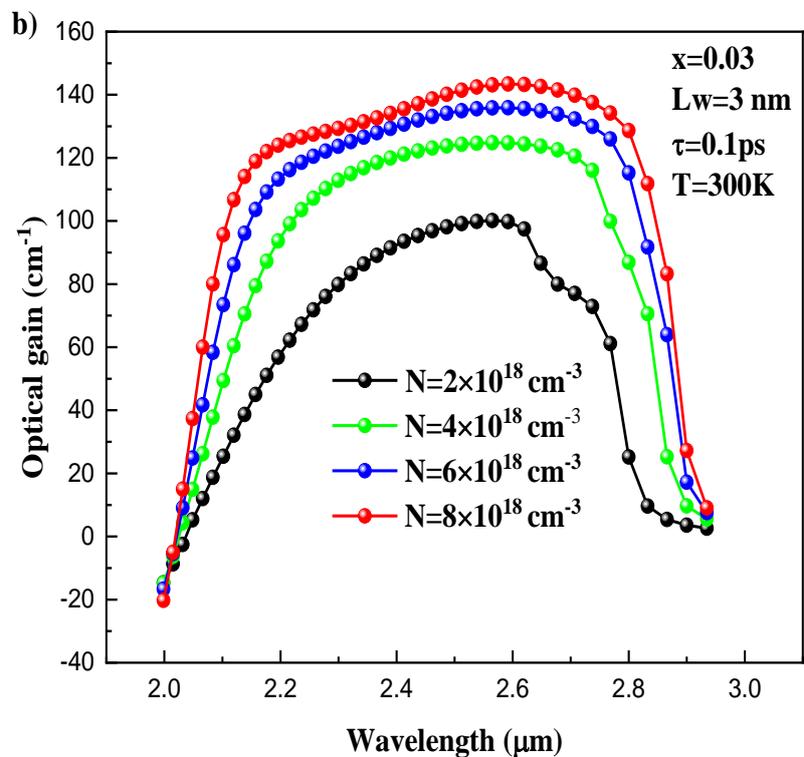


Figure 3.21. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition  $x=0.03$  et une largeur de puits quantique de 3 nm.

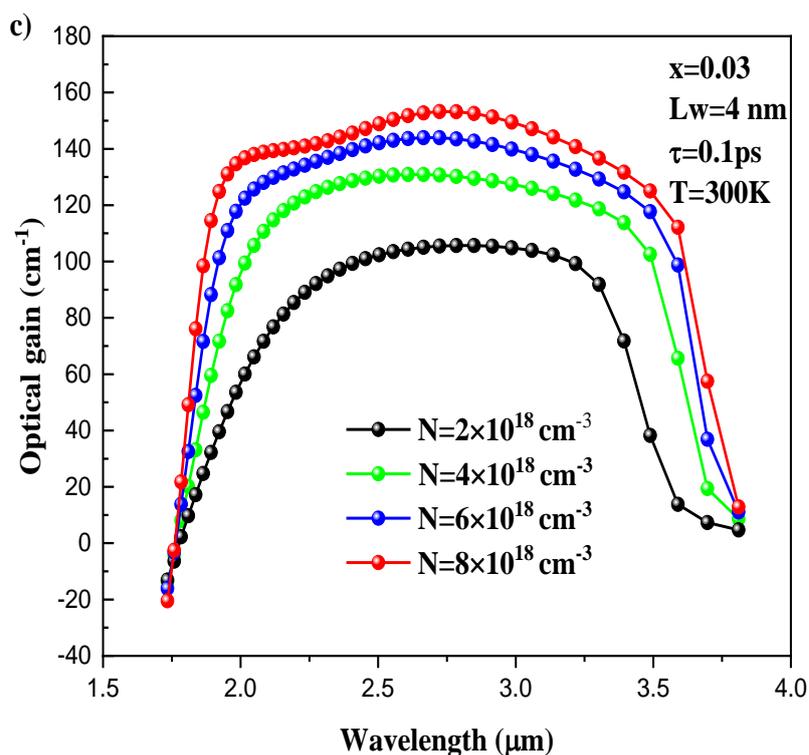


Figure 3.22. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition  $x=0.03$  et une largeur de puits quantique de 4 nm.

