

Université 20 Août 1955-Skikda

Faculté des Sciences

Département : de Physique

Ref : D02P211902D



جامعة 20 أوت 1955 سكيكدة

كلية العلوم

قسم: الفيزياء

المرجع: D02P211902D

Thèse présentée en vue de l'obtention
Du diplôme de

Doctorat en sciences

Spécialité : Physique des Matériaux

Etude et Modélisation Des Structures à Super-réseau pour l'Application Quantique

Présentée par :

Sebbar Djamel

Soutenue publiquement le 14/04/2019

Devant le jury composé de :

Kabir Abdenour	Professeur	Université de Skikda	Président
Boudjema Bouzid	Professeur	Université de Skikda	Rapporteur
Meziri Mahmoud	Professeur	Université de Annaba	Examineur
Djekoun Abdelmalik	Professeur	Université de Annaba	Examineur
Khounfais Kamel	MCA	Université de Skikda	Examineur
Daira Radouane	MCB	Université de Skikda	Invité

Remerciements

Mes remerciements vont premièrement à Dieu le tout puissant pour la volonté, la santé et la patience qu'il m'a donné pour mener à bien cette thèse.

Je tiens à remercier sincèrement mon directeur de thèse, Monsieur Bouzid BOUDJEMA, Professeur à l'Université de 20 Août 1955-Skikda, qui a dirigé mes recherches d'une manière intelligente, efficace ainsi que pour son soutien précieux.

Je remercie également le Professeur Abdenour KABIR, Professeur à l'Université de 20 Août 1955-Skikda, pour sa disponibilité et pour l'honneur qu'il m'a accordé en acceptant de présider le jury de cette thèse.

Mes vifs remerciements au Professeur Mahmoud MEZIRI, Professeur à l'Université de Annaba d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Je voudrais remercier le Professeur Abdelmalik DJEKOUN, Professeur à l'Université de Annaba, d'avoir accepté de participer au jury de cette thèse.

J'adresse aussi mes plus vifs remerciements à Kamel KHOUNFAIS, Maître de Conférences A, à l'Université du 20 Août 1955-Skikda, qui a accepté d'évaluer le présent travail.

Je tiens aussi à exprimer mes sincères remerciements à Radouane DAIRA, Maître de Conférences de l'Université du 20 Août 1955-Skikda d'avoir accepté de participer au jury de cette thèse.

Bien évidemment, j'exprime toute ma reconnaissance et ma sympathie aux membres du Laboratoire de Physique (*LPTEAM*) à l'université de Yahia Farès de Médéa.

Un grand merci à mes collègues, Dr. Abdelali BOUKAOUD et Dr. Oussama HOUHOU, pour leurs encouragements durant la réalisation de ce travail. Je remercie également le Docteur Younes CHIBA pour ses précieuses suggestions et ses remarques importantes.

Je remercie du fond du cœur mes parents qui m'ont toujours soutenu et encouragé, et plus particulièrement au cours de la préparation de ce travail de thèse. Je tiens aussi à remercier mon épouse ainsi que mes enfants

Enfin, je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à mes amis et mes collègues enseignants pour le soutien moral et l'aide qu'ils m'ont apportée.

Résumé

Le présent travail de thèse porte sur deux volets. Le premier volet consiste à développer un modèle numérique permettant de simuler le courant du seuil de laser à cascade quantique. Pour ce faire les équations du bilan en régime stationnaire ont été résolues en tenant compte de la population activée thermiquement dans les états inférieur et supérieur du laser afin d'étudier l'influence de la température et la densité de dopage sur le courant de seuil de laser à cascade quantique à trois niveaux. Les résultats numériques montrent que la densité de courant de seuil augmente avec la température et aussi avec la densité de dopage. Cependant la puissance de sortie diminue lorsque la température et la densité de dopage augmentent. Nous avons également estimé le décalage de la différence d'énergie entre l'état supérieur et inférieur avec la variation de la densité de dopage. Les résultats obtenus à travers le modèle numérique présentent un très bon accord avec les résultats expérimentaux rapportés dans la littérature. Dans le deuxième volet de la thèse, nous avons calculé numériquement la longueur d'onde d'émission de laser pour une structure à cascade quantique à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger par la méthode de matrice de transfert. Les résultats obtenus sont analysés et discutés.

Mots-clés : Laser à cascade quantique, Les équations du bilan, Puissance de sortie, Superréseau, Equation de Schrödinger, Effet tunnel résonant, la méthode de matrice de transfert.

ABSTRACT

The work reported in this thesis is divided into two parts. The first part consisted of developing a numerical model to simulate the threshold current of the quantum cascade laser. To do this the steady-state equilibrium equations were solved by taking into account the thermally activated population in the lower and upper laser states in order to study the influence of temperature and doping on the threshold current of the three-level quantum cascade laser. The numerical results show that the threshold current density increases with temperature and also with the doping density. However, the output power decreases as the temperature and the doping density increase. We also estimated the value of the change in the energy difference between the upper and lower state with the variation of the doping density. The results obtained through the numerical model show a very good agreement with the experimental results reported in the literature. In the second part of the thesis we have numerically computed the laser emission wavelength in a superlattice structure from the resolution of the Schrödinger equation by the transfer matrix method. The results obtained are analyzed and discussed.

KeyWords : Quantum Cascade Laser, Rate Equations, Superlattice, Schrödinger equation, Resonant Tunneling Effect, Transfer matrix method.

ملخص

تنقسم هذه الدراسة إلى جزئين، حيث يركز الجزء الأول على تطوير نموذج رقمي لمحاكاة تيار عتبة ليزر تعاقب الكم ، ولتحقيق ذلك تم حل معادلات التوازن في حالة الاستقرار مع أخذ بعين الإعتبار التنشيط الحراري للإسكان في المستوى العلوي والسفلي لإنبعاث أشعة الليزر، وهذا من أجل دراسة تأثير درجة الحرارة وكثافة التطعيم على تيار العتبة في ليزر تعاقب الكم ذو ثلاثة مستويات طاقوية. تظهر النتائج العددية المتحصل عليها أن كثافة عتبة التيار تزداد مع درجة الحرارة وأيضا مع إزدياد كثافة التطعيم. ومع ذلك فإن استطاعة الليزر تتناقص مع إزدياد درجة الحرارة وكثافة التطعيم. كما قدرنا قيمة التغير في فرق الطاقة بين الحالة العلوية والسفلية مع تغيرات كثافة التطعيم، حيث أن النتائج التي تم الحصول عليها من خلال هذا النموذج العددي أبدت إتفاقا جيدا جدا مع النتائج التجريبية الواردة في المنشورات العلمية. في الجزء الثاني من الأطروحة قمنا بحساب عددي لطول موجة انبعاث الليزر في شبكة ذات تسلسل كمومي وهذا انطلاقا من حل معادلة شرود نغر بواسطة طريقة مصفوفة الانتقال. كما تم تحليل النتائج التي تم الحصول عليها ومناقشتها

الكلمات المفتاحية: ليزر تتالي الكم ، معادلات التوازن ، شبكة ذات تسلسل كمومي ، معادلة شرود نغر ، تأثير النفق الرنيني ، طريقة

مصفوفة الانتقال.

Sommaire

Introduction Général	01
Chapitre I : Rappel sur les lasers à semiconducteur	
I.1. Introduction	04
I.2. Historique du laser	04
I.3. Notions préliminaires sur le rayonnement laser	05
I.3.1. Processus d'interaction matière-rayonnement	05
I.3.1.1 Emission spontanée :	05
I.3.1.2. Absorption	06
I.3.1.3. Emission induite	07
I.3.2. La différence de population	08
I.3.2.1 L'inversion de population	08
I.3.3. Pompage	9
I.3.4. Cavité stable	09
I.3.4.1. Différentes cavités à deux miroirs :	10
I.4. Les semiconducteurs	11
I.4.1. Semi-conducteur intrinsèque	12
I.5. Puits quantiques	13
I.5.1 Définition	13
I.6. Les superréseau	14
I.7. Hétérostructure	14
I.8. Principe de l'amplification intersousbande	15
I.8.1. La transition intersousbande	15
I.8.2. Probabilité de transition entre deux niveaux énergétiques	16
I.8.3. Taux d'émission spontanée	17
I.9. Laser à cascade quantique	17
I.9.1. Principe de fonctionnement :	17
I.9.2. Les propriétés de base	20
I.9.3. Interaction électron-phonon LO	21
I.9.4. Le facteur de forme	22
I.9.5. Élément de matrice Z_{ij}	23
I.9.6. Les états électroniques dans un puits quantique.	24
I.9.7. les pertes d'absorption par les porteurs libres :	24
I.9.8. Les pertes par les miroirs	25
I.10. Structure de puits quantique	26
I.10.1. Structure de puits quantique sans champ électrique appliqué	26
I.10.2. Structure de puits quantique sous le champ électrique appliqué	27

I.10.3. Taux de relaxations inter sous bandes	28
I.10.4. Taux de relaxations d'émission thermoïonique et l'effet tunnel	29
I.10.5. Définition du facteur de confinement	31
I.10.6. Influence du champ électrique sur La demi- largeur à mi-hauteur	31
I.10.7. la population thermique	31
I.10.8. Equations du bilan	32
I.10.9. Modèle simple de LCQ à trois niveaux	34
I.10.10. Le comportement thermique de laser à cascade quantique.	36
Conclusion :	37

Chapitre II : Effet tunnel résonant

II.1 Introduction	39
II.2. Effet tunnel résonant:	40
II.3. Fabrication des composants à superréseau	40
II.4. Equation de Schrödinger pour une hétéro-structure libre	41
II.4.1. L'équation de Schrödinger indépendant de temps :	41
II.4.2. Résolution de l'équation de Schrödinger dans un puits quantiques en absence d'un champ électrique extérieur	42
II.4.2.1. Méthode de matrice de transfert :	42
II.4.2.2. détermination les amplitudes des fonctions enveloppes dans un triple puits quantiques	44
II.5. Résolution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel linéaire.	48
II.5.1. Quelques propriétés des fonctions Airy	50
II.5.2. les fonctions d'enveloppes pour un superréseau polarisé.	51
II.5.3. Coefficient de transmission	59
II.5.4. L'approche de la matrice de transfert	61
Conclusion	63

Chapitre III Résultats et discussion

III.1 Introduction	66
III.2. La densité de courant de seuil	66
III.2. Calcul de l'inversion de population	68

III.2.2. Activation thermique de population	69
III.2.2.1. Détermination les expressions de Δ_{2inj} et Δ_{3inj}	70
III.2.3. Calcul numérique	71
III.2.3.1. Modélisation de l'influence de température sur la densité de courant de seuil	73
III.2.3.2. Modélisation de l'influence de dopage sur la densité de courant de seuil.	74
III.3. La Puissance de sortie	76
I.4. L'effet tunnel résonant	77
I.4.1. Hétérostructure à quatre barrières	77
I.4.2. La résonance avec le phonon optique longitudinal.	80
I.4.4. La variation de l'énergie en fonction du champ électrique (F)	80
III.4.5. Transitions laser	82
Conclusion	84
Annexe	85
A.1. Méthode de calcul des énergies dans les puits quantiques	85
A.1.1. Méthode des différences finies	85
A.1.2. Méthode de tir (Shooting methode)	88
A.2. Solutions self-consiste Schrödinger et Équations de Poisson	90
Référence	93
Conclusion Générale	101

Liste des figures

Chapitre .I.

Figure I. 1: Représentation énergétique d'un système atomique à deux niveaux.	05
Figure I. 2: Représentation de modèle d'Einstein pour émission spontanée	06
Figure I. 3: Représentation de modèle d'Einstein pour l'absorption.	07
Figure I.4: Représentation le mécanisme d'émission stimulée (induite)	08
Figure I.5: Représentation graphique de la stabilité d'une cavité.	10
Figure I. 6: Représentation d'un structure à puits quantique : a) profil de potentiel, b) représentation à trois dimensions	13
Figure I. 7: représentation schématique d'un super-réseau sans champ électrique extérieure,a) représentation à 3D, b) profil de potentiel $V(x)$.	14
Figure I. 8: Représentation des fonctions d'ondes et les niveaux d'énergies dans la bande de conduction d'un seul puits quantique.	15
Figure I. 9: Principe de la première proposition d'amplification de la lumière dans intersubband	18
Figure I. 10: Modèle de laser à trios niveaux pour laser à cascade quantique.	19
Figure I. 11: Structure de bandes sous un champ électrique uniforme et statique est appliqué parallèlement à l'axe de croissance.	21
Figure I. 12. Structure de puits quantique multicouches	26
Figure I. 13. Structure à multicouches de puits quantique	28
Figure I. 14. Schéma de bande d'un puits quantique	30
Figure I. 15. Représentation d'un laser à trois niveaux	34
Figure I. 16: Modèle de laser à trois niveaux avec population thermique.	35

Chapitre .II.

Figure II.1: Représentation schématique de la fonction d'onde d'un électron traverse une barrière de potentiel par le phénomène d'effet tunnel.	40
---	----

Figure II. 2 : Diagramme de profil de potentiel dans un superréseau non polarisé.	43
Figure II.3 : Structure à triple barrières quantiques.	45
Figure II.4: L'allure de fonction Airy $Ai(x)$	50
Figure II.5 : Structure énergétique d'un superréseau polarisé.	52
Figure II.6: Solution numérique de l'équation de Schrödinger unidimensionnel par la matrice approche	61

Chapitre .III.

Figure III.1: Un diagramme schématique de profil de la bande de conduction calculé par self-consiste équation de Schrodinger-poisson,	67
Figure III. 2: Modèle de laser à trois niveaux en tenant compte la population activée thermiquement dans les états laser inférieur et supérieur respectivement.	67
Figure III.3: La variation du courant de seuil en fonction de la température, indique une comparaison entre notre modèle et les données expérimentales [5].	74
Figure III.4: Evaluation de la variation des temps de relaxations dans notre simulation en fonction de la température.	74
Figure III.5 : La variation du courant de seuil en fonction de la densité de dopage de surface d'injecteur avec une comparaison entre notre modèle et les données expérimentales	75
Figure III.6: Variation du courant de seuil en fonction de la température.	76
Figure III.7: Variation de la puissance de sortie en fonction du courant d'injection à $T = 80k$	77
Figure III.8: Variation de la puissance de sortie en fonction du courant d'injection à $T = 240k$	77

Figure III.9: Structure d'un super-réseau à quatre barrières, a) Représentation schématique, b) le profil de l'énergie de potentielle en absence d'un champ électrique.	79
Figure III.10: La Variation de la différence de l'énergie des transitions intersubbandes en fonction du champ électrique.	81
Figure III.11: La Variation de la différence de l'énergie des transitions intersubbandes en fonction du champ électrique	81
Figure III.12: La Variation de la différence de l'énergie des transitions intersubbandes ($E_2 - E_1$) en fonction du champ électrique.	81
Figure III.13: Variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie des électrons pour a/ $F=48\text{kv/cm}$. ; b/ 49kv/cm et c/ $F=50\text{kv/cm}$.	82
Figure III.14: Variation de la longueur d'onde des transitions λ_{43} et λ_{32} en fonction du champ électrique	83
Figure A.1 Fonction d'onde d'un niveau d'énergie dans une structure à deux puits quantiques	87
Figure A.2 Représentation schématique de la dérivée d'une fonction	89
Liste des tableaux	
Tableau I.1 Exemples des semiconducteurs.	11
Tableau III.1: Les paramètres utilisés dans le calcul et varient avec la température.	72
Tableau III.2: Les paramètres utilisés et restent constants dans le calcul.	73
Tableau III.3 : Les résultats obtenus par la simulation.	84

Nomenclature

LCQ	Laser à Cascade quantique
N_i	Le nombre d'électrons au niveau i
D	L'inversion de population
F	L'intensité du champ électrique
$Al_xGa_{1-x}As$	Arséniure de gallium-aluminium
GaAs	Arséniure de gallium
n_i	Concentration intrinsèque
PQ	Puits quantique
f_{ij}	La force d'oscillateur
z_{ij}	Le dipôle de la matrice
$2\hbar\Omega$	L'énergie de division à la résonance entre l'état fondamental de l'injecteur g
τ_{\perp}	Temps de relaxation pour l'électron dans le plan des couches
$\hbar\Delta$	La différence d'énergie $E_g - E_3$ à la résonance
J_{max}	La densité de courant de seuil maximale
h	Constant de Planck
R_1	Réfectivité du premier miroir
R_2	Réfectivité du deuxième miroir
λ	Longueur d'onde
L	Longueur de la cavité
n	Indice de réfraction
c	La vitesse de la lumière
A_{21}	Le taux d'émission spontanée
$\sigma_{12}\Phi$	Le taux d'absorption
$\sigma_{21}\Phi$	Le taux d'émission stimulée
σ_{21}	La surface efficace d'émission stimulée
σ_{12}	La surface efficace d'absorption
Φ	Flux de photons
m^*	Masse effective Masses effectives des électrons
LO	Phonon Longitudinal Optique
E_g	La bande interdite
k_{\perp}	Le vecteur d'onde à deux dimensions
α_m	Les pertes concernant les miroirs
α_w	Les pertes de guides d'ondes
α_{tot}	Les pertes Totales
G	Le gain modal
Γ	Le facteur de confinement,
J_{th}	La densité de courant de seuil
g	Le coefficient de gain
n_q	La population thermique de phonons optiques (facteur de Bose-Einstein)
Δ_{inj}	Différence d'énergie entre l'état inférieur et le potentiel chimique d'injecteur
n_2^{therm}	La population thermique de l'état inférieur d'émission laser

N_{ph}	Le nombre de photons,
J	La densité de courant injectée dans le niveau laser
η	Le rendement d'injection,
L et W	Sont la longueur et largeur de la cavité respectivement,
V	Le volume de la cavité
L_p	La longueur d'une période de la structure laser en cascade
N	Le nombre de périodes,
τ_3	La durée de vie électronique dans le niveau $n = 3$
τ_2	La durée de vie électronique dans le niveau $n = 2$
τ_{21}	Le temps de diffusion des électrons entre les états $n=2$ et $n=1$
τ_{32}	Le temps de diffusion des électrons entre les états $n=3$ et $n=2$
Γ	Le facteur de confinement,
τ_p	Représente la durée de vie des photons dans la cavité
$\hbar\omega_{LO}$	L'énergie du phonon optique longitudinal
L_Z	La largeur du puits quantique
m_1	La masse effective d'électrons dans le puits
m_2	La masse effective d'électrons dans la barrière
j	Le nombre de couche dans la structure
k	Constante de Boltzman
ϵ_∞	La constante diélectrique de haute fréquence
ϵ_s	La constante diélectrique statique
E_a	L'énergie d'activation
G	Gain optique
η_0	L'efficacité de rayonnement laser
P_{out}	La puissance optique de sortie
N_s	Densité surfacique de dopage de l'injecteur
T	Température
Ai	Fonctions Airy de premier type
Bi	Fonctions Airy de deuxième type
V	Le volume de la cavité
e	La charge élémentaire
BC	Bande de conduction
BV	Bande de valence
E_n	L'énergie de quantification du niveau
ΔE_c	La hauteur de la bande de conduction
x	La composition de l'aluminium

Introduction générale

Introduction générale

Depuis la première réalisation du laser en 1960, il y a eu beaucoup de progrès théoriques et expérimentaux en physique et dans de nombreux autres domaines de la science et de la technologie. Le premier laser réalisé était un laser à solide, et plus tard, dans les années 1960 et 1970, des lasers à base de semi-conducteurs ont été obtenus avec succès. Les lasers à cascade quantique (LCQ) sont des lasers à semi-conducteurs basés sur des hétérostructures de plusieurs couches, et constituent des dispositifs unipolaires basés sur des transitions tunnel et inter subband. Ces lasers ont été proposés par R.F. Kazarinov et R.A. Suris en 1971 [1]. En 1994 ont été réalisés pour la première fois par Faist et al [2]. Ils ont de nombreuses applications technologiques en tant que capteurs chimiques, détection de gaz anesthésiques, surveillance de la pollution, systèmes de communication optique en espace libre et spectroscopie infrarougeetc. Ce type de laser couvre une grande gamme de longueurs d'onde allant de $3 \mu\text{m}$ à $300 \mu\text{m}$ qu'on ne trouve pas dans d'autres lasers. L'optimisation de la conception des lasers à cascade quantique était initialement axée sur l'obtention de dispositifs fonctionnent à température ambiante avec un courant de seuil bas et une puissance de sortie élevée. Beaucoup d'efforts théoriques et expérimentaux ont été déployés pour améliorer les performances et l'efficacité des LCQ tels que les températures de fonctionnement, la densité de dopage, la puissance et la longueur d'onde, la densité de courant seuil ...etc. La modélisation et l'optimisation des performances des lasers à cascade quantique LCQ dépendent principalement de la capacité de contrôler des niveaux d'énergie électroniques quantifiés du super réseau. Nous devrions mentionner ici que l'effet tunnel résonant est important pour obtenir des QCL [3].

Dans ce travail, nous avons pris également en considération la transition non radiative concernant le phonon optique longitudinal (LO) [2]. En particulier, nous considérons le super réseau GaAs / AlGaAs et nous avons cherché les champs électriques appropriés qui donnent une transition non radiative résonante avec un phonon LO égal à 36 meV [4]. Dans ce cas des longueurs d'onde dans la gamme de l'infrarouge moyen ont été trouvées.

Introduction générale

L'objectif de ce travail de thèse est consacré à l'étude du comportement de la densité de courant de seuil dans un laser à cascade quantique en fonction de la température, de la densité surfacique de dopage, du calcul des énergies de confinements et de la longueur d'onde correspondant dans une structure pour laser à cascade quantique.

Cette thèse est organisée en trois chapitres :

Le premier chapitre est réservé à la présentation de la structure et le principe de fonctionnement des lasers à cascade quantique. Les notions de bases des processus d'interaction matière-rayonnement, les principes de base de lasers à semiconducteurs et les hétérostructures ont été présentés. A partir des équations bilan, les expressions de l'inversion de population et le courant de seuil sous l'effet de population thermique ont été déduites.

Le deuxième chapitre a été consacré à la méthode de la matrice de transfert utilisée dans la résolution de l'équation de Schrödinger dans une structure à super réseau, ainsi que le calcul du coefficient de transmission.

Le troisième chapitre a été réservé aux développements physiques et mathématiques utilisés dans les calculs de la densité de courant de seuil et des énergies de confinements par la solution numérique de l'équation de Schrödinger. A la fin, de ce chapitre, nous présentons les différents résultats de calcul numériques obtenus lesquels seront ensuite comparés avec des résultats obtenus par d'autres chercheurs.

En fin, nous terminons ce manuscrit par une conclusion générale dans laquelle sont résumés les résultats obtenus.

CHAPITRE I

Rappel sur les lasers à semiconducteurs

I. 1. Introduction

Les lasers en cascade quantiques, QCL, sont des dispositifs unipolaires qui reposent sur les transitions intra bandes de semi-conducteurs et proviennent d'une étude théorique établie en 1971 par deux chercheurs Russes R. Kasarinov et R.Suris [1], dans laquelle ils ont proposé un moyen d'amplifier la lumière dans un super-réseau polarisé sous un champ électrique.

I.2. Historique du laser

Le mot laser est l'acronyme de la phrase (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) donc le laser est une amplification de la lumière par l'émission stimulée de radiation. La découverte et le développement de laser passe par plusieurs étapes, la première idée remonte à l'année 1917 où le physicien d'origine allemand Albert Einstein élabore la théorie d'interaction matière-rayonnement[5], tel-que le phénomène d'émission stimulée qui est à la base des processus d'amplification de rayonnement. Quelques années plus tard, en 1949 A. Kastler a inventé le pompage optique et l'inversion de population. Cette technique permet de transférer du moment cinétique aux atomes en utilisant de la lumière polarisée [6]. En 1954, une équipe de chercheurs sous la direction de Charles Hard Townes a utilisé l'idée d'Einstein pour fabriquer le premier oscillateur appelée MASER (Micro-wave Amplifier by Stimulated Emission of Radiation) à ammoniac NH_3 ($\lambda = 1.25 \text{ cm}$) [7]. En 1960: le premier faisceau laser a été observé dans le rubis ($\lambda = 694.3 \text{ nm}$) par la compagnie de T. H. Maiman [8], cette invention a été rapidement suivi par réalisation de premier laser à gaz (hélium-né) dans le domaine infrarouge par l'équipe de Javan [9]. En 1962, R. Hall a réalisé le premier laser infrarouge à semiconducteur [10], puis en 1964 le premier laser à oxyde de carbone CO_2 ($\lambda = 10 \text{ um}$) par K. N. Patel [11]. Très récemment, en 1975, J. P. Van der Ziel a inventé le premier laser à semiconducteur GaAs à base de puits quantique [12]. Le premier laser à rayons X a été réalisé en 1984. Dix ans plus (1994) équipe de J. Faist, F. Capasso a fabriqué le premier laser à cascade quantique [2].

I.3. Notions préliminaires sur le rayonnement laser

I.3.1. Processus d'interaction matière-rayonnement

Un milieu atomique en interaction avec une onde électromagnétique compte un grand nombre de niveaux énergétiques. Afin de simplifier l'étude, on prend un milieu atomique et on retient seulement deux niveaux d'énergie E_1 et E_2 tels que :

$$E_2 - E_1 = h\nu_a$$

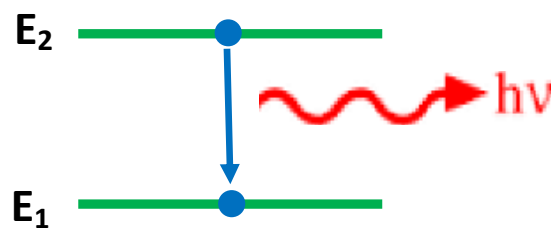


Figure I. 1: Représentation énergétique d'un système atomique à deux niveaux.

I.3.1.1 Emission spontanée

Dans le processus de l'émission spontanée, un électron transite spontanément du niveau 2 vers le niveau 1 en émettant un photon d'énergie $h\nu$. Le niveau 2 se dépeuple donc au profit du niveau 1. La probabilité ou le taux d'émission spontanée par atome et par unité de temps, notée A_{21} , est appelée aussi coefficient d'Einstein. Elle s'exprime en s^{-1} . La population du niveau 2 varie d'une quantité dN_2 pendant un interval de temps dt suivant la loi :

$$dN_2 = -A_{21}N_2dt \quad (I.1)$$

Le signe « moins » indique le dépeuplement du niveau 2. Cette équation signifie aussi que le nombre de photons émis par unité de temps et de volume est égale à $A_{21}N_2$. Au cours de ce processus la population N_1 de niveau 1 augmente de la même quantité [13] :

$$dN_1 = +A_{21}N_2dt \quad (I.2)$$

où cette fois le signe « plus » indique une augmentation de la population du niveau 1. La loi de population du niveau 2 en fonction du temps est liée à l'émission spontanée par la relation exponentielle suivante :

$$N_2(t) = N_2(t = 0)e^{-t/\tau} \quad (\text{I.3})$$

où $\tau = 1/A_{21}$ définit la durée de vie radiative du niveau 2. Le taux d'émission spontanée est une caractéristique de l'atome et de la transition considérée. Il peut varier de plusieurs ordres de grandeur d'une transition à l'autre [13].

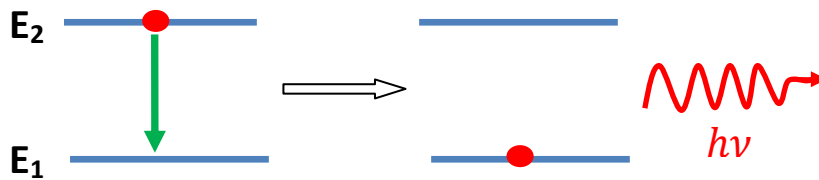


Figure I. 2: Représentation du modèle d'Einstein pour émission spontanée

L'intensité d'un faisceau de lumière est proportionnelle au flux de photons Φ , c'est-à-dire au nombre de photons incidents par unité de surface et de temps (unité : $s^{-1}m^{-2}$). Le flux de photons relié au champ électrique E_0 est défini par: $\Phi = \frac{1}{2} \frac{n_{op} c \epsilon_0 E_0^2}{\hbar \omega}$ [14], où c , ϵ_0 et n_{op} sont respectivement la vitesse de la lumière, la constante diélectrique et indice de réfraction du milieu considéré. Les $A_{21}N_2$ photons émis par unité de temps et de volume correspondent donc à une variation de flux $d\Phi$ donnée par :

$$d\Phi_{sp} = A_{21}N_2 c dt \quad (\text{I.4})$$

I.3.1.2. Absorption

Dans le processus d'absorption, un atome du niveau 1 atteint le niveau 2 en absorbant un photon d'énergie $h\nu$, donc le niveau 2 se peuple (voir figure.I.3.). L'absorption est un processus induit par le champ électromagnétique et la probabilité de transition par atome et par unité de temps est

Chapitre I : Rappel sur les lasers à semiconducteurs

proportionnelle au flux de photons. On l'écrit sous la forme $\sigma_{12}\Phi$ (en s^{-1}). Compte tenu de la dimension de Φ , le coefficient de proportionnalité σ_{12} possède la dimension d'une surface et porte le nom de la section efficace d'absorption, c'est une grandeur caractéristique du milieu atomique [13], sa valeur est déterminée dans le cadre de la description quantique du couplage entre le champ et le milieu atomique. Le nombre d'atomes du niveau 2 varie d'une quantité dN_{2abs} pendant l'intervalle de temps dt suivant la loi :

$$dN_2 = \sigma_{12}\Phi N_1 dt \quad (I.5)$$

Dans le même temps, la population du niveau 1 diminue d'une quantité dN_1 selon la loi :

$$dN_1 = -\sigma_{12}\Phi N_1 c dt \quad (I.6)$$

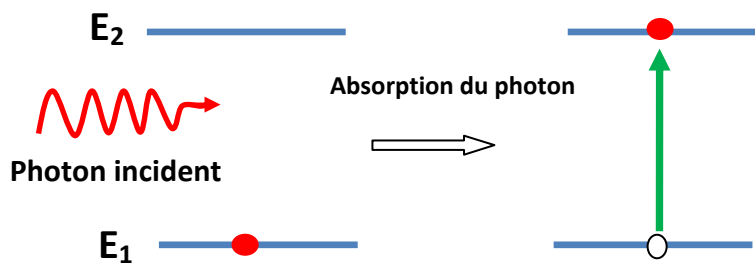


Figure I. 3: Représentation du modèle d'Einstein pour l'absorption.

