# REPUBLIQUE ALGERINNE DEMOCRATIQUE ET

# POPULAIRE

Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche

scientifique

Université El-Hadj Lakhder – Batna



# **MEMOIRE**

Présenté au Département des Sciences de la matière Faculté des Sciences



Pour l'obtention de diplôme de Magister en Physique Option : PLASMA-LASER

Par

# **DEHIMI SAID**

# THEME

# Etude de lasers à base des composés semi-conducteurs (InP, GaAs, GaP).

Soutenu le / / 2011, devant le jury :

Mr	Sid Abdelaziz	(M.C-A)	Université - Batna	Président
Mr	Ounissi Abdelhami	d (Prof.)	Université - Batna	Rapporteur
Mme	Triki Houria	(Prof.)	Université - Annaba	Examinateur
Mr	Aouachria Mekki	(M.C-A)	Université - Batna	Examinateur

### **Remerciements**

Le travail présenté dans ce mémoire à été effectué au département des Sciences de la matière, Faculté des Sciences, Université de Batna, et réalisé au Laboratoire des matériaux métalliques à semi conducteur de l'Université de Biskra, je remercie vivement les responsables de ce laboratoire, pour la confiance et le soutien qu'ils m'ont témoigné tout au long de mon travail de mémoire.

Il m'est agréable d'exprimer ma profonde reconnaissance à monsieur Abdelhamid Ounissi, professeur à l'université de Batna pour ses encouragements, de son expérience dans l'orientation et la direction de ce travail. Et Monsieur Said Abdelaziz maître de conférences, qui m'a fait l'honneur de présider le jury de ce mémoire, je lui exprime mon respect et mes sincères remerciements.

Je tiens aussi à exprimer ma gratitude à madame Triki Houria, Professeur au département de physique, faculté des sciences de l'université de Annaba, d'avoir accepté d'être examinateur.

J'exprime de même mes remerciements les plus sincères aux honorables Monsieur Mekki Aouachria maître de conférences à l'université de Batna d'avoir accepté d'être examinateur.

# **TABLE DES MATIERES**

Table des matières	i
Liste des figures	vi
Liste des tableaux	ix
Introduction générale	х

# <u>Chapitre I</u>

# Matériaux semi-conducteurs III-V, Equations de base des Semi-conducteur et Modèles utilisé dans ATLAS

I-1 Matériaux semi-conducteurs III-V	3
I-1-1 Introduction	3
I-1-2 Définition des semi-conducteurs III-V	3
I-1-3 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des S/C III-V	3
I-1-3-1 Les composés binaires	3
I-1-3-2 Les composés ternaires et quaternaires	4
I-1-4 Structure cristalline	5
I-1-5 Réseau réciproque- La zone de Brillouin	6
I-1-6 Structure des bandes d'énergie des semi-conducteurs III-V	6
I-1-6-1 Structure de bande de GaAs	7
I-1-6-2 Structure de bande de In P	8
I-1-7 Bandes interdites des composés III-V	9
I-1-7-1 Bandes interdites des principaux composés III-V	9
I-1-7-2 Discontinuité de bandes aux hétérojonction "offset" ΔEC	10
I-1-8 Nature de la bande de conduction du matériau Ga <sub>(1-x)</sub> Al <sub>(X)</sub> As	11
I-1-9 Théorie de l'approximation de masse effective dans les hétérostructures	13
I-2 Les équations de base des semi-conducteurs et les modèles utilisés dans le simulateur ATLAS	15

I-2-1 L'équation de Poisson15
I-2-2 Équations de continuité des porteurs de charges16
I-2-3 Les équations de transport16
I-2-4 Transport des charges par le modèle de diffusion16
I-2-5 Théorie de base des statistiques de porteurs18
I-2-5-1 Statistiques de Fermi-Dirac et de Boltzmann18
I-2-5-2 Densité effectives des états
I-2-5-3 Concentration intrinsèque19
I-2-5-4 Énergie de la bande interdite20
I-1-5-5 Rétrécissement de la bande interdite20
I-2-6 Les modèles de calcul de la mobilité21
I-2-6-1 Modèle de calcul de la mobilité sous un faible champ22
I-2-6-2 Modèle de calcul de la mobilité sous un champ faible et constant22
I-2-6-3 Mobilité Électrique Parallèle dépendent Du Champ22
I-2-7 Processus de génération-recombinaison des porteurs
I-2-7-1 Mécanisme de recombinaison de Shockley-Read-Hall24
I-2-7-2 Recombinaison Auge
I-2-7-3 Modèle tenant compte de la température25
I-3 Les équations et les modèles dans le partie LASER du logiciel de simulation SILVACO ATLAS
I-3-1 L'équation de Helmholtz26
I-3-2 Le modèle standard de gain27
I-3-3 Le modèle empirique de Gain27
I-3-4 Le modèle radiatif général de recombinaison28
I-3-5 Le modèle de recombinaison radiative par défaut
I-3-6 Emission Stimulée
I-3-7 l'équation d'évolution de densité de photon29

I-3-8	Puissance optique		
-------	-------------------	--	--

# <u>Chapitre II</u>

# Généralités sur les LASERS

II-1	Introducti	on	35
II-2	Principe d	lu laser	35
II	-2-1 Milieu	ux amplificateur	35
	II-2-1-a	Absorption	36
	II-2-1-b	Emission spontanée	36
	II-2-1-c	Emission stimulée	37
	II-2-1-d	L'inversion de population	37
Ι	I-2-2 Résor	nateur optique	38
Ι	I-2-3 Le Po	ompage	38
II-3	Caractéris	tique de la lumière laser	39
]	I-3-1 Unidi	rectionnel	39
]	I-3-2 Intens	se	39
]	I-3-3 Mono	ochromatique	40
]	I-3-4 Cohér	rent	40
II-4	Différents	types de laser	40
]	I-4-1 Lase	ers à gaz	40
	II-4-1-	-a Laser hélium-néon (He-Ne)	41
	II-4-1	-b Laser excimer	42
]	I-4-2 Lase	ers à corps solide	42
II-5	Lasers à s	emi-conducteurs	44
II-6	Le laser a	homojonction	48
II-7	Le laser a	hétérojonction	49

# <u>Chapitre III</u>

# Logiciel de simulation SILVACO ATLAS

III-1	Logiciel de simulation SILVACO ATLAS	.52
III-2	Utilisation d'ATLAS SILVAC	.53
III-3	Structure de fichier d'entrée	.54
III-4	Spécification de la structure étudiée	.54

III-4-a	Maillage5	5
III-4-b	Région5	6
III-4-c	Electrodes	7
III-4-d	Dopage	8
III-5 Spécif	ication du modèle et du matériau5	;9
III-5-a	Matérielle	59
III-5-b	Modèle	59
III-5-c	Contact	50
III-5-d	Interface	50
III-6 Métho	odes numérique à sélectionner6	60
III-7 Spécif	ïcation de Solution6	1
III-7-a	Log	51
III-7-b	Solve ( <i>Résoudre</i> )6	51
III-7-c	Load et save (chargement et sauvegarde)6	51
III-8 Analy	se des résultats6	51

# **Chapitre IV**

# **Résultat et interprétation**

IV-1	Simu	lation	des	caracté	ristiques	électriques	d'une	diode	laser	GaAs-
AlGaAs	•••••	• • • • • • • • • •	••••••	• • • • • • • • • • • • •	•••••		• • • • • • • • • • • • •	•••••	••••	64
IV	7-1-1 N	ariatio	n du g	ain en fon	ction du c	ourant, de la t	ension, de	e la puiss	sance et	de la
densité d	le photo	ons			•••••		•••••			64
IV	/-1-2	Variatic	on de la	a puissanc	e en fonc	tion du couran	it et de la	tension.	•••••	67
IV	7-1-3 N	ariatio	n de la	densité d	e photons	en fonction d	u courant	et de la t	tension.	68
IV	/-1-4 N	ariatio	n de la	densité d	e photons	en fonction d	e la puiss	ance	••••••	69
IV	7-1-5 E	Effet de	la long	gueur de c	avité sur l	le gain			• • • • • • • • • • •	70
Conclus	ion	•••••		•••••	•••••		•••••	•••••	•••••	72

# LISTE DES FIGURES

Figure I-1 : Réseau cristallin dans la structure Zinc-blende	.5
Figure I-2 : Première zone de Brillouin d'un cristal Zinc blende [3, 4, 5,6]	6
Figure I-3 : Structure de bande de GaAs [3, 4, 5,7]	7
Figure I-4 : Structure de bande de In P [3]	.9
Figure I-5 : Bandes interdites des principaux composés III-V en fonction des paramètres	
cristallins [8]	9
Figure I-6 : Divers types d'hétérojonctions définis par la position relative de bandes des sem	ıi-
conducteurs A et B ; le type I est le plus utilisé [8,9]l	0
Figure I-7 : Variation du minimum de la bande de conduction, et le maximum de la bande d	le
valence du composé $Al_yGa_{(1-y)}As$ en fonction de (y) [8]	12
<b>Figure I-8 :</b> Barrière et puits dans l'hétérojonction GaAS/Al <sub>y</sub> Ga <sub>(1-y)</sub> As [8]- Cas où $y = 0.3$ et	la
vallée $\Gamma$ est la barrière la plus basse - Cas où y = 1 et la vallée X est la barrière la plu	us
basse1	2
Figure I-9 : La fonction d'onde d'un état le plus bas d'un puits de potentiel de 6 nm dans un	ne
hétérostructure, y compris la fonction de Bloch [8]	14
Figure II-1: Schema d'un system laser	35
Figure II-2 : Schéma de niveaux	36
Figure II-3 : Absorption. émission spontanée et émission stimulée	7
Figure II-4 : Schéma d'un faisceau laser	19
Figure II-5 : Comparaison de la lumiér ordinaire et laser4	!0
Figure II-6 : Schéma de niveaux du laser He-Ne4	1
<i>Figure II-7-a :</i> Schéma de niveau pour un laser a trois niveaux4	3
<i>Figure II-7-b :</i> Schéma de niveaux pour un laser à quatre niveaux	4

Figure II-8 : Structure de bandes et radiation de recombinaison lors du passage d'un électron
de la bande de conduction à la bande de valence45
Figure. II-9 a) Distribution de Fermi-Dirac $F(E)$ des électrons dans un semi-conducteur.
b) Position du niveau de Fermi dans un semi-conducteur pur
Figure II-10 : Niveau de Fermi pour des semi-conducteurs dopés:
a)donneur, b) accepteur47
Figure II-11 : Production de l'inversion de population par injection d'électrons dans une
jonction p-n
Figure II-12: Structure d'un laser semi-conducteur a homojonction
<i>Figure II-13</i> : Diagramme de bande d'une homojonction
<i>Figure II-14 : Diagramme de bande d'une double-hétérojonction49</i>
<i>Figure III-1 : Environnement virtuel de fabrication de plaquettes de Silvaco</i> 52
Figure III-2 : Entrées et sorties de Atlas
Figure III-3 : Groupes de commandes54
Figure III-4 : Maillage à deux dimensions55
Figure III-5: Définition des régions56
<i>Figures III-6 : Les régions et les matériaux</i> 57
Figure III-7 : Définition des électrodes
Figure III-8 : Types de dopage
<i>Figure III-9 : Affichage graphique des résultats par « TonyPlot »</i> 62
<i>Figure IV-1 :</i> Variation du gain en fonction de la tension65
<i>Figure IV-2 :</i> Variation du gain en fonction du courant65
<i>Figure IV-3 :</i> Variation du gain en fonction de la densité de photon66
<i>Figure IV-4 :</i> Variation du gain en fonction de la puissance66
<i>Figure IV-5 :</i> Variation de la puissance en fonction du courant

<i>Figure IV-6</i> : Variation de la puissance en fonction de la tension
<i>Figure IV-7 :</i> Variation de la densité de photon en fonction du courant
<i>Figure IV-8 :</i> Variation de la densité de photon en fonction de la tension69
<i>Figure IV-9 :</i> Variation de la densité de photon en fonction de la puissance70
Figure IV-10 : Variation du gain en fonction de la tension dans la longueur de cavité100µm70
<i>Figure IV-11 :</i> Variation du gain en fonction de la tension dans la longueur de cavité70µm71
<i>Figure IV-12 :</i> Variation du gain en fonction de la tension dans la longueur de cavité 50µm71

# LISTE DES TABLEAUX

<b>Tableau 1-1 :</b> Extrait de la classification périodique des éléments	3
Tableau       I-2 : Propriété des principaux composés binaires III-V à 300 K [2,3]	4
Tableau I-3 : Paramètre de la bande de conduction dans GaAs et InP [3]	8
Tableau II-1 : Comparaison de la puissance et l'intensité de différentes sources lumineuse	

### Introduction générale

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteurs.

Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semi-conducteurs interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques.

La plus grande partie des composants (transistors, diodes, et ce qu'on appelle puce en générale) sont réalisés en silicium qui joue un rôle prépondérant, sa technologie et sa connaissance théorique ont atteint des niveaux inégalés.

En électronique rapide et en optoélectronique, les propriétés du silicium sont insuffisantes (mobilités des porteurs relativement petites et transitions électroniques indirectes au seuil d'absorption optique). Dans de telles applications, les composés semi-conducteurs III-V sont préférables. On citera par exemple quelques composés binaires et ternaires, GaAs, InP, GaAlAs, InGaAs,... Les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes pour les performances de ces dispositifs.

L'objectif principal de ce travail est la simulation des caractéristiques électriques et optiques d'un dispositif Laser à hétérostructure de la famille III-V des semi-conducteurs, à travers le logiciel Silvaco Atlas.

Un Laser à semi-conducteur se compose d'une jonction PN réalisée avec un matériau à bande interdite directe; le côté N contient un excès d'électrons tandis que le côté P contient un excès de trous. À travers cette jonction il se forme une barrière de potentielle qui empêche la recombinaison entre les électrons et les trous. La polarisation directe de cette jonction abaisse cette barrière et facilite la recombinaison des porteurs. Si la polarisation directe est importante, il se produit une inversion de population qui rapporte le gain exigé pour l'émission laser.

L'interaction entre la région active et la lumière laser est optimisée par l'utilisation d'une double hétéro structure consistée par une combinaison de matériaux semi-conducteurs avec différentes bandes interdites. Cette structure assure le confinement des photons et des porteurs de charges suite aux différences d'indices de réfraction et de largeurs de bandes

Х

interdites respectivement. L'utilisation de cette technique de confinement améliore l'efficacité du laser et abaisse le courant d'entraînement.

Les semi-conducteur employées dans notre travail sont le « GaAs » qui est un semiconducteur direct, et le «  $Al_{(x)}Ga_{(1-x)}As$  », ici « x » représente le nombre relatif d'atomes pour lesquels le « Ga » est remplacé par l'aluminium « Al », pour x < 0,38 le «  $Ga_{(1-x)}Al_{(x)}As$  » est un matériau a bande interdite directe. Par contre, lorsque la fraction molaire « x » est plus grande, le matériau devient indirect.

Le système GaAs-AlGaAs a été jusqu'ici le plus étudié et le plus utiliser pour réaliser des diodes lasers. Pour différentes raison :

Le GaAs est un semi-conducteur à gap direct que l'on peut doper n et p facilement.

Le composé ternaire AlGaAs peut être fabriqué sur une gamme étendue de composition et présente avec GaAs un désaccord de maille très faible (0.1%) pour toutes les valeurs de x. L'accord de maille entre les constituants d'une structure multicouches est un paramètre important car il conditionne l'absence de contraintes créant des centres de recombinaison non radiative.

Les valeurs relatives des gaps et des indices de GaAs et AlGaAs créent un bon confinement des électrons et des photons.

La diode laser du type GaAs -AlGaAs émet un rayonnement centré de 0.9µm

Dans le premier chapitre nous allons aborder les matériaux semi-conducteurs III-V, les équations de base des semi-conducteurs et les modèles utilisés dans le simulateur ATLAS.

Dans le deuxième chapitre, nous allons présenter des généralités sur les lasers (principe de fonctionnement, les différents types des lasers,...).

Dans le troisième chapitre, nous allons découvrir le logiciel de simulation Silvaco Atlas ainsi qu'une présentation de la structure étudiée.

Enfin nous présentons au dernier chapitre les résultats de simulation obtenus dans notre étude avec discussions.

Х

# <u>Chapitre I</u>

# Matériaux semi-conducteurs III-V, Equations de base des Semi-conducteur et Modèles utilisé dans ATLAS

# <u>Sommaire</u>

I-1 Mat	ériaux semi-conducteurs III-V	.3
I-1-1	Introduction	.3
I-1-2	Définition des semi-conducteurs III-V	3
I-1-3	Les composés binaires, ternaires et quaternaires des S/C III-V	3
I-	1-3-1 Les composés binaires	3
I-	1-3-2 Les composés ternaires et quaternaires	4
I-1-4	Structure cristalline	5
I-1-5	Réseau réciproque- La zone de Brillouin	.6
I-1-6	Structure des bandes d'énergie des semi-conducteurs III-V	.6
I-	-1-6-1 Structure de bande de GaAs	.7
I-	-1-6-2 Structure de bande de In P	.8
I-1-7	Bandes interdites des composés III-V	9
I-	-1-7-1 Bandes interdites des principaux composés III-V	.9
I-	-1-7-2 Discontinuité de bandes aux hétérojonction "offset" ΔEC	10
I-1-8	Nature de la bande de conduction du matériau Ga(1-y)AlyAs	11
I-1-9	Théorie de l'approximation de masse effective dans les hétérostructures	.13
I-2 Les é	équations de base des semi-conducteurs et les modèles utilisés dans le	
simulate	ur ATLAS	15
I-2-1	L'équation de Poisson	.15
I-2-2	Équations de continuité des porteurs de charges	.16
I-2-3	Les équations de transport	16
I-2-4	Transport des charges par le modèle de diffusion	16
I-2-5	Théorie de base des statistiques de porteurs	.18
Ι	-2-5-1 Statistiques de Fermi-Dirac et de Boltzmann	.18
1	-2-5-2 Densité effectives des états	18

I-2-5-3       Concentration intrinsèque       11         I-2-5-4       Énergie de la bande interdite       20         I-1-5-5       Rétrécissement de la bande interdite       20         I-2-6       Les modèles de calcul de la mobilité       21         I-2-6-1       Modèle de calcul de la mobilité sous un faible champ       22         I-2-6-2       Modèle de calcul de la mobilité sous un faible champ       22         I-2-6-3       Mobilité Électrique Parallèle dépendent Du Champ       22         I-2-7-7       Processus de génération-recombinaison des porteurs       22         I-2-7-1       Mécanisme de recombinaison de Shockley-Read-Hall       24         I-2-7-2       Recombinaison Auge       22         I-2-7-3       Modèle tenant compte de la température       22         I-3       Les équations et les modèles dans le partie LASER du logiciel de simulation       24         I-3-1       L'équation de Helmholtz       24         I-3-2       Le modèle standard de gain       24	I-2-5-3 I-2-5-4	Concentration intrinsèque	
I-2-5-4       Énergie de la bande interdite       .20         I-1-5-5       Rétrécissement de la bande interdite       .20         I-2-6       Les modèles de calcul de la mobilité       .21         I-2-6-1       Modèle de calcul de la mobilité sous un faible champ       .22         I-2-6-2       Modèle de calcul de la mobilité sous un faible champ       .22         I-2-6-2       Modèle de calcul de la mobilité sous un champ faible et constant       .22         I-2-6-3       Mobilité Électrique Parallèle dépendent Du Champ       .22         I-2-7       Processus de génération-recombinaison des porteurs       .22         I-2-7-1       Mécanisme de recombinaison de Shockley-Read-Hall       .24         I-2-7-2       Recombinaison Auge       .22         I-2-7-3       Modèle tenant compte de la température.       .22         I-3-1       Leéquations et les modèles dans le partie LASER du logiciel de simulation       .24         I-3-1       L'équation de Helmholtz.       .24         I-3-2       Le modèle standard de gain       .24	I-2-5-4	concentration muniseque	19
I-1-5-5 Rétrécissement de la bande interdite       20         I-2-6 Les modèles de calcul de la mobilité       2         I-2-6-1 Modèle de calcul de la mobilité sous un faible champ       2         I-2-6-2 Modèle de calcul de la mobilité sous un champ faible et constant       22         I-2-6-3 Mobilité Électrique Parallèle dépendent Du Champ       22         I-2-7 Processus de génération-recombinaison des porteurs       2         I-2-7-1 Mécanisme de recombinaison de Shockley-Read-Hall       2         I-2-7-2 Recombinaison Auge       2         I-2-7-3 Modèle tenant compte de la température       2         I-3 Les équations et les modèles dans le partie LASER du logiciel de simulation       2         SILVACO ATLAS       2         I-3-1 L'équation de Helmholtz       2         I-3-2 Le modèle standard de gain       2		Énergie de la bande interdite	20
I-2-6 Les modèles de calcul de la mobilité	I-1-5-5	Rétrécissement de la bande interdite	20
I-2-6-1       Modèle de calcul de la mobilité sous un faible champ       22         I-2-6-2       Modèle de calcul de la mobilité sous un champ faible et constant       22         I-2-6-3       Mobilité Électrique Parallèle dépendent Du Champ       22         I-2-7       Processus de génération-recombinaison des porteurs       22         I-2-7-1       Mécanisme de recombinaison de Shockley-Read-Hall       22         I-2-7-2       Recombinaison Auge       22         I-2-7-3       Modèle tenant compte de la température.       22         I-3       Les équations et les modèles dans le partie LASER du logiciel de simulation       24         SILVACO ATLAS       24         I-3-1       L'équation de Helmholtz.       24         I-3-2       Le modèle standard de gain       24	I-2-6 Les m	odèles de calcul de la mobilité	21
I-2-6-2 Modèle de calcul de la mobilité sous un champ faible et constant	I-2-6-1	Modèle de calcul de la mobilité sous un faible champ	22
I-2-6-3 Mobilité Électrique Parallèle dépendent Du Champ.       22         I-2-7 Processus de génération-recombinaison des porteurs       22         I-2-7-1 Mécanisme de recombinaison de Shockley-Read-Hall.       22         I-2-7-2 Recombinaison Auge.       22         I-2-7-3 Modèle tenant compte de la température.       22         I-3 Les équations et les modèles dans le partie LASER du logiciel de simulation       22         I-3-1 L'équation de Helmholtz.       22         I-3-2 Le modèle standard de gain.       22	I-2-6-2	Modèle de calcul de la mobilité sous un champ faible et constant	22
<ul> <li>I-2-7 Processus de génération-recombinaison des porteurs</li></ul>	I-2-6-3	Mobilité Électrique Parallèle dépendent Du Champ	22
I-2-7-1       Mécanisme de recombinaison de Shockley-Read-Hall       24         I-2-7-2       Recombinaison Auge       22         I-2-7-3       Modèle tenant compte de la température       22         I-3       Les équations et les modèles dans le partie LASER du logiciel de simulation       24         SILVACO ATLAS       24         I-3-1       L'équation de Helmholtz       24         I-3-2       Le modèle standard de gain       24	I-2-7 Proce	essus de génération-recombinaison des porteurs	23
I-2-7-2       Recombinaison Auge.       2         I-2-7-3       Modèle tenant compte de la température.       2         I-3       Les équations et les modèles dans le partie LASER du logiciel de simulation       2         SILVACO ATLAS       2         I-3-1       L'équation de Helmholtz.       2         I-3-2       Le modèle standard de gain.       2	I-2-7-1	Mécanisme de recombinaison de Shockley-Read-Hall	24
I-2-7-3 Modèle tenant compte de la température	I-2-7-2	Recombinaison Auge	25
I-3 Les équations et les modèles dans le partie LASER du logiciel de simulation SILVACO ATLAS	I-2-7-3	Modèle tenant compte de la température	25
SILVACO ATLAS	I-3 Les équat	ions et les modèles dans le partie LASER du logiciel de simulat	ion
I-3-1 L'équation de Helmholtz20 I-3-2 Le modèle standard de gain	SILVACO AT	LAS	26
I-3-2 Le modèle standard de gain2	I-3-1 L'équ	ation de Helmholtz	26
	I-3-2 Le m	odèle standard de gain	27
I-3-3 Le modèle empirique de Gain2	I-3-3 Le m	dèle empirique de Gain	27
I-3-4 Le modèle radiatif général de recombinaison2		dèle radiatif général de recombinaison	
I-3-5 Le modèle de recombinaison radiative par défaut28	I-3-4 Le m		20
I-3-6 Emission Stimulée	I-3-4 Le mo I-3-5 Le mo	dèle de recombinaison radiative par défaut	
	I-3-4 Le me I-3-5 Le me I-3-6 Emiss	dèle de recombinaison radiative par défaut	28
I-3-7 L'équation d'évolution de densité de photon2	I-3-4 Le me I-3-5 Le me I-3-6 Emiss I-3-7 L'équ	dèle de recombinaison radiative par défaut ion Stimulée ation d'évolution de densité de photon	28 29 29