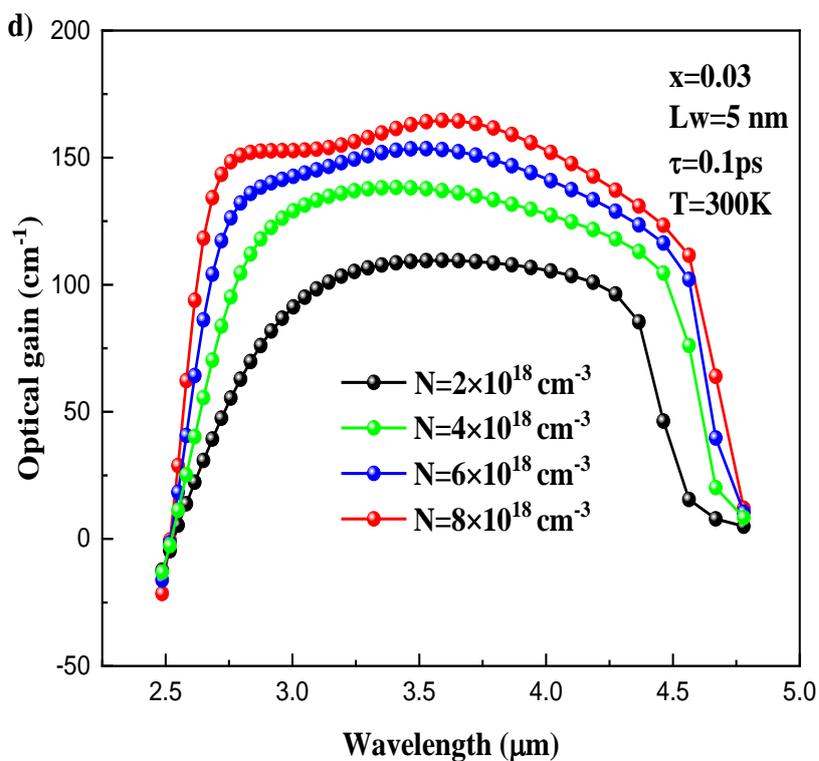


Figure 3.23. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition  $x=0.03$  et une largeur de puits quantique de 5 nm.

### III.3.2. Spectre du gain optique pour différentes largeurs de puits

On a aussi tracé sur la Figure 3.24 le gain optique en fonction de la longueur d'onde pour différentes largeurs de puits pour une densité de porteurs de  $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . On remarque que pour une densité de porteurs donnée, le maximum du gain optique augmente avec l'augmentation de la largeur du puits. Ceci peut être relié à l'éclatement des niveaux énergétiques lorsque la largeur du puits diminue [19,22].