Le nombre de photons absorbés est :

$$d\Phi = \sigma_{12}\Phi N_1 c dt \quad (I.7)$$

I.3.1.3. Emission induite

Le processus d'émission induite (ou émission stimulée) est la base du fonctionnement des lasers. Lors de l'émission induite, un photon d'énergie $h\nu$ induit la désexcitation d'un électron du niveau haut vers le niveau bas. Celle-ci s'accompagne de l'émission d'un photon de caractéristiques identiques à celles du photon inducteur c'est-à-dire même fréquence, même direction de propagation et même état de polarisation. Le faisceau incident de lumière crée des photons identiques et il y a amplification de la lumière. Le bilan de ces processus pour les populations est le suivant :

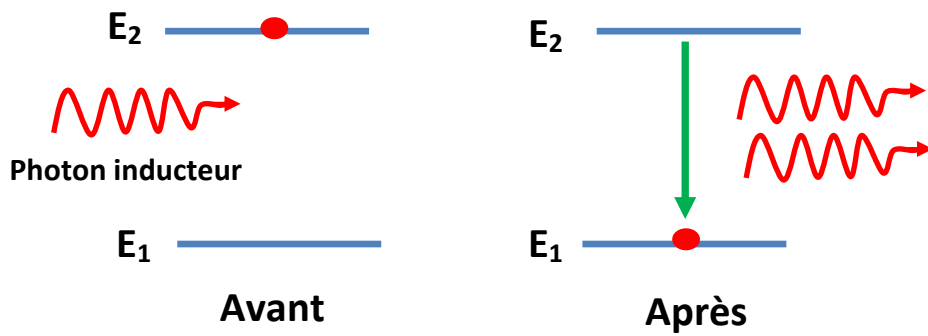


Figure I.4: Représentation du mécanisme d'émission stimulée (induite)

$$dN_2 = -\sigma_{21}\Phi N_2 dt \quad (\text{I.8})$$

Dans le même temps, la population du niveau 1 diminue :

$$dN_1 = +\sigma_{21}\Phi N_2 dt \quad (\text{I.9})$$

Le nombre de photons obtenu est :

$$d\mathcal{S}_{ind} = \sigma_{21}\Phi N_2 c dt \quad (\text{I.10})$$

Avec $\sigma_{21}\Phi$ est la probabilité (ou taux) d'émission stimulée et σ_{21} représente la section efficace d'émission stimulée. L'émission induite est un processus similaire à l'émission spontanée.

I.3.2. La différence de population

Si la différence de population ΔN entre le niveau supérieur et le niveau inférieur est positive ($\Delta N > 0$) on dit que le milieu est amplificateur. Dans le cas contraire où ($\Delta N < 0$) est négatif on dit que le milieu est absorbant.

I.3.2.1 Inversion de population

L'inversion de population se produit lorsqu'un système (à trois niveaux d'énergie minimum) se trouve dans un état dans lequel la majorité des électrons sont dans un état excité plutôt que dans leur état fondamental. Le phénomène d'inversion de population est une étape nécessaire dans le fonctionnement d'un laser. Dans ce cas, Il faut donc créer une situation hors équilibre en apportant

de l'énergie au système des atomes via un pompage dont l'objectif est d'amener suffisamment d'atomes dans le niveau haut.

I.3.3. Pompage

La technique du « pompage optique » a été élaborée en 1950, par Kastler Alfred lauréat du prix Nobel de physique en 1966. Cette technique permet de modifier les états des atomes à l'aide d'une irradiation lumineuse polarisée.

I.3.4. Cavité stable

La cavité laser stable est un dispositif très important pour le fonctionnement d'un oscillateur laser, généralement obtenu par un jeu de deux miroirs parallèles M_1 et M_2 séparés par une distance L . L'un de rayon de courbure R_1 est totalement réfléchissant et l'autre de rayon de courbure R_2 presque totalement réfléchissant pour laisser sortir le faisceau laser, ce qu'on appelle une cavité ou encore un résonateur. Le résonateur permet à la lumière amplifiée d'effectuer des allers et retours successives dans le système atomique afin d'obtenir une amplification suffisante. La cavité est dite stable, si la condition suivante est vérifiée [15] :

$$0 \leq \left(1 - \frac{L}{R_1}\right) \left(1 - \frac{L}{R_2}\right) \leq 1 \quad (\text{I.11})$$

En introduisant les paramètres géométriques de la cavité :

$$g_1 = \left(1 - \frac{L}{R_1}\right) \quad \text{et} \quad g_2 = \left(1 - \frac{L}{R_2}\right) \quad (\text{I.12})$$

On obtient :

$$0 \leq g_1 g_2 \leq 1 \quad (\text{I.13})$$

Une cavité laser vérifiant la condition (I.11) est donc capable de confiner les faisceaux lasers. La représentation graphique de la stabilité d'une cavité est illustrée dans la figure suivante :

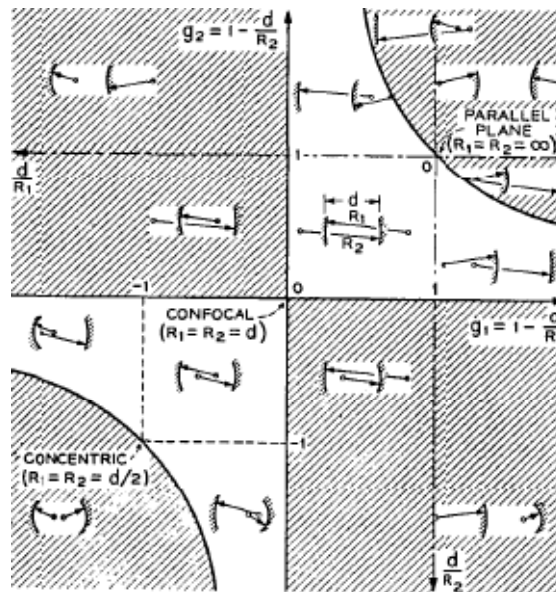


Figure I.5: Diagramme de stabilité. Les cavités stables se trouvent dans les régions non hachurées [16].

I.3.4.1. Différentes cavités à deux miroirs

Avec deux miroirs sphériques de rayons de courbure R_1 et R_2 , de nombreuses configurations de cavités peuvent être réalisées :

*/ **plane** : formée de 2 miroirs plans, tous les rayons parallèles feront plusieurs allers- retours sans s'échapper d'en haut à la cavité, avec une réflexion des rayons quelconques (angle d'incidence est égale l'angle de réflexion) et la perte du rayonnement par la cavité sera rapide. Dans ce genre de cavité, il peut également y avoir des pertes par diffraction.

*/ **concentrique** : Si les deux miroirs ont le même centre ($R_1 + R_2 = L$).

*/ **hémisphérique** : En remplaçant un des deux miroirs par un miroir plan placé au centre de l'autre, on obtient une cavité hémisphérique

*/ **confocale** : Les deux miroirs sont identiques et dont les rayons de courbure coïncident avec la longueur de la cavité ($R_1 = R_2 = L$). Ce type de cavité permet de produire des faisceaux les plus fins possibles.

Chapitre I : Rappel sur les lasers à semiconducteurs

*/ **concave-convexe** : Constituée par deux miroirs sphériques, l'un concave et l'autre convexe. Cela permet de ne pas trop focaliser le faisceau, ce qui est parfois important dans des lasers de grande puissance pour ne pas détruire le milieu amplificateur.

I.4. Les semi-conducteurs

Souvent on définit un semi-conducteur par sa résistivité dont elle est comprise entre celle d'un isolant et celle d'un conducteur (10^{-3} à 10^4) Ωm [17]. Energétiquement on définit un semiconducteur par une faible valeur de la bande interdite E_g [18].

Les matériaux semiconducteurs jouent un rôle important dans la technologie de l'optoélectronique [19]. On distingue plusieurs types de matériaux semiconducteurs usuelles : simples (Si, Ge,...), binaires (GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP, InSb,...), ternaires ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}_y\text{P}_{1-y}$) et quaternaires ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$), voir tableau (I.1) [20,21].

Eléments de la Colonne		Semiconducteurs
IV		Ge, Si
III-V	binaire	GaAs, GaP, GaSb, InAs, InP, InSb
	ternaire	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaAs}_y\text{P}_{1-y}$
	quaternaire	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$
II-VI	binaire	CdS, HgTe, CdTe, ZnTe, ZnS
	ternaire	$\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$

Tableau I.1: Classification des semiconducteurs

I.4.1. Semi-conducteur intrinsèque

Lorsque le matériau semiconducteur ne présente aucun défauts chimique (impuretés) et physique (imperfection structurale), on dit que le semi-conducteur est intrinsèque. Dans ce cas la bande interdite est dépourvue de la présence d'états d'énergie permis et la transition possible est la transition inter bandes. En conclusion les électrons de conduction (électrons dans la bande de conduction) viennent tous de la bande de valence et on a autant d'électrons de conduction (n) que de trous libres dans la bande de valence (p), c'est-à-dire $n = p = n_i$. Dans ce type de cas la conduction totale est nulle et le matériau est considéré électriquement comme un isolant. Pour qu'on puisse utiliser le matériau semiconducteur dans le transport de charges on doit briser l'égalité des porteurs de charges c'est-à-dire on cherche à avoir une conduction unipolaire ($n \neq p$). La procédure usuelle est de procéder au dopage par des atomes de valences différentes. Si les niveaux introduits sont proche du bas de la bande de conduction on parle d'un semiconducteur de type n et dans le cas contraire on parle de semiconducteur de type p . Dans le cas d'un semiconducteur de type n , à température ambiante on a une concentration en électrons supérieure à celle des trous et la conduction est gouvernée par les électrons. La densité électronique n est liée à la concentration du taux de dopage N_D . A la température ambiante on peut écrire :

$$n_{n0} = N_D \quad (\text{I.14})$$

Et en utilisant la loi de masse, on déduit la concentration des porteurs minoritaires (trous dans la bande de valence) :

$$p_{n0} = \frac{n_i^2}{N_D} \quad (\text{I.15})$$

Dans le contraire on a :

$$p_{p0} = N_A \quad (\text{I.16})$$

et
$$n_{p0} = \frac{n_i^2}{n_{p0}} \quad (I.17)$$

La mise en contact d'un semiconducteur de type n et d'un semiconducteur de type p crée une zone entre les deux matériaux dépourvue de charges libres appelée zone de charges d'espace ou zone de déplétion. Cette zone empêche les porteurs de charges de transiter facilement d'une zone vers une autre par suite de l'établissement d'une barrière de potentielle.

I.5. Puits quantiques

I.5.1 Définition

Un puits quantique (PQ) est une structure formée par deux semi-conducteurs A et B à gap différents (voir figure (I.6)).

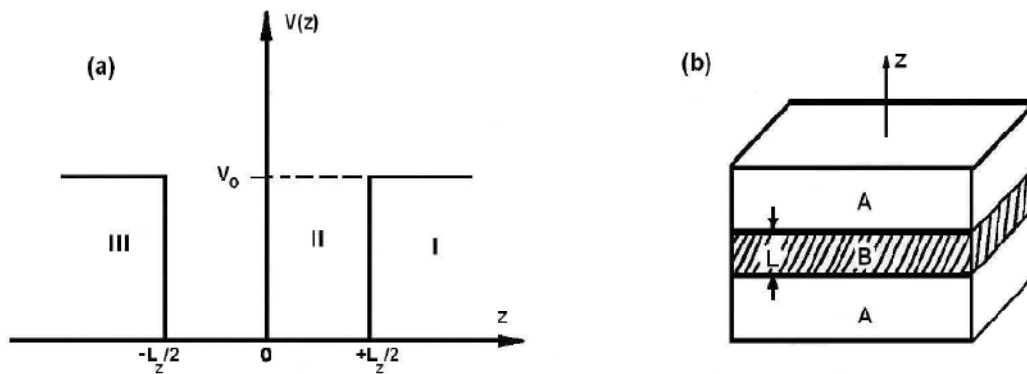


Figure I. 6: Représentation d'une structure à puits quantique : a) profil du potentiel, b) représentation structurelle à trois dimensions.

La Différence de gaps d'énergie entre les deux matériaux crée une barrière de potentiel V_0 qui confine les porteurs de charges (les électrons) dans le puits quantique. Selon la nature de la discontinuité de bandes interdites à l'interface puits-barrière, on distingue deux types de puits quantiques :

1) puits quantique de type-I, où les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon émis dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du puits du matériau.

2) puits quantiques de type-II, où les électrons et les trous sont confinés séparément dans les deux puits des deux matériaux et la barrière respectivement.

I.6. Les superréseaux

Le premier superréseau a été réalisé par Esaki et Tsu et consistait en un empilement périodique des couches très fines des matériaux (A, B) suivant l'axe de croissance des gaps différents.

GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ce type de super réseau est le plus utilisé [22].

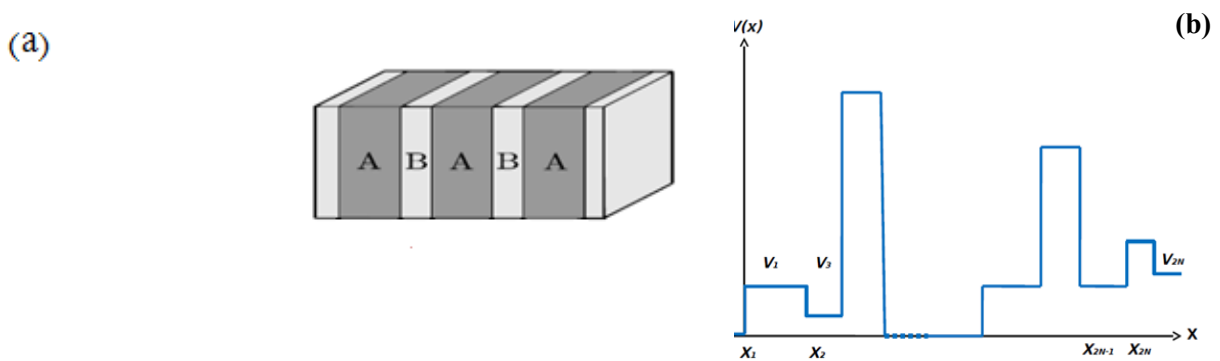


Figure I. 7: Représentation schématique d'un super-réseau sans champ électrique extérieure, a) représentation à 3D, b) profil de potentiel $V(x)$.

I.7. Hétérostructure

Une hétérostructure constituée d'une couche parallèle de semiconducteur A d'épaisseur L_1 en sandwich entre deux couches d'un semiconducteur B d'épaisseur L_2 [23], il faut en effet que A et B aient le même type de réseau cristallin et le même ordre de dimension de cellule élémentaire comme le couple GaAs/AlAs [24]. Il existe deux types d'hétérostructures dans les semiconducteurs[25].

- type I : les électrons et les trous sont piégés dans le même semi-conducteur, il est à gap direct

-type II : les électrons et les trous sont confinés dans deux matériaux semiconducteurs adjacents, il est à gap indirect.

I.8. Principe de l'amplification intersousbande

Les transitions intersousbandes dans les hétérostructures sont la base des lasers dits intersousbandes ou unipolaires car leur fonctionnement repose sur l'émission radiative des électrons entre niveaux confinés dans la bande de conduction ou de valence de structures à puits quantiques. Les transitions intersousbandes sont aujourd'hui les candidats les plus sérieux pour le développement de composants optoélectroniques unipolaires.

I.8.1. La transition intersousbande

Considérons les états quantiques ($n = i, i = 1, 2, 3 \dots$) dans un puits quantique décrits, dans l'approximation de la fonction enveloppe par l'équation (I.18).

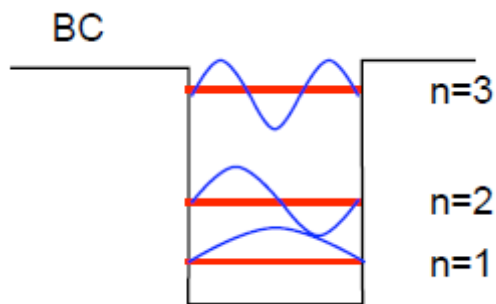


Figure I. 8: Représentation des fonctions d'ondes et les niveaux d'énergie dans la bande de conduction d'un seul puits quantique.

$$\Psi_n(z) = f_n(z) u_n(z) \quad (I.18)$$

où $f_n(z)$ est la fonction enveloppe et $u_n(z)$ est la fonction de Bloch de la bande de conduction qui assure la périodicité des fonctions d'ondes de chaque état quantique, et z est la direction de croissance de la structure à puits quantique. La transition intersousbande entre les niveaux énergétiques de puits obéit à la loi des probabilités.

I.8.2. Probabilité de transition entre deux niveaux énergétiques

Nous considérons une onde électromagnétique plane polarisée linéairement avec un champ électrique $E(r, t) = E_0 \varepsilon \exp i(\omega t - kr)$, où ε sa polarisation, ω est la pulsation et k est un vecteur de propagation, dans un matériau semi-conducteur d'indice de réfraction n , nous avons $k = n\omega/c$. Le potentiel vecteur A associé à cette onde électromagnétique incidente est donné par la relation $E = -\frac{\partial A}{\partial t}$. Ainsi, l'hamiltonien d'interaction électron-photon dans la mécanique quantique est donné par [26] :

$$H = \frac{(p - qA)^2}{2m^*} \quad (\text{I.19})$$

où q la charge élémentaire d'un électron et m^* est la masse effective dans un matériau à puits quantique. On utilise la relation $\nabla A = 0$ (la jauge de Coulomb), et encore on considère que le champ électromagnétique de faible intensité ($A^2 = 0$), après quelques approximations on obtient :

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \frac{eAp}{m^*} \quad (\text{I.20})$$

Second terme représente une perturbation dépendant de temps et porte le nom d'hamiltonien p , qui peut se mettre sous la forme suivante :

$$\frac{eAp}{m^*} = V(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t}) \quad (\text{I.21})$$

Avec :

$$V = \frac{ieE_0}{2\omega m^*} \quad (\text{I.22})$$

Sous l'effet (l'action) de cette perturbation, la probabilité de transition par unité du temps entre l'état initial i d'énergie E_i et l'état final f d'énergie E_f des électrons de matériau est donnée par la règle d'or de Fermi, comme suit [27] :

$$w_{if}(\hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f|V|i\rangle|^2 \delta(\hbar\omega_{fi} \pm \hbar\omega) \quad (\text{I.23})$$

où δ est la fonction de Dirac.

En utilisant l'élément de matrice de quantité de mouvement, nous avons :

$$w_{if}(\hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 E_0^2}{4m^{*2}\omega^2} |\varepsilon p|^2 \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega) \quad (\text{I.24})$$

Le terme $-\hbar\omega$ est associé à l'absorption d'un photon incident $E_f = E_i + \hbar\omega$, tandis que le terme $+\hbar\omega$ est associé à l'émission stimulée d'un photon $E_f = E_i - \hbar\omega$.

I.8.3. Taux d'émission spontanée

Le taux d'émission spontanée est donné par l'équation suivante [28] :

$$W_{ij}^{spo} = \frac{e^2 n^2 \omega^3}{3\pi c^3 \hbar \varepsilon_0} |z_{ij}|^2 = \frac{e^2 n^2 \omega^2}{6\pi m_0 c^3 \hbar \varepsilon_0} f_{ij} \quad (\text{I.25})$$

La relation entre le dipôle de la matrice z_{ij} et la force d'oscillateur f_{ij} défini par [29-31] :

$$f_{ij} = \frac{2m_0(E_j - E_i)|z_{ij}|^2}{\hbar^2} \quad (\text{I.26})$$

où n est l'indice de réfraction du milieu, f_{ij} est la force d'oscillateur.

Puisque le mécanisme dominant de diffusion non-radiative dans nos dispositifs est l'émission de phonons LO, nous considérons uniquement ce mécanisme de diffusion dans nos calculs.

I.9. Laser à cascade quantique

I.9.1. Principe de fonctionnement

Les lasers à cascade quantique LCQs, qui sont des lasers intersoubandes, sont conceptuellement différents des lasers classiques à semi-conducteur qui sont des lasers interbandes. En effet un seul type de porteur (le plus souvent des électrons) est en jeu pour assurer la transition radiative, qui a lieu entre deux soubandes d'un système de puits quantiques couplés. On dit alors que toutes les transitions se passent dans la bande de conduction.

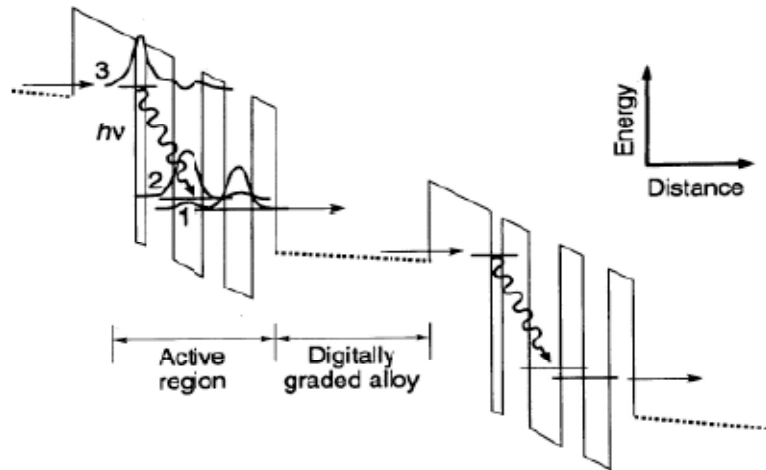


Figure I. 9: Principe de la première proposition d'amplification de la lumière dans intersousband [2].

Donc les lasers à cascade quantique sont des dispositifs unipolaires basés à multi-puits quantique où les transitions laser se produisent entre les niveaux d'énergie quantifiés dans la bande de conduction d'un puits quantique (PQ) donné, c'est-à-dire via des transitions entre sous-bandes. L'application d'un champ électrique extérieur suivant la direction de l'axe de croissance, déforme le potentiel de puits d'une façon linéaire et modifier, en conséquence les fonctions d'onde et les énergies de confinement électroniques des puits quantiques. Cette déformation de potentiel modifié fortement le temps de relaxation des transitions intersousbandes. Dans la figure I. 9, nous montrons la partie du profil d'énergie de la bande de conduction. La structure de LQC est composée par trions composant sont :

Le milieu actif de LCQ est de structure périodique de telle sorte que chaque période contienne deux régions: la région active et la région d'injection.

La région active : est la zone responsable d'émission laser (émission stimulée) entre les niveaux énergétiques de confinement électroniques. Dans notre cas, les transitions laser se produisent entre le niveau haut E_3 et le niveau bas E_2 , et elles satisfont la condition de l'inversion de population.

Chapitre I : Rappel sur les lasers à semiconducteurs

L'injecteur : son rôle est d'injecter rapidement les électrons dans la région active, ce processus s'effectue à l'aide d'effet tunnel c'est-à-dire il permet d'amener les porteurs (les électrons) de niveau 1 dans le haut niveau de la région active suivante. L'injecteur est formé d'un super-réseau ou multi puits quantiques couplés. Lorsqu'on applique un champ électrique, le premier niveau de l'injecteur et le troisième niveau de la région active se rapproche.

La transition stimulée (laser) s'effectue dans chaque puits quantique d'une période (super-réseau), où chaque période est formée par p puits quantiques, ce mécanisme est répété pour émettre $(p \times q)$ des photons stimulés, où q est le nombre de périodes (q jusqu'à 200 périodes dans certaines structures QCL). Le nombre de QW dans chaque période est fixé de manière à pouvoir obtenir une puissance suffisante de l'émission laser, et compte tenu de l'effet tunnel entre les niveaux d'énergie E_1 et les niveaux d'énergie E_3 de la suite de chaque puits quantique d'une période donnée qui est une condition stricte pour créer une inversion de population d'électrons suffisante et nécessaire pour l'émission stimulée.

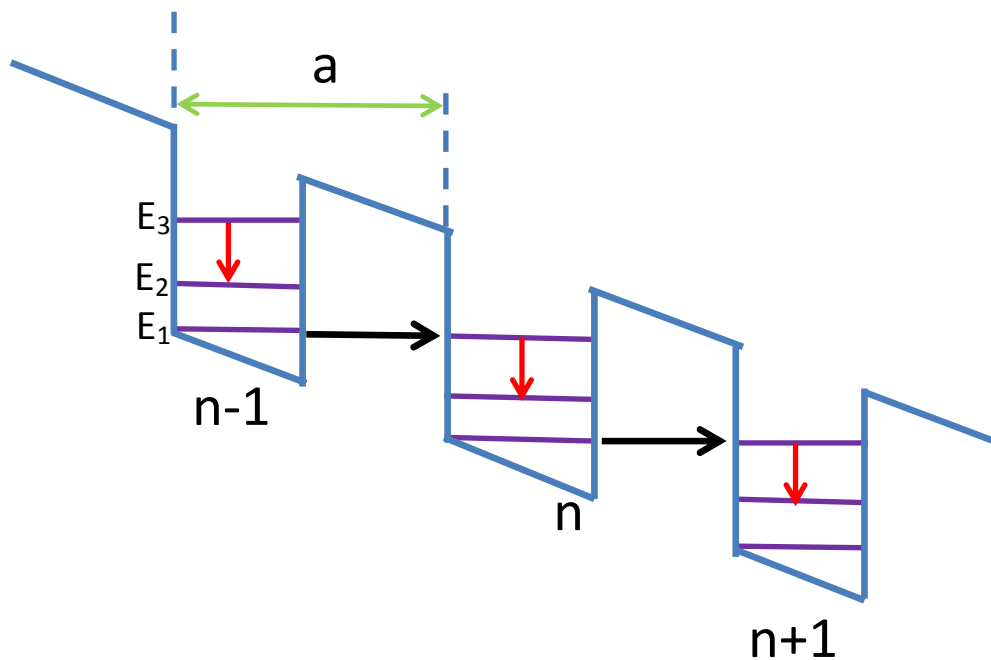


Figure I. 10: Modèle de laser à trois niveaux pour le laser à cascade quantique.

I.9.2. Les propriétés de base

Les lasers à cascade quantique (LCQ) sont des dispositifs unipolaires basés sur des transitions tunnel et intrasousbandes. Ils ont été proposés par R.F. Kazarinov et R.A. Suris en 1971 [1] et il a été la première réalisation par J. Faist, en 1994 [2]. La modélisation et l'optimisation des QCL dépendent principalement de la capacité de contrôler le dopage et de la densité de courant. R.F. Kazarinov et R. A. Suris ont proposées un modèle pour calculer la densité de courant en fonction de la densité de concentration et les taux de transitions intrasousbandes comme suit.

$$J = qN_s \frac{4|\Omega|^2\tau_{\perp}}{1+\Delta^2\tau_{\perp}^2+4|\Omega|^2\tau_3\tau_{\perp}} \quad (\text{I.27})$$

$2\hbar\Omega$ est l'énergie de division à la résonance entre l'état fondamental de l'injecteur g et l'état $n = 3$, $\hbar\Delta$ est la différence d'énergie $E_g - E_3$ à la résonance, τ_{\perp} est le temps de relaxation pour l'électron dans le plan des couches qu'est responsable à la perte de phase entre les états g et $n = 3$ à la résonance et dépend essentiellement de la rugosité des interfaces, τ_3 est la durée de vie de l'électron dans le niveau 3, qu'est déterminée à basse température par l'émission spontanée de phonons optiques et diminue avec l'augmentation de la température. Lorsque les deux niveaux d'énergie sont en résonance, c'est-à-dire quand Δ est égal à zéro, l'équation précédente elle donne le courant maximum :

$$J_{max} = qN_s \frac{2|\Omega|^2\tau_{\perp}}{1+4|\Omega|^2\tau_3\tau_{\perp}} \quad (\text{I.28})$$

Le couplage entre les niveaux g et 3 peut être décrit par deux régimes selon la grandeur $4|\Omega|^2\tau_3\tau_{\perp}$: un couplage fort et un couplage faible, où le couplage fort se produit lorsque $4|\Omega|^2\tau_3\tau_{\perp} \gg 1$. Dans ce régime, le courant total est contrôlé par le temps de diffusion intrasousbandes τ_3 et écrit par $J_{max} = \frac{qN_s}{2\tau_3}$. Le couplage est faible lorsque $4|\Omega|^2\tau_3\tau_{\perp} \ll 1$ et le courant maximum devient $J_{max} = 2qN_s|\Omega|^2\tau_{\perp}$ [3].

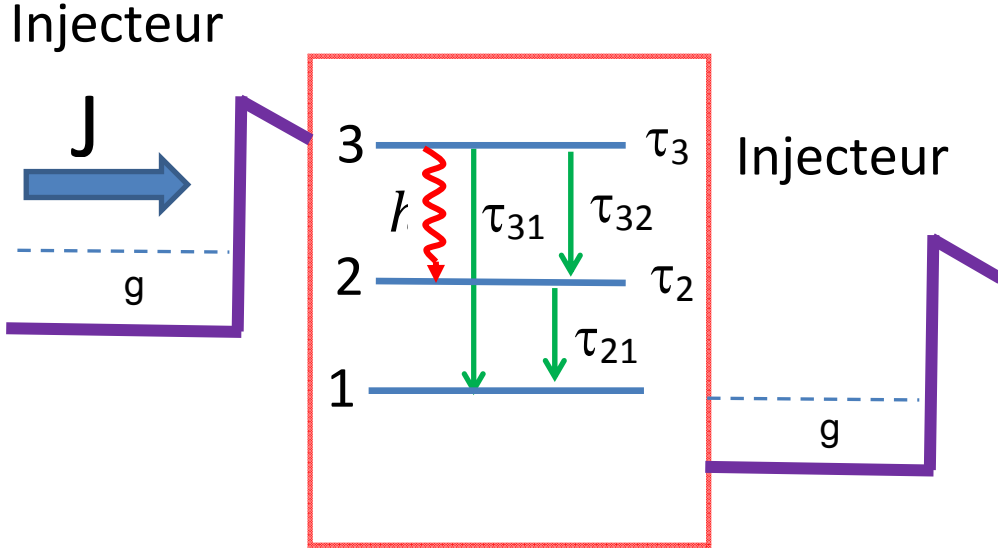


Figure I. 11: Structure d'un laser à cascade quantique indique les régions active et d'injection

I.9.3. Interaction électron-phonon LO

Le taux de diffusion d'un état initial i vers un état final f dû à l'émission de phonons longitudinaux optique à $T = 0K$ s'écrit [32] :

$$\frac{1}{\tau_i} = \frac{m^* e^2 \omega_{LO}}{2 \hbar^2 \epsilon_P} \sum_f \int_0^{2\pi} d\theta \frac{I^{if}(Q)}{Q} \quad (I.29)$$

$$Q = (k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos\theta)^{1/2} \quad (I.30)$$

$$k_f^2 = (k_i^2 + \frac{2m^*}{\hbar^2} (\epsilon_i - \epsilon_f - \hbar\omega_{LO})) \quad (I.31)$$

avec
$$\epsilon_P^{-1} = \epsilon_\infty^{-1} + \epsilon_0^{-1} \quad (I.32)$$

où ϵ_∞ et ϵ_P sont respectivement la permittivité relative de haute fréquence et statique de l'hétérostructure. $I^{if}(Q)$ est définie par :

$$I^{if}(Q) = \int dz \int dz' \chi_i(z) \chi_f(z) e^{-Q|z-z'|} \chi_i(z') \chi_f(z') \quad (I.33)$$

Tous les résultats étant calculés à une température $T \neq 0K$, nous devons multiplier l'équation (I.33) par :

$$n_{LO} = \left(e^{\frac{\hbar\omega_{LO}}{k_B T}} - 1 \right)^{-1} \quad (\text{I.34})$$

Nous venons de décrire explicitement le calcul du taux de diffusion dû à l'émission d'un phonon LO, ce mécanisme n'est possible que si la séparation entre les sous-bandes soit supérieure ou égale à l'énergie d'un phonon LO ($\hbar\omega_{LO}$).