### I-1 Matériaux semi-conducteurs III-V

### **I-1-1 Introduction**

Après les spectaculaires résultats enregistrés dans la technologie Silicium dans le domaine de la microélectronique, la recherche de composants électroniques présentant des propriétés de transport supérieures à celles du Silicium, conduit la plupart des grands laboratoires de recherches à s'intéresser à des nouveaux matériaux et en particulier les composés semi-conducteurs III-V.

C'est alors qu'une nouvelle classe de matériaux fait son apparition, basés sur la création d'un potentiel dans un cristal par:

- **La modulation de dopage.**
- La variation de composition d'un alliage.
- **↓** La combinaison des deux méthodes précédentes.

#### I-1-2 Définition des semi-conducteurs III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la troisième (III) colonne et d'un élément de la cinquième (V) colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Le tableau (I-1) regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés.

III	IV	V
${}^{5}_{10,81}B$	$^{6}_{12,01}C$	$^{7}_{14,01}N$
$^{13}_{26,98}Al$	$^{14}_{28,09}Si$	$^{15}_{30,97}P$
$^{31}_{69,74}Ga$	$^{32}_{72,59}Ge$	$^{33}_{74,92}As$
<sup>49</sup> <sub>114.82</sub> In	$^{50}_{118,69}Sn$	$^{51}_{121,75}Sb$

**Tableau I-1 :** Extrait de la classification périodique des éléments.

### I-1-3 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des S/C III-V

#### I-1-3-1 Les composés binaires

L'étude de propriétés des composés binaires, et en particulier de la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont laquelle la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée.

Les composés contenant du Bore, de l'Aluminium ou de l'Azote entrent dans cette catégorie; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [1], qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique ou une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le Thallium ou le Bismuth donnent des composés à base de Galium (GaAs, GaSb) ou d'Indium (InP, InAs,InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes. Le tableau (I-2) résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

Composé III-V	Eg (ev)	$m * / m_{\circ}$	$\mu$ (cm <sup>2</sup> /VS)	a (A°)
BN	7,5	-	-	3,6150
AlP	2,45	-	-	5,4510
AlAs	2,16	-	-	5,6605
AlSb	1,58	0,12	200	6,1355
BP	2,0	-	-	4,5380
GaN	3 36	0.10	380	a=3,189
Gaiv	5,50	0,19	580	b=5,185
GaP	2,26	0,82	110	5,4512
GaAs	1,42	0,067	8500	5,6533
GaSp	0,72	0,042	5000	6,0959
InP	1,35	0,077	4600	5,8686
InAs	0,36	0,023	33000	6,0584
InSp	0,17	0,0145	80000	6,4794

Tableau I-2: Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300 K [2,3].

### I-1-3-2 Les composés ternaires et quaternaires

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne.

On sait par exemple obtenir des alliages ternaires, ou quaternaires qui sont identifié de la façon suivante :

> Ternaires : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit

 $A_x A_{(l-x)}^{\setminus} B$  Exemple:  $Ga_x In_{(l-x)}P$ , lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court GaInP.

> Quaternaires 1+3 : S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit:

 $A_x A_y A_{(1-x-y)} B$ . Exemple  $Ga_x In_y A l_{(1-x-y)} As$ .

> Quaternaires 2+2 : S'il y a substitution de 2 atomes sur chacun des deux sous

réseaux, soit  $A_x A_{(1-x)}^{\setminus} B_y B_{(1-y)}^{\setminus}$ . Exemple :  $Ga_x In_{(1-x)} P_y As_{(1-y)}$ .

La plupart des solutions solides ainsi réalisées sont complètes, la loi de Vegard (relation linéaire entre le paramètre de réseau et la composition) est approximativement suivie, et on observe une évolution progressive et régulière des propriétés (dont la bande interdite et les paramètres cristallins) en fonction du taux de substitution.

#### I-1-4 Structure cristalline

La plupart des matériaux III-V se cristallisent dans la structure sphalérite dite "Zinc Blende" présentée sur la figure (I-1). Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V [3, 4,5].

Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité  $(a_0/4, a_0/4, a_0/4)$ ,  $a_0$  étant le paramètre cristallin, c'est-à-dire la longueur de l'arête du cube élémentaire.



Figure I-1 : Réseau cristallin de la structure Zinc-blende.

De ce fait, dans les matériaux III-V, les liaisons ne sont pas simplement covalentes comme dans le Silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement covalent des liaisons (semi-conducteur polaires). Cette composante ionique de la liaison est importante, elle se manifeste par la présence de moments dipolaires électriques qui interagissent avec le rayonnement électromagnétique de grande longueur d'onde, au même titre qu'il y a interaction entre les cristaux ioniques et la lumière infrarouge [6].

### I-1-5 Réseau réciproque- La zone de Brillouin

Les fonctions d'ondes électroniques et les énergies correspondantes sont fonction du vecteur d'onde de l'électron. Ainsi la structure de bandes d'énergie du semi-conducteur doit être représentée dans l'espace réciproque et dans les différentes directions du vecteur d'onde  $\vec{K}$ .

Le réseau réciproque associe à la structure de type zinc blende est cubique centré. Sa maille élémentaire qui correspond à la première zone de Brillouin à la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube (Figure I-2).

Elle présente un centre de symétrie à l'origine (noté  $\Gamma$ ) et des axes de symétrie:

- Les axes <100> à symétrie d'ordre  $4(\Delta)$
- Les axes <111> à symétrie d'ordre  $6(\Lambda)$
- Les axes <011> à symétrie d'ordre  $2(\Sigma)$



Figure I-2 : Première zone de Brillouin d'un cristal Zinc blende [3, 4, 5,6].

Les points de rencontre de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin jouent un rôle essentiel dans la théorie des bandes. On les note généralement de la manière suivante:

- ▶ Points X de cordonnées  $(2\pi/a, 0, 0)$  sur les axes <100>.
- ▶ Points L de cordonnées ( $\pi/a$ ,  $\pi/a$ ,  $\pi/a$ ) sur les axes <111>.
- > Points K de cordonnées (0,  $3\pi/2a$ ,  $3\pi/2a$ ) sur les axes <011>.

La forme et le volume de la zone de Brillouin ne dépendent que de la géométrie du réseau de Bravais, sans égard à la composition chimique ou au nombre d'atomes dans la cellule unitaires. La zone de Brillouin est une cellule unitaire primitive de réseau réciproque d'importance fondamentale pour l'étude des propriétés électroniques des cristaux, en particulier dans les semi-conducteurs [6,7].

### I-1-6 Structure des bandes d'énergie des semi-conducteurs III-V

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les élections en fonction de leurs vecteurs d'onde. On les représente donc dans l'espace réciproque, et pour simplifier, dans les directions de plus hautes symétries de la première zone de Brillouin. Elles se décomposent en bandes de conduction la plus haute, la bande de valence la plus basse, et la

bande interdite qui les sépare qui détermine principalement les propriétés de transport du semi-conducteur.

#### I-1-6-1 Structure de bande de GaAs

Pour le GaAs, le maximum de la bande de valence est en K=0 et celle-ci est doublement dégénérée avec deux branches E=f(K) confondues au centre de la zone de Brillouin (Figure I-3). Les deux bandes décrivent la disposition de porteurs de masses effectives différentes, la masse des trous lourds est de  $0.68m_0$ , celle des trous légers est de  $012m_0$  où m<sub>0</sub> est la masse de l'électron au repos. Une troisième branche de la bande de valence est abaissée par rapport aux deux premières d'une énergie  $\Delta$ , égale à 0,33 eV.

La bande de conduction présente, au centre de la zone de Brillouin (K=0) un minimum non dégénérée, qui est une vallée à symétrie ( $\Gamma$ ) appelée vallée centrale. Il existe également d'autres minima à des niveaux d'énergie plus élevée, les 4 vallées à symétrie L dans la direction <111> et les directions équivalentes. Cette propriété est en partie responsable de certaines caractéristiques des phénomènes de transport dans le semi-conducteur GaAs. L'arséniure de gallium étant un composé à gap direct, les transitions électriques les moins énergétiques entre la bande de valence et la bande de conduction peuvent se faire avec conversation du vecteur d'onde K (sans l'intervention des phonons). L'énergie correspondante à la largeur de la bande interdite  $\Delta$ Eg au centre de la zone de Brillouin varie avec la température. Eg = 1.43ev à 300K et 1.51ev à 77K.



Figure I-3 : Structure de bande de GaAs [3, 4, 5,7].

### I-1-6-2 Structure de bande de In P

Le InP est un composé III-V à transition direct. Cela signifie que l'énergie minimale ( $\Gamma_{15}$ ) de la bande de conduction et l'énergie maximale ( $\Gamma_{15}$ ) de la bande de valence sont localisées au centre de la zone de Brillouin. Ceci a des conséquences importantes du point de vue des propriétés électroniques et optiques.

La bande de conduction présente par ailleurs une courbure généralement très accentuée au voisinage de son minimum ( $\Gamma$ ). La masse effective des électrons étant inversement proportionnelle à cette courbure, ceci explique pourquoi dans les semi-conducteur III-V à bande interdite comme GaAs, InP, GaInAs,..., la masse effective des électrons en ( $\Gamma$ ) est très faible, et par conséquent, la mobilité électronique est élevée.

On note généralement la présence de deux vallées latérales sur la bande de conduction, en bordure de la zone de Brillouin : vallée L dans la direction <111> et vallée X dans la direction <100>. Réparties dans l'espace, il existe quatre vallées de type L équivalentes et trois de type X. les vallées sont caractérisées par une courbure faible et par conséquent par des électrons ayant une masse effectives élevée et une faible mobilité. Le tableau (I-3) donne les valeurs des masses effectives dans les différentes vallées et les écarts en énergie entre le minimum principal et les minima secondaires L et X pour GaAs, InP à la température ambiante et à basse température.

	Ga	As	In	ıP
Température	300K	77K	300K	77K
$\Delta Eg(ev)$	1,43	1,51	1,35	1,41
$\lambda(\mu_m)$	0,87	0,82	0,92	0,88
$\Delta E_{\Gamma L}(ev)$	0,33	0,33	0,54	0,61
$\Delta E_{_{\Gamma X}} (ev)$	0,48	0,46	0,76	0,755
$m_{e\Gamma^*}/m_{\circ}$	0,063	0,067	0,078	0,082
$m_{_{eL^*}}/m_\circ$	0,22	0,22	0,22	0,22
$m_{_{eX}*}/m_{\circ}$	0,58	0,58	0,384	0,384

Tableau I-3: Paramètres de la bande de conduction dans GaAs et InP [3].