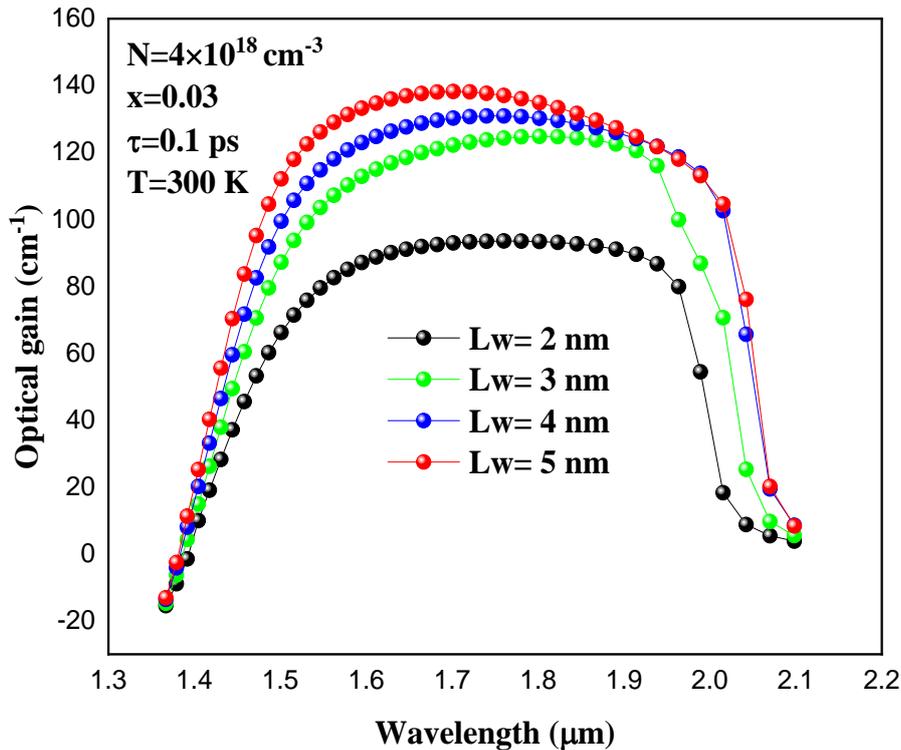
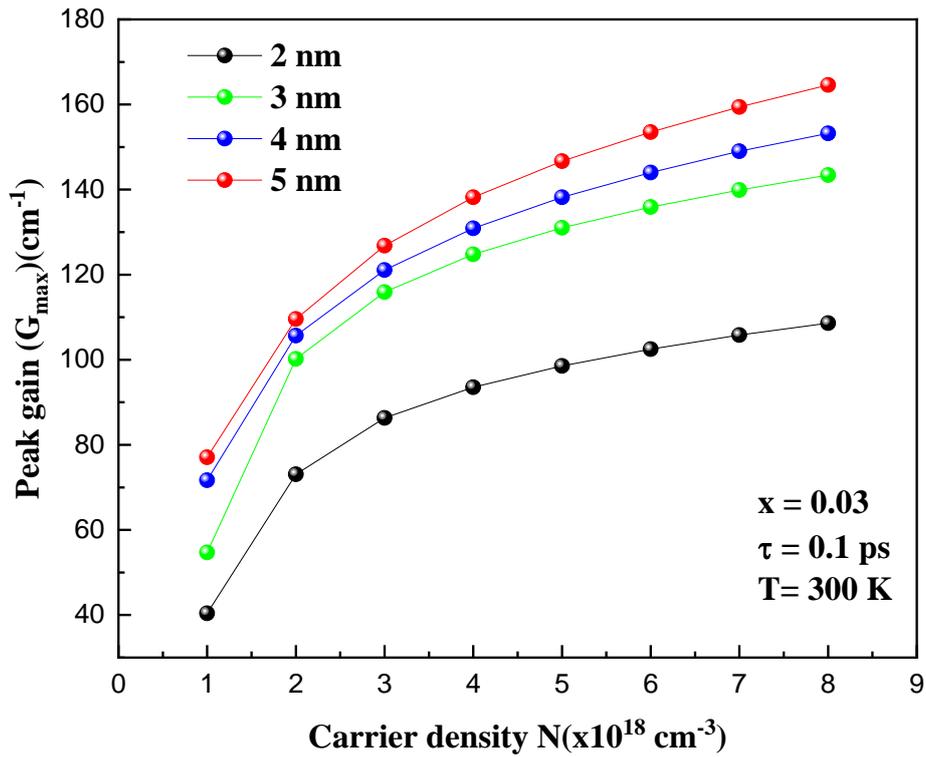


Figure 3.24. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition  $x=0.03$  et une densité de porteurs de  $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