I.9.4. Le facteur de forme

Nous introduisons un facteur de forme qui tient compte des écarts du cas idéal. Pour une largeur de puits quantique finie le potentiel de Coulomb devient [33].

$$V_q = f_q \frac{e^2}{2\epsilon_b A q} \quad (\text{I.35})$$

où le facteur de forme est :

$$f_q = \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' |u_n(z)|^2 |u_n(z')|^2 e^{-q|z-z'|} \quad (\text{I.36})$$

Pour obtenir une expression analytique pour les intégrales nous rapprochons les fonctions d'enveloppe avec ceux d'une profondeur infinie et de la largeur L .

$$u_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi z}{L}\right) \quad (\text{I.37})$$

Puis, le facteur de forme devient :

$$f_q = \frac{2}{L^2} \int_0^L dz \sin^2\left(\frac{n\pi z}{L}\right) F(z) \quad (\text{I.38})$$

où $F(z)$ implique l'intégrale par rapport de z'

$$F(z) = e^{-qz} \int_0^z dz' \sin^2\left(\frac{n\pi z'}{L}\right) e^{qz'} + e^{qz} \int_z^L dz' \sin^2\left(\frac{n\pi z'}{L}\right) e^{-qz'} \quad (\text{I.39})$$

Effectuer l'intégration de (1.39) qu'elle donne:

$$F(z) = \frac{1}{2q} - \frac{q}{q^2 + \left(\frac{2n\pi}{L}\right)^2} \cos\left(\frac{2n\pi z}{L}\right) - \frac{q}{2} \left(\frac{1}{q^2} - \frac{1}{q^2 + \left(\frac{2n\pi}{L}\right)^2} \right) (e^{-qz} + e^{-q|L-z|z}) \quad (\text{I.40})$$

$$f_q = \frac{2}{L} \left[\frac{1}{q} + \frac{1}{2} \frac{q}{q^2 + \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} + (e^{-qL} - 1) \frac{1}{L} - \frac{q}{2} \left(\frac{1}{q} - \frac{q}{q^2 + \left(\frac{2\pi}{L}\right)^2} \right)^2 \right] \quad (\text{I.41})$$

Cette dernière relation permet de calculer le temps de transition entre les niveaux d'énergies pour un puits infini.

I.9.5. Élément de matrice Z_{ij}

Dans le cas d'un potentiel infini (puits infini) et de largeur a , la résolution de l'équation de Schrödinger fournit des solutions analytiques pour les fonctions $\varphi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}z\right)$ et pour leur énergie $E_n(z) = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m}$. Par conséquent les éléments de matrice $\langle i|z|j \rangle$ pour un puits infini sont donnés par les intégrales [34]:

$$\langle i|z|j \rangle = \frac{2}{a} \int_0^a z \sin i \frac{\pi}{a} z \cdot \sin j \frac{\pi}{a} z dz \quad (\text{I.42})$$

Après l'intégration on obtient :

$$\langle i|z|j \rangle = \frac{a}{\pi^2} \left[\frac{1}{(j-i)^2} - \frac{1}{(j+i)^2} \right] (\cos(i-j)\pi - 1) \quad (\text{I.43})$$

Donc :

$$\langle i|z|j \rangle^2 = \frac{2^6 a^2}{\pi^4} \frac{(ij)^2}{(j^2 - i^2)^4} F(i-j) \quad (\text{I.44})$$

où $F(i-j)$ est la fonction qui vaut 0 si $i-j$ est paire et 1 si $i-j$ est impaire. La force d'oscillateur de la transition $i \rightarrow j$ est alors :

$$f_{ij} = \frac{2m}{\hbar^2} \left[(j^2 - i^2) \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} \right] \left[\frac{2^6 a^2}{\pi^4} \frac{(ij)^2}{(j^2 - i^2)^4} F(i-j) \right] \quad (\text{I.45})$$

$$f_{ij} = \frac{2^6}{\pi^4} \frac{(ij)^2}{(j^2 - i^2)^3} F(i-j) \quad (\text{I.46})$$

On constate que les forces d'oscillateur sont concentrées dans les transitions entre les niveaux quantifiés de plus basse énergie. Ainsi, les forces d'oscillateur f_{1j} à partir du niveau fondamental $|1\rangle$ décroissent et pour les premières valeurs nous avons :

$$f_{21} = \frac{2^8}{\pi^2 3^3} = 0.960 \quad (\text{I.47})$$

$$f_{41} = \frac{2^{10}}{\pi^2 15^3} = 0.030 \quad (\text{I.48})$$

I.9.6. Les états électroniques dans un puits quantique

Le potentiel de confinement associé à la structure du puits quantique confine le mouvement des électrons dans la direction perpendiculaire du plan de couches (appelons cette direction z), tandis que le mouvement dans le plan reste libre. L'énergie et les fonctions d'onde correspondant au mouvement suivant la direction z sont données par la résolution de l'équation de Schrödinger à une dimension.

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \varphi(z) + V(z)\varphi(z) = E_n \varphi(z) \quad (\text{I.49})$$

E_n est l'énergie de confinement créée par le potentiel $V(z)$.

Prenons un potentiel carré pour modéliser un puits de la largeur L et de profondeur V_0

$$V(z) = \left\{ \begin{array}{l} 0 \rightarrow \text{for } -L/2 \leq z \leq L/2 \\ V_0 \rightarrow \text{for } z > L/2. \text{ or } z < -L/2 \end{array} \right\} \quad (\text{I.50})$$

L'énergie totale des électrons dans le plan x - y est :

$$E_{n,k_{\perp}} = E_n + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*} \quad (\text{I.51})$$

k_{\perp} est le vecteur d'onde à deux dimensions (k_x, k_y).

I.9.7. Les pertes d'absorption par les porteurs libres

Le guide d'onde en laser à cascade quantique LCQ par principe ne diffère pas de celle des lasers à diodes. Le confinement optique le long de la direction de croissance en LCQ est obtenu à l'aide de guide d'onde diélectrique planaire classiques fondées sur l'indice de réfraction contraste entre guide d'ondes (une base région active du laser) avec un indice de réfraction élevé, entouré par les couches de bardage de guides d'onde à faible indice de réfraction (Figure I.6). En supposant que la

direction de croissance se trouve suivant l'axe z et que nous avons une onde libre propagation pour les modes guidés le long x , le vecteur de champ électrique réside dans le plan yz perpendiculaire à la couches épit axiales et dirigé le long de l'axe Z (mode TM) ou le long de l'axe y (mode TE). L'indice de réfraction de guide des modes est $n_{eff} = n + ik$, où n est la partie réelle et k la partie imaginaire de l'indice de réfraction. Les pertes ou coefficient d'absorption correspond à guide est $\alpha_w = \frac{4\pi k}{\lambda}$, qui proviennent principalement de pertes par les porteurs libres dans les couches d'absorption.

I.9.8. Les pertes par les miroirs

Le confinement longitudinal en résonateur de Fabry-Pérot du laser à semiconducteur est prévu par les facettes de milieu actif clivé, qui sont agit comme deux miroirs, la réflectivité de miroirs est fournie par la différence des indices de réfraction entre l'air et les semi-conducteurs.

$$R = \frac{(n_1 - n_2)^2}{(n_1 + n_2)^2} \quad (I.52)$$

où R est le coefficient de réflectivité et n_1 et n_2 sont les indices de réfraction de l'air et semi-conducteur. les pertes α_m concernant les miroirs R_1 et R_2 peuvent être exprimés par :

$$\alpha_m = -\frac{1}{2L_w} \ln(R_1 R_2) \quad (I.53)$$

où L_w est la longueur de la cavité laser.

En supposant que $R_1 = R_2 = R$, l'expression précédente peut être réécrite :

$$\alpha_m = -\frac{1}{2L_w} \ln(R) = \frac{1}{L_w} \ln\left(\frac{1}{R}\right) \quad (I.54)$$

Les pertes totales α_{tot} de laser peuvent être obtenues en tant que la somme des pertes de guides d'ondes α_w et les pertes miroirs α_m tel que $\alpha_{tot} = \alpha_w + \alpha_m$.

Comme l'émission de LCQ provient des transitions intersousbandes, selon des règles de sélection intersousbands, les rayonnements laser sont polarisés perpendiculairement aux couches, et donc

couplées qu'à des modes TM. L'intensité de mode ne dépend que de la coordonnée z est proportionnelle à $|E(z)|^2$, dans les LCQs représente seulement une fraction de la intensité globale de mode de cavité est couplée avec la région active. Cette quantité est appelé facteur de confinement, ce facteur est déterminé par la densité de la puissance de laser en mode intégré sur plusieurs régions actives et normalisées par rapport à l'intensité totale de ce mode. Il a été montré, que le confinement maximal est obtenu pour les modes fondamentaux TE et TM [35]. La condition de seuil pour l'oscillation laser est déterminée à partir de gain modale G par :

$$G = g\Gamma J_{th} = \alpha_{tot} \quad (I.55)$$

où Γ est le facteur de confinement, J_{th} est la densité de courant de seuil, et g est le coefficient de gain. Alors, la densité de courant de seuil peut être écrite par :

$$J_{th} = \frac{\alpha_{tot} - \alpha_w}{g\Gamma} - \frac{1}{g\Gamma L_w} \ln(R) \quad (I.56)$$

I.10. Structure de puits quantique

I.10.1 Structure de puits quantique sans champ électrique appliqué

On suppose une structure de puits quantique arbitraire multicouche comme représentée sur la figure (I.12) :

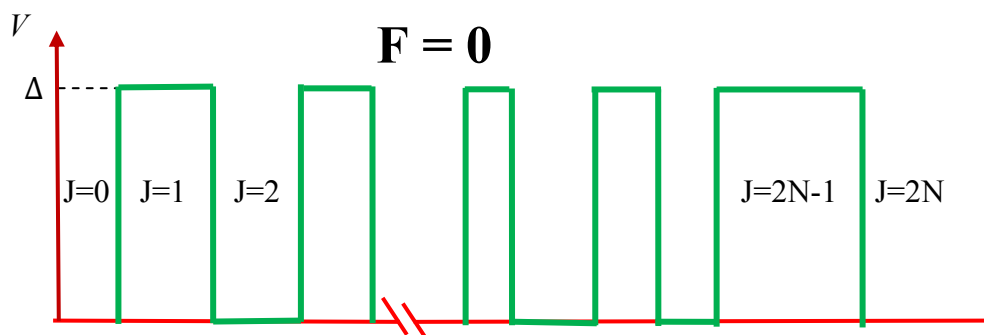


Figure I. 12 : Structure de puits quantique multicouches

L'équation de Schrödinger indépendante de temps pour chaque région carrée de puits quantique s'écrit sous la forme :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_j^*} \frac{\partial^2 \psi_j(x)}{\partial x_j^2} + V_j(x) \psi_j(x) = E \psi_j(x) \quad (I.57)$$

où \hbar est la constante de réduction de Planck, m_j^* est la masse efficace d'électrons dans la région j , x est la coordonnée (généralement prise le long de la direction de la croissance), ψ est la fonction d'onde, V_j est l'énergie potentielle dans la région j , et E représente l'énergie des électrons associé à la solution générale de l'équation (I.57) dans chaque région, qu'est une superposition des ondes progressives dans le sens gauche et le sens droit, et est donnée par :

$$\psi_j(x) = C_j e^{ik_j x} + D_j e^{-ik_j x} \quad (I.58)$$

Où k_j est le vecteur d'onde dans la région j , C_j et D_j sont des constantes complexes.

I.10.2. Structure de puits quantique sous le champ électrique appliqué

Pendant l'opération du laser à cascade quantique LCQ, il est nécessaire d'appliquer la polarisation externe aux extrémités de la structure. Sous un champ électrique externe, le potentiel de puits de quantum incline, comme illustré sur le schéma (I.13). La quantité de l'inclinaison dépend de l'intensité et de la direction du champ appliqué [36]. La polarisation change le potentiel dans la structure de puits quantique, et par conséquent, change le profil énergétique de la structure. Dans la section suivante, l'effet d'un champ électrique externe sur l'opération de multipuits quantique est analysé en résolvant l'équation de Schrödinger avec un potentiel linéaire en plus le potentiel de profondeur de puits quantique.

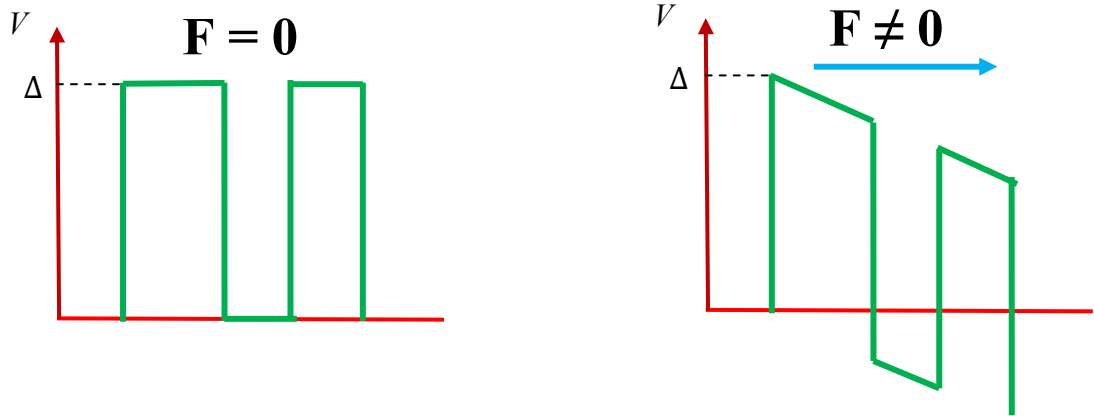


Figure I. 13 : Structure à multicouche de puits quantique sans polarisation et avec polarisation.

I.10.3. Temps de relaxation intersousbandes

L'inversion de population dans des lasers de cascade de quantum ne se fonde pas sur une propriété intrinsèque des matériaux mais est obtenue par une conception soignée de temps. Il est ainsi crucial de pouvoir évaluer les temps de dispersion entre les sous-bandes. Les transitions non radiatives inter sous bande sont induites par l'impureté dispersant, le phonon dispersant acoustique et optique, rugosité d'interface et dispersion d'électron-électron. Pour des sous-bandes espacées par plus que le $\hbar\omega_{LO}$ d'énergie optique de phonon longitudinal, le processus le plus efficace est la dispersion optique de phonon [37].

Nous avons tenu compte seulement dans ce processus, le temps de dispersion entre deux sous-bandes i et f est calculé pour l'émission et l'absorption des phonons de structure par l'approche de Ferreira et al [38]. À la température zéro, le taux τ^{-1} de dispersion est égal au taux d'émission spontanée des phonons, il est donné par :

$$\frac{1}{\tau_{em}} = \frac{\pi m^* e^2 \omega_{LO}}{\hbar \epsilon_p q_{if}} \int dz \int dz' \chi_i(z) \chi_f(z) e^{-q_{if}|z-z'|} \chi_i(z') \chi_f(z') \quad (I.59)$$

où $q_{if} = \sqrt{2m^*(E_i - E_f - \hbar\omega_{LO})/\hbar}$ est la norme de vecteur d'onde dans le plan et $\epsilon_p^{-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_s^{-1}$, ϵ_∞^{-1} et ϵ_s^{-1} sont les constantes diélectriques à haute fréquence et statiques, respectivement.

Pour simplifier l'évaluation numérique, nous avons négligé la contribution de la composante de

bande de valence de la fonction d'enveloppe. Cette formule conduit à des durées de vie d'ordre de quelques picosecondes, avec un minimum de $\approx 0.25ps$ lorsque l'espacement de sous-bande est en résonance avec $\hbar\omega_{LO}$.

A température différente de zéro, l'absorption et les processus d'émission stimulée sont aussi possibles et le taux de dispersion est donné par :

$$\tau_{if}^{-1} = (1 + n_q)\tau_{em}^{-1} + n_q\tau_{abs}^{-1} \quad (I.60)$$

où τ_{abs} est calculé de façon similaire à τ_{em} mais avec $q_{if} = \sqrt{2m^*(E_i - E_f + \hbar\omega_{LO})}/\hbar$ et n_q est égal à la population thermique de phonons optiques (facteur de Bose-Einstein):

$$n_q = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{kT}\right) - 1 \right]^{-1} \quad (I.61)$$

La diffusion des phonons LO durée de vie est très faiblement dépendante de la température. Dans le composant *AlGaAs* l'énergie de phonons optique longitudinal $\hbar\omega_{LO}$ est d'ordre de $35meV$.

I.10.4. Taux de relaxations d'émission thermoïonique et l'effet tunnel

La durée de vie d'émission thermoïonique est principalement déterminée par la hauteur de la barrière, où dans la barrière les porteurs des charges sont transits par effet tunnel. Schneider et Von Klitzing sont mis l'expression suivante pour la durée de vie d'émission thermoïonique dans un puits quantique [39].

$$\frac{1}{(\tau_E)_i} = \left(\frac{k_B T}{2\pi m_i L_w^2} \right)^{\frac{1}{2}} \exp - \left[\frac{H_i(F)}{k_B T} \right] \quad (I.62)$$

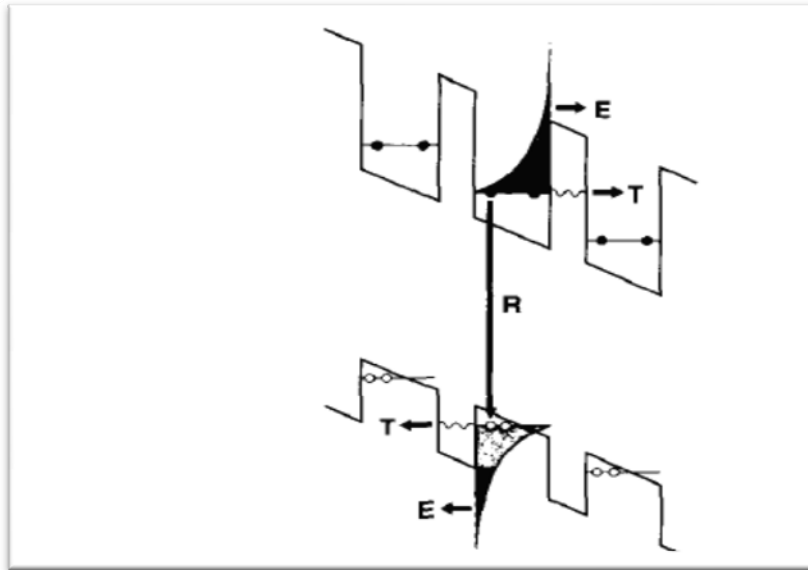


Figure I. 14 : Schéma de bande d'un puits quantique indique recombinaison R , tunnel T et émission thermique E [40]

Ici, nous avons ajouté un indice i ($i = e$ pour les électrons et $i = h$ pour les trous). m_i est la masse efficace dans le puits quantique, L_w est la largeur du puits, F est le champ électrique, et T est la température. Le paramètre $H_i(F)$ est dépend à la hauteur de la barrière, est simplement donné par :

$$H_i(F) = Q_i \Delta E_g - E_i^{(n)} - \frac{|e|FL_w}{2} \quad (I.63)$$

Dans cette relation $Q_i = Q_e, Q_h$ est le rapport de conduction à la bande de valence discontinuités, ($Q_e + Q_h = 1$). ΔE_g est la différence entre les bandes interdites des matériaux de barrière et de puits, et $E_i^{(n)}$ est l'énergie de sous-bande. Sachant que le taux d'émission d'électrons et des trous est très différent. Dans le système GaAs-AlGaAs où $Q_e = 0.65$, les trous peuvent être émis sensiblement plus vite que les électrons, en raison de la plus petite hauteur de la barrière.

Suite à l'analyse de Larsson et al. [40], le taux de transition par effet tunnel est donné par :

$$\frac{1}{(\tau_T)_i} = \frac{n\hbar\pi}{2L_w^2 m_i} \exp - \left[\frac{2L_b m_b \sqrt{2H'_i(F)}}{\hbar} \right] \quad (I.64)$$

où L_b est l'épaisseur de la barrière et m_b est la masse efficace dans la barrière. En première approximation, $H'_i(F)$ serait le même que $H_i(F)$, uniquement L_w est remplacé par $(L_w + L_b)$.

I.10.5. Définition du facteur de confinement

Le facteur de confinement ou de recouvrement Γ d'un guide est le rapport de l'intensité du mode contenue dans la zone active à l'intensité du mode dans toute la structure et défini comme suit :

$$\Gamma = \frac{\int_0^d |E(x)|^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} |E(x)|^2 dx} \quad (\text{I.65})$$

où d étant l'épaisseur du puits où le lieu de l'émission stimulée et $|E(x)|$ est le module de vecteur de champ électrique du mode optique dans la cavité.

Dans les lasers semi-conducteurs, on s'intéresse principalement au recouvrement des modes guidés avec la zone de gain (puits, zone active), qui est souvent une partie du cœur du guide. En augmentant le facteur de recouvrement du mode avec à la région dans laquelle la lumière est amplifiée, le gain modal du laser augmente et on peut ainsi diminuer son courant de seuil.

I.10.6. Influence du champ électrique sur La demi-largeur à mi-hauteur

La demi-largeur à mi-hauteur (HWHM) dépend de champ électrique et la largeur de puits quantique par la relation suivante [41].

$$\gamma(L_w, E) = 8,459 - 0,511(L_w) + 0,018(L_w)^2 + 4 * 10^{-3}(E) + 1,64 * 10^{-4}(E)^2 - 4,13 * 10^{-7}(E)^3 \quad (\text{I.66})$$

où γ est en meV, L_w est la largeur en nm et E est un champ électrique en kV/cm.

I.10.7. La population thermique

La population thermique de l'état inférieur d'émission laser n_2^{therm} est un autre terme important dans l'expression de la densité de courant de seuil. Comme montré schématiquement dans la figure.I.16. Cette population provient de porteurs excités thermiquement dans la région injectrice à l'état inférieur de l'émission. La population n_2^{therm} doit être dédommagée par la même population de l'état supérieure pour accomplir la transparence, généralement on considère l'effet de population thermique est négligeable. Dans un modèle simplifié, la population thermique peut être se rapprochée par un terme de l'activation thermique simple à une température électronique.

$$n_2^{\text{therm}} = n_s \exp\left(-\frac{\Delta_{\text{inj}}}{kT}\right) \quad (\text{I.67})$$

où n_s est la densité surfacique de l'injecteur, et Δ_{inj} est la différence d'énergie entre l'état inférieur et le potentiel chimique de l'injecteur.

I.10.8. Equations du bilan

Les équations de bilan sont des équations différentielles d'une méthode phénoménologique pour décrire des dispositifs laser à partir desquels des paramètres de performance importants (par exemple l'inversion de population, densité de courant de seuil, puissance de sortie, etc.). Avant de discuter directement aux équations de bilan pour les lasers à cascade quantique, il est important de reconnaître certaines de leurs propriétés uniques. Ces propriétés s'étendent du fait que les lasers à cascade quantique ont plusieurs régions de gain dans l'injecteur où le cœur de laser à cascade quantique, tel que chaque période individuelle peut avoir ses propres propriétés locales d'intensité de champ de photons et de température, chaque période est caractérisé par des émissions individuellement personnalisées [42] et les profils de dopage [43] qui peuvent être traités en conséquence par les équations de bilan. Dans la discussion qui suit, nous nous limitons au cas où la conception de périodes de LCQ individuelles est identique. Dans ce cas, on considère les équations de bilan dans une seule période de la structure.

Le système laser à trois niveaux était basé sur un système d'équations basé aux taux de relaxations, utilisé pour décrire la dynamique des porteurs et le nombre de photons dans la cavité laser, pour un laser à cascade quantique LCQ à trois niveaux, où l'émission spontanée peut être négligée [44], on peut écrire :

$$\frac{dN_3}{dt} = \eta WL \frac{J}{e} - \frac{N_3}{\tau_3} - \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} (N_3 - N_2) N_{\text{ph}} \quad (\text{I.67.a})$$

$$\frac{dN_2}{dt} = (1 - \eta) WL \frac{J}{e} + \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} (N_3 - N_2) N_{\text{ph}} - \frac{N_2}{\tau_{21}} + \frac{N_3}{\tau_{32}} \quad (\text{I.67.b})$$

$$\frac{dN_{\text{ph}}}{dt} = N \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} (N_3 - N_2) N_{\text{ph}} - \frac{N_{\text{ph}}}{\tau_p} \quad (\text{I.67.c})$$

Chapitre I : Rappel sur les lasers à semiconducteurs

où N_i est un nombre d'électrons au niveau i , N_{ph} est le nombre de photons, $(1-\eta)j$ et ηJ sont la densité de courant injectée dans le niveau laser inférieur et supérieur respectivement, η est le rendement d'injection, L et W sont la longueur et largeur de la cavité respectivement, V est le volume de la cavité est déterminé par $V = NWLL_p$ où L_p est la longueur d'une période de la structure laser en cascade, alors que N est le nombre de périodes, e est la charge électronique, τ_3, τ_2 sont les durées de vie électronique dans les niveaux $n = 3$ et $n = 2$ respectivement, τ_{21}, τ_{32} est le temps de diffusion des électrons entre les états du système, Γ est le facteur de confinement, τ_p représente la durée de vie des photons dans la cavité $\tau_p^{-1} = c'(\alpha_w + \alpha_m)$, où $c' = c/n_{eff}$ représente la vitesse de la lumière dans la structure, c est la vitesse de la lumière dans le vide, (n_{eff} est l'indice de réfraction de la structure), α_w est les pertes du guide d'ondes, tandis que α_m est les pertes de miroirs déterminées par $\alpha_m = -\ln(R_1 R_2 / 2L)$ où R_1 et R_2 sont les coefficients de réflexion des facettes 1 et 2 respectivement, et σ_{32} la section d'émission stimulée est donnée par :

$$\sigma_{32} = \frac{4\pi e^2 z_{32}^2}{\epsilon_0 n_{eff} \lambda (2\gamma_{32}(T))} \quad (I.68)$$

où z_{32} est l'élément de transition dipolaire optique, λ est la longueur d'onde LCQ, ϵ_0 est la permittivité électrique de l'espace libre, T est la température absolue, $2\gamma_{32}(T)$ est la largeur totale à mi-hauteur FWHM, sa dépendance en température est donnée par :

$$\frac{\gamma_{32}(T)}{\gamma_{32}(77)} = \frac{2n_q(T) + 1}{2n_q(T) + 1} \quad (I.69)$$

où $n_q(T)$: la population de phonons est déterminée par la distribution de Bose Einstein:

$$n_q(T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{LO}}{kT}\right) - 1} \quad (I.70)$$

où $\hbar\omega_{LO}$ est l'énergie du phonon optique longitudinal.

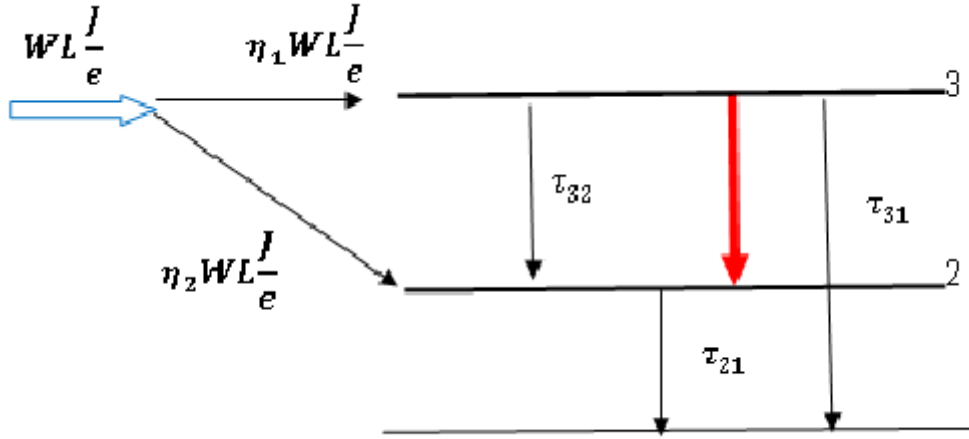


Figure I. 15 : Représentation d'un laser à trois niveaux.

I.10.9. Modèle simple de LCQ à trois niveaux

Dans chaque système physique plusieurs paramètres sont pris en compte et doivent être optimisés en même temps. Dans le laser à cascade quantique, J.Faist et al. En se basant sur une vision simple du laser mettent en avant quelques paramètres les plus pertinents pour l'optimisation de la zone active. Dans le laser dont un milieu à trois niveaux d'énergies comme le montre la figure. I.16, où les paramètres nécessaires pour décrire ce modèle, sont schématisés.

Les électrons sont injectés sur l'état 3 avec un taux égal à $\eta WL \frac{J}{e}$, ils peuvent ensuite diffuser vers l'état bas $n = 2$ avec un temps τ_{32} , vers l'état $n = 1$ avec un temps de τ_{31} , comme un certains électrons peuvent être perdus par un processus quelconque caractérisé par un temps τ_{esc} donné par la relation suivante [45].

$$\tau_{esc} = \left(\frac{2\pi m^* L_z^2}{KT} \right) \exp\left(\frac{\Delta E_{act}}{KT} \right) \quad (I.71)$$

où ΔE_{act} est l'énergie d'activation, m^* est la masse effective pour l'électron dans le puits, L_z est l'étendue approximative de la fonction d'onde d'état $n = 3$ et k la constante de Boltzmann.

Le temps de vie de l'état haut va s'écrire dans ce cas comme $\tau_3^{-1} = \tau_{31}^{-1} + \tau_{32}^{-1} + \tau_{esc}^{-1}$.