Figure I-4 : Structure des bandes de In P [3].

L'allure générale des bandes est la même pour tous les composés III-V dont la structure des bandes est directe (InAs, InSb, GaAs, GaSb,...).

### I-1-7 Bandes interdites des composés III-V

#### I-1-7-1 Bandes interdites des principaux composés III-V

La figure (I-5) montre les bandes interdites Eg des principaux composés III-V en fonction des paramètres cristallins  $a_0$  [8,9]. En continu bandes interdites directes et en tirets bandes interdites indirectes; les discontinuités sont dues au changement de structures.



*Figure I-5* : *Bandes interdites des principaux composés III-V en fonction des paramètres cristallins* [8].

Ce diagramme montre qu'il est possible d'obtenir des matériaux dont la largeur de la bande interdite, et donc les propriétés optiques, varient dans une large gamme.

Il existe cependant une contrainte importante pour la fabrication de ces matériaux, qui sont réalisés en couches minces par croissance épitaxiale sur un substrat binaire, dont le paramètre cristallin doit être très proche de celui du substrat. Le diagramme de la figure (I-5) permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être épitaxie en couche mince sur des substrats binaires.

#### I-1-7-2 Discontinuité de bandes aux hétérojonctions "offset" ΔEC

Plusieurs types d'hétérojonction sont envisageables (*figure I-6*); le système le plus utilisé actuellement est le système GaAlAs/GaAs qui est de type I.



*Figure I-6* : Divers types d'hétérojonctions définis par la position relative des bandes des semi-conducteurs A et B ; le type I est le plus utilisé [8,9].

Les discontinuités de bandes (ou "offsets" de bandes) aux hétérojonctions ( $\Delta E_C$ ,  $\Delta E_V$ ) sont certainement les paramètres à la fois les plus importants mais aussi les plus difficiles à déterminer. En fait, le problème est très complexe, d'autant plus que la dépendance éventuelle des "offsets" de bandes en fonction de la technologie de croissance, de l'orientation cristallographique, ou même de la séquence de croissance est peu connue [3,8,9].

Les principales théories permettant de prédire ces discontinuités de bandes sont des théories dites "linéaires" ; elles supposent qu'il existe une énergie absolue, spécifique, associée à

**(I-1)** 

chaque bord de bandes de tout semi-conducteur. Les "offsets" de bandes sont alors simplement les différences entre les énergies absolues de chaque bande pour chacun des deux semi-conducteurs. Par exemple pour la bande de conduction :

$$\Delta E_{\rm C}({\rm A}/{\rm B}) = E_{\rm C}({\rm B}) - E_{\rm C}({\rm A}) .$$

En fait cette hypothèse de linéarité est bien évidemment une approximation et on devait écrire :

$$\Delta E_{\rm C}(A/B) = E_{\rm C}(B) - E_{\rm C}(A) + \delta(A/B) . \tag{I-2}$$

où  $\delta(A/B)$  est une correction ne pouvant être exprimée linéairement en fonction des propriétés individuelles des semi-conducteurs A et B, mais est une caractéristique propre à la combinaison A/B.

Compte tenu de l'hypothèse de linéarité, la propriété de transitivité des discontinuités de bandes aux hétérojonctions se déduit immédiatement, et l'on a :

$$\Delta E_{\rm C}({\rm A/C}) = \Delta E_{\rm C}({\rm A/B}) + \Delta E_{\rm C}({\rm B/C}) . \tag{I-3}$$

Cette règle, couramment admise, est cependant difficile à vérifier expérimentalement ; elle à été très bien vérifiée sur certaines hétérostructures. Mais la détermination expérimentale des discontinuités de bandes aux hétérostructures est toujours un problème d'actualité et ce même pour des systèmes bien connus comme le cas de l'hétérostructures GaAlAs/GaAs.

#### I-1-8 Nature de la bande de conduction du matériau Ga(1-y)AlyAs

Pour que deux matériaux puissent former une bonne hétérojonction, il est d'abord nécessaire que les paramètres de maille soient aussi voisins que possible. A cet effet, le matériau  $Ga_{(1-y)}Al_yAs$  est très intéressant car, lorsque « y » varie de 0 à 1, c'est à dire lorsque l'on passe de GaAs à AlAs, la structure de bande passe d'un gap direct de valeur 1.43 eV à un gap indirect de valeur 2.16 eV, alors que la constante de maille passe de 5.653 A° à 5.661 A°, soit une variation < 0.2%. Ainsi il est possible de faire croître toutes les compositions sur le GaAs avec un accord de maille convenable [10].

La constante de maille et les bandes d'énergies en fonction de la composition « y » de l'aluminium sont données par [1,10] :

Constante de maille (en A°)
$$a = 5.6533 + 0.0078y$$
(I-4)Bande interdite (en eV) $Eg = 1.424 + 1.155y + 0.37y^2$ .(I-5)

Affinité électronique (en eV)	$\chi = \begin{cases} 4.07 - 1.1y \\ 3.64 - 0.14y \end{cases}$	$0 \le y < 0.44$ $0.44 < y \le 1$	( <b>I-6</b> )
Discontinuité de Ec (en eV)	$\Delta Ec = \begin{cases} 0.67  y + 0.27  y^2 \\ 0.475 - 0.31 y \end{cases}$	$0 \le y < 0.44$ $0.44 < y \le 1$	( <b>I-7</b> )
Discontinuité de Ev (en eV)	$\Delta Ev = \begin{cases} 0.413y + 0.166y^2\\ 0.413y + 0.166y^2 \end{cases}$	$0 \le y < 0.44$ $0.44 < y \le 1$	( <b>I-8</b> )

Les deux figures (I-7 et I-8) illustrent la nature, et la variation du minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence en fonction de la composition de l'aluminium « y » du composé ternaire  $Ga_{(1-y)}Al_yAs$ , et son effet sur les vallées  $\Gamma$ , L et X.



*Figure I-7 :* Variation du minimum de la bande de conduction, et le maximum de la bande de valence du composé  $Al_yGa_{(1-y)}As$  en fonction de « y » [8].



**Figure I-8**: Barrière et puits dans l'hétérojonction GaAS/Al<sub>y</sub>Ga<sub>(1-y)</sub>As [8]. - Cas où y = 0.3 et la vallée  $\Gamma$  est la barrière la plus basse. - Cas où y = 1 et la vallée X est la barrière la plus basse.

### I-1-9 Théorie de l'approximation de masse effective dans les hétérostructures

La masse d'un électron libre m0 est définie par l'accélération  $\gamma$  prise sous l'effet d'une force F appliquée : F = m0 $\gamma$ , m0 = 9.1x10<sup>-30</sup> Kg.

La masse de l'électron évoluant dans un cristal de dimensions finies, elle est soumise à des résultantes des forces intérieures ( $F_i$ ) et extérieures (F).

 $F_i + F = m_0 \gamma \implies F = (m_0 - F_i / \gamma) \gamma = m_e \gamma$ , on introduit une particule fictive, de masse  $m_e$  (qui dépend de terme  $F_i / \gamma$ ), seule intervient la résultante des forces extérieure F, dont l'état est identique à celui de la particule réelle (accélération, énergie,...). D'autre part elle est définie par :

$$m_e = h^2 / (d^2 E / dk^2)$$

**(I-9)** 

(si l'origine des énergies est pris au bas de la bande de conduction d'un semi-conducteur), m<sub>e</sub> dépend de la valeur du dénominateur  $d^2E/dk^2$ , elle est constante si E(k) est parabolique.

La masse effective d'une particule négative  $(m_e)$  ou positive  $(m_h)$  dépend de la nature du semiconducteur considéré :

Dans le cas d'un semi-conducteur à gap direct (GaAs par exemple) la masse effective est isotrope. Dans le cas d'un semi-conducteur à gap indirect (Si ou Ge par exemple) les masses effectives des électrons et des trous sont respectivement :

$$\begin{split} m_{e} &= (r \ m_{l}^{1/2} \ m_{t})^{2/3} \\ m_{h} &= (m_{Lv}^{-3/2} + m_{lv}^{-3/2})^{2/3} \end{split}$$

Où r est le nombre de vallées des bandes du matériau (r= 6 pour le Si et r= 4 pour le Ge).

m<sub>1</sub> : masse longitudinale (masse effective dans la direction (100) pour le Si ou (111) pour le Ge).

 $m_t$ : masse transversale (masse effective dans toute les directions perpendiculaires à la précédente.

 $m_{Lv}$ : particule lourde.

m<sub>lv</sub> : particule légère.

Dans le cas d'un cristal tridimensionnel, la masse effective d'un électron devient un tenseur dont les neuf composantes sont de type :

$$(\mathbf{m}_{e})_{xx} = \mathbf{h}^{2}/(\partial^{2} \mathbf{E}/\partial \mathbf{k}^{2}_{x}); \quad (\mathbf{m}_{e})_{xy} = \mathbf{h}^{2}/(\partial^{2} \mathbf{E}/\partial \mathbf{k}_{x} \partial \mathbf{k}_{y}); \quad \dots$$
 (I-10)

Le potentiel cristallin (potentiel périodique associé aux ions du cristal), joue évidemment un rôle important. L'approximation de la masse effective consiste à effectuer à l'électron une masse effective  $m_e$  différente de  $m_0$  et dont la fonction d'onde est une onde de Bloch, et il se déplace dans un réseau périodique supposé vide des ions, c'est à dire le potentiel cristallin est

(I-11)

représenté par le fait que l'électron à une masse effective différente de la masse de l'électron libre [2, 8,11].

Quant à l'application de la théorie de masse effective à l'hétérostructure un peut plus d'attention est demandé à cause de la différence des matériaux de l'hétérostructure (différence de constantes diélectriques).

Dans cette théorie la fonction d'onde peut être considérée comme le produit d'une onde de Bloch  $\varphi_n(z)$  par une fonction enveloppe  $\chi(z)$  [2,8,11].

La figure (I-9) montre la fonction enveloppe  $\chi(z)$  qui module la fonction d'onde de Bloch pour donner la fonction d'onde  $\psi(z)$ . L'énergie de l'électron est la somme de son énergie dans la bande de conduction et de l'énergie de son mouvement associé à la présence de la charge d'espace, la fonction enveloppe et l'énergie additionnelle sont respectivement fonction propre et valeur propre de l'énergie, de l'équation de la masse effective suivante :

 $(h^{2}/2m_{e})d^{2}\chi_{i}(z)/dz^{2} + [E_{i} - V(z)]\chi_{i}(z) = 0$ 



*Figure I-9* : La fonction d'onde d'un état le plus bas d'un puits de potentiel de 6 nm dans une hétérostructure, y compris la fonction de Bloch [8].

La première condition pour que l'approximation de la masse effective soit valable est que les fonctions de Bloch dans les deux matériaux de l'hétérostructure doivent être semblables, une condition évidente est qu'elles doivent appartenir au même point dans la relation énergie - vecteur d'onde E(k).

La discontinuité des bandes de conduction ( $\Delta Ec$ ) impose un transfert d'électrons, du semiconducteur à grand gap vers le semi-conducteur de petit gap, la vitesse de ces électrons doit être la même sur les deux côtés pour conserver le courant, et par conséquent la seconde condition concerne l'interface de l'hétérostructure et les égalités suivantes doivent être vérifiées :  $\chi(0_A) = \chi(0_B)$ ;  $(1/m_A) [d\chi(z)/dz]_{z=0A} = (1/m_B) [d\chi(z)/dz]_{z=0B}$  (I-12) m<sub>A</sub> et m<sub>B</sub> sont respectivement les masses effectives des matériaux A et B. Si on néglige la différence des masses effectives de l'électron dans les deux matériaux on peut écrire m<sub>A</sub>  $\approx$ m<sub>B</sub>, et l'expression (I.12) se simplifie. La validité de la théorie de l'approximation de masse effective est à discuter dans le cas où les électrons sont confinés dans une épaisseur de l'ordre de quelques couches atomiques.