### III.3.3. Gain maximal en fonction de l'injection

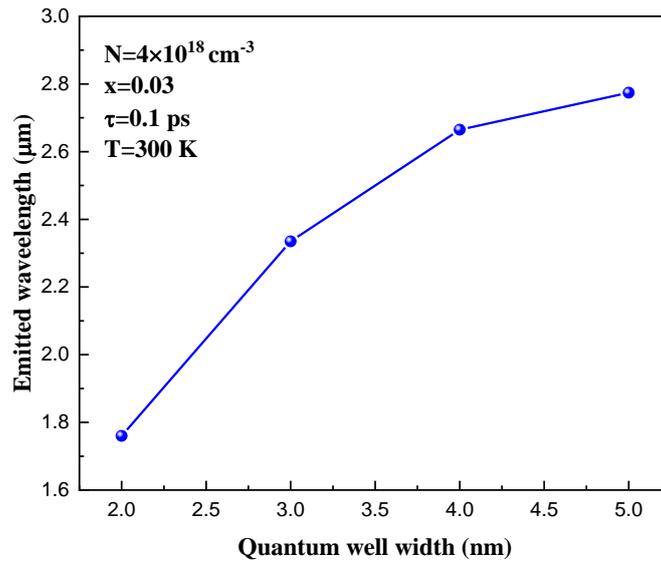
La Figure 3.25 représente les variations du gain maximal  $G_{\text{peak}}$  en fonction de l'injection  $N$ , pour différentes valeurs de la largeur du puits  $L_p$ . Ces courbes ont été obtenues à partir des courbes de la Figure 4.14, pour différentes injections  $N$ . On constate que le gain maximal croît lorsqu'on fait augmenter l'injection des porteurs quelle que soit la largeur du puits quantique. A partir du gain maximum on peut déterminer le gain au seuil et le courant de seuil de la diode laser à puits quantique contraint de cette structure[23,27].



**Figure 3.25. Variation du gain optique maximal en fonction de la densité des porteurs pour une composition  $x=0.03$  et pour différentes largeurs de puits.**

### III.3.4. Longueur d'onde émise

La longueur d'onde émise  $\lambda_{\text{em}}$  en fonction de la largeur du puits est représentée sur la Figure note 3.26. On note que  $\lambda_{\text{em}}$  augmente de 1.76 à 2.77  $\mu\text{m}$  à mesure que la largeur du puits augmente de 1 à 5 nm. Toutes les longueurs d'ondes émises sont situées donc dans la fenêtre infrarouge du spectre électromagnétique. Ceci est en accord avec le comportement du gap d'énergie du  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ .



**Figure 3.26. Emitted wavelength as a function of the well width for carrier density of  $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .**

#### **III.4. Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons présenté dans une première partie nos résultats de simulation des propriétés optoélectroniques du GaSbN matériau constituant la couche active de notre laser à puits quantique GaSbN/GaSb dont les propriétés physiques ont été présentées dans une seconde partie. Les principaux résultats seront rassemblés dans la conclusion générale.