Chapitre I : Rappel sur les lasers à semiconducteurs

Les électrons peuvent aussi être activés thermiquement sur l'état 2 du laser. La population thermique de l'état bas s'écrira dans le modèle simple de Boltzmann par :

$$n_2^{therm} = n_s \exp\left(-\frac{\Delta_{inj}}{kT}\right) \quad (I.72)$$

où Δ_{inj} est la différence d'énergie entre l'état d'injecteur g et celle de l'état bas du laser $n = 2$, T est la température, n_s est la densité surfacique d'électrons de l'injecteur exprimé par (cm^{-2}) . Dans ce cas, les équations bilan qui gèrent le système sont les suivantes :

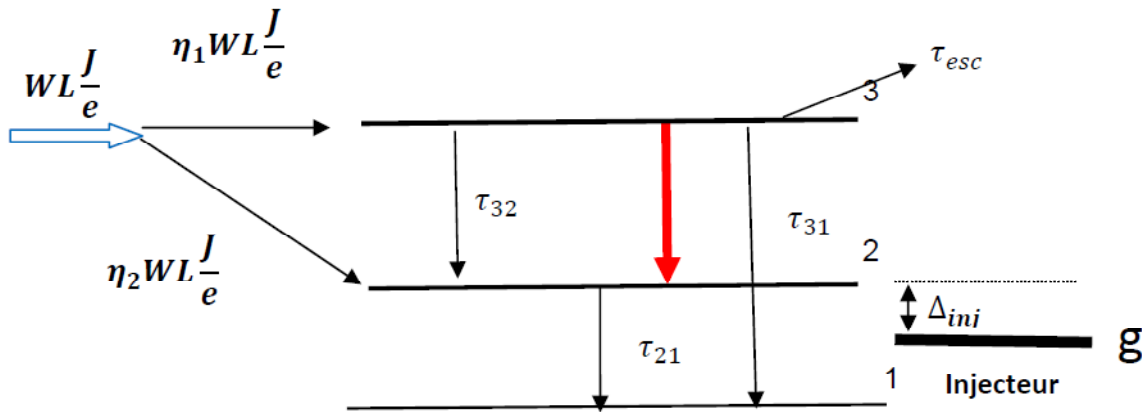


Figure I. 16: Modèle de laser à trois niveaux avec population thermique.

$$\frac{dN_3}{dt} = \eta WL \frac{J}{e} - \frac{N_3}{\tau_3} - \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} (N_3 - N_2) N_{ph} \quad (I.73.a)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = (1 - \eta) WL \frac{J}{e} + \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} (N_3 - N_2) N_{ph} - \frac{N_2 - WL n_2^{therm}}{\tau_{21}} + \frac{N_3}{\tau_{32}} \quad (I.73.b)$$

$$\frac{dN_{ph}}{dt} = N \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} (N_3 - N_2) N_{ph} - \frac{N_{ph}}{\tau_p} \quad (I.73.c)$$

Dans un régime stationnaire, les dérivées temporelles sont nulles, en conséquence ces équations représentent un système des équations des inconnus N_1 , N_2 et N_3 , qui sont exprimés par :

$$N_3 = \left(\Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} N_{ph} + \frac{\eta}{\tau_{21}} \right) \omega L \frac{J}{e} + \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} N_{ph} \frac{WL n_2^{therm}}{\tau_{21}} / \Delta \quad (I.74)$$

$$N_2 = \left(\Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} N_{ph} + \frac{\eta}{\tau_{32}} - \frac{\eta}{\tau_3} + \frac{1}{\tau_3} \right) \omega L \frac{J}{e} + \left(\Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} N_{ph} + \frac{1}{\tau_3} \right) \frac{WL n_2^{therm}}{\tau_{21}} / \Delta \quad (I.75)$$

Avec :

$$\Delta = \left[\frac{1}{\tau_3 \tau_{21}} + \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} N_{ph} \left(\frac{1}{\tau_{21}} - \frac{1}{\tau_3} + \frac{1}{\tau_3} \right) \right] \quad (I.76)$$

L'inversion de la population $\Delta N = N_3 - N_2$ s'écrit sous la forme :

$$\Delta N = \left[\left(\frac{\eta}{\tau_{21}} - \frac{\eta}{\tau_{32}} - \frac{1}{\tau_3} + \frac{\eta}{\tau_3} \right) \omega L \frac{J}{e} - \frac{W L n_2^{therm}}{\tau_3 \tau_{21}} \right] / \Delta \quad (I.77)$$

On peut écrire la dernière équation sous la forme :

$$\Delta N(T) = \frac{\left(\left(1 - \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_{32}(T)} \right) \eta - (1-\eta) \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_3(T)} \right) \tau_3(T) W L \frac{J}{e} - W L n_2^{therm}}{1 + \frac{N_{ph}}{N_{ph,sat}(T)}} \quad (I.78)$$

$N_{ph,sat}(T)$: représente le nombre de photons de saturation est donné par la relation suivante [44]:

$$N_{ph,sat}(T) = \frac{V}{\Gamma c' \sigma_{32} \left(1 + \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_{31}(T)} + \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_{th}} \right) \tau_3(T)} \quad (I.79)$$

La relation de la densité de courant de seuil peut être déterminée par la relation suivante [46] :

$$\Delta N_{th} = V / N \Gamma c' \sigma_{32} \tau_p \quad (I.80)$$

où ΔN_{th} est obtenu en mettant N_{ph} égal à zéro et en remplaçant J par j_{th} dans l'équation. (I.78)

nous obtenons la relation suivante:

$$J_{th} = \frac{1}{\left(\left(1 - \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_{32}(T)} \right) \eta - (1-\eta) \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_3(T)} \right) \tau_3(T)} \left[\frac{\varepsilon_0 n_{eff} \lambda_{LP} 2 \gamma_{32} (\alpha_w + \alpha_m)}{4 \pi e z_{32}^2 \Gamma} + e n_2^{therm} \right] \quad (I.81)$$

Cette relation représente l'expression de la densité de courant de seuil pour le fonctionnement du laser à cascade quantique.

I.10.10. Le comportement thermique de laser à cascade quantique[47]

Dans les LCQ émettant dans l'infrarouge moyen, le niveau laser bas (niveau 2), est dépeuplé vers le niveau fondamental (niveau 1) via des transitions non radiatives qui sont favorisées par la résonance entre l'énergie de la transition $E_2 - E_1$ et l'énergie $\hbar \omega_{LO}$ du phonon optique longitudinal LO, le temps de relaxation $\tau_{21}(T)$ entre le niveau 2 et 1 en fonction de la température est donné par cette expression [47]:

$$\tau_{21}(T) = \tau_{21}^c \frac{1 + n_q(77)}{1 + 2n_q(T)} \quad (I.82)$$

Chapitre I : Rappel sur les lasers à semiconducteurs

Pour la transition 3 vers 2, le temps de relaxation $\tau_{32}(T)$ est donné par :

$$\tau_{32}(T) = \tau_{32}^c \frac{1+2n_q(77)}{1+2n_q(T)} \quad (\text{I.83})$$

Comme le cas précédent, le temps de relaxation $\tau_{31}(T)$ est donné par :

$$\tau_{31}(T) = \tau_{31}^c \frac{1+2n_q(77)}{1+2n_q(T)} \quad (\text{I.84})$$

où τ_{21}^c , τ_{32}^c et τ_{31}^c sont les temps de transitions calculés à basse température ($T = 77\text{K}$).

Remarque : la séparation énergétique entre le niveau laser 2 et le niveau fondamental est d'ordre d'énergie du phonon optique longitudinal LO, tandis que la séparation énergétique entre le niveau laser 3 et le niveau fondamental est plus grande que l'énergie du phonon LO.

Conclusion

Ce chapitre de thèse porte sur l'étude des transitions intersousbandes dans les puits quantiques. Nous avons présenté quelques explications pour montrer que le laser à cascade quantique est un laser à semi-conducteur constitué par hétéro structure à multipuits quantiques polarisé sous un champ électrique uniforme.

Chapitre II :
EFFET TUNNEL RESONANT

Chapitre II : Effet tunnel résonant

II.1 Introduction

Dans l'approximation de la masse effective, la solution exacte de l'équation de Schrödinger par les fonctions d'Airy est bien connue, et constitue la méthode la plus précise pour calculer le coefficient de transmission des tunnels dans des super-réseaux à polarisation électrique variable. Cette solution exclue les effets des interactions électron-phonon et l'interaction Coulombienne [48-53]. Pour les structures à barrières multiples, cette approche est mise en œuvre en utilisant la méthode de la matrice de transfert sous la forme initialement développée pour les potentiels linéaires [54]. Cette méthode a l'avantage de fournir simultanément les énergies des états quasi-liés avec le coefficient de transmission. La théorie du tunnelage résonant dans les hétéro-structures multi-barrières a fait l'objet d'une étude récente [55], où la solution des fonctions d'Airy a été utilisée pour étudier le coefficient de transmission des énergies positives et négatives [22].

L'élément clé pour trouver ces niveaux d'énergie est de résoudre l'équation de Schrödinger pour un électron dans la bande de conduction du super-réseau. Et pour cela il existe de nombreuses méthodes comme les méthodes de Runge-kutta, les méthodes des éléments finis, les méthodes de Monte Carlo, potentiel multi-étapes, méthodes spectrales, méthode d'interface immergée, ... [56-70]. Dans certains cas, la méthode de la matrice de transfert est utilisée avec les méthodes précédentes pour trouver le coefficient de transmission qui quantifie la tunnellation des électrons à travers les différentes barrières du super-réseau. Dans ce travail, nous utilisons la méthode de la matrice de transfert pour calculer le coefficient de transmission du transport électronique dans un super-réseau formé d'une alternance de couches de deux matériaux différents, et nous l'utilisons pour extraire des informations sur les niveaux d'énergie de résonance décrites dans [22]. Cette méthode est basée sur la solution analytique de l'équation de Schrödinger, où les fonctions d'Airy [71,72] apparaissent en raison de la présence de champ électrique externe. Ce dernier est considéré comme constant dans chaque couche du super-réseau mais pas nécessairement égal dans les différentes couches. En particulier, nous

Chapitre II : Effet tunnel résonant

considérons un champ électrique constant dans toutes les couches de structure, puis nous cherchons les paramètres appropriés pour avoir un effet tunnel résonnant.

II.2. Effet tunnel résonant

L'effet tunnel est un phénomène qui intervient en physique quantique et est généralement décrit comme la capacité d'une particule quantique à traverser une barrière d'énergie même si son énergie est inférieure à celle de barrière. L'effet tunnel a fait l'objet de nombreuses études, aussi bien théoriques qu'expérimentales [73-74]. Il traduit la probabilité pour une particule élémentaire de traverser une barrière de potentiel, à lors que ceci reste impossible en mécanique classique. L'effet tunnel est décrit par le coefficient de réflexion R qui désigne la probabilité de la particule quantique d'être réfléchi par la barrière de potentiel ou par le coefficient de transmission T qui représente la probabilité d'une particule d'être transmise à travers une barrière quantique. Sachant que la somme de transmission T et de réflexion R est égale à l'unité. On peut noter que l'effet tunnel résonant joue un rôle important dans le fonctionnement de laser à cascade quantique.

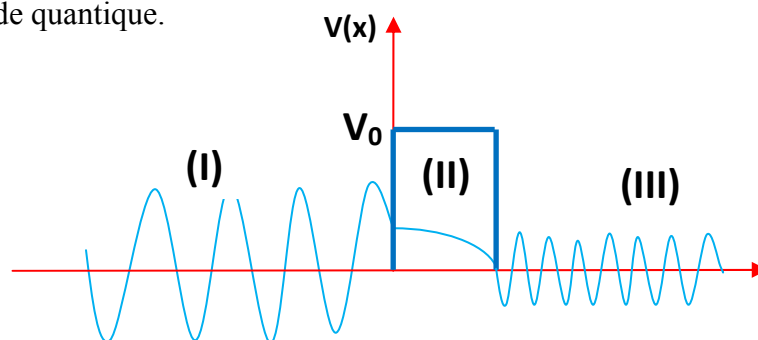


Figure II.1: Représentation schématique de la fonction d'onde d'un électron traversant une barrière de potentiel par effet tunnel.

II.3. Fabrication des composants à super-réseau

L'épitaxie est une technique expérimentale qui permet la fabrication de très fines couches (quelques nanomètres) de super-réseau en déposant les matériaux les uns sur les autres. En effet, l'empilement périodique des atomes d'un monocristal (substrat) permet de faire croître sur ce substrat. Dans le cas de déposition de différents matériaux (d'hétéro-épitaxie), il existe

Chapitre II : Effet tunnel résonant

différentes techniques d'épitaxie, où l'épitaxie par jet moléculaire (Molecular Beam Epitaxy MBE en anglais) [75] est la plus utilisée et qui permet de déposer des couches atomiques les unes sur les autres et ainsi de contrôler très précisément (au nanomètre près) l'épaisseur de la structure créée. Le substrat est déposé dans une chambre à très faible pression (dans le but d'augmenter le libre parcours moyen des atomes). Les matériaux sont déposés par transport thermique sur la surface du substrat, plus froide mais de température quand même assez élevée pour permettre le déplacement et le réarrangement des atomes.

II.4. Equation de Schrödinger pour une hétéro-structure libre

Le présent chapitre traite les solutions de l'équation de Schrödinger dans les puits quantiques par la méthode de matrice de transfert.

II.4.1. L'équation de Schrödinger indépendante du temps :

Schrödinger en 1926 a montré que l'énergie et la fonction d'onde sont des solutions aux dérivées partielles de deuxième ordre d'une équation différentielle. Cette équation différentielle est la base de la mécanique quantique décrivant l'évolution de l'état quantique ψ d'un système et elle prend la forme suivante :

$$H\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{II.1})$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{II.2})$$

H : Hamiltonien du système (associé à l'énergie totale du système considéré), il est donné par :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta + V \quad (\text{II.3})$$

Δ : C'est le Laplacien

m_e^* : La masse effective de l'électron

E : L'énergie totale de l'électron (énergie cinétique + énergie potentielle)

Ψ : La fonction d'onde

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ Avec h la constante de Planck

Chapitre II : Effet tunnel résonant

II.4.2. Résolution de l'équation de Schrödinger dans un puits quantique en absence d'un champ électrique extérieur

Différentes méthodes existent pour résoudre l'équation de Schrödinger à une dimension. Le choix d'une méthode numérique ou analytique particulière repose généralement sur la forme du potentiel, la fonction d'onde et le spectre d'énergie recherchée. En pratique, il existe deux types d'états quantiques différents : les états liés où les énergies sont considérées inférieures à la hauteur des barrières (bound states) et les états de diffusion libres ou quasi-libres (scattering states) où les énergies sont considérées supérieures à la hauteur des barrières. Les états liés correspondent à une quantification de l'énergie. Les deux types d'états sont déterminés par le signe de l'énergie fournie par la solution de l'équation de Schrödinger : une énergie négative (états liés) et une énergie positive (états quasi-libres).

II.4.2.1. Méthode de matrice de transfert :

La méthode de la matrice de transfert (MMT) [76] est utilisée pour déterminer les amplitudes des fonctions enveloppes dans une structure super-réseau. Cette méthode est également un modèle théorique permettant de décrire quantitativement le phénomène d'effet tunnel résonnant à travers un seul puits quantique ou super-réseau (Tsu R.-1973) [77]. Un électron de vecteur d'onde k_z traversant les barrières par effet tunnel suivant l'axe z , son mouvement est décrit par l'équation de Schrödinger :

$$\left[-\frac{\hbar^2 d^2}{2m dz^2} + V(Z) - E \right] \Psi (Z) = 0 \quad (\text{II.4})$$

$V(z)$ est l'énergie potentielle. Elle prend la valeur V_0 dans les régions des barrières et nul dans les puits. La solution générale de l'équation est de la forme :

$$\Psi (Z) = A e^{ik_z z} + B e^{-ik_z z} \quad (\text{II.5})$$

Avec :

$$k_z^2 = \frac{2m(E-V)}{\hbar^2} \quad (\text{II.6})$$

Chapitre II : Effet tunnel résonant

De plus, nous avons identifié les deux cas suivants [78]:

- Lorsque E_z est supérieure à V_0 on a k_z^2 positif de sorte que k_z est réel, et donc la fonction d'onde est une onde plane.
- Lorsque E_z est inférieure à V_0 on a k_z^2 négatif de sorte que k_z est imaginaire, et donc la fonction d'onde est une exponentielle croissante ou décroissante.

Les constantes d'intégration A et B sont déterminées par les conditions habituelles de continuité de la fonction d'onde et du courant de probabilité aux interfaces.

Nous considérons le super-réseau représenté sur la figure (II.2).

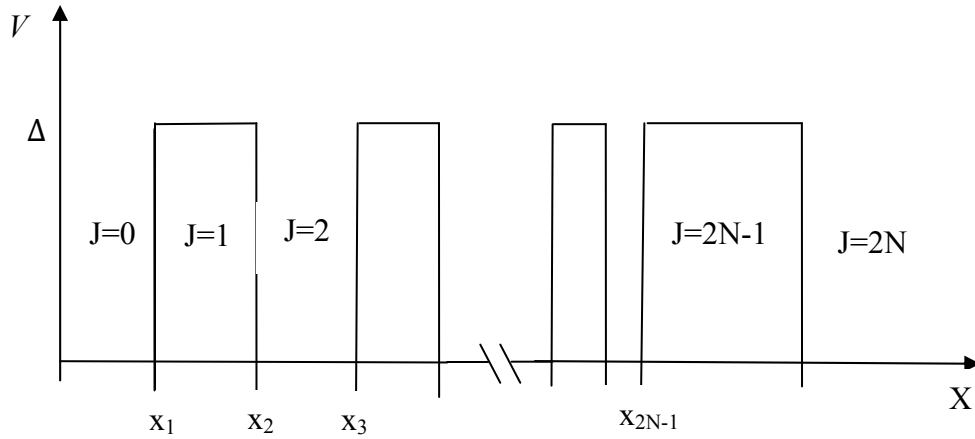


Figure II.2 : Diagramme de profil du potentiel dans un super-réseau non polarisé.

En notant par m_j la masse effective de l'électron dans chaque région, et en appliquant les conditions aux interfaces (continuité de la fonction d'onde Ψ et du courant de probabilité $(1/m)(d\Psi'/dx)$), on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi_0(x_1) = \psi_1(x_1) \end{array} \right. \quad (\text{II.7})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{m_0} \frac{d\psi_0(x_1)}{dx} = \frac{1}{m_1} \frac{d\psi_1(x_1)}{dx} \end{array} \right. \quad (\text{II.8})$$

Au niveau de la première interface, ces conditions donnent la relation matricielle [79].

$$\begin{Bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{Bmatrix} = M_1 \begin{Bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{Bmatrix} \quad (\text{II.9})$$

Chapitre II : Effet tunnel résonant

où M_1 est une la matrice de transfert son expression est donnée par :

$$M_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{K_2 m_1}{K_1 m_2}\right) e^{i(k_2 - k_1)z_1} & \left(1 - \frac{K_2 m_1}{K_1 m_2}\right) e^{-i(k_2 - k_1)z_1} \\ \left(1 - \frac{K_2 m_1}{K_1 m_2}\right) e^{i(k_2 + k_1)z_1} & \left(1 + \frac{K_2 m_1}{K_1 m_2}\right) e^{-i(k_2 - k_1)z_1} \end{pmatrix} \quad (\text{II.10})$$

En appliquant les conditions de continuités dans l'interface entre la région j et la région $j+1$

$$\begin{Bmatrix} A_j \\ B_j \end{Bmatrix} = M_j \begin{Bmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{Bmatrix} \quad (\text{II.11})$$

où M_j est une matrice de dimension 2×2

$$M_j = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left(1 + \frac{K_{j+1} m_j}{K_j m_{j+1}}\right) e^{i(k_{j+1} - k_j)z_j} & \left(1 - \frac{K_{j+1} m_j}{K_j m_{j+1}}\right) e^{-i(k_{j+1} + k_j)z_j} \\ \left(1 - \frac{K_{j+1} m_j}{K_j m_{j+1}}\right) e^{i(k_{j+1} + k_j)z_j} & \left(1 + \frac{K_{j+1} m_j}{K_j m_{j+1}}\right) e^{-i(k_{j+1} - k_j)z_j} \end{pmatrix} \quad (\text{II.12})$$

où K_j est donné par :

$$K_j = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E_Z - V_j)} \quad (\text{II.13})$$

On peut définir la relation reliant les amplitudes (A_0, B_0) et (A_{2N}, B_{2N}) par la matrice de transfert totale comme suit :

$$\begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix} = M_1 M_2 M_3 \dots \dots M_{2N-1} M_{2N} \begin{bmatrix} A_{2N} \\ B_{2N} \end{bmatrix} \quad (\text{II.14})$$

$$\begin{Bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{Bmatrix} = M \begin{Bmatrix} A_{2N} \\ B_{2N} \end{Bmatrix} \quad (\text{II.15})$$

La matrice de transfert totale M est donnée par :

$$M = M_1 M_2 M_3 \dots \dots M_{2N-1} M_{2N} = \prod_{j=1}^{2N} M_j \quad (\text{II.16})$$

Donc, on peut calculer le coefficient de transmission dans une structure donnée.

II.4.2.2. Détermination les amplitudes des fonctions enveloppes dans une structure à triple barrières quantiques

Nous allons étudier une structure à trois puits quantiques formée par une succession alternée de sept couches semiconductrices d'interfaces en $x=0, a, b, c, d, e$ représentée par la figure (II.3).

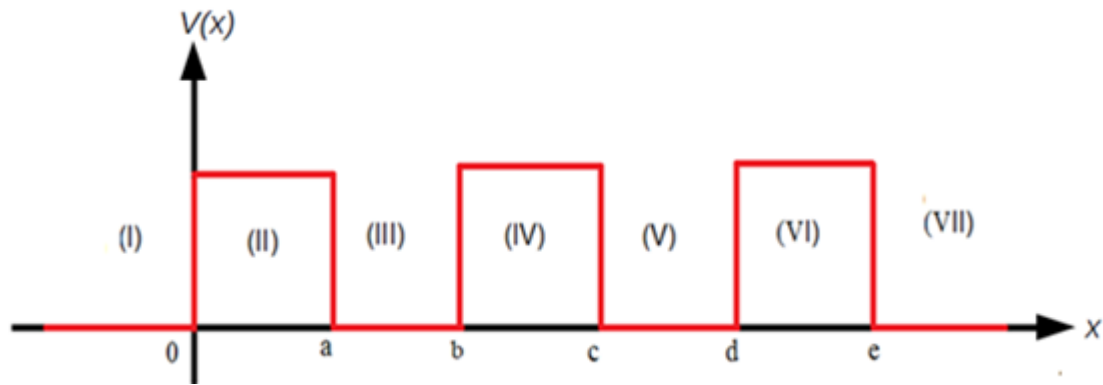


Figure II.3 : Structure à triple barrières quantiques.

L'équation de Schrödinger dans les régions de puits de la figure (II.3) s'écrit pour $j = \{1, 3, 5, 7\}$:

$$\Psi_j''(x) + k^2 \Psi_j(x) = 0 \quad (\text{II.17})$$

dont la solution est de la forme :

$$\Psi_j(x) = A_j e^{ikx} + B_j e^{-ikx} \quad (\text{II.18})$$

L'équation de Schrödinger dans les régions de barrière s'écrit pour $j = \{2, 4, 6\}$:

$$\Psi_j''(x) - g^2 \Psi_j(x) = 0 \quad (\text{II.19})$$

dont la solution est de la forme :

$$\Psi_j(x) = C_j e^{gx} + D_j e^{-gx} \quad (\text{II.20})$$

où A_j , B_j , C_j et D_j sont des constantes complexes qui représentent les amplitudes des fonctions enveloppes.

Les conditions de continuité aux limites de Ben Daniel-Duke et G. Bastard [80,81].

La continuité de $\Psi(x)$ et $\Psi'(x)$ nous permet l'écriture :

- A l'interface $x = 0$.

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2 \quad (\text{II.21})$$

$$\frac{ik}{m_1} (A_1 - B_1) = \frac{g}{m_2} (A_2 - B_2) \quad (\text{II.22})$$

Dont l'écriture matricielle suivante :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik}{m_1} & -\frac{ik}{m_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{g}{m_2} & -\frac{g}{m_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II.23})$$

On déduit l'expression suivante :

$$W_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = W_2 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II.24})$$

Avec :

$$W_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{ik}{m_1} & -\frac{ik}{m_1} \end{pmatrix} \quad (\text{II.25})$$

Chapitre II : Effet tunnel résonant

et

$$W_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{\varrho}{m_2} & -\frac{\varrho}{m_2} \end{pmatrix} \quad (\text{II.26})$$

A l'interface $x = a$.

$$A_2 e^{\varrho a} + B_2 e^{-\varrho a} = A_3 e^{ika} + B_3 e^{-ika} \quad (\text{II.27})$$

$$\frac{\varrho}{m_2} (A_2 e^{\varrho a} - B_2 e^{-\varrho a}) = \frac{ik}{m_1} (A_3 e^{ika} - B_3 e^{-ika}) \quad (\text{II.28})$$

On trouve l'expression suivante :

$$\begin{pmatrix} e^{\varrho a} & e^{-\varrho a} \\ \frac{\varrho}{m_2} e^{\varrho a} & -\frac{\varrho}{m_2} e^{-\varrho a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ \frac{ik}{m_1} e^{ika} & -\frac{ik}{m_1} e^{-ika} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} \quad (\text{II.29})$$

L'expression matricielle s'écrit :

$$W_3 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = W_4 \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} \quad (\text{II.30})$$

Avec :

$$W_3 = \begin{pmatrix} e^{\varrho a} & e^{-\varrho a} \\ \frac{\varrho}{m_2} e^{\varrho a} & -\frac{\varrho}{m_2} e^{-\varrho a} \end{pmatrix} \quad (\text{II.31})$$

et

$$W_4 = \begin{pmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ \frac{ik}{m_1} e^{ika} & -\frac{ik}{m_1} e^{-ika} \end{pmatrix} \quad (\text{II.32})$$

A l'interface $x = b$

$$A_3 e^{ikb} + B_3 e^{-ikb} = A_4 e^{\varrho b} + B_4 e^{-\varrho b} \quad (\text{II.33})$$

$$\frac{ik}{m_1} (A_3 e^{ikb} - B_3 e^{-ikb}) = \frac{\varrho}{m_2} (A_4 e^{\varrho b} - B_4 e^{-\varrho b}) \quad (\text{II.34})$$

L'expression suivante est obtenue :

$$\begin{pmatrix} e^{ikb} & e^{-ikb} \\ \frac{ik}{m_1} e^{ikb} & -\frac{ik}{m_1} e^{-ikb} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{\varrho b} & e^{-\varrho b} \\ \frac{\varrho}{m_2} e^{\varrho b} & -\frac{\varrho}{m_2} e^{-\varrho b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix} \quad (\text{II.35})$$

Dont l'expression matricielle est de la forme suivante:

$$W_5 \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = W_6 \begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix} \quad (\text{II.36})$$

Chapitre II : Effet tunnel résonant

avec :

$$W_5 = \begin{pmatrix} e^{ikb} & e^{-ikb} \\ \frac{ik}{m_1} e^{ikb} & -\frac{ik}{m_1} e^{-ikb} \end{pmatrix} \quad (\text{II.37})$$

et

$$W_6 = \begin{pmatrix} e^{gb} & e^{-gb} \\ \frac{g}{m_2} e^{gb} & -\frac{g}{m_2} e^{-gb} \end{pmatrix} \quad (\text{II.38})$$

A l'interface $x = c$.

$$A_4 e^{gc} + B_4 e^{-gc} = A_5 e^{ikc} + B_5 e^{-ikc} \quad (\text{II.39})$$

$$\frac{g}{m_2} (A_4 e^{gc} - B_4 e^{-gc}) = \frac{ik}{m_1} (A_5 e^{ikc} - B_5 e^{-ikc}) \quad (\text{II.40})$$

Qui sont peuvent être écrits sous la forme matricielle comme suit :

$$\begin{pmatrix} e^{gc} & e^{-gc} \\ \frac{g}{m_2} e^{gc} & -\frac{g}{m_2} e^{-gc} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ikc} & e^{-ikc} \\ \frac{ik}{m_1} e^{ikc} & -\frac{ik}{m_1} e^{-ikc} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_5 \\ B_5 \end{pmatrix} \quad (\text{II.41})$$

et

$$W_7 \begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix} = W_8 \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} \quad (\text{II.42})$$

Avec :

$$W_7 = \begin{pmatrix} e^{gc} & e^{-gc} \\ \frac{g}{m_2} e^{gc} & -\frac{g}{m_2} e^{-gc} \end{pmatrix} \quad (\text{II.43})$$

et

$$W_8 = \begin{pmatrix} e^{ikc} & e^{-ikc} \\ \frac{ik}{m_1} e^{ikc} & -\frac{ik}{m_1} e^{-ikc} \end{pmatrix} \quad (\text{II.44})$$

A l'interface $x = d$

$$A_5 e^{ikd} + B_5 e^{-ikd} = A_6 e^{gd} + B_6 e^{-gd} \quad (\text{II.45})$$

$$\frac{ik}{m_1} (A_5 e^{ikd} - B_5 e^{-ikd}) = \frac{g}{m_2} (A_6 e^{gd} - B_6 e^{-gd}) \quad (\text{II.46})$$

Avec :

$$\begin{pmatrix} e^{ikd} & e^{-ikd} \\ \frac{ik}{m_1} e^{ikd} & -\frac{ik}{m_1} e^{-ikd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{gd} & e^{-gd} \\ \frac{g}{m_2} e^{gd} & -\frac{g}{m_2} e^{-gd} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_6 \\ B_6 \end{pmatrix} \quad (\text{II.47})$$

et

$$W_9 \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} = W_{10} \begin{pmatrix} A_6 \\ B_6 \end{pmatrix} \quad (\text{II.48})$$

Chapitre II : Effet tunnel résonant

Avec
$$W_9 = \begin{pmatrix} e^{ikd} & e^{-ikd} \\ \frac{ik}{m_1} e^{ikd} & -\frac{ik}{m_1} e^{-ikd} \end{pmatrix} \quad (\text{II.49})$$

et
$$W_{10} = \begin{pmatrix} e^{\varrho d} & e^{-\varrho d} \\ \frac{\varrho}{m_2} e^{\varrho d} & -\frac{\varrho}{m_2} e^{-\varrho d} \end{pmatrix} \quad (\text{II.50})$$

A l'interface $x = e$.

$$A_6 e^{\varrho e} + B_6 e^{-\varrho e} = A_7 e^{ike} + B_7 e^{-ike} \quad (\text{II.51})$$

$$\frac{\varrho}{m_2} (A_6 e^{\varrho e} - B_6 e^{-\varrho e}) = \frac{ik}{m_1} (A_7 e^{ike} - B_7 e^{-ike}) \quad (\text{II.52})$$

Avec :

$$\begin{pmatrix} e^{\varrho e} & e^{-\varrho e} \\ \frac{\varrho}{m_2} e^{\varrho e} & -\frac{\varrho}{m_2} e^{-\varrho e} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_6 \\ B_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ike} & e^{-ike} \\ \frac{ik}{m_1} e^{ike} & -\frac{ik}{m_1} e^{-ike} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_7 \\ B_7 \end{pmatrix} \quad (\text{II.53})$$

et

$$W_{11} \begin{pmatrix} A_6 \\ B_6 \end{pmatrix} = W_{12} \begin{pmatrix} A_7 \\ B_7 \end{pmatrix} \quad (\text{II.54})$$

Avec
$$W_{11} = \begin{pmatrix} e^{\varrho e} & e^{-\varrho e} \\ \frac{\varrho}{m_2} e^{\varrho e} & -\frac{\varrho}{m_2} e^{-\varrho e} \end{pmatrix} \quad (\text{II.55})$$

et
$$W_{12} = \begin{pmatrix} e^{ike} & e^{-ike} \\ \frac{ik}{m_1} e^{ike} & -\frac{ik}{m_1} e^{-ike} \end{pmatrix} \quad (\text{II.56})$$

La relation entre les constantes A_1, B_1, A_7 et B_7 est donnée par :

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_7 \\ B_7 \end{pmatrix} \quad (\text{II.57})$$

où M est la matrice de transfert exprimée par la relation suivante :

$$M = W_1^{-1} W_2 W_3^{-1} W_4 W_5^{-1} W_6 W_7^{-1} W_8 W_9^{-1} W_{10} M_{11}^{-1} W_{12} \quad (\text{II.58})$$

La solution doit être finie dans tout l'espace, alors on doit avoir :

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \Psi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad B_1 = B_7 = 0$$

II.5. Résolution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel linéaire

Bien qu'un tel traité perturbatif puisse être adéquat pour des puits quantiques uniques, sa précision pour les systèmes de puits compliqués, peut-être multiples et discutable pour les champs élevés. La forme de potentiel de champ est requis pour trouver une solution exacte et

Chapitre II : Effet tunnel résonant

complète (non perturbative) de l'équation de Schrödinger. Dans l'approximation de masse effective, l'équation de Schrödinger dans un matériau particulier (région de masse constante), avec un champ électrique appliqué d'intensité F s'écrit:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + [V(z) - eFz]\psi = E\psi \quad (\text{II.60})$$

Cette nouvelle équation n'admet pas de solution standard de combinaisons linéaires des fonctions trigonométriques et exponentielles, et donc une approche différente est requise.