# I-2 Les équations de base des semi-conducteurs et les modèles utilisés dans le simulateur ATLAS

Des années de recherche dans la physique des dispositifs à semi-conducteur ont eu comme résultat l'établissement d'un modèle mathématique qui s'applique à tous les dispositifs [12]. Ce modèle consiste en un ensemble d'équations fondamentales qui lient le potentiel électrostatique et les densités de porteurs ensemble. Ces équations, qui sont résolues à l'intérieur de tous les simulateurs de dispositifs, ont été dérivées à partir des lois de Maxwell et consistées en l'équation de Poisson, les équations de continuité et les équations de transport. L'équation de Poisson décrit la variation du potentiel électrostatique avec les densités de charges locales.

La partie LASER du logiciel de simulation SILVACO ATLAS utilise le système de coordonnées (x,y,z):

- L'axe x est perpendiculaire à la cavité laser et va le long de la surface (de gauche à droite).
- 4 L'axe y est perpendiculaire à la cavité laser et il est dirigé vers le bas.
- L'axe z va le long de la cavité laser.

Les équations électriques et optiques sont résolues dans le plan x et y (perpendiculairement à la cavité du laser).

#### I-2-1 L'équation de Poisson

L'équation de Poisson relie le potentiel électrostatique à la densité de charge de l'espace:

 $div(\varepsilon\nabla\psi)=-\rho$ 

(**I-13**)

Où  $\psi$  est le potentiel électrostatique,  $\varepsilon$  est la permittivité locale, et  $\rho$  est la densité locale de la charge d'espace. Le potentiel de référence peut être défini de différentes manières. La densité

locale de la charge d'espace est la somme des contributions de toutes les charges mobiles et fixes (électrons, trous, et impuretés ionisées).

Le champ électrique est obtenu à partir du gradient de potentiel.

$$\vec{E} = -\nabla \psi \tag{I-14}$$

### I-2-2 Équations de continuité des porteurs de charges :

Les équations de continuité pour les électrons et les trous sont définies par les équations suivantes:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} div j_n^{\rightarrow} + G_n - R_n \tag{I-15}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} div j_p^{\rightarrow} + G_p - R_p \tag{I-16}$$

où n et p sont respectivement les concentrations d'électrons et de trous, Jn et Jp sont les densités de courants d'électrons et de trous respectivement, Gn et Gp sont les taux de génération pour les électrons et les trous, Rn et Rp sont les taux de recombinaison pour les électrons et les trous, et q est la charge de l'électron.

#### I-2-3 Les équations de transport

Les équations des densités de courants, ou des modèles de transport des charges, sont habituellement obtenues en appliquant des approximations et des simplifications aux équations de transport de Boltzmann.

Le modèle le plus simple et utile du transport de charges est le modèle « Drift-Diffusion ». Ce modèle est attrayant dans le sens ou il ne présente aucune variable indépendante en plus du potentiel ø, et des concentrations n et p. Ce modèle est accordé pour presque tous les dispositifs faisables technologiquement.

#### I-2-4 Transport des charges par le modèle « Drift-Diffusion »

Les dérivations basées sur la théorie de transport de Boltzmann ont prouvé que les densités de courants dans les équations de continuité peuvent être rapprochées par un modèle de diffusion [13]. Dans ce cas-ci, les densités de courant sont exprimées en termes des quasiniveaux de Fermi  $\phi_n$  et  $\phi_p$  comme:

$$j_n^{\rightarrow} = -q\mu_n n \nabla \phi_n \tag{I-17}$$

$$j_p^{\rightarrow} = -q\mu_p n \nabla \phi_p \tag{I-18} \text{ Où}$$

 $\mu_n$  et  $\mu_p$  sont les mobilités d'électrons et de trous respectivement. Les quasi-niveaux de Fermi sont alors liés aux concentrations de porteurs et au potentiel par les deux approximations de Boltzmann:

$$n = n_{ie} exp\left[\frac{q(\Psi - \phi_n)}{kT_L}\right]$$
(I-19)

$$n = n_{ie} exp\left[\frac{-q(\Psi - \phi_P)}{kT_L}\right]$$
(I-20)

Où  $n_{ie}$  est la concentration intrinsèque efficace et  $T_L$  est la température de treillis. Ces deux équations peuvent alors être réécrites pour définir les quasi-potentiels de Fermi:

$$\phi_n = \psi - \frac{kT_L}{q} ln \frac{n}{n_{ie}}$$
(I-21)

$$\phi_p = \psi + \frac{kT_L}{q} ln \frac{p}{n_{ie}}$$
(I-22)

En substituant ces équations dans les expressions de densité de courant, on obtient :

$$\vec{J_p} = -qD_p \nabla p - qp\mu_p \nabla \psi + \mu_p p(kT_L \nabla (lnn_{ie}))$$

$$\vec{J_n} = qD_n \nabla n - qn\mu_n \nabla \psi - \mu_n n(kT_L \nabla (lnn_{ie}))$$
(I-24)

Le terme final, dans ces deux équations, tient compte de l'effet de rétrécissement de la bande interdite. Les champs électriques effectifs sont définis comme suivant:

$$\vec{E}_n = -\nabla \left(\psi + \frac{kT_L}{q} lnn_{ie}\right)$$
(I-25)

$$\vec{E}_p = -\nabla \left( \psi - \frac{kT_L}{q} lnn_{ie} \right)$$
(I-26)

Ce qui permet alors d'écrire les formules les plus conventionnelles suivantes :

$$\overrightarrow{J_n} = qn\mu_n \overrightarrow{E_n} + qD_n \nabla n \tag{I-27}$$

$$\overrightarrow{J_p} = qp\mu_p \overrightarrow{E_p} - qD_p \nabla p \tag{I-28}$$

Il convient de noter que dans ce modèle, les constantes de diffusion des électrons et de trous sont calculées par les relations d'Einstein suivantes :

$$D_n = \frac{kT_L}{q}\mu_n \tag{I-29}$$
$$D_n = \frac{kT_L}{q}\mu_n$$

$$p \quad q \quad p \tag{I-30}$$

### I-2-5 Théorie de base des statistiques de porteurs

### I-2-5-1 Statistiques de Fermi-Dirac et de Boltzmann

À l'équilibre thermique et à une température  $T_L$  les électrons obéissent aux statistiques de Fermi-Dirac :

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1 + exp\left(\frac{\varepsilon - E_F}{kT_L}\right)}$$

(**I-31**)

f( $\epsilon$ ) est la probabilité qu'un niveau énergétique «  $\epsilon$  » soit occupé par un électron ;

 $E_{\text{F}}$  est l'énergie correspondante au niveau de Fermi ;

k est la constante de Boltzmann.

Si  $(E - E_F) > kT_L$ , l'équation I-31 s'écrit comme suit :

$$f(\varepsilon) = exp\left(\frac{E_F - \varepsilon}{kT_L}\right)$$
(I-32)

Cette dernière équation représente la statistique de Boltzmann [14, 15].

L'utilisation de la statistique de Boltzmann rend le calcul beaucoup plus simple, mais la statistique de Fermi-Dirac est nécessaire pour expliquer certaines propriétés des matériaux très fortement dopés (semi-conducteurs dégénérés).

#### I-2-5-2 Densité effectives des états

L'intégration des statistiques de Fermi-Dirac au-dessus d'une densité parabolique des états dans les bandes de conduction et de valence, dont le minimum d'énergie est placé aux énergies *EC* et *EV* respectivement, rapporte les expressions suivantes pour les concentrations d'électrons et de trous:

$$n = N_C F_{1/2} \left( \frac{E_F - E_C}{kT_L} \right)$$
(I-33)

$$p = N_V F_{1/2} \left( \frac{E_v - E_F}{kT_L} \right)$$
(I-34)

Où  $F_{1/2}$  désigne l'intégrale de Fermi-Dirac de l'ordre  $\frac{1}{2}$ . Les équations (I-33) et (I-34) peuvent être simplifiés comme suit :

$$n = N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{kT_L}\right)$$
(I-

35)

$$p = N_V \exp\left(\frac{E_v - E_F}{kT_L}\right)$$
(I-

36)

Ce qui est désigné par l'approximation de Boltzmann.

 $N_C$  et  $N_V$  représentent les densités effectives des états pour les électrons et les trous et sont donnés par:

$$\begin{split} N_{C}(T_{L}) &= 2 \left( \frac{2\pi m_{e}^{*} kT_{L}}{h^{2}} \right)^{\frac{3}{2}} = \left( \frac{T_{L}}{300} \right)^{\frac{3}{2}} NC300 \end{split} \tag{I-37}$$

$$N_{V}(T_{L}) &= 2 \left( \frac{2\pi m_{h}^{*} kT_{L}}{h^{2}} \right)^{\frac{3}{2}} = \left( \frac{T_{L}}{300} \right)^{\frac{3}{2}} NV300 \tag{I-38}$$

Dans quelques circonstances, la température du réseau « $T_L$ » est remplacée par la température des électrons, «Tn » dans l'équation (I-37) et la température des trous, «Tp » dans l'équation (I-38), NC300 et NV300 représentent les valeurs de N<sub>C</sub> et de N<sub>V</sub> à la température 300° K, considérées comme des constantes, suivant le matériau utilisé.

#### I-2-5-3 Concentration intrinsèque

Multipliant les équations (I-35) et (I-36) on obtient:

$$np = n_{ie}^2 \tag{I-39}$$

Où  $n_{ie}$  est la concentration en porteurs intrinsèque. Pour la statistiques de Boltzmann  $n_{ie}$  est donné par:

$$n_{ie} = \sqrt{N_C N_V} \exp\left(\frac{-E_g}{2kT_L}\right)$$
(I-40)

 $E_g = E_C - E_V$  est la bande interdite (gap) du semi-conducteur.

Pour un semi-conducteur intrinsèque le niveau énergétique de Fermi est donné par l'expression suivante :

$$E_{F} = E_{i} = -q\psi_{i} = \frac{E_{C} + E_{V}}{2} + \left(-\frac{kT_{L}}{2}\right) \ln\left(\frac{N_{v}}{N_{c}}\right)$$
(I-41)

Où  $E_i$  est le niveau de Fermi pour un semi-conducteur intrinsèque ;  $\Psi_i$  est le potentiel intrinsèque.

L'équation (I-41) décrira le potentiel intrinsèque sous les conditions du non-équilibre également.

Les concentrations d'électrons et de trous peuvent être exprimées en termes de concentrations en porteurs intrinsèques comme:

$$n = n_{ie} \exp\left[\frac{q(\psi - \phi_n)}{kT_L}\right]$$
(I-42)  
$$p = n_{ie} \exp\left[\frac{-q(\psi - \phi_p)}{kT_L}\right]$$

(**I-43**)

où  $\Psi$  est le potentiel intrinsèques et  $\phi$  est le potentiel correspondant au niveau de Fermi ( $E_F = q\phi$ ).

### I-2-5-4 Énergie de la bande interdite

La dépendance de la température avec l'énergie de la bande interdite est modelée comme suit [16]:

$$E_{g}(T_{L}) = E_{g}(0) - \frac{\text{egalpha}\left(T_{L}^{2}\right)}{T_{L} + \text{egbeta}} = \text{eg300} + \text{egalpha}\left[\frac{300^{2}}{300 + \text{egbeta}} - \frac{T_{L}^{2}}{T_{L} + \text{egbeta}}\right]$$
(I-44)

Les paramètres EG300, EGALPHA et EGBETA considérées comme des constantes et dépendent du matériau à utiliser.