---

## Référence

- [1] C. Van de Walle, "II–VI blue/green light emitters. In Semiconductors and Semimetals", Vol. 44, ed, R. Gunshor and A. Nurmikko. San Diego: Academic Press, pp. 122–160 1997.
- [2] Seoung-Hwan Park, Polarization characteristics of 480–680 nm  $(1\sqrt{2})$ InGaN/GaN quantum well structures with strain relaxation effects, *Superlattices and Microstructures* 86 531–535 (2015)
- [3] C. Chao and S. Chuang, "Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells," *Phys. Rev. B*, vol. 46, no. 7, 1992.
- [4] J. Piprek, *Optoelectronic Devices*, Springer S. 2005.
- [5] C. Lamberti, "Characterization of Semiconductor Heterostructures and Nanostructures", Elsevier B.V 2008.
- [6] W. Wladek Walukiewicz, *Physica E* 20 (2004) 300-307.
- [7] M. Rezek, The electronic band structures of III-V compounds of ternary alloys, Doctoral thesis, Istanbul University, 2005
- [8] Riechert, H., Ramakrishnan, A. & Steinle, G. (2002) Development of InGaAsN-based 1.3  $\mu\text{m}$  VCSELs. *Semicond. Sci. Technol.*, 17, 892-897.
- [9] B. Abbar, B. Bouhafs, H. Aourag, and P. Ruterana, *Phys. Stat. sol. (b)* 228, N0. 2, (2001).
- [10] H. Mathieu, *Physique des SCs et des composants électroniques*, 5e édition, Dunod 2004.
- [11] J.R. Chelikowsky, T.J. Wagener, J.H. Weaver, A. Jin, *Phys. Rev. B* 40 (1989) 9644.
- [12] K. Kassali, N. Bouarissa, *Solid State Electron.* 44 (2000) 501.
- [13] A.H. Yafaiedh, N. Bouarissa, *Mater. Chem. Phys.* (2008), doi :10.1016/j.matchemphys.2008.11.036.
- [14] D. Ahn, "Theoretical aspects of blue-green II-VI strained quantum well Lasers", *Physica B* 191 140-155, 1993.
- [15] J. Ding, M. Hagerott, P. Kelkar, A.V. Nurmikko, D.C. Grillo, Li He, J. Han, R.L. Gunshor, "Gain and dynamics in ZnSe-based quantum wells", *Journal of Crystal Growth* 138 719-726, 1994.
- [16] I. Suemune, K. Nakanishi, Y. Fujii, Y. Kuroda, M. Fujimoto and M. Yamanishi, "Photopumped ZnSe/ZnSSe blue semiconductor lasers and a theoretical calculation of the optical gain", *Journal of Crystal Growth* 117 1068—1072, 1992.
- [17] H. Change Jeon, Seung Joo Lee, Seoung-Hwan Park, Tae Won Kang, Doyeol Ahn, G. Ihm, "Enhancement of optical gain in Li: CdZnO/ZnMgO quantum well lasers", *Physica E* 42 2652–2654, 2010.

- 
- [18] M. Sugawara, "Optical gain process in wide-gap semiconductors: possibilities of blue-light bi-exciton lasing in quantum-well and quantum-dot lasers", *Journal of Crystal Growth* 189/190 585-592, 1998.
- [19] F.P. Loguea, P. Rees, C. Jordan, J.F. Donegana, J. Hegarty, F. Hiei, S. Taniguchi, T. Hino, K. Nakano, A. Ishibashi, "Optical gain in (Zn,Cd)Se-Zn(S,Se) quantum wells as a function of temperature", *Journal of Crystal Growth* 184/185 623-626, 1998.
- [20] G. Bastard. "Wave mechanics applied to semiconductor heterostructure". Les Éditions de Physique", Les Ulis, France, 1988.
- [21] M. Altarelli, "Electronic structure and semiconductor-semimetal transition in InAs-GaSb superlattices", *Physical Review B*, 28(2), July 1983.
- [22] M. Asada, A. Kameyama, and Y. Suematsu, "Gain and Intervalence Band Absorption in Quantum-Well Lasers", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, QE-20(7), July 1984.
- [23] U. Eckenberg and M. Altarelli, "Calculation of hole subbands at the GaAs-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As interface", *Physical Review B*, 30(6), September 1984.
- [24] D.A. Broido and L.J. Sham, "Effective masses of holes at GaAs-AlGaAs heterojunctions", *Physical Review B*, 31(2), January 1985.
- [25] T. Ando, "Hole Subbands at GaAs/AlGaAs Heterojunctions and Quantum Wells", *Journal of the Physical Society of Japan*, 54(4), April 1985.
- [26] K. Shahzad, D. J. Olego, and C. G. Van de Walle, "Optical characterization and band offsets in ZnSe-Zn<sub>Sx</sub>Se<sub>1-x</sub> strained-layer superlattices", *Phys. Rev. B* 38, 1417, 1988.
- [27] D. Rached, N. Benkhattou, B. Soudini, B. Abbar, N. Sekkal, and M. Driz, "Electronic structure calculation of magnesium chalcogenides MgS and MgSe", *Phys. Status Solidi B* 240, 565, 2003.