La réorganisation de l'équation (II.60) elle donne [59]:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \frac{2m^*}{\hbar^2} [V(z) - eFz - E]\psi = 0 \quad (\text{II.61})$$

Puis en faisant les substitutions suivantes :

$$\alpha = \frac{2m^*}{\hbar^2} [V(z) - E] \quad (\text{II.62})$$

et

$$\beta = \frac{2m^*}{\hbar^2} [-eF] \quad (\text{II.63})$$

L'équation de Schrödinger (II.61) devient:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - (\alpha + \beta z)\psi = 0 \quad (\text{II.64})$$

En considérant la substitution supplémentaire suivante :

$$z' = \frac{\alpha + \beta z}{\gamma} \quad (\text{II.65})$$

où γ est une constante et z' est une fonction linéaire du premier ordre de z , on a

$$\frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z'^2} \times \left(\frac{\partial z'}{\partial z} \right)^2 \quad (\text{II.66})$$

En utilisant la relation (II.65), on obtient :

$$\frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} = \frac{\beta^2}{\gamma^2} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z'^2} \quad (\text{II.67})$$

La substitution dans l'équation (II.61) nous donne:

Chapitre II : Effet tunnel résonant

$$\frac{\beta^2}{\gamma^2} \frac{\partial^2 \Psi(z)}{\partial z'^2} - \gamma z' \Psi = 0 \quad (\text{II.68})$$

Si γ^3 est égal à β^2 , alors la transformation complète est donnée par:

$$z' = \left(\frac{2m_1}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \left[\frac{V(z)-E}{(eF)^{\frac{2}{3}}} - (eF)^{\frac{1}{3}} z \right] \quad (\text{II.69})$$

et l'équation de Schrödinger peut être écrite sous la forme:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial z'^2} - z' \Psi = 0 \quad (\text{II.70})$$

La raison d'une telle procédure est que l'équation (II.60) a une solution standard qui est une combinaison linéaire des fonctions d'Airy [82].

$$\Psi(z') = A \text{Ai}(z') + B \text{Bi}(z') \quad (\text{II.71})$$

où A et B sont des constantes, la solution complète (la fonction d'onde) dans une structure superréseau les constantes A et B sont déterminées par les conditions aux limites de Ben Daniel-Duke et G. Bastard [80,81], comme nous avons vu dans la section précédente.

II.5.1. Quelques propriétés des fonctions Airy

L'allure de fonction Airy [83] est illustrée dans la figure suivante :

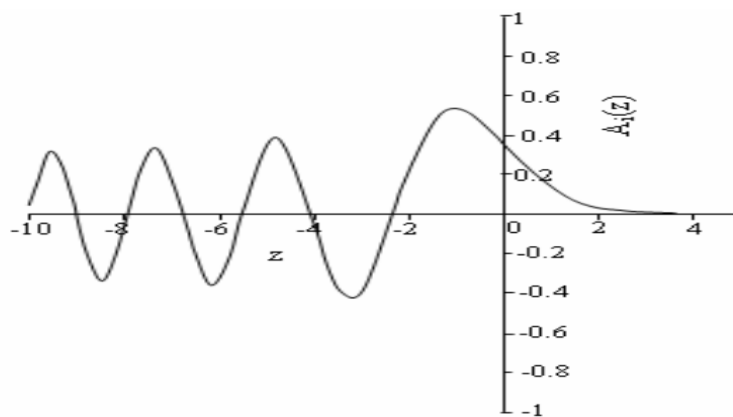


Figure II.4: Allure de fonction Airy $\text{Ai}(z)$.

Chapitre II : Effet tunnel résonant

La relation entre les fonctions airy et leurs dérivées est donnée par :

$$Ai(x)Bi'(x) - Bi(x)Ai'(x) = 1/\pi \quad (\text{II.72})$$

Pour les grandes valeurs de x ($x \gg 0$) on peut faire les approximations suivantes :

$$Bi(x) \cong \pi^{-\frac{1}{2}} x^{-\frac{1}{4}} \exp(2x^{\frac{3}{2}}/3) \quad (\text{II.73})$$

$$Bi'(x) \cong \pi^{-\frac{1}{2}} x^{\frac{1}{4}} \exp(2x^{\frac{3}{2}}/3) \quad (\text{II.74})$$

$$Ai(x) \cong (4\pi)^{-\frac{1}{2}} x^{-\frac{1}{4}} \exp(-2x^{\frac{3}{2}}/3) \quad (\text{II.75})$$

$$Ai'(x) \cong -(4\pi)^{-\frac{1}{2}} x^{\frac{1}{4}} \exp(-2x^{\frac{3}{2}}/3) \quad (\text{II.76})$$

Pour les petites valeurs de x ($x \ll 0$) on peut faire les approximations suivantes :

$$Bi(x) \cong (\pi)^{-\frac{1}{2}} (-x)^{-\frac{1}{4}} \cos\left(\frac{2(-x)^{\frac{3}{2}}}{3} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (\text{II.77})$$

$$Bi'(x) \cong (\pi)^{-\frac{1}{2}} (-x)^{\frac{1}{4}} \sin\left(\frac{2(-x)^{\frac{3}{2}}}{3} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (\text{II.78})$$

$$Ai(x) \cong (\pi)^{-\frac{1}{2}} (-x)^{-\frac{1}{4}} \sin\left(\frac{2(-x)^{\frac{3}{2}}}{3} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (\text{II.79})$$

$$Ai'(x) \cong -(\pi)^{-\frac{1}{2}} (-x)^{\frac{1}{4}} \sin\left(\frac{2(-x)^{\frac{3}{2}}}{3} + \frac{\pi}{4}\right) \quad (\text{II.80})$$

II.5.2. les fonctions d'enveloppes pour un super-réseau polarisé

Nous considérons le super-réseau représenté sur la figure II.5 Nous appliquons un champ électrique uniforme $F(x)$ sur le super-réseau de sorte que le champ soit constant dans chaque région et nul dans la première et la dernière région:

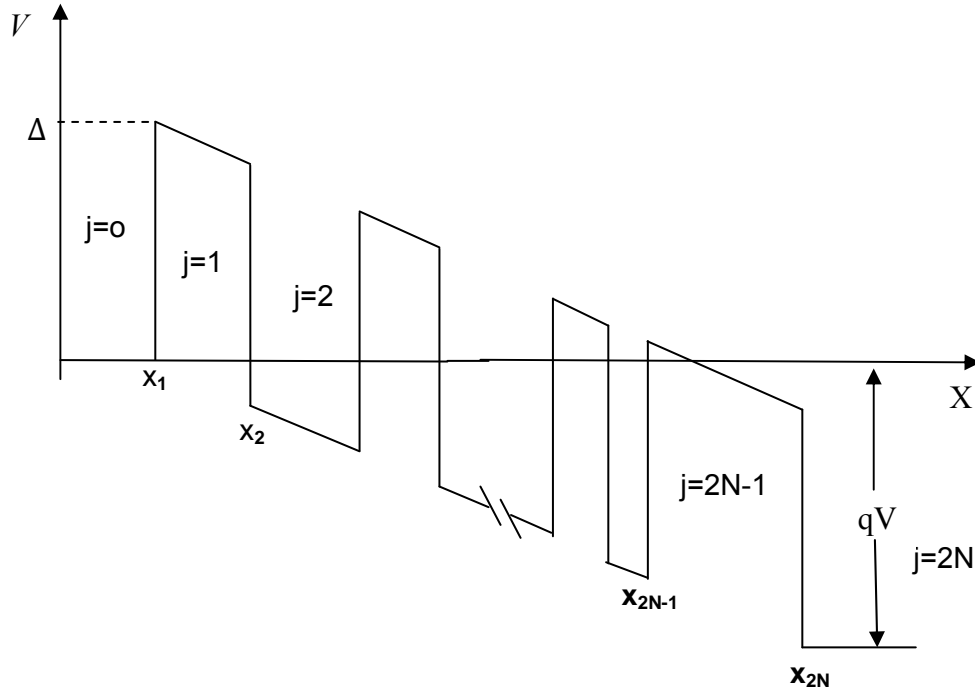


Figure II.5. Structure énergétique d'un super-réseau polarisé.

L'énergie de résonance d'un superréseau est déterminée par résolution l'équation de Schrödinger indépendante du temps. L'équation de Schrödinger pour un électron dans la couche j ($j = 0, \dots, 2N$) est donnée par :

$$\frac{-\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m_j^*(x)} \frac{d}{dx} \right) \psi_j(x) + V_j(x) \psi_j(x) = E \psi_j(x) \quad (\text{II.81})$$

où x est l'axe de croissance des couches dans le super-réseau, \hbar est la constante de Planck réduite, E est l'énergie de l'électron, $\psi_j(x)$ est la fonction d'onde dans la couche j , $m_j^*(x)$ est la masse effective des électrons.

$$m_j^*(x) = \begin{cases} m_w & j - \text{paire} \\ m_b & j - \text{impaire} \end{cases} \quad (\text{II.82})$$

où m_w et m_b sont les masses efficaces dans les puits et les barrières respectivement, et $V_j(x)$ est l'énergie potentielle de l'électron (figure (II.2)) et est égale à :

$$V_j(x) = U_j - eFx \quad (\text{II.83})$$

où U_j est donné par :

Chapitre II : Effet tunnel résonant

$$U_j = \begin{cases} \Delta E_c & j - \text{impaire} \\ 0 & j - \text{paire} \end{cases} \quad (\text{II.84})$$

où ΔE_c est la hauteur de la bande de conduction. La solution de l'équation (II.81) est [22] :

$$\psi_j(x) = \begin{cases} A_0 e^{ik_0 x} + B_0 e^{-ik_0 x} & j = 0 \\ A_j \text{Ai}(z_j(x)) + B_j \text{Bi}(z_j(x)) & 1 \leq j \leq 2N - 1 \\ A_{2N} e^{ik_{2N} x} + B_{2N} e^{-ik_{2N} x} & j = 2N \end{cases} \quad (\text{II.85})$$

où Ai et Bi sont des fonctions Airy de premier et deuxième type respectivement [83], A_j et B_j sont des constantes complexes qui représentent les amplitudes de la fonction d'onde, k_0 , k_{2N} et z_j sont définis comme suit :

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m_\omega E}{\hbar^2}} \quad (\text{II.86})$$

$$k_{2N} = \sqrt{\frac{2m_\omega (E + eF)}{\hbar^2}} \quad (\text{II.87})$$

$$z_j(x) = \left(\frac{2m_j}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left[\frac{V_j(x) - E}{(eF)^{\frac{2}{3}}} \right] \quad (\text{II.88})$$

Les coefficients A_j et B_j sont déterminés à partir des conditions de continuité de la fonction d'onde dans la limite de chaque couche [80, 81]. On trouve donc la relation entre les coefficients de la couche j et la couche $j + 1$ comme suit:

$$\begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{pmatrix} \quad (\text{II.89})$$

Cette dernière équation conduit à l'expression reliant les amplitudes de la première région ($j = 0$) et de la dernière région ($j = 2N$):

Partie(I) : dans cette partie nous définissons les matrices de transfert d'interface entre les régions $j=0$ et $j=1$. Dans la région $j=0$ la solution de l'équation de Schrödinger est donnée par :

$$\psi_0(x) = A_0 e^{iK_0 x_1} + B_0 e^{-iK_0 x_1} \quad (\text{II.90})$$

et dans la région $j=1$ la solution de l'équation de Schrödinger est donnée par :

Chapitre II : Effet tunnel résonant

$$\psi_1(x) = A_1 \text{Ai}(Z_1) + B_1 \text{Bi}(Z_1) \quad (\text{II.91})$$

La condition de continuité

$$\begin{cases} \psi_0(x_1) = \psi_1(x_1) \\ \frac{1}{m_0} \frac{d\psi_0(x_1)}{dx} = \frac{1}{m_1} \frac{d\psi_1(x_1)}{dx} \end{cases} \quad (\text{II.92})$$

$$A_0 e^{ik_0 x_1} + B_0 e^{-ik_0 x_1} = A_1 \text{Ai}(Z_1) + B_1 \text{Bi}(Z_1) \quad (\text{II.94})$$

$$\frac{iK_0}{m_0} (A_0 e^{ik_0 x_1} - B_0 e^{-ik_0 x_1}) = -\left(\frac{2eF}{m_1^2}\right)^{\frac{1}{3}} (A_1 \text{Ai}'(Z_1) + B_1 \text{Bi}'(Z_1)) \quad (\text{II.95})$$

Avec :

$$\begin{cases} Z = \left(\frac{2m_1}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{V_0 - E}{(eF)^{\frac{1}{3}}} - (eF)^{\frac{1}{3}} x\right) \\ \frac{\partial \text{Ai}(Z)}{\partial x} = \frac{\partial Z}{\partial x} \text{Ai}'(Z) \end{cases} \quad (\text{II.96})$$

$$\frac{\partial Z}{\partial x} = -\left(\frac{2m_1 eF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{II.98})$$

$$\begin{pmatrix} e^{ik_0 x_1} & e^{-ik_0 x_1} \\ \frac{ik_0}{m_0} e^{ik_0 x_1} & -\frac{ik_0}{m_0} e^{-ik_0 x_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Ai}(Z_1) & \text{Bi}(Z_1) \\ -\left(\frac{2eF}{m_1^2}\right)^{\frac{1}{3}} \text{Ai}'(Z_1) & -\left(\frac{2eF}{m_1^2}\right)^{\frac{1}{3}} \text{Bi}'(Z_1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II.99})$$

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = W_0^{-1} W_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II.100})$$

Avec

$$W_0 = \begin{pmatrix} e^{ik_0 x_1} & e^{-ik_0 x_1} \\ \frac{ik_0}{m_0} e^{ik_0 x_1} & -\frac{ik_0}{m_0} e^{-ik_0 x_1} \end{pmatrix} \quad (\text{II.101})$$

$$W_1 = \begin{pmatrix} \text{Ai}(Z_1(x_1)) & \text{Bi}(Z_1(x_1)) \\ -\left(\frac{2eF}{m_1^2}\right)^{\frac{1}{3}} \text{Ai}'(Z_1(x_1)) & -\left(\frac{2eF}{m_1^2}\right)^{\frac{1}{3}} \text{Bi}'(Z_1(x_1)) \end{pmatrix} \quad (\text{II.102})$$

L'expression de l'inverse de la matrice W_0 est déterminée par cette relation :

Chapitre II : Effet tunnel résonant

$$W_0^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{-ik_0 x_1} & -\frac{im_0}{k_0} e^{-ik_0 x_1} \\ e^{ik_0 x_1} & \frac{im_0}{k_0} e^{-ik_0 x_1} \end{pmatrix} \quad (\text{II.103})$$

Donc :

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} Ai(Z_1(x_1)) + i\xi Ai'(Z_1(x_1)) e^{-ik_0 x_1} & (Bi(Z_1(x_1)) + i\xi Bi'(Z_1(x_1))) e^{-ik_0 x_1} \\ (Ai(Z_1) - i\xi Ai'(Z_1)) e^{ik_0 x_1} & (Bi(Z_1(x_1)) - i\xi Bi'(Z_1(x_1))) e^{ik_0 x_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II.104})$$

Avec :

$$\xi = \frac{m_0}{k_0} \left(\frac{2eF}{m_1^2 \hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{II.105})$$

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II.106})$$

Avec:

$$M_1 = W_0^{-1} W_1 \quad (\text{II.107})$$

PARTIE (II) : dans cette partie nous définissons les matrices de transfert d'interface $j-1$ et j , avec $2 \leq j \leq 2N - 2$.

A l'interface de la position x_j nous avons :

$$\psi_{j-1}(x) = A_{j-1} Ai(\alpha_{j-1}(x)) + B_j Bi(\alpha_{j-1}(x)) \quad (\text{II.108})$$

$$\psi_j(x) = A_j Ai(\beta_j(x)) + B_j Bi(\beta_j(x)) \quad (\text{II.109})$$

Avec :

$$\alpha_{j-1}(x) = \left(\frac{2m_{j-1}}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left[\frac{V_{j-1}(x) - E}{(eF)^{\frac{2}{3}}} \right] \quad (\text{II.110})$$

$$\beta_j(x) = \left(\frac{2m_j}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left[\frac{V_j(x) - E}{(eF)^{\frac{2}{3}}} \right] \quad (\text{II.111})$$

La condition de continuité :

$$\psi_{j-1}(x_j) = \psi_j(x_j) \quad (\text{II.112})$$

$$\frac{1}{m_{j-1}} \frac{d\psi_{j-1}(x_j)}{dx} = \frac{1}{m_j} \frac{d\psi_j(x_j)}{dx} \quad (\text{II.113})$$

Chapitre II : Effet tunnel résonant

Donc :

$$A_{j-1} \text{Ai}(\alpha_{j-1}(x_j)) + B_{j-1} \text{Bi}(\alpha_{j-1}(x_j)) = A_j \text{Ai}(\beta_j(x_j)) + B_j \text{Bi}(\beta_j(x_j)) \quad (\text{II.114})$$

$$-\left(\frac{2eF}{m_{j-1}^2 \hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \left(A_{j-1} \text{Ai}'(\alpha_{j-1}(x_j)) + B_{j-1} \text{Bi}'(\alpha_{j-1}(x_j)) \right) = -\left(\frac{2eF}{m_j^2 \hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \left(A_j \text{Ai}'(\beta_j(x_j)) + B_{j+1} \text{Bi}'(\beta_j(x_j)) \right) \quad (\text{II.115})$$

Les relations (II.114) et (II.115) s'écrivent sous forme matricielle comme suit :

$$W_{j-1} \begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix} = W_j \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad (\text{II.116})$$

Avec :

$$W_{j-1} = \begin{pmatrix} \text{Ai}(\alpha_{j-1}(x_j)) & \text{Bi}(\alpha_{j-1}(x_j)) \\ \frac{\text{Ai}'(\alpha_{j-1}(x_j))}{m_{j-1}^{2/3}} & \frac{\text{Bi}'(\alpha_{j-1}(x_j))}{m_{j-1}^{2/3}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.117})$$

$$W_j = \begin{pmatrix} \text{Ai}(\beta_j(x_j)) & \text{Bi}(\beta_j(x_j)) \\ \frac{\text{Ai}'(\beta_j(x_j))}{m_j^{2/3}} & \frac{\text{Bi}'(\beta_j(x_j))}{m_j^{2/3}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.118})$$

Donc les amplitudes des fonctions d'onde des régions $j-1$ et j sont reliées par :

$$\begin{pmatrix} A_{j-1} \\ B_{j-1} \end{pmatrix} = M_j \begin{pmatrix} A_j \\ B_j \end{pmatrix} \quad (\text{II.119})$$

Avec :

$$M_j = W_{j-1}^{-1} W_j \quad (\text{II.120})$$

où l'inverse de la matrice W_{j-1} s'écrit comme suit :

$$W_{j-1}^{-1} = \pi \begin{pmatrix} \text{Bi}'(\alpha_{j-1}(x_j)) & -(m_{j-1})^{2/3} \text{Bi}(\alpha_{j-1}(x_j)) \\ -\text{Ai}'(\alpha_{j-1}(x_j)) & (m_{j-1})^{2/3} \text{Ai}(\alpha_{j-1}(x_j)) \end{pmatrix} \quad (\text{II.121})$$

Chapitre II : Effet tunnel résonant

Finalement on peut généraliser la matrice de transfert dans la partie (II) à la forme suivante :

$M_j =$

$$\pi \begin{pmatrix} B_i'(\alpha_{j-1}(x_j)) Ai(\beta_j(x_j)) - \gamma B_i(\alpha_{j-1}(x_j)) Ai(\beta_j(x_j)) & B_i'(\alpha_{j-1}) Bi(\beta_j(x_j)) - \gamma B_i(\alpha_{j-1}(x_j)) B_i'(\beta_j) \\ -Ai'(\alpha_{j-1}(x_j)) Ai(\beta_j) + \gamma Ai(\alpha_{j-1}(x_j)) Ai'(\beta_j(x_j)) & -Ai'(\alpha_{j-1}) Bi(\beta_j(x_j)) + \gamma Ai(\alpha_{j-1}) B_i'(\beta_j) \end{pmatrix} \quad (II.122)$$

$$\text{Avec} \quad \gamma = \left(\frac{m_{j-1}}{m_j} \right)^{2/3} \quad (II.123)$$

Partie (III) : dans cette partie nous définissons les matrices de transfert d'interface $j=2N-1$ et

$j=2N$.

A l'interface de la position x_{2N} nous avons :

$$\psi_{2N-1}(x) = A_{2N-1} Ai(Z_{2n}(x)) + B_{2N-1} Bi(Z_{2n}(x)) \quad (II.124)$$

$$\psi_{2N}(x) = A_{2N} e^{iK_{2N}x} + B_{2N} e^{-iK_{2N}x} \quad (II.125)$$

La condition de continuité

$$\psi_{2N-1}(x_{2N}) = \psi_{2N}(x_{2N}) \quad (II.126)$$

$$\frac{1}{m_{2N-1}} \frac{d\psi_{2N-1}(x_{2N})}{dx} = \frac{1}{m_{2N}} \frac{d\psi_{2N}(x_{2N})}{dx} \quad (II.127)$$

Donc on trouve :

$$A_{2N-1} Ai(Z_{2n}(x_{2N})) + B_{2N-1} Bi(Z_{2n}(x_{2N})) = A_{2N} e^{iK_{2N}x_{2N}} + B_{2N} e^{-iK_{2N}x_{2N}} \quad (II.128)$$

$$- \left(\frac{2eF}{m_{2N-1}^2 \hbar^2} \right)^{1/3} (A_{2N-1} Ai'(Z_{2n}(x_{2N})) + B_{2N-1} Bi'(Z_{2n}(x_{2N}))) = \frac{iK_{2N}}{m_{2N}} (A_{2N} e^{iK_{2N}x_{2N}} - B_{2N} e^{-iK_{2N}x_{2N}}) \quad (II.129)$$

On écrit les deux dernières équations sous forme matricielle

$$W_{2N-1} \begin{pmatrix} A_{2N-1} \\ B_{2N-1} \end{pmatrix} = W_{2N} \begin{pmatrix} A_{2N} \\ B_{2N} \end{pmatrix} \quad (II.130)$$

Avec:

Chapitre II : Effet tunnel résonant

$$W_{2N-1} = \begin{pmatrix} \text{Ai}(Z_{2n}(x_{2N})) & \text{Bi}(Z_{2n}(x_{2N})) \\ -\left(\frac{2eF}{m_{2N-1}^2 \hbar^2}\right)^{1/3} \text{Ai}'(Z_{2n}(x_{2N})) & -\left(\frac{2eF}{m_{2N-1}^2 \hbar^2}\right)^{1/3} \text{Bi}'(Z_{2n}(x_{2N})) \end{pmatrix} \quad (\text{II.131})$$

$$W_{2N} = \begin{pmatrix} e^{iK_{2N}x_{2N}} & e^{-iK_{2N}x_{2N}} \\ \frac{iK_{2N}}{m_{2N}} e^{iK_{2N}x_{2N}} & -\frac{iK_{2N}}{m_{2N}} e^{-iK_{2N}x_{2N}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.132})$$

La relation entre les amplitudes est donnée par :

$$\begin{pmatrix} A_{2N-1} \\ B_{2N-1} \end{pmatrix} = M_{2N} \begin{pmatrix} A_{2N} \\ B_{2N} \end{pmatrix} \quad (\text{II.133})$$

où $M_{2N} = W_{2N-1}^{-1} W_{2N}$

Pour l'inverse de la matrice W_{2N-1}

$$W_{2N-1}^{-1} = \pi \begin{pmatrix} \text{Bi}'(Z_{2n}(x_{2N})) & \frac{\text{Bi}(Z_{2n}(x_{2N}))}{\alpha} \\ -\text{Ai}'(Z_{2n}(x_{2N})) & -\frac{\text{Ai}(Z_{2n}(x_{2N}))}{\alpha} \end{pmatrix} \quad (\text{II.134})$$

Avec:

$$\alpha = \left(\frac{2eF}{m_{2N-1}^2 \hbar^2}\right)^{1/3} \quad (\text{II.135})$$

Donc la matrice de transfert dans la partie (III), en cas générale, s'écrit :

$$M_{2N} = \pi \begin{pmatrix} \left(\text{Bi}'(Z_{2n}(x_{2N})) - i \frac{\text{Bi}(Z_{2n}(x_{2N}))K_{2N}}{\alpha m_{2N}}\right) e^{iK_{2N}x_{2N}} & \left(\text{Bi}'(Z_{2n}(x_{2N})) + i \frac{\text{Bi}(Z_{2n}(x_{2N}))K_{2N}}{\alpha m_{2N}}\right) e^{-iK_{2N}x_{2N}} \\ \left(\text{Ai}'(Z_{2n}(x_{2N})) - i \frac{\text{Ai}(Z_{2n}(x_{2N}))K_{2N}}{\alpha m_{2N}}\right) e^{iK_{2N}x_{2N}} & \left(\text{Ai}'(Z_{2n}(x_{2N})) + i \frac{\text{Ai}(Z_{2n}(x_{2N}))K_{2N}}{\alpha m_{2N}}\right) e^{-iK_{2N}x_{2N}} \end{pmatrix} \quad (\text{II.136})$$

La dernière équation (II.136) conduit à l'expression reliant les amplitudes de la première région ($j = 0$) et de la dernière région ($j = 2N$) par l'expression:

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_{2N} \\ B_{2N} \end{pmatrix} \quad (\text{II.137})$$

où M est une matrice complexe de dimension 2×2 , est appelée la matrice de transfert [81, 82]

qui contient toutes les informations physiques du système.

$$M = \prod_{j=1}^{2N} M_j \quad (\text{II.138})$$

Chapitre II : Effet tunnel résonant

II.5.3. Coefficient de transmission :

Le coefficient de transmission noté (T) est évidemment inférieur ou égal à 1 et sa valeur est exprimé par le rapport entre le courant de probabilité transmis (noté par J_{trans}) et le courant de probabilité incident (noté par J_{inc}), et également exprimé par la probabilité de transport d'un électron à travers une barrière de potentiel.

$$T = \frac{J_{\text{trans}}}{J_{\text{inc}}} \quad (\text{II.139})$$

Le courant de probabilité est le courant transporté par un électron incident traversant la barrière, est donné par l'expression suivante:

$$\vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m^*} [\Psi(x)\vec{\nabla}\Psi(x, t)^* - \Psi(x)^*\vec{\nabla}\Psi(x)] \quad (\text{II.140})$$

où m^* représente la masse effective de l'électron et $\Psi(x)$ sa fonction d'onde dans tout l'espace.

J_{inc} et J_{trans} sont définies suivant la direction x par :

$$J_{\text{inc}} = \frac{i\hbar}{2m^*} \left[\Psi_{\text{inc}}(x) \frac{d}{dx} \Psi_{\text{inc}}(x)^* - \Psi_{\text{inc}}(x, t)^* \frac{d}{dx} \Psi_{\text{inc}}(x) \right] \quad (\text{II.141})$$

$$J_{\text{trans}} = \frac{i\hbar}{2m^*} \left[\Psi_{\text{trans}}(x) \frac{d}{dx} \Psi_{\text{trans}}(x)^* - \Psi_{\text{trans}}(x)^* \frac{d}{dx} \Psi_{\text{trans}}(x) \right] \quad (\text{II.142})$$

où $\Psi_{\text{inc}}(x)$ et $\Psi_{\text{trans}}(x)$ représentent la fonction d'onde incidente et la fonction d'onde transmise respectivement, elles sont données par :

$$\Psi_{\text{inc}}(x) = A_0 e^{ik_0 x} \quad (\text{II.143})$$

$$\Psi_{\text{trans}}(x) = A_{2N} e^{ik_{2N} x} \quad (\text{II.144})$$

Avec :

$$k_0 = \sqrt{\frac{2m_0 E}{\hbar^2}} \quad (\text{II.145})$$

$$k_{2N} = \sqrt{\frac{2m_{2N}(E+edF)}{\hbar^2}} \quad (\text{II.146})$$

Chapitre II : Effet tunnel résonant

Donc l'expression de coefficient de transmission T devient :

$$T = \frac{J_{\text{trans}}}{J_{\text{inc}}} = \frac{k_{2N} m_0}{k_0 m_{2N}} \left| \frac{A_{2N}}{A_0} \right|^2 \quad (\text{II.147})$$

En utilisant la relation (II.147) qui donne :

$$A_0 = M_{11} A_{2N} + M_{12} B_{2N} \quad (\text{II.148})$$

$$B_0 = M_{21} A_{2N} + M_{22} B_{2N} \quad (\text{II.149})$$

Où M_{11} , M_{12} , M_{21} et M_{22} sont les éléments de la matrice M. On a $B_{2N}=0$ alors la relation entre A_0 et A_{2N} est donnée par :

$$A_0 = M_{11} A_{2N} \quad (\text{II.150})$$

C'est-à-dire :

$$\left| \frac{A_{2N}}{A_0} \right| = |M_{11}|^{-1} \quad (\text{II.151})$$

Ce dernier est quantifié par le coefficient de transmission $T(E)$ qui est donné par l'expression suivante [14]:

$$T(E) = \frac{k_{2N} m_0}{k_0 m_{2N}} |M_{11}|^{-2} \quad (\text{II.152})$$

où M_{11} est l'élément matriciel de la première rangée (ligne) et de la première colonne de la matrice de transfert M.

Le coefficient de transmission $T(E)$ joue un rôle important dans la résolution d'équation de Schrödinger par la méthode de matrice de transfert pour déterminer les énergies de résonance, ces dernières qui sont représentées par les pics du graphe d'allure du coefficient de transmission $T(E)$ en fonction d'énergie E.

II.5.4. La matrice de transfert approchée

La matrice de transfert approchée utilise le fait que la solution analytique de l'équation de Schrödinger est disponible pour un potentiel constant ou linéaire. Un potentiel arbitraire peut être traité en approchant des termes de petits segments dans lesquels le potentiel est constant. Dans le cas où le potentiel est constant la solution de l'équation de Schrödinger est donnée par des fonctions de formes exponentielles complexes (fonctions d'onde planes), tandis que pour les segments où le potentiel est linéaire la fonction d'onde de la solution d'équation de Schrödinger est donnée par les fonctions Airy.

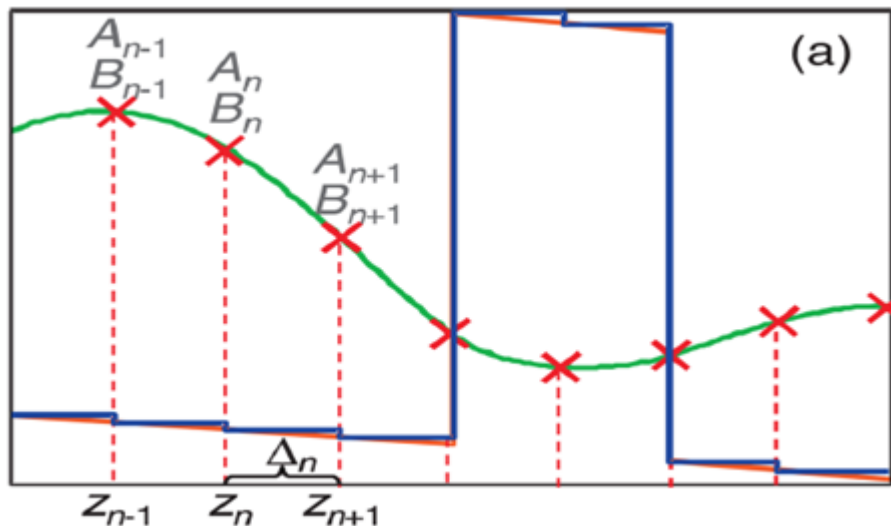


Figure II.6: Solution numérique de l'équation de Schrödinger unidimensionnel par la matrice de transfert approchée [84].