#### I-1-5-5 Rétrécissement de la bande interdite

Les travaux expérimentaux ont montré qu'en présence d'un fort dopage (supérieur à  $10^{18}$  cm<sup>-3</sup>), le produit « p.n » dans le silicium devient dépendant du dopage et au fur et à mesure que le niveau de dopage augmente, une diminution de la largeur de bande interdite s'effectue de façon que la bande de conduction est réduite d'environ la même valeur que la bande de valence est soulevée. En tenant compte de ce phénomène, la concentration intrinsèque n<sub>ie</sub> est simulé par l'équation :

$$n_{ie}^2 = n_i^2 \exp\left(\frac{\Delta Eg}{kT}\right) \tag{I-45}$$

L'effet de rétrécissement de la bande interdite est exprimé par l'équation (I-45), Ces effets peuvent être décrits par une expression analytique décrivant la variation de la largeur de la bande interdite «  $\Delta$ Eg » en fonction de la concentration du dopage « N ». L'expression utilisée est celle de Slotboom et de Graaf [17].

$$\Delta E_{g} = \mathbf{B}\mathbf{G}\mathbf{N} \cdot \mathbf{E} \left\{ ln \frac{N}{\mathbf{B}\mathbf{G}\mathbf{N} \cdot \mathbf{N}} + \left[ \left( ln \frac{N}{\mathbf{B}\mathbf{G}\mathbf{N} \cdot \mathbf{N}} \right)^{2} + \mathbf{B}\mathbf{G}\mathbf{N} \cdot \mathbf{C} \right]^{\frac{1}{2}} \right\}$$

**(I-46)** 

La variation de la bande interdite est introduite pour les autres modèles physiques en soustrayant le résultat de l'équation (I-45) de la bande interdite. En outre, un ajustement est également apporté aux termes du champ électrique dans les modèles de transport tel que décrit précédemment. L'ajustement prend la forme:

$$\vec{E}_n = -\nabla \left( \psi + \frac{kT_L}{q} lnn_{ie} \right)$$

$$\vec{E}_p = -\nabla \left( \psi - \frac{kT_L}{q} lnn_{ie} \right)$$
(I-47)
(I-48)

La variation dans le gap énergétique est également appliquée partiellement à l'affinité électronique. L'affinité électronique efficace est donnée comme suit

$$\chi_{eff} = \chi + \Delta E_g \times \text{asymmetry}$$
(I-49)

Où ASYMMETRY est un facteur d'asymétrie (spécifiable par l'utilisateur).

Les valeurs des différents paramètres (BGN.E, BGN.N, BGN.C et ASYMMETRY) sont indiquées dans la déclaration du matériau à utiliser.

### I-2-6 Les modèles de calcul de la mobilité

Les électrons et les trous sont accélérés par les champs électriques, mais perdent une partie de leurs vitesses par plusieurs processus de dispersion. Ces mécanismes de dispersion enferment les vibrations du réseau cristallin (phonons), les impuretés ionisées, l'état de surfaces et autres imperfections de la matière.

Les effets de tous ces phénomènes microscopiques sont prisent en compte dans le calcul des mobilités macroscopiques introduites par suite dans les équations de transport. Ces mobilités dépendent de la grandeur du champ électrique local, la température du réseau cristallin, la concentration de dopage, existence de couches d'inversion et autres effets.

Les porteurs de charge sous un bas champ électrique sont presque en équilibre avec le réseau et ses mobilités ont des valeurs caractéristiques généralement dénotées par le symbole «  $\mu$ N0P0 ». Ces mobilités vont êtres diminués sous les effets de dispersion (par les phonons et les impuretés).

Sous un champ électrique élevé, la mobilité des porteurs diminue avec l'augmentation du champ électrique car les porteurs qui gagnent plus d'énergie peuvent participer à un éventail processus de dispersion. Par contre, la vitesse tend vers une valeur constante «  $v_{sat}$  ». La dispersion par les impuretés est relativement insignifiante pour les porteurs énergiques, ainsi que «  $v_{sat}$  » est principalement une fonction de la température du réseau.

### I-2-6-1 Modèle de calcul de la mobilité sous un faible champ

La mobilité des porteurs sous un faible champ peut être définie de différentes manières. La première manière est l'utilisation des paramètres MUN et MUP pour placer des valeurs constantes pour la mobilité des électrons et de trous. La deuxième manière consiste à employer un modèle reliant la mobilité en faible champ (à 300°K) à la concentration des impuretés.

#### I-2-6-2 Modèle de calcul de la mobilité sous un champ faible et constant

Ce modèle est indépendant de la concentration de dopage, des densités de porteur et du champ électrique. Il explique la dispersion par le réseau cristallin due à la température selon:

$$\mu_{n0} = MUN \left(\frac{T_L}{300}\right)^{-TMUN}$$
(I-50)  
$$\mu_{p0} = MUP \left(\frac{T_L}{300}\right)^{-TMUP}$$
(I-51)

Où *T* est la température du réseau.

MUN et la mobilité d'électron et MUP la mobilité du trou

### I-2-6-3 Mobilité électrique parallèle dépendante du champ

Lorsque les porteurs sont accélérés dans un champ électrique leur vitesse commencera à saturer quand la grandeur du champ électrique devient significative. Cet effet peut être expliqué par une réduction de la mobilité efficace, puisque la vitesse de dérive est le produit de la mobilité par la composante du champ électrique dans la direction du courant. L'expression suivante de Caughey et de Thomas [18] est employée pour mettre en application une mobilité dépendante du champ. Ceci fournit une transition douce entre le champ de valeur basse et le comportement de champ de valeur élevée où:

$$\mu_n(E) = \mu_{n0} \left[ \frac{1}{1 + \left(\frac{\mu_{n0} E}{VSATN}\right)^{BETAN}} \right]^{\frac{1}{BETAN}}$$
(I-52)

$$\mu_{P}(E) = \mu_{P0} \left[ \frac{1}{1 + \left(\frac{\mu_{P0} E}{VSATP}\right)^{BETAP}} \right]^{\frac{1}{BETAP}}$$
(I-53)

*E* est le champ électrique parallèle,  $\mu_{n0}$  et  $\mu_{p0}$  sont respectivement les basses mobilités d'électrons et de trous sous un champ électrique E.

Les vitesses de saturation sont calculées par défaut par des modèles dépendants de la température [19]:

$$VSATN = \left[\frac{ALFAN.FLD}{1 + THETAN.FLD.exp\left(\frac{T_L}{TNOMN.FLD}\right)}\right]$$
(I-54)

$$VSATP = \left[\frac{ALFAP.FLD}{1 + THETAP.FLD.exp\left(\frac{T_L}{TNOMP.FLD}\right)}\right]$$
(I-55)

#### I-2-7 Processus de génération-recombinaison des porteurs

Lorsqu'il y a dans la bande de conduction et dans la bande de valence un excès d'électrons libres et de trous libres par rapport aux concentrations d'équilibre thermique, différents processus tendent à ramener le système vers son état d'équilibre. Ces processus sont traduits dans les équations de conservation par les termes G et R, qui caractérisent la création (génération) et la disparition (recombinaison) des porteurs dans un semi-conducteur. Le terme G regroupe les générations de paires électron-trou dans le semi-conducteur par un processus externe. Ces générations peuvent résulter notamment ;

✓ D'une excitation optique; génération de paires électron-trou par absorption

directe ou indirecte de photons.

- $\checkmark$  D'une irradiation par des particules ionisantes.
- ✓ D'un champ électrique intense.
- ✓ D'une injection électrique.

Le terme R regroupe les générations-recombinaisons par un processus interne. Les différents mécanismes qui traduisent le processus de génération-recombinaison des porteurs sont nombreux. L'importance des différents mécanismes dépend du type de dispositif et du problème considéré. On peut citer ici :

- Génération-recombinaison bande à bande : la recombinaison s'effectue par rencontre directe d'un électron de la bande de conduction et d'un trou de la bande de valence. Pour le processus inverse de génération, la conservation de l'énergie est assurée par l'absorption d'un photon et /ou d'un phonon.
- ➢ Génération-recombinaison Auger: Par exemple, la recombinaison d'une paire d'électron-trou s'accompagne pour un électron de la bande de conduction par l'absorption d'un rayonnement d'énergie. Cet électron saute sur un état d'énergie E<sub>2</sub> = E<sub>1</sub> ± h ⋅ v , dans la bande. Ce phénomène se manifeste aussi pour des trous dans la bande de valence.
- Génération-recombinaison assistée par un centre recombinant : lorsque le semi-conducteur est peu dopé, les densités de porteurs libres sont faibles, de sorte que la probabilité pour qu'un électron et un trou se rencontrent (recombinaison bande à bande) soit faible. La présence d'impuretés joue alors un rôle important dans le processus de recombinaison.

Les sections suivantes décrivent les modèles utilisés dans ATLAS qui assure la simulation de ces types de mécanismes de génération-recombinaison.

### I-2-7-1 Mécanisme de recombinaison de Shockley-Read-Hall

Ce mécanisme est prépondérant pour les semi-conducteurs de type *Ge*, Si, et *GaAs*, tant que les densités de porteurs libres ne sont pas trop élevées  $(n, p \ll 10^{18} cm^{-3})$ .

La recombinaison de Shockley-Read-Hall est modelée comme suit :

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}}{TAUP0\left[n + n_{ie}exp\left(\frac{ETRAP}{kT_L}\right)\right] + TAUN0\left[p + n_{ie}exp\left(\frac{-ETRAP}{kT_L}\right)\right]}$$
(I-56)

Où ETRAP est la différence entre le niveau énergétique du piège et le niveau de Fermi intrinsèque,  $T_L$  est la température du réseau cristallin en degrés Kelvin, TAUNO et TAUPO sont les durées de vies des électrons et de trous respectivement.

On peut utiliser d'autres modèles dans lesquels les durées de vies des porteurs varient en fonction de la concentration des impuretés [20,21,22] en employant l'équation suivante:

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau_p \left[ n + n_{ie} exp\left(\frac{ETRAP}{kT_L}\right) \right] + \tau_n \left[ p + n_{ie} exp\left(\frac{-ETRAP}{kT_L}\right) \right]}$$
(I-57)

Où:

$$\tau_n = \frac{TAONO}{1 + N/(NSRHN)}$$
(I-58)  
TAUP0

$$\tau_p = \frac{1AOTO}{1 + N/(NSRHP)}$$
(I-59)

N est la concentration totale des impuretés.

TAUNO

Ou bien, on utilise le modèle de Klaassen qui prend en considération la température du réseau cristallin. Les durées de vies des porteurs dans ce modèle sont données par les équations:

$$TAUN0^{-1} = (KSRHTN^{-1} + KSRHCN \times N) \left(\frac{300}{T_L}\right)^{KSRHGN}$$
(I-60)

$$TAUP0^{-1} = (KSRHTP^{-1} + KSRHCP \times N) \left(\frac{300}{T_L}\right)^{KSRHGP}$$
(I-61)

#### I-2-7-2 Recombinaison Auger

#### Modèle Standard

Ce phénomène est généralement modelé en utilisant l'expression [23]:

$$R_{Auger} = \operatorname{augn}\left(pn^{2} - nn_{ie}^{2}\right) + \operatorname{augp}\left(np^{2} - pn_{ie}^{2}\right)$$
(I-62)

#### I-2-7-3 Modèle tenant compte de la température

Ce modèle, appelé aussi modèle de Klaassen-Auger [24], est décrit par l'équation suivante:

$$R_{Auger} = C_n \left( pn^2 - nn_{ie}^2 \right) + C_p \left( np^2 - pn_{ie}^2 \right)$$
(I-63)

Où:
(I-65)

$$C_{n} = KAUGCN \left(\frac{T_{L}}{300}\right)^{KAUGDN}$$

$$C_{p} = KAUGCP \left(\frac{T_{L}}{300}\right)^{KAUGDP}$$
(I-64)

# I-3 Les équations et les modèles dans le partie LASER du logiciel de simulation SILVACO ATLAS

#### I-3-1 L'équation de Helmholtz

Le logiciel SILVACO permet la résolution de l'équation de Helmholtz à deux dimensions pour déterminer le profil du champ optique transversal  $E_k(x, y)$  [25]:

où

est l'opérateur de Laplace à deux dimensions,  $\omega_m$  est la fréquence Ox. dy ' correspondant à **m** mode longitudinaux, **c** est la vitesse de la lumière dans le vide, et  $\varepsilon$  (x, y) est la permittivité diélectrique à haute fréquence. L'équation (III-1) est une équation à valeurs propres complexes.