## **CONCLUSION GENERALE**

---

## CONCLUSION GENERALE

Les objectifs de la présente thèse se résument en l'étude des propriétés physiques du laser à puits quantique à base du nitrure GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> et en particulier le gain optique. Nous avons d'abord commencé par l'étude du matériau lui-même GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>. Nous avons étudié ses propriétés électroniques, optiques et élastiques ainsi que les discontinuités des bandes au niveau de la structure investie, moyennant la méthode du pseudo potentiel. Ensuite, nous avons exploré les propriétés de notre laser à puits quantique.

Les principaux résultats sont :

### Propriétés optoélectroniques

La variation du *gap* direct  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  du nitrure dilué GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> entraîne la diminution de  $E_{\Gamma}^{\Gamma}$  présentant ainsi un fort paramètre de courbure positive.

La forte réduction du *gap* démontre la convenance du matériau sous investigation aux applications optoélectroniques dans les régions spectrales de l'infrarouge et l'infrarouge moyen.

Les *gaps*  $E_{\Gamma}^X$  et  $E_{\Gamma}^L$  lorsque la concentration  $x$  d'azote varie de 0 à 0.05 diminuent non linéairement.

La variation de la largeur de la bande de valence augmente de manière monotone quand la concentration  $x$  augmente de 0 à 0.05.

Les masses effectives des porteurs (électrons et trous) diminuent rapidement et de façon non linéaire lorsque la concentration augmente de 0 à 0.05.

L'ajout de quelques pourcents seulement d'azote dans le ternaire GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub> fait augmenter visiblement l'indice de réfraction et les constantes diélectriques statique et de haute fréquence.

### Propriétés élastiques

Lorsque la concentration  $x$  d'azote varie de 0 à 0.05, toutes les constantes élastiques augmentent.

Les modules de compression  $B_s$ , de cisaillement  $C$  et d'Young  $Y_0$  augmentent de façon monotone avec l'augmentation de la teneur en azote.

### Discontinuités des bandes

Les discontinuités des bandes de conduction au niveau de l'interface GaSb<sub>1-x</sub>N<sub>x</sub>/GaSb<sub>1-y</sub>N<sub>y</sub> sont de signe négatif lorsque la concentration d'azote dans le substrat est inférieure à la concentration d'azote dans la couche supérieure (i.e.  $y < x$ ) et changent de signe dans le cas contraire. Les discontinuités des bandes de valence présentent un comportement contraire.

---

L'alignement est de type I (straddling).

Le gap énergétique du matériau contraint diminue de façon non linéaire lorsque la composition d'azote varie de 0 à 0.05 et est plus faible que le gap du matériau  $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$  relaxé sur tout l'intervalle de compositions  $x$ .

Le gain optique du puits quantique est fonction de la longueur d'onde. Nous avons observé un très faible décalage du maximum de gain vers les courtes longueurs d'ondes, lorsque la densité de porteurs augmente et que le maximum de gain augmente avec l'augmentation de la concentration des porteurs de charge avec toutefois une diminution de la longueur d'onde correspondante.

Le gain maximum croît lorsqu'on fait augmenter l'injection des porteurs.

La longueur d'onde émise croît avec la densité des porteurs injectés.

La longueur d'onde émise croît avec la largeur du puits quantique.

Comme perspective de ce travail, il serait intéressant de réétudier la même structure avec le même matériau mais en y injectant des points quantiques ce qui améliorerait le gain optique de notre laser.