Nous commençons par diviser la structure en petits segments (méthode de discrétisation) de potentiel constant tout en prenant un compte la discontinuité en bord de bande.

$$z_n \leq z < z_n + \Delta_n = z_{n+1} \quad (\text{II.153})$$

Pour les segments appartenant à la même région :

$$V_{n+1}(z_{n+1}) = V_n(z_n) \quad , \quad m_n^* = m^*(z_n) \quad (\text{II.154})$$

Si les segments n et $n + 1$ se situent à la frontière entre deux régions :

Chapitre II : Effet tunnel résonant

$$v_n \rightarrow v_{n+1}, m_n^* \rightarrow m_{n+1}^* \quad (\text{II.155})$$

La solution de l'équation de Schrödinger dans le segment n est donnée par :

$$\Psi(z) = A_n \exp[iK_n(z - z_n)] + B_n \exp[-iK_n(z - z_n)] \quad (\text{II.156})$$

$$K_n = \frac{\sqrt{2m_n^*(V_n - E)}}{\hbar} \quad (\text{II.157})$$

où les conditions de continuité sont données par :

$$\Psi(z_0^+) = \Psi(z_0^-) \quad (\text{II.158})$$

$$\frac{[\partial_z \Psi(z_0^+)]}{m^* \partial(z_0^+)} = \frac{[\partial_z \Psi(z_0^-)]}{m^* \partial(z_0^-)} \quad (\text{II.159})$$

où z_0^+ et z_0^- désignent les positions directement à droite et à gauche de la position z_n , les amplitudes A_{n+1} et B_{n+1} peuvent être liées à A_n et B_n par :

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = T_{n,n+1} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} \quad (\text{II.160})$$

où la matrice de transfert $T_{n,n+1}$ est donnée par :

$$T_{n,n+1} = T_{n \rightarrow n+1} T_n(\Delta_n) = \begin{pmatrix} \frac{\check{K}_{n+1} + \check{K}_n}{2\check{K}_{n+1}} e^{iK_n \Delta_n} & \frac{\check{K}_{n+1} - \check{K}_n}{2\check{K}_{n+1}} e^{-iK_n \Delta_n} \\ \frac{\check{K}_{n+1} - \check{K}_n}{2\check{K}_{n+1}} e^{iK_n \Delta_n} & \frac{\check{K}_{n+1} + \check{K}_n}{2\check{K}_{n+1}} e^{-iK_n \Delta_n} \end{pmatrix} \quad (\text{II.161})$$

Avec :

$$\check{K}_n = \frac{K_n}{m_n^*} \quad (\text{II.162})$$

$$T_n(\Delta_n) = \begin{pmatrix} e^{iK_n \Delta_n} & 0 \\ 0 & e^{-iK_n \Delta_n} \end{pmatrix} \quad (\text{II.163})$$

Chapitre II : Effet tunnel résonant

Cette dernière relation correspond à la matrice de transfert pour un potentiel obtenu par l'équation (II.156), donc l'expression (II.161) devient:

$$T_{n \rightarrow n+1} = \frac{1}{2\check{K}_{n+1}} \begin{pmatrix} \check{K}_{n+1} + \check{K}_n & \check{K}_{n+1} - \check{K}_n \\ \check{K}_{n+1} - \check{K}_n & \check{K}_{n+1} + \check{K}_n \end{pmatrix} \quad (\text{II.164})$$

$T_{n \rightarrow n+1}$ est la matrice de transfert pour l'interface z_n entre les segments n et $n+1$.

Pour une structure divisée en N segments, la relation entre les amplitudes aux limites gauche et droite de la structure, A_0 , B_0 et A_N , B_N , est obtenue en multipliant les matrices pour tous les segments.

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = T_{N-1,N} T_{N-2,N} \dots T_{0,1} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.165})$$

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.166})$$

Cette équation doit être complétée par des conditions aux limites, pour une hétérostructure de laser à cascade quantique. Nous pouvons limiter notre simulation à une période et nous supposons que $\Psi(z) = 0$ aux extrémités d'une période.

Les énergies correspondantes sont les valeurs propres des états. Numériquement ces énergies sont données par les pics du coefficient de transmission ou par la méthode dite de tir (shooting methode) voir annexe.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons utilisé la méthode de la matrice de transfert basée sur la solution exacte de l'équation de Schrödinger dans chaque région d'une structure polarisée sous un champ électrique uniforme dans laquelle réside un potentiel linéaire, et par conséquent la solution de l'équation de Schrödinger est donnée par les fonctions d'Airy. L'objectif d'utilisation de la méthode de la matrice de transfert est la détermination des amplitudes des fonctions d'onde et le calcul des énergies des transitions électroniques basé sur les pics du

Chapitre II : Effet tunnel résonant

coefficient de transmission. Ces énergies permettent d'obtenir les longueurs d'onde des transitions électroniques de structure super-réseau.

CHAPITRE III

Résultats et discussion

Chapitre III : Résultats et discussion

III.1 Introduction

Plusieurs paramètres physiques ont été utilisés pour améliorer les performances et l'efficacité des LCQ tel que la température de fonctionnement, la densité de dopage, la densité de courant de seuil, l'énergie de transitions, la longueur d'onde ...etc. La modélisation et l'optimisation des performances des lasers à cascade quantique LCQ dépendent principalement de la réduction de la densité de courant de seuil J_{th} et de la capacité de contrôle des niveaux d'énergie électroniques quantifiés du super-réseau sous la variation du champ électrique appliqué et de la densité de dopage.... Nous devrions mentionner ici que l'effet tunnel résonant est important pour obtenir des LCQ [3].

A cet effet ce chapitre est divisé en deux parties : la première partie concerne l'étude et le calcul de l'influence de la température et de la densité surfacique de dopage sur la densité de courant de seuil. La deuxième partie traite les super-réseaux à effet tunnel résonant à base de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ pour leur application dans des lasers à cascade quantique LCQ.

III.2. La densité de courant de seuil

Dans un milieu actif l'étude de l'influence de la densité de dopage sur les performances des lasers à cascade quantique est basée sur le self-consistent des équations de Schrödinger-Poisson (voir annexe) comme le montre la figure.III.1. L'approche théorique pour simuler le transport d'électrons est basée sur un modèle appelé équations du bilan (rate equations).

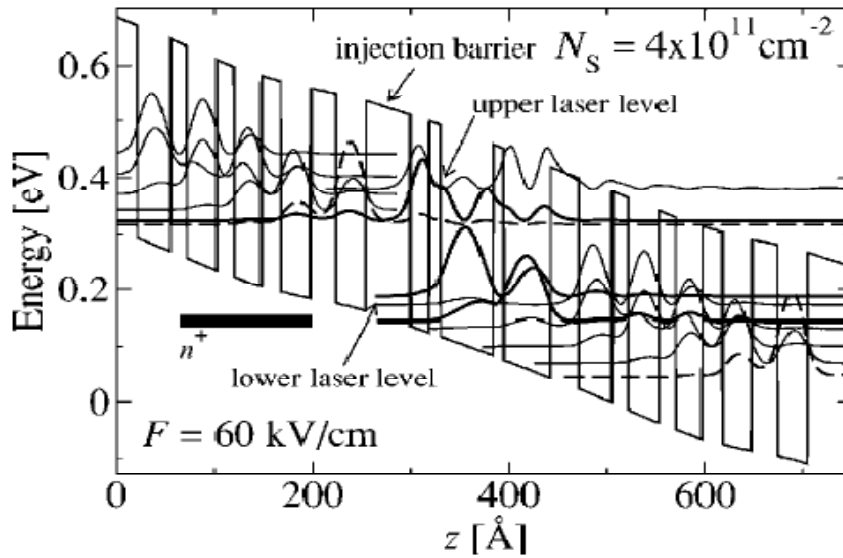


Figure III.1: Diagramme schématique du profil de la bande de conduction calculé par self-consistent equation de Schrodinger-poisson, représente les niveaux d'énergie et le carré des fonctions d'onde pour structure $\text{Al}_{45}\text{Ga}_{55}\text{As}/\text{GaAs}$ sous un champ électrique externe de 60 kV/cm et la région de l'injecteur dopée par $4.1 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ [87]

Dans cette première partie on considère un milieu actif à trois niveaux. Un système d'équations des taux de relaxations, utilisé pour décrire le dynamique de porteurs et le nombre de photons dans chaque niveau dans les lasers à cascade quantique, où l'émission spontanée peut être négligée [44]. En tenant compte de la population activée thermiquement dans les états laser inférieur (niveau 2) et supérieur (niveau 3) n_2^{therm} et n_3^{therm} respectivement. La représentation schématique du milieu actif est donnée dans la figure ci-dessus:

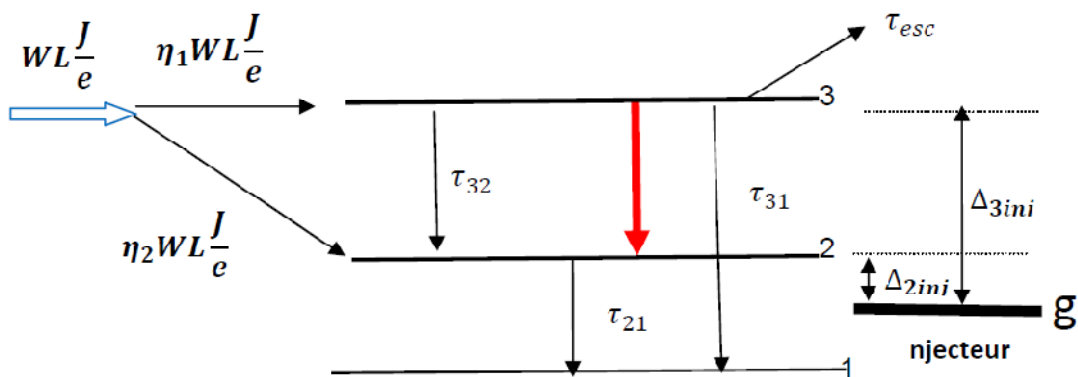


Figure III. 2: Modèle de laser à trois niveaux en tenant compte de la population activée thermiquement dans les états inférieur et supérieur respectivement.

Les équations du bilan sont données par [85]:

Chapitre III : Résultats et discussion

$$\frac{dN_3}{dt} = \eta WL \frac{J}{e} - \frac{N_3 - WLn_3^{\text{therm}}}{\tau_3} - \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} (N_3 - N_2) N_{\text{ph}} \quad (\text{III.1.A})$$

$$\frac{dN_2}{dt} = (1 - \eta) WL \frac{J}{e} + \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} (N_3 - N_2) N_{\text{ph}} - \frac{N_2 - WLn_2^{\text{therm}}}{\tau_{21}} + \frac{N_3 - WLn_3^{\text{therm}}}{\tau_{32}} \quad (\text{III.1.B})$$

$$\frac{dN_{\text{ph}}}{dt} = N \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} (N_3 - N_2) N_{\text{ph}} - \frac{N_{\text{ph}}}{\tau_p} \quad (\text{III.1.C})$$

III.2.1. Calcul de l'inversion de population

Dans un régime stationnaire, les dérivées temporelles des équations du bilan sont nulles, en conséquence

elles représentent un système d'équations dont les inconnus N_1 , N_2 et N_3 , sont donnés par :

$$N_3 = \left(\Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} N_{\text{ph}} + \frac{\eta}{\tau_{21}} \right) \omega L \frac{J}{e} + \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} N_{\text{ph}} \frac{WLn_2^{\text{therm}}}{\tau_{21}} + \left(\frac{1}{\tau_{21} \tau_3} + \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} N_{\text{ph}} \left(\frac{\tau_{32} - \tau_3}{\tau_{32} \tau_3} \right) \right) WLn_3^{\text{therm}} / \Delta \quad (\text{III.2})$$

$$N_2 = \left(\Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} N_{\text{ph}} + \frac{\eta}{\tau_{32}} - \frac{\eta}{\tau_3} + \frac{1}{\tau_3} \right) \omega L \frac{J}{e} + \left(\Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} N_{\text{ph}} + \frac{1}{\tau_3} \right) \frac{WLn_2^{\text{therm}}}{\tau_{21}} + \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} N_{\text{ph}} \left(\frac{\tau_{32} - \tau_3}{\tau_{32} \tau_3} \right) WLn_3^{\text{therm}} / \Delta \quad (\text{III.3})$$

Avec :

$$\Delta = \left[\frac{1}{\tau_3 \tau_{21}} + \Gamma \frac{C' \sigma_{32}}{V} N_{\text{ph}} \left(\frac{1}{\tau_{21}} - \frac{1}{\tau_3} + \frac{1}{\tau_3} \right) \right] \quad (\text{III.4})$$

L'inversion de population $\Delta N = N_3 - N_2$ s'écrit alors sous la forme :

$$\Delta N = \left[\left(\frac{\eta}{\tau_{21}} - \frac{\eta}{\tau_{32}} - \frac{1}{\tau_3} + \frac{\eta}{\tau_3} \right) \omega L \frac{J}{e} - \frac{WLn_2^{\text{therm}}}{\tau_3 \tau_{21}} + \frac{WLn_3^{\text{therm}}}{\tau_3 \tau_{21}} \right] / \Delta \quad (\text{III.5})$$

On peut écrire la dernière équation sous la forme :

$$\Delta N(T) = \frac{\left(\left(1 - \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_{32}(T)} \right) \eta - (1 - \eta) \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_3(T)} \right) \tau_3(T) WL \frac{J}{e} - WLn_2^{\text{therm}} + WLn_3^{\text{therm}}}{1 + \frac{N_{\text{ph}}}{N_{\text{ph,sat}}(T)}} \quad (\text{III.6})$$

$N_{\text{ph,sat}}(T)$ représente le nombre de photons de saturation qui est donné par la relation [44]:

$$N_{\text{ph,sat}}(T) = \frac{V}{\Gamma C' \sigma_{32} \left(1 + \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_{31}(T)} + \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_{\text{th}}} \right) \tau_3(T)} \quad (\text{III.7})$$

La densité de courant de seuil peut être déterminée d'après la relation (I.80) et on obtient :

$$J_{th} = \frac{1}{\left(\left(1 - \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_{32}(T)} \right) \eta - (1 - \eta) \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_3(T)} \right) \tau_3(T)} \left[\frac{\varepsilon_0 n_{eff} \lambda L_P 2 \gamma_{32} (\alpha_w + \alpha_m)}{4 \pi e z_{32}^2 \Gamma} + e n_2^{therm} - e n_3^{therm} \right] \quad (III.8)$$

Cette dernière relation représente l'expression de la densité de courant de seuil en tenant compte de la population activée thermiquement dans les états inférieur et supérieur n_2^{therm} et n_3^{therm} respectivement. Lorsque on néglige n_2^{therm} et n_3^{therm} l'expression de la densité de courant de seuil est en accord avec la relation trouvée dans les références [44,86].

III.2.2. Activation thermique de population

Pour évaluer l'influence de la densité de dopage sur la densité de courant de seuil, on utilise les expressions de population thermique n_2^{therm} et n_3^{therm} des niveaux 2 et 3 respectivement, qui sont en équilibre thermodynamique de Boltzmann définies par la température T et la densité de dopage de l'injecteur n_s comme suit:

$$n_2^{therm} = n_s \exp \left(- \frac{\Delta_{2inj}}{kT} \right) \quad (III.9.A)$$

$$n_3^{therm} = n_s \exp \left(- \frac{\Delta_{3inj}}{kT} \right) \quad (III.9.B)$$

Δ_{2inj} est la différence d'énergie entre le niveau 2 et le potentiel chimique de l'injecteur g, et Δ_{3inj} est la différence d'énergie entre le niveau 3 et le potentiel chimique de l'injecteur g.

En remplaçant les équations (III.9.A) et (III.9.B) dans l'équation (III.8), alors la densité de courant de seuil devient dépendante de la température et de la densité de dopage de l'injecteur comme suit:

$$J_{th}(T, n_s) = J_{th}(T) + \frac{e n_s \left(\exp \left(- \frac{\Delta_{2inj}}{kT} \right) - \exp \left(- \frac{\Delta_{3inj}}{kT} \right) \right)}{\tau_{eff}(T)} \quad (III.10)$$

où $\tau_{eff}(T) = \left(\left(1 - \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_{32}(T)} \right) \eta - (1 - \eta) \frac{\tau_{21}(T)}{\tau_3(T)} \right) \tau_3(T)$ représente la durée de vie effective. Le premier terme $J_{th}(T)$ est calculé par le modèle de Hamadou [44], où pour une densité surfacique de dopage de l'injecteur n_{s0} est égal à $4,1 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, donc l'équation. (III.10) devient:

$$J_{th}(T, n_s) = J_{th}(T, n_{s0}) + \frac{en_s \left(\exp\left(-\frac{\Delta_{2inj}}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{\Delta_{3inj}}{kT}\right) \right)}{\tau_{eff}(T)} \quad (III.11)$$

III.2.2.1. Détermination des expressions de Δ_{2inj} et Δ_{3inj}

Par conformité de l'équation. (III.11) avec la relation $j_{th}(N_s) \times (kA/cm^2) = j_{th}(4.1) + \gamma(N_s - 4.1)$ publié dans la référence [87] donnant la densité de courant de seuil en fonction du dopage de l'injecteur. Nous trouvons que le premier terme $J_{th}(T, n_{s0})$ dépend de la densité surfacique de référence n_{s0} , et il est égal à $4,1 \times 10^{11} cm^{-2}$. Alors que dans le second terme la densité de dopage N_s est donnée en $10^{11} cm^{-2}$. Cette conformité donne un système de deux équations dépendant des valeurs des températures T_1 et T_2 , dans le but de déterminer les valeurs de Δ_{2inj} et Δ_{3inj} , qui sont définis comme suit:

$$\frac{en_s \left(\exp\left(-\frac{\Delta_{2inj}}{kT_1}\right) - \exp\left(-\frac{\Delta_{3inj}}{kT_1}\right) \right)}{\tau_{eff}(T_1)} = \gamma_1 (N_s - 4.1) \quad (III.12.A)$$

$$\frac{en_s \left(\exp\left(-\frac{\Delta_{2inj}}{kT_2}\right) - \exp\left(-\frac{\Delta_{3inj}}{kT_2}\right) \right)}{\tau_{eff}(T_2)} = \gamma_2 (N_s - 4.1) \quad (III.12.B)$$

où γ_1 et γ_2 sont des constantes expérimentales déterminées aux températures T_1 et T_2 respectivement. Les équations. (III.12.A) et (III.12.B) forment un système d'équations non linéaires avec deux inconnues Δ_{2inj} et Δ_{3inj} . Pour $T_2/T_1 = 3$ et en supposant que $Y = \exp\left(-\frac{\Delta_{2inj}}{kT_2}\right)$ et $X = \exp\left(-\frac{\Delta_{3inj}}{kT_2}\right)$ le système conduit à résoudre une équation quadratique de la forme:

$$3\alpha_2 X^2 + 3\alpha_2^2 X + \alpha_2^3 - \alpha_1 = 0 \quad (III.13.A)$$

$$\text{et} \quad Y = \alpha_2 + X \quad (III.13.B)$$

Avec

$$\alpha_1 = \gamma_1 (N_s - 4.1) \tau_{eff}(T_1) / en_s \quad (III.14.A)$$

$$\alpha_2 = \gamma_2 (N_s - 4.1) \tau_{eff}(T_2) / en_s \quad (III.14.B)$$

Alors les expressions de Δ_{2inj} et Δ_{3inj} sont données comme suit:

$$\Delta_{2inj} = -KT_2 \text{Ln}(Y) \quad (\text{III.15.A})$$

$$\Delta_{3inj} = -KT_2 \text{Ln}(X) \quad (\text{III.15.B})$$

Dans ce modèle Δ_{2inj} et Δ_{3inj} sont affectés par la variation de la concentration de dopage, où les valeurs exactes de Δ_{2inj} et Δ_{3inj} sont incluses dans le premier terme de la densité de courant de seuil de l'Equation (III.11). Nous pouvons remplacer Δ_{2inj} et Δ_{3inj} par $\Delta\Delta_{2inj}$ et $\Delta\Delta_{3inj}$ respectivement, où, $\Delta\Delta_{2inj}$ et $\Delta\Delta_{3inj}$ dans ce cas représentent respectivement le décalage de la différence d'énergie entre le niveau supérieur et inférieur et le potentiel chimique de l'injecteur avec leurs valeurs exactes. Par exemple, pour calculer la valeur exacte de Δ_{2inj} on utilise la relation $V_p = (\hbar\omega + \Delta_{2inj})/e$ [88], où V_p est la tension appliquée à une période qui peut être exprimée par $V_p = F L_p$, où F est l'intensité du champ électrique appliquée sur la structure.

III.2.3. Calcul numérique

Dans cette première partie comme nous avons dit précédemment, nous traitons les dépendances de la densité de courant de seuil et de la puissance de sortie avec la variation de la température et de la densité de dopage de la structure rapportée en référence [87]. Dans notre calcul numérique, nous utilisons les paramètres à $T = 77\text{K}$ [87, 89,90]. Certains paramètres peuvent être fixés avec la température comme indique le Tableau III.1 et certains paramètres varient avec la température comme indique le Tableau III.2.

Chapitre III : Résultats et discussion

Paramètres	Symbole	Valeur
La longueur d'onde d'émission laser LCQ	λ	$9\mu\text{m}$
l'élément de transition dipolaire optique	z_{32}	1.7nm
l'indice de réfraction de la structure laser en cascade	n_{eff}	3.27
les pertes du guide	α_w	18cm^{-1}
les pertes de miroirs	α_m	6cm^{-1}
l'énergie d'activation	ΔE_{act}	58meV
le facteur de confinement	Γ	0.32
la longueur d'une période de la structure laser en cascade	L_p	45nm
l'étendue approximative de la fonction d'onde d'état $n = 3$	L_z	10nm
la longueur de la cavité	L	1mm
la largeur de la cavité	W	$34\mu\text{m}$
la masse effective pour l'électron dans le puits	m^*	$0.067m_0$
constante expérimentale déterminé à la température T_1	γ_1	0.91KA
constante expérimentale déterminé à la température T_2	γ_2	2.91KA
température T_1	T_1	80K
température T_2	T_2	240K

Tableau III.1: Les paramètres utilisés et restent constants dans le calcul.

Paramètres	Symbole	Valeur
Le temps de diffusion des électrons entre les états 3 et 2.	τ_{32}	2.1ps
Le temps de diffusion des électrons entre les états 2 et 1	τ_{21}	0.3ps
La durée de vie de l'électron dans le niveau 3	τ_3	1.4ps
La largeur totale à mi-hauteur FWHM	$2\gamma_{32}$	12meV

Tableau III.2: Les paramètres utilisés dans le calcul et varient avec la température.

III.2.3.1. Modélisation de l'influence de la température sur la densité de courant de seuil

Maintenant, nous représentons la densité de courant de seuil en fonction de la température comme définie dans l'équation (III.11) pour une densité de dopage $n_s = 4.1 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$, dans ce cas le second terme de l'équation (III.11) dépend de la variation de la densité de dopage qui disparaît lorsque $\Delta\Delta_{2inj}$ est égal à $\Delta\Delta_{3inj}$ et prend la valeur de 7,49 meV. Le modèle dans ce cas est identique au modèle rapporté par Hamadou et al. [44] dont le résultat de calcul est illustré dans la figure III.3. Notre modèle montre qu'à $T = 292\text{K}$ une erreur de 10,22% a été trouvée par rapport au résultat expérimental rapporté dans la référence [87]. Cette erreur est due à la variation de l'injection fractionnaire η , où dans nos calculs, nous avons pris la valeur de $\eta=1$ fixée pour différentes valeurs de température. On peut dire que les résultats obtenus par les calculs théoriques sont en bon accord avec les données expérimentales.

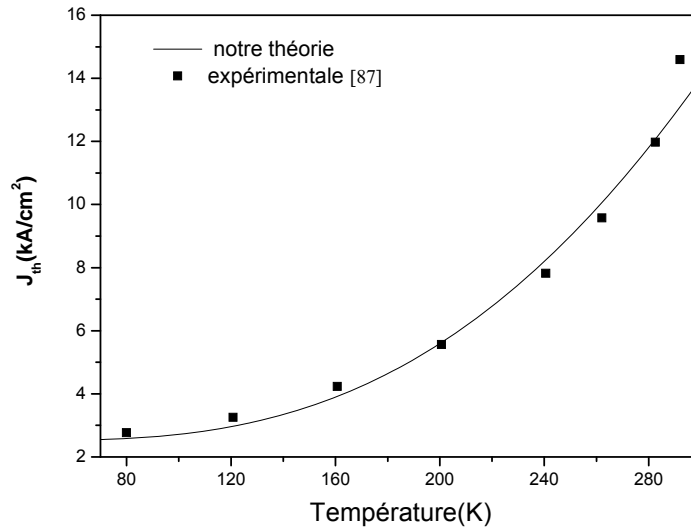


Figure III.3: Variation du courant de seuil en fonction de la température avec une comparaison entre notre modèle et les données expérimentales [87].

Tandis que dans la figure III.4, nous avons présenté la variation des temps de relaxation τ_{31} , τ_{21} , τ_{32} et τ_3 en fonction de la température [47].

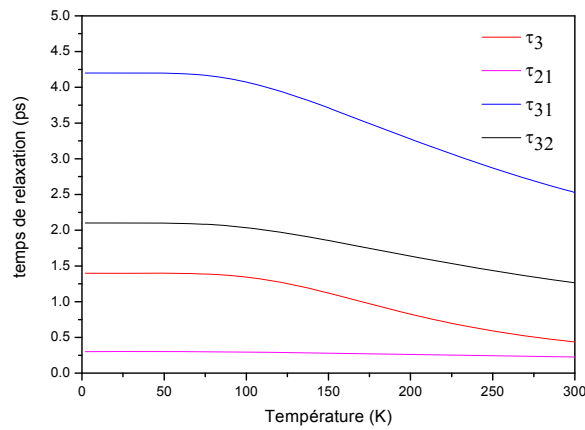


Figure III.4: Evolution de la variation des temps de relaxations dans notre simulation en fonction de la température.

III.2.3.2. Modélisation de l'influence de dopage sur la densité de courant de seuil

La dépendance de la densité de courant de seuil avec la densité surfacique de dopage [91-94] de l'injecteur n_s est indiquée dans la figure.III.5 pour les valeurs $n_s = 4.1$ et $6.5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, elle montre clairement que la proportionnalité est quasi linéaire de la densité du courant de seuil avec la densité surfacique de dopage, pour la densité surfacique de dopage de l'injecteur $5.2 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ on trouve $\Delta\Delta_{2inj} = 7.2 \text{meV}$ et $\Delta\Delta_{3inj} = 7.8 \text{meV}$ et pour la densité surfacique de dopage de l'injecteur $6.5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ nous trouvons $\Delta\Delta_{2inj} = 6.98 \text{meV}$ et $\Delta\Delta_{3inj} = 8.03 \text{meV}$. La figure III.5 montre également une comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux, nous remarquons que pour la température $T = 240 \text{K}$ sont en très bon accord, mais pour $T = 80 \text{K}$ ils présentent un petit décalage correspondant à la densité surfacique de dopage $6.5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$. Ce décalage est probablement dû en raison de plusieurs paramètres dans notre modèle ils ont pris comme des constants avec la variation de la température et la densité de dopage, comme la longueur d'onde, le facteur de confinement de mode, et l'élément de transition dipolaire optique. Ces paramètres qui devraient avoir un impact important sur la performance des lasers à cascade quantique.

La figure III.6 représente la variation de la densité de courant de seuil en fonction de la température pour différentes densités surfaciques de dopage $n_s = 4.1 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, $5.6 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ et $6.5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$. A partir de cette figure on peut remarquer que la densité de courant de seuil est proportionnelle à la densité de dopage de l'injecteur.

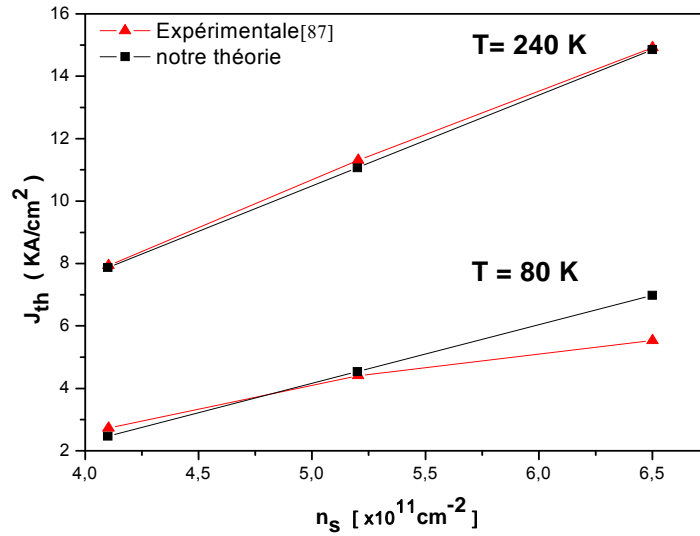


Figure III.5 : Variation du courant de seuil en fonction de la densité surfacique de dopage d’injecteur avec une comparaison entre notre modèle et les données expérimentales [87]

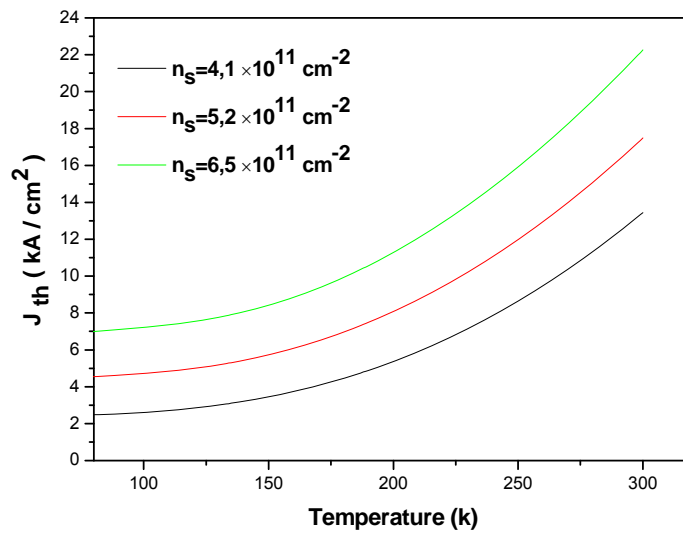


Figure III.6: Variation du courant de seuil en fonction de la température.