La partie LASER du logiciel résout cette équation pour déterminer l'ensemble des valeurs propres complexes ( $\beta_k$ ) et les fonctions propres correspondantes  $E_k(x, y)$ .

En principe, l'équation (III-1) devrait être résolue pour chaque mode longitudinal qui est pris en compte, avec la plus grande puissance:

$$E_m(x,y) = E_o(x,y) \tag{I-67}$$

 $O\hat{u}$ : Eo(x,y) est le domaine optique correspondant au mode longitudinal le plus puissant. Cette hypothèse est raisonnable, puisque la forme de la solution est presque indépendante de la fréquence dans la plage d'intérêt.

Pour la permittivité diélectrique, LASER utilise le modèle suivant [26]:

$$\varepsilon(\mathbf{r}, \mathbf{z}) = \varepsilon_0 + (-ALPHAR + j) \frac{\sqrt{\varepsilon_0}g(\mathbf{r}, \mathbf{z})}{k_{\omega}} - j \frac{\sqrt{\varepsilon_0}(ALPHAA + FCN \cdot n + FCP \cdot p)}{k_{\omega}}$$
(I-68)

Où:

 $\varepsilon_0$  est la permittivité diélectrique de la masse.

- n0 est l'indice de réfraction de la masse.
- ALPHAR est le facteur d'élargissement de la largeur de ligne.
- $j^2 = -1$

• 
$$k_{\omega} = \omega / c$$

- g (x, y) est le gain optique local.
- ALPHAA est la perte d'absorption.
- FCN et FCP sont les coefficients de la perte de porteurs libres.

# I-3-2 Le Modèle Standard De Gain

Le modèle standard de gain [27,28] est donné par :

$$g(r, z) = GAIN0 \sqrt{\frac{\hbar\omega - E_g}{kT}} \left[ f \left( \frac{E_c - E_{fn} + GAMMA(\hbar\omega - E_g)}{kT} \right) - f \left( \frac{E_v - E_{fp} - (1 - GAMMA)(\hbar\omega - E_g)}{kT} \right) \right]$$
(I-69)

Où:

•h est la constante de Planck,

- • $E_g$  est l'énergie de la bande interdite,
- •*k* est la constante de Boltzmann,
- •*T* est la température de Trellis,
- E<sub>fn</sub> etE<sub>fp</sub> sont les quasi niveaux de Fermi des électrons et de trous respectivement,
- ω est la fréquence d'émission,
- Ev et Ec sont les énergies de la bande de valence et de la bande de conduction,
- la fonction f est définie par

$$f(x) = \frac{1}{1 + \exp(x)}.$$
 (I-70)

Les valeurs des paramètres GAMMA et GAIN0 sont GAIN0 =  $2000.0 \text{ cm}^{-1}$  (valeur par défaut)

$$GAMMA = \frac{1}{\left(\frac{N_c}{N_p}\right)^{\frac{2}{3}} + 1}$$

(**I-71**)

où Nc et Nv sont les densités effectives des états de la bande de conduction et de la bande de valence respectivement.

### I-3-3 Le modèle empirique de Gain

Le modèle empirique de gain est décrit par l'expression suivante:

$$g(r, z) = GAIN00 + GAIN1N \cdot n + GAIN1P \cdot p + GAIN2NP \cdot np + GAIN1MIN \cdot min(n, p)$$
(I-72)

Où n et p sont les concentrations d'électrons et de trous, et GAIN00, GAIN1N, GAIN1P GAIN2NP et GAIN1MIN sont des paramètres déterminables. Notez que le modèle empirique ne contient aucune dépendance spectrale et ne devrait pas être employé pour des simulations de laser avec des multiples modes longitudinaux.

#### I-3-4 Le modèle radiatif général de recombinaison

Le taux de recombinaison spontané est donné par:

$$r(r,z) = \frac{EMISSION\_FACTOR \cdot COPT \cdot (n \cdot p - n_i^2)}{N_i}$$
(I-73)

Où n et p sont les concentrations d'électrons et de trous, ni est la concentration intrinsèque,

*Nl* est le nombre de modes longitudinaux, COPT représente le taux radiatif énergétique dans toutes les directions.

Le facteur EMISSION représente la fraction de l'énergie couplée dans la direction d'intérêt et dans la gamme d'énergie d'intérêt.

#### I-3-5 Le modèle de recombinaison radiative par défaut

Le modèle de recombinaison radiative spontanée par défaut est donné par :

$$\begin{aligned} r_{sp_{m}}(r,z) &= ESEP \cdot EMISSION\_FACTOR \frac{c}{NEFF} \cdot D(E) \cdot GAIN0 \cdot \sqrt{\frac{\hbar\omega - E_{g}}{kT}} \\ &\cdot f \Big( E_{c} - E_{fn} + GAMMA \frac{(\hbar\omega - E_{g})}{kT} \Big) \cdot \Big[ 1 - f \Big( E_{v} - E_{fp} - \frac{(1 - GAMMA)(\hbar\omega - E_{g})}{kT} \Big) \Big] \end{aligned}$$
(I-74)

où:

•c est la vitesse de la lumière,

•h est la constante de Planck,

•K constante de Boltzman,

• $E_g$  est le gap énergétique,

• $E_c$  et  $E_v$  sont les énergies de la bande de conduction et de la bande de valence,

•*T* est la température de trellis,

• E<sub>fn</sub> et E<sub>fp</sub> sont les énergies des quasi niveaux de Fermi d'électrons et de trous,

•  $\omega$  est la fréquence d'émission qui correspond à l'énergie de transition E,

•D(e) est la densité optique de mode,

La densité optique D(e) de mode est indiquée par :

$$D(E) = \frac{n^3 E^2}{\pi^2 \pi^3 c^3}$$
(I-75)

Où *n* est l'indice de réfraction, f(x) est une fonction définie par :

$$f(x) = \frac{1}{1 + \exp(x)}.$$
 (I-76)

#### I-3-6 Emission Stimulée

Le taux de recombinaison  $R_{st}$  des porteurs due à l'émission stimulée de lumière est modélisé comme suit:

$$R_{st}(x,y) = \sum_{m} \frac{c}{NEFF} g(x,y) |E(x,y)|^2 \cdot S_m$$
(I-77)

Où NEFF est l'indice de réfraction effective qui a une valeur voisine de 3,57.

S est la densité linéaire de photons, S<sub>m</sub> est la densité linéaire de photons pour le mode m.

#### I-3-7 L'équation d'évolution de densité de photon

Le gain optique fournit un lien entre les modèles optiques et électriques, et dépend des niveaux de Fermi et influe sur la permittivité diélectrique par le couplage entre le taux de recombinaison des porteurs stimulé (Rst) et la densité des photons (S).

Pour déterminer S<sub>m</sub>, LASER résout le système d'équations des taux de photons:

$$\frac{dS_m}{dt} = \left(\frac{c}{NEFF}G_m - \frac{1}{\tau_{ph_m}} - \frac{c \ LOSSES}{NEFF}\right)S_m + R_{sp_m}$$
(I-78)

Où Gm est donné par le model de gain suivant :

$$G_m = \iint g_m(x, y) \cdot |E(x, y)|^2 \cdot dx \ dy$$
(I-79)

et le model de taux d'émission spontanée est donnée par l'expression suivante:

$$R_{sp_m} = \iint (r_{sp}(x, y))_m \cdot dx \ dy$$
(I-80)

LOSSES sont les pertes internes, nul par défaut,

E (x, y) est le champ optique normalisé,

Le model de la durée de vie des photons, représente les pertes dans le laser.

Les pertes par mode sont données par [29.30]:

$$\frac{1}{\tau_{ph}} = \frac{c}{NEFF} (\alpha_a + \alpha_{fc} + \alpha_{mir})$$
(I-81)

 $\alpha_a$ ,  $\alpha_{fc}$  et  $\alpha_{mir}$  représentent respectivement les pertes par absorption en volume, pertes de porteurs libres, et les pertes par l'effet de miroir. Ils sont définies par:

$$\alpha_a = \iint ALPHAA \cdot |E(x, y)|^2 dx \, dy \tag{I-82}$$

$$\alpha_{fc} = \iint (FCN \ n + FCP \ p) \ \cdot |E(x, y)|^2 \ \cdot \ dx \ dy \tag{I-83}$$

Les pertes par l'effet de miroir  $\alpha_{mir}$ , peuvent être définies de deux façons. La première repose sur la définition du pourcentage de réflectivité des deux miroirs. La seconde dépend des définitions des différentes réflectivités de miroir à facettes. Cela suppose que les deux miroirs avant et arrière sont identiques ce qui donne une perte calculée par:

$$\alpha_{mir} = \frac{1}{2 CAVITY.LENGTH} ln \left(\frac{1}{MIRROR.LOSS^2}\right)$$
(I-84)

où CAVITY.LENGTH est la longueur de la cavité laser.

Les pertes  $\alpha_{mir}$  sont définies également par l'expression :

$$\alpha_{mir} = \frac{1}{2 \cdot CAVITY \cdot LENGTH} ln \frac{1}{RF \cdot RR}$$
(I-85)

Les paramètres RF, RR sont les réflectivités des deux faces arrière et avant respectivement. Les pertes par l'effet de miroir sont de l'ordre de 90%.

#### I-3-8 Puissance optique

La puissance optique émise par le miroir avant est calculée par [31] selon l'expression suivante :

$$P_{f} = \frac{h \omega SmC}{2NEFF} \frac{ln(1/(R_{f}R_{r}))}{1 + \sqrt{R_{f}/R_{r}(1 - R_{r})/(1 - R_{f})}}$$
(I-86)

où Sm est la densité de photons du mode  $\mathbf{m}$ ,  $\mathbf{\omega}$  est la fréquence de la lumière émise, Rf et Rr sont les réflectivités avant et arrière.

#### **Bibliographie** - Chapitre I

[1] R. Castagné et all, Circuits Intégrés en arséniure de Gallium., Physique, technologie et règles de conception. Masson et Cinet ENST Paris, (1989).

[2] Henry Mathieu, *Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques*, Masson, 1987.

[3] Gerald Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*, les éditions de physique, paris, 1988.

[4] C. Kittel .Introduction a la physique de l'état solide, Dunode (1972)

[5] J.S.Blakemore, Semiconducting and other major properties of gallium Arsenide, J. Appl. phys. 53(10), October (1982).

[6] Francis Levy, Traité des matériaux (18), Physique et technologie des semiconducteures, Presses polytechniques et universitaires Romandes (1995)

[7] Youla Fatima-Zohra, Modélisation de structure guide d'onde en semi-conducteursIII-V pour la commutation optique. Mémoire de magister Université de Canstantine (2003).

[8] John H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors*, Cambridge University Press, 1998.

[9] WOLNY. M. et SELLE. D , *introduction aux composants à hétérostructures*, l'onde électrique, mai-juin, vol 70, 3, 1990, pp. 59-74.

[10] CAPPY. A, Propriétés physiques et performances potentielles des composants submicroniques à effet de champ : structures conventionnelles et à gaz d'électrons, Thèse d'état, 1986, Université de Lille France.

[11] A. G. Milnes and D. L. Feucht, Heterojunctions and Metal-Semiconductor Junctions, Academic Press, 1972.

[12] M.R. Pinto, Conor S. Rafferty, and Robert W. Dutton, "PISCES2 - Poisson and Continuity Equation Solver", Stanford Electronics Laboratory Technical Report, Stanford University, September 1984.