III.3. La Puissance de sortie

La puissance de sortie est liée au nombre de photons, elle peut être écrite par cette relation [44]:

$$P_{\text{sortie}} = \eta_0 \hbar \omega N_{\text{ph}} / \tau_p \quad (\text{III.16})$$

Chapitre III : Résultats et discussion

où $\hbar\omega$ est l'énergie du laser et η_0 est l'efficacité donnée par:

$$\eta_0 = \frac{(1-R_1)\sqrt{R_2}}{(1-R_1)\sqrt{R_2} + (1-R_2)\sqrt{R_1}} \frac{\alpha_m}{\alpha_w + \alpha_m} \quad (\text{III.17})$$

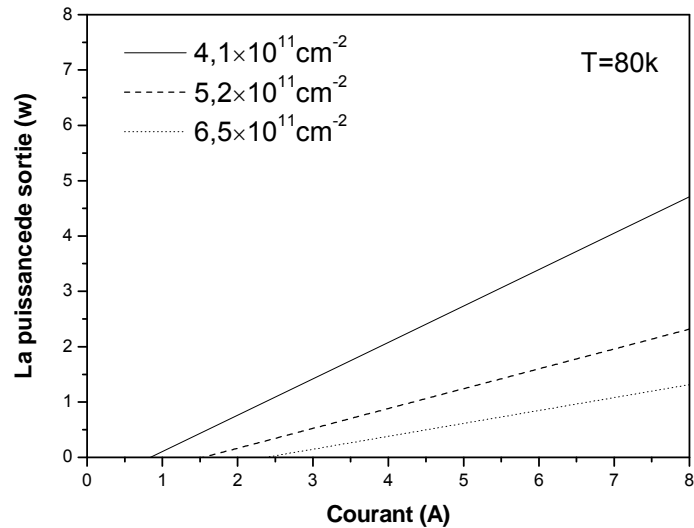


Figure III.7: Variation de la puissance de sortie en fonction du courant d'injection à T = 80k

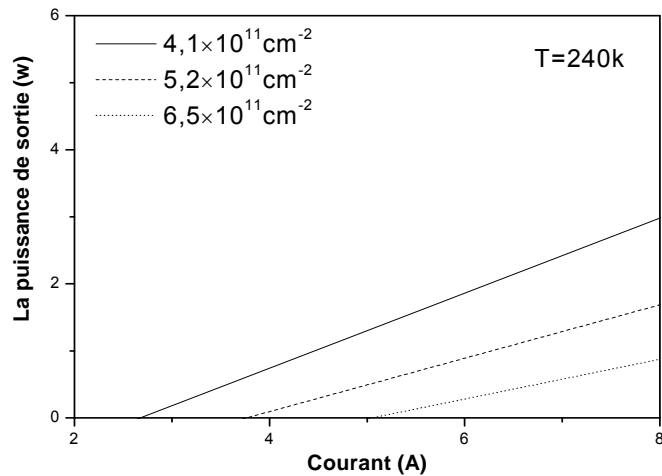


Figure III.8: Variation de la puissance de sortie en fonction du courant d'injection à T = 240k

la puissance de sortie est représentée sur les figures III.7 et III.8 en fonction du courant d'injection pour différentes densités surfaciques de dopage $n_s = 4,1 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $5,6 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ et

Chapitre III : Résultats et discussion

$6.5 \cdot 10^{11} \text{cm}^{-2}$ pour des températures $T = 80\text{K}$ et $T = 240\text{K}$. Nous notons que la puissance optique de sortie diminue avec la température, le courant d'injection et la densité de dopage.

III.4. L'effet tunnel résonant

Les composants à effet tunnel résonnant ont un grand rôle dans le domaine des matériaux pour l'optoélectronique, qui caractérisent la puissance et le changement des concepts d'ingénierie quantique. Le transport des porteurs de charges dans ces composants est basé sur le principe de l'effet tunnel résonnant qui présente un champ d'application important dans la fabrication des dispositifs très performants comme LCQ.

III.4.1. Hétéro structure à quatre barrières

On considère une hétéro structure de quatre barrières ($2N=8$) d'un composé AlGaAs /GaAs de couches de semi-conducteurs, où AlGaAs représente les régions barrières et GaAs représente les régions puits dans le schéma énergétique d'une hétéro structure produite par de nombreuses couches alternées de GaAs et $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Cette structure a été considérée dans la littérature [22,57,95,96]. Nous appliquons un champ électrique F à cette structure (Figure III.9).

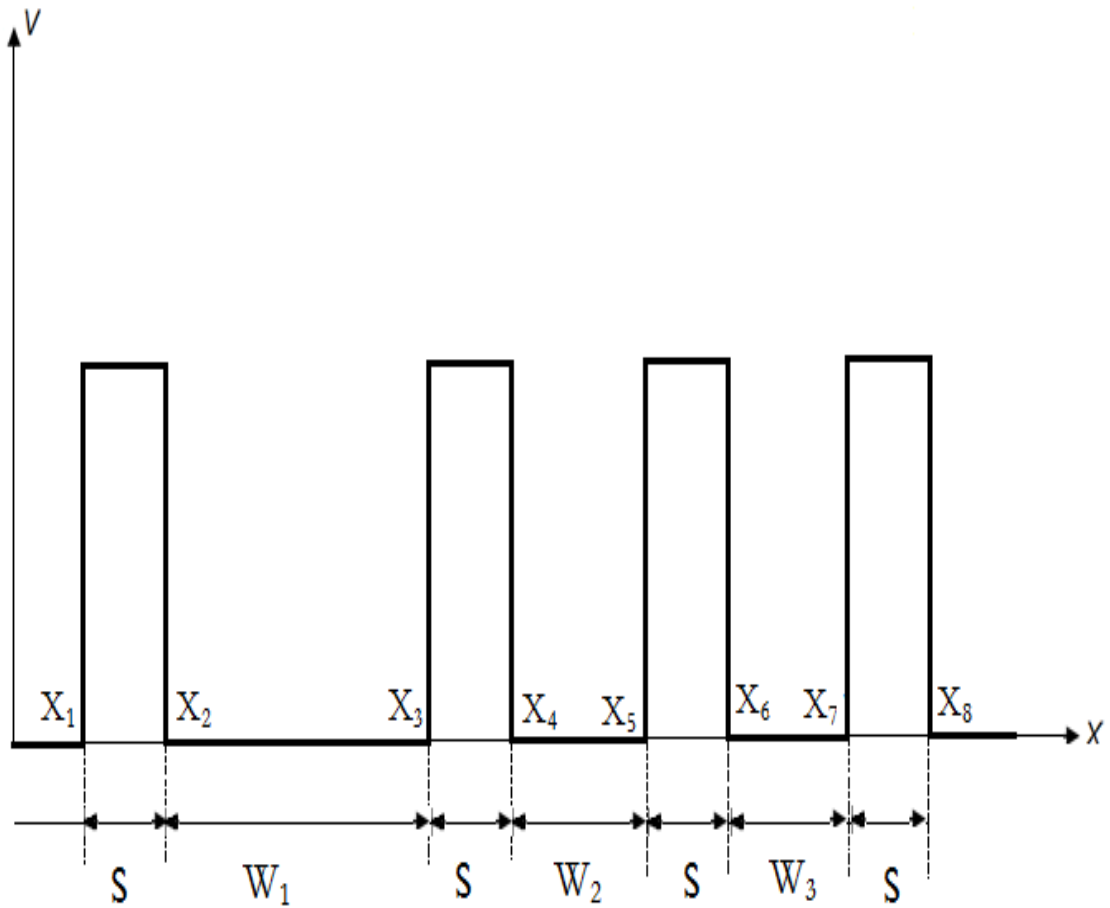
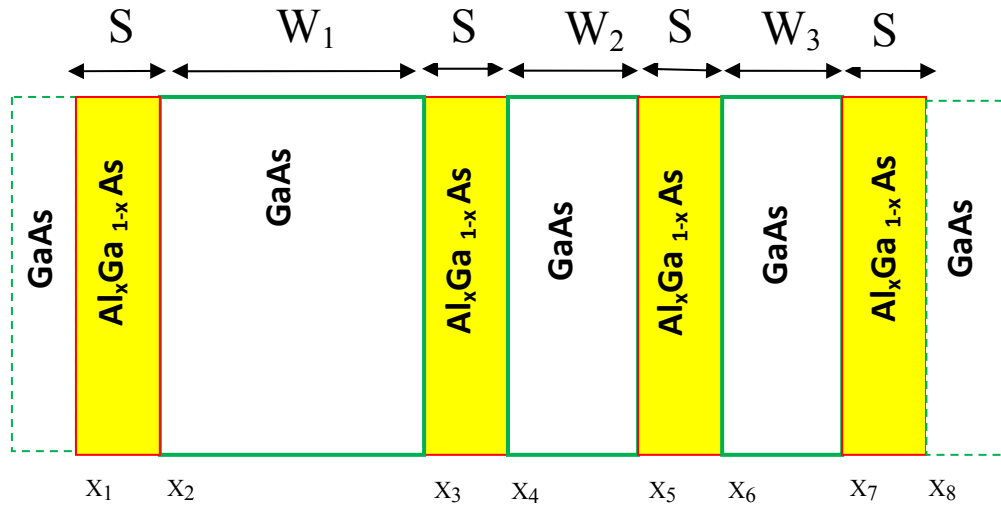


Figure III.9: Structure d'un super-réseau à quatre barrières : a) Représentation schématique, b) Profil de l'énergie potentielle en absence d'un champ électrique.

III.4.2. La résonance avec le phonon optique longitudinal

Dans cette partie, on s'intéresse à l'étude d'un laser à cascade quantique à partir d'une structure super réseau. Pour obtenir un laser à cascade quantique l'énergie de transition du premier état excité vers l'état fondamental doit être en résonance avec l'énergie du phonon optique longitudinal [2] tel que :

$$E_2 - E_1 = \hbar\omega_{LO} \quad (\text{III.18})$$

L'idée est de trouver un champ électrique approprié qui vérifie la condition (III.18). Pour cela, on change F et on calcule la différence d'énergie $E_2 - E_1$. Pour GaAs, nous devons avoir:

$$E_2 - E_1 \sim 35 \text{ meV} \quad (\text{III.19})$$

III.4.4. La variation de l'énergie en fonction du champ électrique (F)

Dans cette étude, nous considérons la structure du super réseau indiqué dans la figure III.9 , où la largeur des barrières $S = 35 \text{ \AA}$, et les largeurs des puits sont $w_1 = 110\text{\AA}$, $w_2 = 28.2\text{\AA}$, $w_3 = 22\text{\AA}$. Les masses effectives des électrons correspondantes dans chaque région sont $m_w = 0.067m_0$ et $m_b = 0.1087m_0$, où : m_w est la masse effective des électrons dans les régions puits et m_b la masse effective dans les régions barrières. Cette structure a été proposée dans [22], avec $x_1=0$, $x_2=46\text{\AA}$, $x_3=145 \text{ \AA}$, $x_4=180 \text{ \AA}$, $x_5=208.2 \text{ \AA}$, $x_6=143.2 \text{ \AA}$, $x_7=265.2 \text{ \AA}$, $x_8=300.2 \text{ \AA}$. La figure III.10 représente la variation des énergies des transitions intersubbandes en fonction du champ électrique où on constate une diminution de l'énergie avec l'intensité du champ électrique appliqué.

L'obtention des niveaux d'énergie est réalisée par l'étude de la variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie des électrons dans la structure pour une rangée de champ électrique allant de 10 à 50 KV/cm et avec un pas de 1KV/cm. Pour chaque valeur du champ électrique, nous obtenons des niveaux d'énergies correspondantes aux pics de la courbe du coefficient de transmission $T(E)$ basé sur la méthode de la matrice de transfert (Figure III.13.).

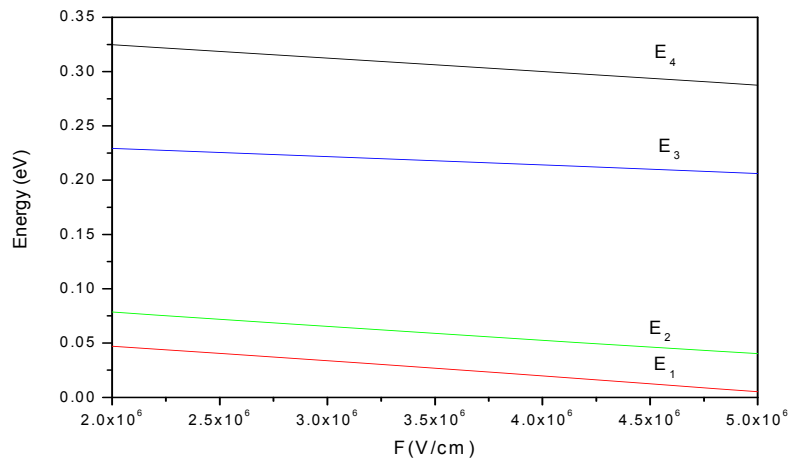


Figure III.10: Variation de l'énergie des transitions intrasousbandes en fonction du champ électrique.

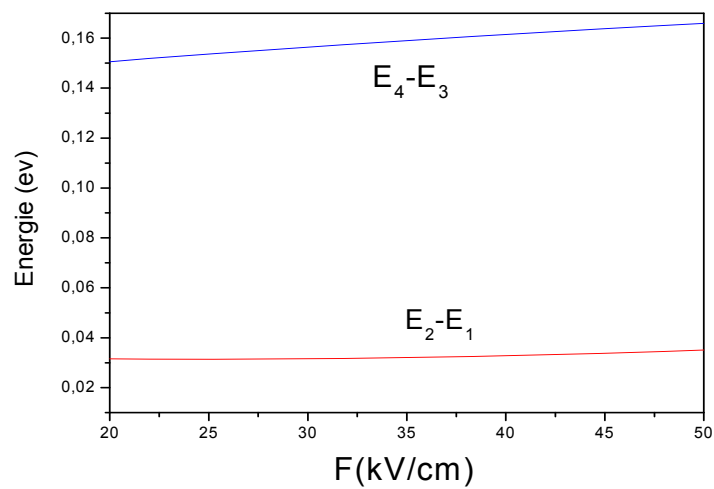


Figure III.11: Variation de la différence de l'énergie des transitions intrasousbandes en fonction du champ électrique.

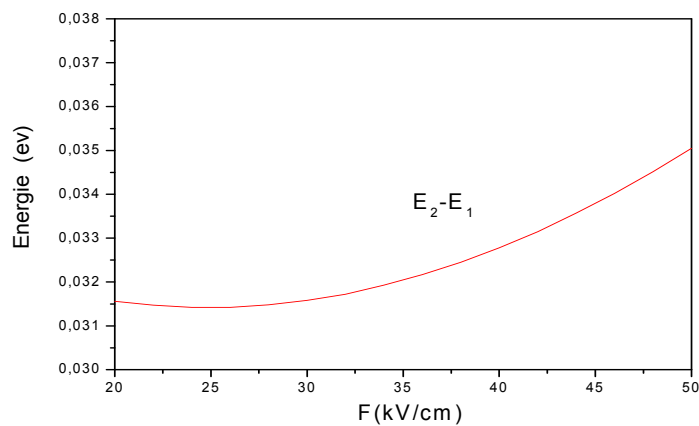


Figure III.12: Variation de la différence de l'énergie des transitions intrasousbandes ($E_2 - E_1$) en fonction du champ électrique.

Chapitre III : Résultats et discussion

Dans la figure.III.11 nous présentons la différence de l'énergie ($E_4 - E_3$) et ($E_2 - E_1$) pour différentes valeurs de champ électrique. Tandis que la figure III.12 indique la différence de l'énergie ($E_2 - E_1$) pour différentes valeurs du champ électrique.

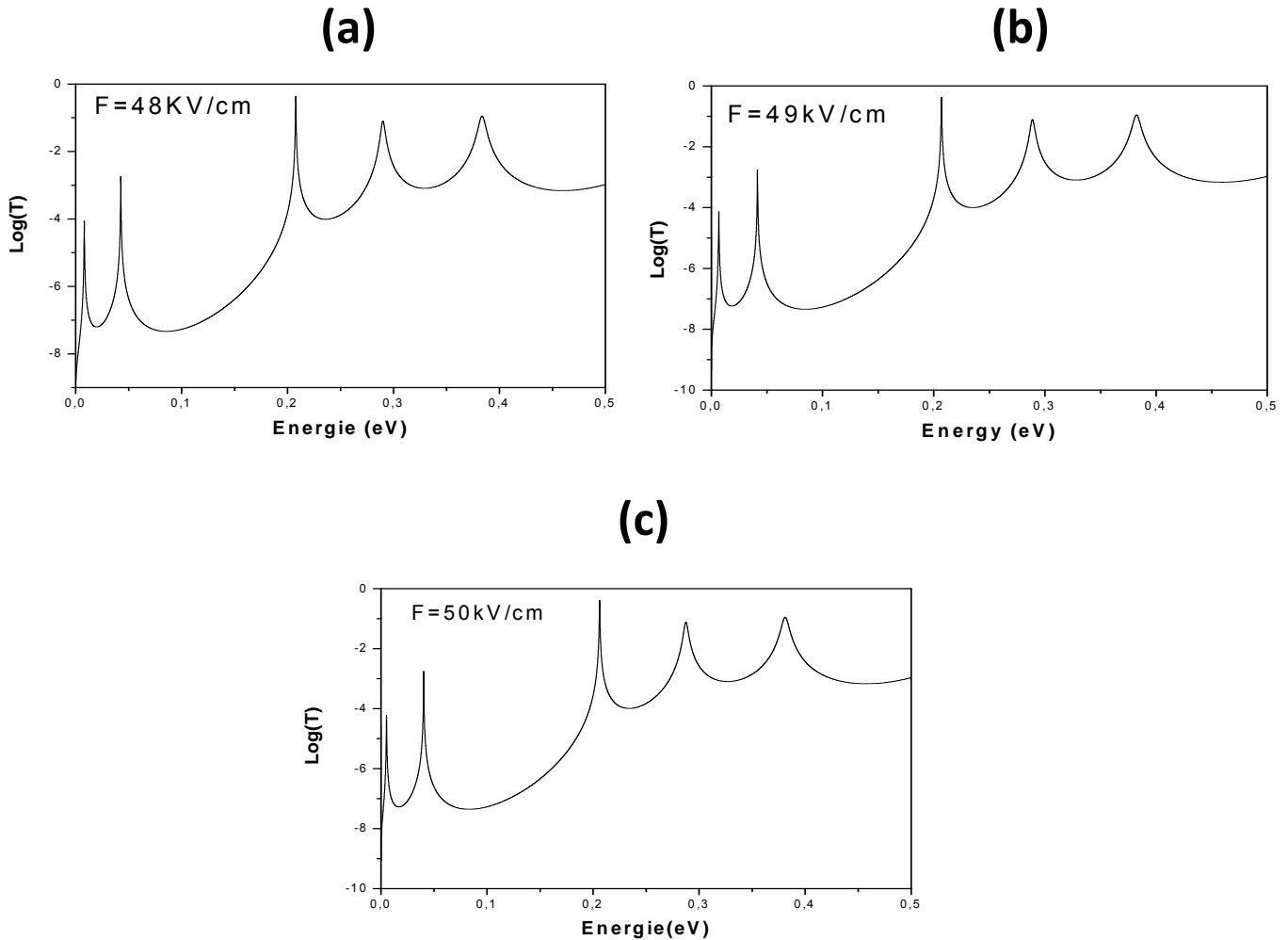


Figure III.13: Variation du coefficient de transmission en fonction de l'énergie des électrons pour a/ $F=48\text{kv/cm}$. ; b/ 49kv/cm et c/ $F=50\text{kv/cm}$.

III.4.5. Transitions laser

De nombreuses études ont été fait sur la variation de la longueur d'onde du laser d'émission en fonction d'un paramètre les super-réseaux basés sur $\text{GaAS}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. L'effet du champ électrique uniforme sur la longueur d'onde de transition électronique intrasousbandes a été décrite où les calculs d'énergies de transitions sont déterminées par les pics de la courbe de la transmission $T(E)$.

$$\lambda_{32} = \frac{hc}{E_3 - E_2} \quad (\text{III.20})$$

$$\lambda_{43} = \frac{hc}{E_4 - E_3} \quad (\text{III.21})$$

Où λ_{32} et λ_{43} sont les longueurs d'onde d'émission correspondant aux transitions électroniques entre les niveaux E_3, E_2 et E_4, E_3 respectivement, h la constante de Plank, C est la vitesse de la lumière dans l'espace libre.

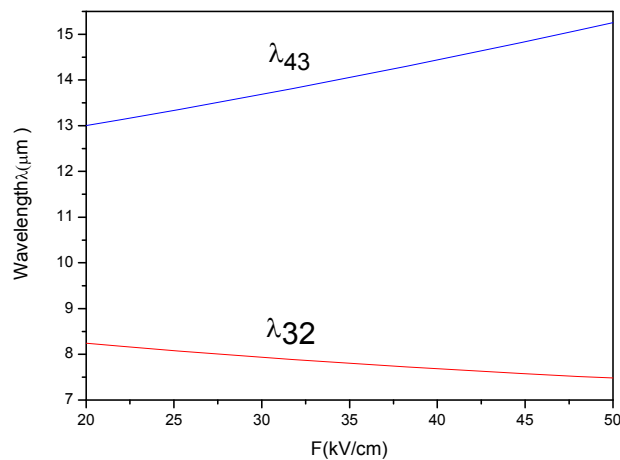


Figure III.14: Variation de la longueur d'onde des transitions λ_{43} et λ_{32} en fonction du champ électrique

Dans la figure III.14, nous présentons la variation de la longueur d'onde en fonction d'un champ électrique constant dans toutes les régions, tel que $x_1 \leq x \leq x_8$, celle-ci correspondant aux transitions entre les niveaux 3,2 et les niveaux 4, 3 pour la plage de champ électrique allant de 20 à 50 kv / cm. Les longueurs d'onde obtenues varient entre 7,50 μm et 16,00 μm , elles sont dans la gamme des lasers à infrarouge moyen [97]. Cette gamme de longueurs d'onde a de nombreuses applications dans des domaines de détection biochimique, télédétection, astronomie, communication, biologie, évaluation des matériaux non destructifs et en médecine [98]. Les valeurs de champ pour lesquelles la différence d'énergie ($E_2 - E_1$) est proche de l'énergie du photon optique longitudinal $\hbar\omega_{LO}$. Quelques résultats sont regroupés dans le tableau III.3.

	F=48kV/cm	F=49kV/cm	F=50kV/cm
E_1 (meV)	8.18	6.71	5.23
E_2 (meV)	42.70	41.49	40.28
E_3 (meV)	207.80	207.00	206.21
E_4 (meV)	290.07	288.82	287.57
$E_2 - E_1$	34.52	34.78	35.05
λ_{32} (μm)	7.51	7.49	7.48
λ_{43} (μm)	15.08	15.16	15.25

Tableau III.3 : Les résultats obtenus par la simulation

Conclusions :

Dans la première partie de ce chapitre nous avons trouvé à partir des équations du bilan à régime stationnaire les expressions analytiques de l'inversion de population et de la densité de courant de seuil qui détermine l'influence de la température et le dopage dans un laser à cascade quantique à trois niveaux.

Tandis que dans la seconde partie nous avons calculé les énergies de confinement dans un super réseau sous un champ électrique externe et également nous avons étudié les effets de la modification du champ électrique appliqué à la structure. L'idée est de trouver les valeurs de champ électrique de sorte que la différence énergétique du premier état excité et de l'état fondamental ait du même ordre d'énergie du phonon optique longitudinal, et cette condition est nécessaire pour le fonctionnement du laser à cascade quantique.

CONCLUSION GENERALE

Au cours de ce travail, nous avons développé et validé un modèle numérique permet de déterminer la densité de courant de seuil dans une structure de laser à cascade quantique, grâce à un calcul basé sur les équations du bilan. Nous avons démontré l'importance de la température et la densité de dopage dans le calcul de la densité de courant de seuil et la puissance optique émise, et par conséquent dans la performance de laser à cascade quantique.

Le calcul de la densité de courant effectué par plusieurs étapes à partir de la solution du système des équations du bilan en régime statique pour déterminer l'inversion de population qui est la base de fonctionnement de laser, et également le calcul fait par la détermination du nombre de photons dans la cavité. Introduire de l'énergie d'activation thermique de population des niveaux supérieur et inférieur de transition laser permet de montrer l'indépendance de la densité de courant de seuil avec la densité de dopage.

Dans la deuxième partie de ce travail, nous avons présenté le formalisme de la matrice de transfert traitant l'effet tunnel résonant en utilisant l'approximation de la masse effective, les conditions de continuité de Bastard .

Nous avons ainsi calculé ensuite numériquement les énergies de confinement dans un superréseau polarisé par un champ électrique externe. Le calcul fait à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger par la méthode de la matrice de transfert qu'est basée sur l'utilisation de coefficient de transmission. Les pics de la courbe de transmission correspondent aux énergies de transition dans le supereseau. Ce travail concerne l'étude de l'influence de la modification du champ électrique externe sur les énergies de résonance (confinement) sur un superréseau à base de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs}$, où l'objectif est de trouver les valeurs de champ électrique de sorte que la différence énergétique de premier état excité et l'état fondamental soit d'ordre d'énergie de phonon optique longitudinal. Cette condition est une condition nécessaire pour le fonctionnement du laser à cascade quantique. Au cours de cette thèse, nous avons démontré qu'il est possible de contrôler la densité de courant

Conclusion Générale

de seuil et la longueur d'émission d'un laser à cascade quantique. Les résultats obtenus par notre calcul concernant la densité de courant de seuil sont en très bon accord avec les résultats expérimentaux.

Annexe

A.1. Méthode de calcul les énergies dans les puits quantiques

La résolution de l'équation de Schrödinger reste un problème très important intervenant dans de nombreux calculs de physique. Plusieurs méthodes de calcul des états liés et les fonctions d'ondes dans les bandes d'énergie dans les hétéro structures. On peut classer ces méthodes de calcul peuvent être semi analytique comme la méthode de matrice de transfert la méthode d'onde plane soient numérique comme les méthodes de (différences finies, éléments finis, shooting méthode.....). Ces méthodes numériques basées sur la discrétisation et développement limite.

A.1.1. Méthode des différences finies

Il existe plusieurs méthodes basées sur la discrétisations, pour résoudre les équations de Schrödinger. Parmi ces méthodes, la méthode de différences finies est la plus utilisée. Donc dans la méthode de différences finies nous utilisons des mailles rectangulaires à pas constant. Le choix de cette méthode est guidé par :

- Sa facilité d'application.
- Sa stabilité numérique pour résoudre les équations couplées comme self consiste équation.

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + V(z)\psi = E \psi \quad (\text{A.1})$$

La méthode des différences finies consiste à remplacer les dérivées dans les équations de la physique aux problèmes discrétisés au moyen des développements de Taylor.

$$f(z + \Delta z) = f(z) + \Delta z f'(z) + \dots + \frac{(\Delta z)^n}{n!} f^{(n)}(z) + \frac{(\Delta z)^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\delta) \quad (\text{A.2})$$

$$f(z - \Delta z) = f(z) - \Delta z f'(z) + \frac{(\Delta z)^2}{2!} f''(z) + \dots \quad (\text{A.3})$$

De ces deux relations, on peut déduire trois approximations pour $f'(z)$:

$$f'(z) = \frac{f(z+\Delta z) - f(z)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad \text{décentrée avant}$$

ANNEXE

$$f'(z) = \frac{f(z) - f(z - \Delta z)}{\Delta z} + O(\Delta z) \quad \text{décentrée arrière}$$

$$f'(z) = \frac{f(z + \Delta z) - f(z - \Delta z)}{2\Delta z} + O(\Delta z) \quad \text{dérivée centrée}$$

La dérivée seconde par rapport à x est discrétisée par :

$$f''(z) = \frac{f(z + \Delta z) + f(z - \Delta z) - 2f(z)}{(\Delta z)^2} + O(\Delta z^2) \quad (\text{A.4})$$

où $O(\Delta z)$ et $O(\Delta z^2)$ sont les termes d'erreurs

Pour l'équation de Schrödinger (A.1) (cas des électrons dans la bande de conduction), l'utilisation un maillage uniforme est comme suit,

$$z = z_i \quad z + \Delta z = z_{i+1} \quad z - \Delta z = z_{i-1} \quad (\text{A.5})$$

L'hamiltonien est alors discrétisé en chaque nœud par du maillage

$$H_i = \frac{\left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \psi}{\partial z}\right)_{i+1/2} - \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial \psi}{\partial z}\right)_{i-1/2}}{\Delta z} + V_i \psi_i = \frac{\left(\frac{1}{m^*} \frac{\psi_{i+1} - \psi_i}{\Delta z}\right) - \left(\frac{1}{m^*} \frac{\psi_i - \psi_{i-1}}{\Delta z}\right)}{\Delta z} + V_i \psi_i \quad (\text{A.6})$$

$$= \frac{1}{(\Delta z)^2} \left[\frac{1}{m^*_{i+1/2}} \psi_{i+1} + \frac{1}{m^*_{i-1/2}} \psi_{i-1} - \frac{2}{m^*_i} \psi_i \right] + V_i \psi_i \quad (\text{A.7})$$

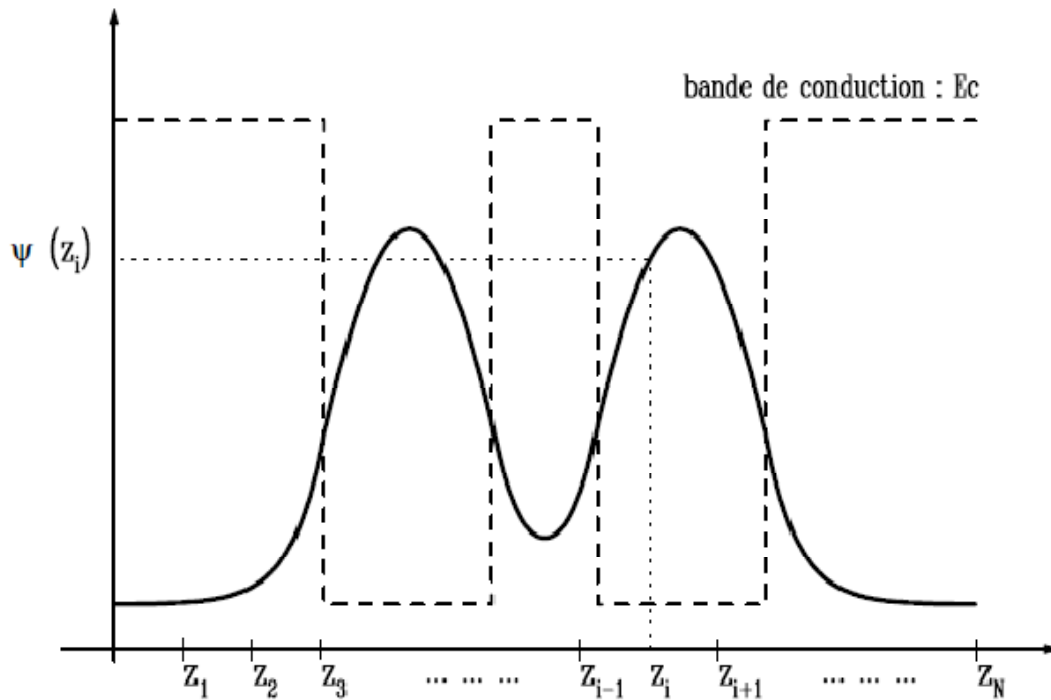


Figure A.1 : Fonction d'onde d'un niveau d'énergie dans une structure à deux puits quantiques [99]

ANNEXE

où les quantités indicées par i correspondent à des valeurs de x espacées de Δz . Nous considérons un système de longueur L et des indices i allant de 0 à N ($\Delta z = L/N$), nous posons comme conditions aux limites (frontières) que $\psi_0 = \psi_N = 0$.

Les équations obtenues pour i allant de 1 à $N-1$ peuvent alors se mettre sous la forme matricielle.

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & & \\ & & a_{N-2} & b_{N-2} & b_{N-2} & & \\ & & & b_{N-1} & b_{N-1} & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

$$\text{où} \quad a_i = -\frac{\hbar^2}{2m^*_{i-1/2}} \frac{1}{\Delta z^2}, \quad b_i = -\frac{\hbar^2}{2m^*_i} \frac{-2}{\Delta z^2}, \quad c_i = -\frac{\hbar^2}{2m^*_{i+1/2}} \frac{1}{\Delta z^2}$$

On trouve donc un système d'équations du type $Ax = bx$, où A est une matrice tridiagonale, sa résolution fournira l'énergie E et la fonction d'onde ψ .

A.1.2. Méthode de tir (Shooting method)

En considérant une forme générale, mais simple (masse constante) pour l'équation de Schrödinger indépendante du temps, dont les solutions numériques [100] :

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \quad (\text{A.9})$$

où $V(z)$ le potentiel unidimensionnel restera indéfini et $\psi(z)$ est la fonction d'onde d'une particule de masse effective m^* . L'équation (A.8) peut être écrite comme suit.

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi(z) + [V(z) - E]\psi(z) = 0 \quad (\text{A.10})$$

Le problème est maintenant de trouver une méthode numérique pour la résolution () des valeurs propres d'énergie E et des fonctions propres $\psi(z)$ pour toutes les valeurs de potentiel $V(z)$. La première dérivée de n'importe quelle fonction est définie comme:

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\Delta f}{\Delta z} = \frac{df}{dz} \quad (\text{A.11})$$

Il convient ici de conserver la forme approximative, c'est-à-dire :

$$\frac{df}{dz} \approx \frac{\Delta f}{\Delta z} = \frac{f(z+\delta z) - f(z-\delta z)}{2\delta z} \quad (\text{A.12})$$

En utilisant les formes de différences finies dans l'équation (A.10) pour les premières dérivées, alors:

$$\frac{d^2f}{dz^2} \approx \frac{f(z+2\delta z) - 2f(z) + f(z-2\delta z)}{(2\delta z)^2} \quad (\text{A.13})$$

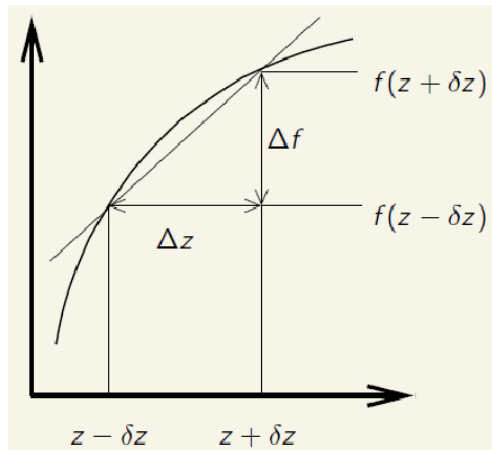


Figure A.2 : Représentation schématique de la dérivée d'une fonction

Comme δz est une petite longueur de pas indéfinie le long de l'axe z et qu'elle n'apparaît que dans l'équation (A.13) avec le facteur 2, cette représentation par différence finie de la dérivée seconde peut être légèrement simplifiée en substituant δz à $2\delta z$, c'est-à-dire :

$$\frac{d^2f}{dz^2} \approx \frac{f(z+\delta z) - 2f(z) + f(z-\delta z)}{(\delta z)^2} \quad (\text{A.14})$$

En utilisant cette forme pour la seconde dérivée dans l'équation de Schrödinger originale et en prenant la longueur de pas δz comme suffisamment petite pour que l'approximation soit bonne, alors:

ANNEXE

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\psi(z+\delta z) - 2\psi(z) + \psi(z-\delta z)}{(\delta z)^2} \right] + [V(z) - E]\psi(z) = 0 \quad (\text{A.15})$$

Après petite simplification on obtient alors :

$$\psi(z + \delta z) - 2\psi(z) + \psi(z - \delta z) = \frac{2m^*}{\hbar^2} (\delta z)^2 [V(z) - E]\psi(z) \quad (\text{A.16})$$

qui peut enfin être écrit comme:

$$\psi(z + \delta z) = \left[\frac{2m^*}{\hbar^2} (\delta z)^2 (V(z) - E) + 2 \right] \psi(z) - \psi(z - \delta z) \quad (\text{A.17})$$

En utilisant deux valeurs connues de la fonction d'onde $\psi(z - \delta z)$ et $\psi(z)$, une troisième valeur, c'est-à-dire $\psi(z + \delta z)$, peut être prédite. En utilisant ce nouveau point $\psi(z + \delta z)$, avec $\psi(z)$ et en effectuant la transformation $z + \delta z \rightarrow z$, on peut calculer un quatrième point, $\psi(z + 2\delta z)$, et ainsi de suite. Par conséquent, la fonction d'onde complète peut être déduite pour toute énergie particulière. Les solutions pour les états stationnaires ont des fonctions d'onde qui satisfont aux conditions aux limites standards,

$$\psi(z) \rightarrow 0 \text{ et } \frac{\partial}{\partial z} \psi(z) \rightarrow 0 \text{ pour } z \rightarrow +\infty.$$

Les deux premières valeurs de la fonction d'onde nécessaires pour démarrer la procédure de calcul numérique, alors la fonction d'onde au centre du puits (appelons cela l'origine $z = 0$ pour l'instant) doit être nulle. En conséquence, un petit déplacement le long de la direction de croissance (z) doit produire une valeur finie pour la fonction d'onde. Par conséquent, dans ce cas, les conditions de départ suivantes pourraient être choisies $\psi(z) = 0$ et $\psi(\delta z) = 1$.

Pour calculer l'énergies des états en effectuant la transformation $E + \delta E \rightarrow E$, si la fonction d'onde vérifie la condition $\psi(z) \rightarrow 0$ pour $z \rightarrow +\infty$ on dit que l'énergie E est une valeur propre de l'équation de Schrödinger.

A.2. Solutions self-consiste Schrödinger et Équations de Poisson

Nous utilisons un calcul auto-cohérent des équations couplées de Poisson- Schrödinger [101-10]. Connaissant les écarts d'énergies et les décalages de bandes de notre système de matériaux, nous pouvons calculer le profil de potentiel de matériau semi-conducteur $V_{\text{mat}}(z)$. Cependant, lorsque les semi-conducteurs sont dopés, les charges fixes et libres (impuretés ionisées et électrons libres, respectivement) qui constituent une distribution de charge. Une perturbation au profil de potentiel est donnée par l'équation de Poisson.

L'équation de Schrödinger est couplée avec l'équation de Poisson, qui cette dernière elle nous donne le potentiel électrostatique.

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + V(z)\psi = E\psi \quad (\text{A.18})$$

L'équation de Poisson unidimensionnelle est donnée par :

$$\frac{d}{dx} \left(\varepsilon_s(x) \frac{d}{dx} \right) \phi(x) = \frac{-q[N_D(x) - n(x)]}{\varepsilon_0} \quad (\text{A.19})$$

où ε_s est la constante diélectrique, $\phi(x)$ est le potentiel électrostatique, $N_D(x)$ est la concentration du donneur ionisé, et $n(x)$ est la distribution de la densité électronique. Pour trouver la distribution d'électrons dans la bande de conduction, on peut mettre l'énergie potentielle V est égal à l'énergie de décalage de la bande de conduction ΔE_c . Dans un puits quantum l'énergie potentielle V est liée au potentiel électrostatique $\phi(x)$ comme suit:

$$V(x) = -q\phi(x) + \Delta E_c(x) \quad (\text{A.20})$$

La fonction d'onde ψ dans l'équation de Schrödinger et la densité électronique $n(x)$ dans l'équation de poisson sont liées par la relation suivante :

$$n(x) = \sum_{k=1}^m \psi_k^*(x) \psi_k(x) n_k \quad (\text{A.21})$$

où m est le nombre d'états liés, et n_k est l'occupation électronique pour chaque état. La concentration d'électrons pour chaque état peut être exprimé par :

$$n_k = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_{E_k}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{(E-E_F)/K_B T}} dE \quad (\text{A.22})$$

Après quelque simplification de l'équation (A.22) on obtient :

$$n_k = \frac{m^* K_B T}{\pi \hbar^2} \text{Ln} \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_k}{K_B T} \right) \right] \quad (\text{A.23})$$

où E_k est l'énergie propre et E_F l'énergie du niveau de Fermi. Nous utilisons une procédure d'itération pour obtenir une cohérence solutions pour l'équation de Schrödinger. On Commence avec un potentiel d'essai $V(x)$, les fonctions d'onde, et leurs énergies propres correspondants E_k sont utilisées pour calculer la distribution de densité électronique $n(x)$, et la concentration de donneur $N_D(x)$ peut être utilisée pour calculer $\phi(x)$ dans l'équation (A.19). La nouvelle énergie potentielle $V(x)$ est obtenue à partir de l'équation (A.9). L'itération sera donne les solutions finales auto-cohérentes (self-consiste) pour $V(x)$ et $n(x)$ qui satisfont certains critères d'erreur. Plus de détails sur la méthode de calcul peuvent être trouvés dans la référence [101].

Références

REFERENCES:

- [1] R. Kazarinov, R. Suris, *Phys. Semiconductors* 5, 707, 1971.
- [2] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, A. Y. Cho, Quantum cascade laser. *Science*, 264, 5158, 553-556, 1994.
- [3] C. Sirtori, F. Capasso, J. Faist, A. L. Hutchinson, D. L. Sivco, A. Y. Cho, Resonant tunneling in quantum cascade lasers. *Quantum Electronics, IEEE Journal* 34, 1722-1729, 1998.
- [4] R. W. Adams, K. Vijayraghavan, Q. J. Wang, J. Fan, F. Capasso, S. P. Khanna, A. G. Davies, E. H. Linfield, M. A. Belkin, GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As terahertz quantum cascade lasers with double-phonon resonant depopulation operating up to 172 K. *Appl. Phys. Lett.* 97,13, 131111, 2010.
- [5] A. Einstein. Zur quantentheorie der strahlung. *Phys. Z.* 18 : 121-128, 1917.
- [6] J. Brossel, A. Kastler. La detection de la resonance magnetique des niveaux excites-leffect de depolarisation des radiations de resonance optique et de fluorescence. *Comptes Rendus Hebdomadaires Des Seances De L Academie Des Sciences* 229.23 : 1213-1215, 1949.
- [7] J. Gordon, P. Herbert, J. Zeiger, C. H. Townes. Molecular microwave oscillator and new hyperfine structure in the microwave spectrum of N H 3. *Physical Review* 95.1 : 282,1954.
- [8] T. H. Maiman, "Optical maser action in ruby." *Advances in Quantum Electronics*. 1961
- [9] A. Javan, R. William, Jr. Bennett, R. H. Donald .Population inversion and continuous optical maser oscillation in a gas discharge containing a He-Ne mixture. *Physical Review Letters* 6.3 106. 1961.
- [10] R. Hall, E. Gunther, J. D. Kingsley, T. J. Soltys, R. O. Carlson. " Coherent light emission from GaAs junctions." *Physical Review Letters* 9, 9 366, 1962.
- [11] C. K. N. Patel. Continuous-wave laser action on vibrational-rotational transitions of CO₂. *Physical review*, 136(5A), A1187, 1964.
- [12] J. P. Van der Ziel, R. Dingle, C. R. Miller, W. Wiegmann, W. A. Nordland Jr. Laser oscillation from quantum states in very thin GaAs- Al_{0.2}Ga_{0.8}As multilayer structures. *Applied Physics Letters* 26, 8 , 463-465, 1975.
- [13] D. Dangoisse, D. Hennequin, V. Z. Dhaoui. Les Lasers cours et exercices corrigés. Edition Dunod, Paris. 1998.
- [14] E. Rosencher, B. Vinter. optoélectronique. Edition Masson, Paris, 1998.
- [15] C. Delsart. Laser et optique non linéaire. Edition Ellipses, Paris cedex 15 , 2008.
- [16] H. Kogelnik, T. Li. Laser beams and resonators. *Applied optics*, 5.10, 1550-1567, 1966.
- [17] M. Henry, et Fanet Hervé .Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques. 6e édition, Paris, Dunod, 2009.

Références

- [18] S. Bernard, et C. Hermann. Physique des semi-conducteurs. école Polytechnique, France, 1990.
- [19] A. Chovet et P. Masson. Physique des semi-conducteurs. École polytechnique universitaire, Marseille, France, 2004.
- [20] N, Christian et N, Hélène. Physique des semi-conducteurs .3^e édition, paris, DUNOD, 2007.
- [21] B. Oliver .Physique des solides, des Semi-conducteurs et Dispositifs. *Université de Rennes 1*, , 2003.
- [22] S. Vatannia, G. Gildenblat. Airy's functions implementation of the transfermatrix method for resonant tunneling in variably spaced finite superlattices. *Quantum Electronics, IEEE Journal* 32(6), 1996 .
- [23] W. Shockley. *Circuit element utilizing semiconductive material*. U.S. Patent 2,569,347, 25 sept. 1951.
- [24] A. K. Sood, J. Menendez, M. Cardona, *et al*. Resonance Raman scattering by confined LO and TO phonons in GaAs-AlAs superlattices. *Physical review letters*, 54, 19, 2111, 1985.
- [25] M. Dion, Z. R. Wasilewski, F. Catenoud , *et al*. Extremely low threshold current density InGaAs/GaAs/AlGaAs strained SQW laser grown by MBE with As₂. *Canadian journal of physics*, 74, 12, 1-4, 1996.
- [26] T. Jayasekera, N. Goel, M. A. Morrison, K. Mullen, *Physica*, 584 E 34 ,2006.
- [27] Cohen-Tannoudji,. Mécanique quantique. *Hermann, Paris*, 1973.
- [28] A. Yariv. Quantum electronics. John Wiley and Sons, New-York, 1989.
- [29] C. Weisbuch and B. Vinter. *Quantum semiconductor structures*. Academic Press, San Diego, CA, 1991.
- [30] G. Bastard. Superlattice band structure in the envelope-function approximation. *Phys. Rev. B*, 24(10):5693-5697, 1981.
- [31] G. Bastard. Theoretical investigations of superlattice band structure in the envelope-function approximation. *Phys. Rev. B*, 25(12):7584-7597, 1982.
- [32] R. Ferreira and G. Bastard, "Evaluation of some scattering times for electrons in unbiased and biased single- and multiple-quantum-well structures," *Phys. Rev. B*, vol. 40, pp. 1074-1086, 1989.
- [33] W. W. Chow, S.W.Koch 'Semiconductor Laser Fundamentals *Springer* 1997.
- [34] J. Devenson, InAs/AlSb Short Wavelength Avelength Quantum cascade lasers, *Physical Sciences, Semiconductor Physics*, Vilnius,150, 2010.
- [35] E. V. Psarakis. Simulation of performance of quantum well infrared photocetectors (*Doctoral dissertation, Monterey California*. Naval Postgraduate School, 2005.

Références

- [36] S. Nobuhiko. "Design of double and triple quantum wells for InGaAs-AlAsSb intersubband unipolar semiconductor lasers." *IEEE journal of quantum electronics* 32, no.: 20-281, 1996.
- [37] P. P. Sorokin and M. J. Stevenson, "Stimulated infrared emission from trivalent uranium", *Phys. Rev. Lett.* 5, 557, 1960.
- [38] A. Evans, S. R. Darvish, S. Slivken, J. Nguyen, Y. Bai, and M. Razeghi, *Buried heterostructure quantum cascade lasers with high continuous-wave wall plug efficiency. Appl. Phys. Lett.* 91, 071101, 2007.
- [39] H. Schneider, K. V. Klitzing, "Thermionic emission and Gaussian transport of holes in GaAs/AlGaAs multiple quantum well structure," *phys. Rev. B*, vol.38, 1988.
- [40] A. M. Fox, A. Mark, Miller, AB. David, Livescu, Gabriela, J. E. Cunningham. Y. J an. Willian. Quantum well carrier sweep out: relation to electroabsorption and exciton saturation. *IEEE journal of quantum electronics*, 27, 10, 2281-2295, 1991.
- [41] N. Swat am, T. Nakahara, "Design of AlGaAs/GaAs quantum wells for karoabsorpt 'on modulators," *Solid-Srute Electron.* 2000.
- [42] C. Gmachl, D. L. Sivco, R. Colombelli, F. Capasso, and A. Y. Cho, "Ultra-broadband semiconductor laser," *Nature* 415, 883 , 2002.
- [43] A. J. Hoffman, S. Scharfner, S. S. Howard, K. J. Franz, F. Towner, and C. Gmachl, Low voltage-defect quantum cascade laser with heterogeneous injector regions, *Opt. Express* 15, 15818, 2007.
- [44] A. Hamadou, J. J-L. Thobel, S. Lamari, Modeling of temperature effects on the characteristics of mid-infrared quantum cascade lasers, *optics cominication*, 281(21), 5385-5388, 2008.
- [45] H. Schneider, K. Klitzing, Thermionic emission and Gaussian transport of holes in a GaAs/Al_xGa_{1-x}As multiple-quantum-well structure. *Physical Review B*. 38, 96160, 1988.
- [46] A. Hamadou, S. Lamari, J. L. Thobel, Dynamic modeling of a midinfrared quantum cascade laser. *Journal of Applied Physics*, 105(9), 093116, 2009.
- [47] A. Hamadou, *Étude Physique des Lasers à Semi-conducteurs : Cas des Lasers à Cascades Quantiques* , Thèse de doctorat. Université Ferhat Abbas Sétif (Algérie), 2010.
- [48] G. H. Dohler, "Doping superlattices ('n - z - p z crystals')," *IEEE J. Quantum Electron.*, 22, 9, 1682-1695, 1986.
- [49] M. Biittiker, "Coherent and sequential tunneling in series barriers," *IBM J. Res. Develop.*, 32, 1, 63--75, 1988.
- [50] N. C. Kluksdahl, A. M. Kirman, and D. K. Ferry, "Self-consistent study of the resonant-tunneling diode," *Phys. Rev. B*, 39, 11, 7720-7735, 1989.

Références

- [51] W. R. Frensley, "Boundary conditions for open quantum systems driven far from equilibrium," *Rev. Mod. Phys.*, 62, 3, 745-791, 1990.
- [52] E.V. Anda and F. Flores, "Electron-phonon interaction in resonant tunneling heterostructure, in: *Resonant Tunneling in Semiconductors*", Springer, Boston, MA. 193-200, 1991.
- [53] N. Tessler and G. Eisenstein, "On carrier injection and gain dynamics in quantum well lasers," *IEEE J. Quantum Electron.*, 29, 6, 1586-1595, 1993.
- [54] W. W. Lui and M. Fukuma, "Exact solution of the Schrodinger equation across an arbitrary one-dimensional piecewise-linear potential barrier," *J. Appl. Phys.*, 60, 5, 1555-1559, 1986.
- [55] S. S. Allen and S. L. Richardson, "Theoretical investigations of resonant tunneling in asymmetric multibarrier semiconductor heterostructures in an applied constant electric field," *Phys. Rev. B*, 50, 16, 11693-11700, 1994.
- [56] S. Ban, J. Hasbun, X. Liang, A novel method for quantum transmission across arbitrary potential barriers *Journal of Luminescence* 87 369-371, 2000.
- [57] E. Anemogiannis, E. N. Glytsis, T. K. Gaylord, Bound and quasibound state calculations for biased/unbiased semiconductor quantum heterostructures, *Quantum Electronics, IEEE Journal of* 29, 2731-2740, 1993.
- [58] J. Singh, A new method for solving the ground-state problem in arbitrary quantum wells: Application to electron-hole quasi-bound levels in quantum wells under high electric field, *Appl. Phys. Lett.* 48 434-436 1986.
- [59] P. Harrison, *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*, John Wiley & Sons, 2005.
- [60] Y. Ando, T. Itoh, Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers, *Journal of applied physics* 61, 1497-1502, 1987.
- [61] L. Ram-Mohan, K. Yoo, J. Moussa, The Schrödinger–Poisson self-consistency in layered quantum semiconductor structures, *Journal of applied physics* 95 3081-3092, 2004.
- [62] E. Bellotti, B. K. Doshi, K. F. Brennan, J. D. Albrecht, P. P. Ruden, Ensemble Monte Carlo study of electron transport in wurtzite InN, *Journal of Applied Physics* 85 916-923, 1999.
- [63] P. Lebowhl, P. Price, Direct Microscopic Simulation of Gunn-Domain Phenomena, *Applied Physics Letters* 19, 530-532, 1971.
- [64] B. Stupovski, J. Crnjanski, D. Gvozdić, Application of coordinate transformation and finite differences method in numerical modeling of quantum dash band structure, *Computer Physics Communications* 182, 289-298, 2011.

Références

- [65] S. F.-P. Paul, H. Fouckhardt, An improved shooting approach for solving the time-independent Schrödinger equation for III/V QW structures, *Physics Letters A* 286 199-204, 2001.
- [66] V. Gavryushin, Asymmetric double quantum wells with smoothed interfaces, *Open Physics* 10 459-469, 2012.
- [67] F. Thierry, J. Le Rouzo, F. Flory, G. Berginc, L. Escoubas, Fast and reliable approach to calculate energy levels in semiconductor nanostructures, *Journal of Nanophotonics* 9, 093080, 2015.
- [68] C. Cheng, Q. H. Liu, J.-H. Lee, H. Z. Massoud. Spectral element method for the Schrödinger-Poisson system, *Journal of Computational Electronics*, 3, 417-421, 2004.
- [69] R. J. Leveque, Z. Li, The immersed interface method for elliptic equations with discontinuous coefficients and singular sources, *SIAM Journal on Numerical Analysis* 31, 1019-1044, 1994.
- [70] E. Momox, N. Zakhleniuk, N. Balkan, Solution of the 1D Schrödinger equation in semiconductor heterostructures using the immersed interface method, *Journal of Computational Physics* 231, 6173-6180, 2012.
- [71] G. B. Airy, et al., *Transactions of the Cambridge Philosophical Society* 6 379, 1838.
- [72] A. K. Ghatak, I. Goyal, R. Gallawa, Mean lifetime calculations of quantum well structures: a rigorous analysis, *Quantum Electronics, IEEE Journal of* 26 305-310, 1990.
- [73] L. L. Chang, L. Esaki, and R. Tsu, Resonant tunneling in semiconductor double barrier, *App. Phys. Lett.* 24, 593, 1974.
- [74] S. Luryi, Frequency limit of double-barrier resonant-tunneling oscillators, *App. Phys. Lett.* 47, 490, 1985.
- [75] Y. Chen, D.M. Bagnall, H.J. Koh, K.T. Park, K. Hiraga, Z. Zhu, and T. Yao. *J. App. Phys.*, 84, 3912, 1998.
- [76] T. Makino, J. Glinski, "Transfer matrix analysis of the amplified spontaneous emission of DFB semiconductor laser amplifiers," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 24, no. 8, pp. 1507-1518, Aug. 1988.
- [77] R. Tsu, L. Esaki. Tunneling in a finite superlattice, *Applied Physics Letters* 22 (11), 562-564, 1973. 2532, 1973.
- [78] H. Mathieu, H. Fanet : *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques*. Volume 5. Dunod Paris, 2001.
- [79] B. Jonsson, and T. E. Sverre "Solving the Schrodinger equation in arbitrary quantum-well potential profiles using the transfer matrix method." *IEEE journal of quantum electronics* 26.11: 2025-2035, 1990.

Références

- [80] D. BenDaniel, C. Duke, *Physical Review* 152 683.1966.
- [81] G. Bastard, Superlattice band structure in the envelope-function approximation *Phys. Rev. B* 24 ,5693,1981.
- [82] C. Giner, Trallero, and J. López Gondar. "Exact wave functions and energy levels for a quantum well with an applied electric field." *Physica B+ C* 138.3: 287-294 ,1986.
- [83] G. B Airy, et al. On the intensity of light in the neighborhood of a caustic. *Transactions of the Cambridge Philosophical Society* 6, 379, 1838.
- [84] C. Jirauschek, and T Kubis. "Modeling techniques for quantum cascade lasers." *Applied Physics Reviews* 1.1: 011307, 2014.
- [85] D.Sebbar, B. Boudjema. "Modeling the Effects of Temperature and Doping Density on the Performance of Mid-infrared Quantum Cascade Lasers." *Journal of Nano-& Electronic Physics* 10.1 .2018.
- [86] S. Höfling, R. Kallweit, J. Seufert, J. Koeth, J. P. Reithmaier, A. Forchel, Reduction of the threshold current density of GaAs/AlGaAs quantum cascade lasers by optimized injector doping and growth conditions. *Journal of crystal growth*, 278(1-4), 775-779. 2005.
- [87] V. D. Jovanović, S. Höfling, D. Indjin, , N. Vukmirović, Z. Ikonić, P. Harrison, A. Forchel, "Influence of doping density on electron dynamics in Ga As/ Al Ga As quantum cascade lasers". *Journal of Applied Physics*, 99 (10), 103106. 2006.
- [88] C. Sirtori, J. Faist, F.Capasso, D. L. Sivco, A. L. Hutchinson, A. Cho, "Long wave length infrared ($\lambda \approx 11 \mu\text{m}$) quantum cascade lasers". *Applied physics letters*, 69(19), 2810-2812.1996.
- [89] H. Page, C.Becker, A. Robertson, G. Glastre, V.Ortiz, C. Sirtori, "300 K operation of a GaAs-based quantum-cascade laser at $\lambda \approx 9 \mu\text{m}$ ". *Applied Physics Letters*, 78 (22), 3529-3531. 2001.
- [90] V. Ortiz, C. Becker, H. Page, C. Sirtori, "Thermal behavior of GaAs/AlGaAs quantum-cascade lasers: effect of the Al content in the barrier layers". *Journal of crystal growth*, 251 (1), 701-706. 2003.
- [91] H. C. Liu , M. Wächter, D. Ban, Z. R. Wasilewski, M. Buchanan, G. C. Aers, Q. Hu, Effect of doping concentration on the performance of terahertz quantum-cascade lasers. *Applied Physics Letters*, 87(14), 141102,2005.
- [92] A. Lassaad, S. Giacomo, G. Marcella, *et al.* Doping in quantum cascade lasers. II. GaAs/ Al 0.15 Ga 0.85 As terahertz devices. *Journal of applied physics*, vol. 100, no 4, p. 043102, 2006.

Références

- [93] V. D. Jovanović, D. Indjin, N. Vukmirović, Z. Ikonić, P. Harrison, E. H. Linfield, H. E. Beere, Mechanisms of dynamic range limitations in GaAs/ AlGaAs quantum-cascade lasers: Influence of injector doping. *Applied Physics Letters*, 86(21), 211117. 2005.
- [94] S. Höfling, V. D. Jovanović, D. Indjin, J. P. Reithmaier, A. Forchel, Z. Ikonić, V. Milanović, Dependence of saturation effects on electron confinement and injector doping in GaAs/Al 0.45Ga0.55 As quantum-cascade lasers. *Applied physics letters*, (25), 251109 . 2006.
- [95] K. Brennan, C. Summers, *Journal of applied physics* 61 , 614-623, 1987.
- [96] M. Vassell, J. Lee, H. Lockwood, *Journal of applied physics* 54 , 5206-5213, 1983.
- [97] R. Köhler, A. Tredicucci, F. Beltram, H. E. Beere, E. H. Linfield, A. G. Davies, D. A. Ritchie, R. C. Iotti, F. Rossi, Terahertz semiconductor-heterostructure laser. *Nature* 417, 156-159. 2002.
- [98] M. A. Belkin, Q. J. Wang, C. Pflugl, A. Belyanin, S. P. Khanna, A. G. Davies, E. H. Linfield, F. Capasso, Selected Topics in Quantum Electronics, *IEEE Journal* 15, 952-967. 2009.
- [99]- N. Trenado. *Modélisation et simulation des composants optoélectroniques à puits quantiques* (Doctoral dissertation, Université de Rouen) , 2002
- [100] P. Harrison, Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures, John Wiley & Sons, 2005
- [101] I-H. Tan, G. L. Snider, L. D. Chang, and E. L. Hu. "A self-consistent solution of Schrödinger–Poisson equations using a nonuniform mesh." *Journal of applied physics* 68, 8. 4071-4076, 1990
- [102] J. Ding, W. Xiaoliang, X. Hongling, W. Cuimei, Y. Haibo, C. Hong, F. Chun, J Lijuan , "Self-consistent simulation of carrier confinement characteristics in (Al_yGa_{1-y}N/AlN) SLs/GaN/(In_xGa_{1-x}N/GaN) MQW/GaN heterostructures." *Journal of Alloys and Compounds* 523 88-93, 2012.
- [103]- J. Ding, W. Xiaoliang, X. Hongling, W. Cuimei, Y. Haibo, C. Hong, F. Chun, J Lijuan , "Numerical optimization of carrier confinement characteristics in (Al_xGa_{1-x}N/AlN) SLs/GaN heterostructures." *Physica B: Condensed Matter* 407, 18. 3920-3924, 2012.

Liste des Travaux

Communications internationales

- 1- **D. Sebbar**, B. Boudjema. *Simulation of the Losses in Waveguide Cladding of Semiconductor Laser Based On GaAs/ AlGaAs Superlattices*. International Conference on Applied Analysis and Mathematical Modeling *ICAAMM18* , June 20-24, 2018, Istanbul-Turkey.

- 2- **D. Sebbar**, B. Boudjema. *Effects the variation the electric field and the width of the barriers for Resonant Tunneling in Superlattices*. International Conference on Applied Analysis and Mathematical Modeling *ICAAMM17* , July 3-7, 2017, Istanbul-Turkey.

- 3- **D. Sebbar**, B. Boudjema , O. Houhou. *Effects the Electrical Field for Resonant Tunneling in Superlattices for QCL*. 2nd International Conference on Pure and Applied Sciences Yildiz Technical University, Turkey, June 1-5, 2016

Résumé

Le présent travail de thèse porte sur deux volets. Le premier volet consiste à développer un modèle numérique permettant de simuler le courant de seuil de laser à cascade quantique. Pour ce faire les équations du bilan en régime stationnaire ont été résolues en tenant compte de la population activée thermiquement dans les états inférieur et supérieur du laser afin d'étudier l'influence de la température et la densité de dopage sur le courant de seuil de laser à cascade quantique à trois niveaux. Les résultats numériques montrent que la densité de courant de seuil augmente avec la température et aussi avec la densité de dopage. Cependant la puissance de sortie diminue lorsque la température et la densité de dopage augmentent. Nous avons également estimé le décalage de la différence d'énergie entre l'état supérieur et inférieur avec la variation de la densité de dopage. Les résultats obtenus à travers le modèle numérique présentent un très bon accord avec les résultats expérimentaux rapportés dans la littérature. Dans le deuxième volet de la thèse, nous avons calculé numériquement la longueur d'onde d'émission de laser pour une structure à cascade quantique à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger par la méthode de matrice de transfert. Les résultats obtenus sont analysés et discutés.

Mots-clés : Laser à cascade quantique, Les équations du bilan, Puissance de sortie, Superréseau, Equation de Schrödinger, Effet tunnel résonant, la méthode de matrice de transfert.

ABSTRACT

The work reported in this thesis is divided into two parts. The first part consisted of developing a numerical model to simulate the threshold current of the quantum cascade laser. To do this the steady-state equilibrium equations were solved by taking into account the thermally activated population in the lower and upper laser states in order to study the influence of temperature and doping on the threshold current of the three-level quantum cascade laser. The numerical results show that the threshold current density increases with temperature and also with the doping density. However, the output power decreases as the temperature and the doping density increase. We also estimated the value of the change in the energy difference between the upper and lower state with the variation of the doping density. The results obtained through the numerical model show a very good agreement with the experimental results reported in the literature. In the second part of the thesis we have numerically computed the laser emission wavelength in a superlattice structure from the resolution of the Schrödinger equation by the transfer matrix method. The results obtained are analyzed and discussed.

KeyWords : Quantum Cascade Laser, Rate Equations, Superlattice, Schrödinger equation, Resonant Tunneling Effect, Transfer matrix method.