[13] S. Selberherr, "Analysis and Simulation of Semiconductor Devices", Springer-Verlag, Wien-New York. 1984.

[14]. Z. Yu and R.W. Dutton, "SEDAN III - A Generalized Electronic Material Device Analysis Program", Stanford Electronics Laboratory Technical Report, Stanford University, July 1985.

[15]. W.B. Joyce and R. W. Dixon, "Analytic Approximation for the Fermi Energy of an ideal Fermi Gas", Appl. Phys Lett. 31, p. 354-356, 1977.

[16]S.M. Sze, "Physics of Semiconductor Devices", Wiley, 1981.

[17] J.W. Slotboom and H.C. De Graaf, "Measurements of Bandgap Narrowing in Silicon Bipolar Transistors", Solid State Electronics, Vol. 19, p. 857-862, 1976

[18] D.M. Caughey and R. E. Thomas, "Carrier Mobilities in Silicon Empirically Related to Doping and Field", Proc. IEEE 55, 1967, p. 2192-2193.

[19]. S.A. Schwarz and S.E. Russe, "Semi-Empirical Equations for Electron Velocity in Silicon: Part II — MOS Inversion Layer", IEEE Trans. on Electron Devices. ED-30, N12, p. 1634-1639, 1983.

[20]. D.J. Roulston, N.D. Arora, and S.G. Chamberlain, "Modeling and Measurement of Minority-Carrier Lifetime versus Doping in Diffused Layers of n ±p Silicon Diodes", IEEE Trans. on Electron Devices, ED-29, Feb. 1982, p. 284-291.

[21]. Law, M.E., et. al., Self-Consistent Model of Minority-Carrier Lifetime, Diffusion Length, and Mobility, IEEE Electron Device Letters, Vol. 12, Nol 8, 1991.

[22]. J.G. Fossum and D.S. Lee, "A Physical Model for the Dependence of Carrier Lifetime on Doping Density in Nondegenerate Silicon", Solid State Electronics, Vol. 25, p. 741-747, 1982.

[23]. J. Dziewior and W. Schmid, "Auger Coefficient for Highly Doped and Highly Excited Silicon", Appl. Phys. Lett., Vol. 31, p. 346-348, 1977.

[24] Klaassen, D. B. M., Slotboom, J. W. and De Graaff, H. C., "Unified Apparent Bandgap Narrowing in n- and p- type Silicon", Sol. St. Elec., V. 35, No. 2, p. 125-129, 1992.

[25]. D.P. Wilt and A. Yariv, "Self-Consistent Static Model of the Double-Heterostructure Laser," IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. QE-17, No.9, 1981, p. 1941-1949.

[26]. K.B. Kahen, "Two-Dimensional Simulation of Laser Diodes in Steady State", IEEE Journal of Quantum Electronics, Vol. 24, No. 4, April 1988.

[27] T.Ohtoshi, K,Yamaguchi, C. Nagaoka, T. Uda, Y. Murayama, and N. Chionone, "A Two-Dimensional Device Simulator of Semiconductor Lasers", Solid-State Electronics, Vol. 30, No.6, p.627-638, 1987.

[28]. H.J. Wünsche, H. Wenzel, U. Bandelow, J. Piprek, H. Gajewski, and J. Rehberg, "2D Modelling of Distributed Feedback Semiconductor Lasers," Simulation of Semiconductor Devices and Processes, Vol 4, Sept. 1991, p. 65-70.

[29]. S. Seki, T. Yamanaka and K. Yokoyama, "Two-Dimensional Analysis of Current Blocking Mechanism in InP Buried Heterostructure Lasers", J. Appl. Phys. 71(7), April 1992, p. 3572-3578.

[30] Tan, G., Bewtra, N., Lee, K., Xu, and J.M., "A Two-Dimensional Nonisothermal Finite Element Simulation of Laser Diodes", IEEE J. of Q.E., Vol. 29, No.3, March 1993, pp. 822-835.

[31]. Boyd, R.W., "Nonlinear Optics", Academic Press, New York, 1992

# <u>Chapitre II</u>

# Généralités sur les LASERS

# <u>Sommaire</u>

II-1	Introduction	35
II-2	Principe du laser	35
	II-2-1 Milieux amplificateur	35
	II-2-1-a Absorption	36
	II-2-1-b Emission spontanée	36
	II-2-1-c Emission stimulée	37
	II-2-1-d L'inversion de population	37
	II-2-2 Résonateur optique	38
	II-2-3 Le Pompage	38
II-3	Caractéristique de la lumière laser	39
	II-3-1 Unidirectionnel	39
	II-3-2 Intense	39
	II-3-3 Monochromatique	40
	II-3-4 Cohérent	40
II-4	Différents types de laser	40
	II-4-1 Lasers à gaz	40
	II-4-1-a Laser hélium-néon (He-Ne)	41
	II-4-1-b Laser excimer	42
	II-4-2 Lasers à corps solide	42
II-5	Lasers à semi-conducteurs	44
II-6	Le laser a homojonction	48
II-7	Le laser a hétérojonction	49

#### **II-1** Introduction

Les travaux fondamentaux d'Albert Einstein qui posèrent les bases théoriques pour la réalisation des masers (Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation) et lasers (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) datent de plus de 50 ans. En effet, c'est en 1917 qu'il a publié ses fameux travaux sur l'absorption et l'émission de la lumière où il mentionne les différences entre émission spontanée et émission stimulée.

En 1954, Townes, Gordon et Zeiger construisent le premier oscillateur maser à NI à émission stimulée, et trois ans plus tard, le premier amplificateur maser dans le domaine des ondes millimétriques est réalisé presque simultanément par Bloerpbergen aux Etats Unis et par Prokhorov et Basov en Union Soviétique.

Le principe de l'amplification électronique quantique est étendu au domaine optique (laser) dans les travaux de Townes et Schawlow, et ils montrent la possibilité théorique de produire de la lumière cohérente par émission stimulée dans un résonateur optique. En 1960, Maiman (Etats-Unis) réalise le premier oscillateur laser dans un cristal de rubis, et dans la même année le premier laser à gaz voit le jour, réalisé par Javan et Bennet. En 1958 déjà Bascov propose un laser a semi-conducteur (diode laser ou laser a injection), qui se réalisera en 1962 parallèlement dans les laboratoires de General Electric, IBM et au MIT.

#### **II-2** Principe du laser

Les trois principales composantes d'un laser sont les suivant : un milieu actif et un mécanisme de pompage et un résonateur optique [32] .Un system laser peut être schématisé de la façon suivante :



Figure II-1: Schema d'un system laser.

#### II-2-1 Milieux amplificateur

D'après le modèle de l'atome de Bohr, un atome est constitué d'un noyau positif formé par les protons et les neutrons, et d'un nuage d'électrons de charge négative sur des orbites spécifiques autour du noyau. Toutes ces trajectoires permises des électrons correspondent à des énergies discrètes, et l'ensemble des niveaux d'énergies permises constitue le schéma de niveaux de l'atome (Fig. II-2). Ces termes d'énergie  $E_n$  dépendent essentiellement de l'atome en question. Le passage d'électrons d'un niveau à un autre donne lieu aux lignes spectrales de lumière émise ou absorbée. Lors du passage d'un électron d'un niveau  $E_n$  supérieur à un niveau  $E_m$  inférieur, un photon d'énergie  $hv = E_n-E_m$  est émis.

La largeur naturelle de ces lignes spectrales est déterminée par la relation d'incertitude de Heisenberg, qui relie la durée de vie d'un état à l'incertitude d'énergie  $\Delta E$  de cet état. Il se rajoute généralement à cette largeur naturelle un élargissement dû à d'autres effets tels que l'interaction avec le réseau cristallin dans un solide, la pression dans un gaz ou le déplacement de fréquence Doppler dû à l'agitation thermique des atomes d'un gaz. Entre deux niveaux  $E_n$  et  $E_m$  trois types d'interactions différentes peuvent se produire :

#### **II-2-1-a** Absorption

Un électron du niveau inférieur  $E_m$  absorbe un photon d'énergie  $hv = (E_n - E_m)$  et passe au niveau supérieur  $E_n$ . L'énergie du photon doit être comprise dans l'intervalle d'énergie donné par la largeur de la ligne d'absorption considérée [32].



Figure II-2 : Schéma de niveaux.

#### II-2-1-b Emission spontanée

Un électron du niveau supérieur  $E_n$  passe spontanément au niveau inférieur  $E_m$  en émettant un photon d'énergie hv =( $E_n$ - $E_m$ ).

#### II-2-1-c Emission stimulée

La lumière incidente de fréquence y située à l'intérieur de la largeur de la transition force le passage d'un électron du niveau supérieur au niveau inférieur et l'émission d'un photon d'énergie  $hv = (E_n - E_m)$  [32].



Figure II-3 : Absorption, émission spontanée et émission stimulée.

L'absorption et l'émission stimulées sont des interactions cohérentes, en effet, pour les deux phénomènes l'échange d'énergie correspond à une onde partielle en relation de phase bien déterminée avec l'onde primaire.

L'émission spontanée, par contre, est un processus incohérent car indépendant du champ de radiation environnant et statistiquement indépendant d'un atome à l'autre. Dans les sources de lumière thermique (lampes à incandescence, lampes à arc, etc.), c'est l'émission spontanée qui livre la partie prépondérante de l'émission qui est donc incohérente.

#### II-2-1-d L'inversion de population

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

dite cohérente, contrairement par exemple à celle émise par une ampoule à filament, qui émet de nombreuses ondes de fréquences et phases diverses et ce dans toutes les directions.

Mais pour obtenir un effet d'émission stimulée sur un grand nombre d'atomes ou molécules, il faut fournir de l'énergie au milieu matériel afin que ses atomes ou molécules soient pour la plupart dans un niveau d'énergie excité  $E_2$ , et non dans leur niveau fondamental  $E_1$ . C'est ce qu'on appelle effectuer une inversion de population, car à l'équilibre thermodynamique la majorité des atomes se trouvent au contraire dans l'état d'énergie le plus bas (plus précisément, le rapport des populations des niveaux  $E_2$  et  $E_1$  vaut, à l'équilibre thermodynamique à la température absolue T:

$$N_2/N_1 = \exp\left[-(E_2 - E_1)/kT\right]$$
 (II-1)

Où k est la constante de Boltzmann. [32]

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

#### II-2-2 Résonateur optique

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

#### **II-2-3** Le Pompage

Le pompage permet d'amener une majorité des particules à l'état excité (Excitation optique, Décharge électrique, ...). Il ya ensuite accumulation d'électrons sur le niveau métastable, c'est l'inversion de population. Celle-ci favorise l'émission stimulée [33, 34].

#### II-3 Caractéristique de la lumière laser

Un faisceau laser est unidirectionnel, intense, monochromatique et cohérent

#### **II-3-1** Unidirectionnel

Le faisceau se dirige dans une direction unique. Cependant, il peut y avoir une divergence de 1 degré d'arc provoquée par la diffraction lorsque le faisceau se propage dans un milieu, ainsi, le diamètre du faisceau peut augmenter jusqu'à 1mm par mètre parcouru. La divergence d'un faisceau laser dans l'aire est :

$$\theta = \frac{\lambda}{w^0}$$

(II-2)



Figure II-4 : Schéma d'un faisceau laser.

#### II-3-2 Intense

Les lasers émettent une lumière très intense, bien que certains laser semble peu puissant (quelque milliwatts) leur lumière est concentrée sur une toute petit surface parfois d'à peine quelques millimètres carrés. C'est pourquoi il est très important de ne jamais recevoir un faisceau directement dans les yeux, ce qui pourrait provoque une cécité permanente en endommageant la rétine.

Source	Puissance (W)	Intensité (W/m <sup>2</sup> )
Soleil	$4 \times 10^{26}$	(à la surface de Terre) 1400
Ampoule à incandescence	100	(à 1 m de l'ampoule) 8
Laser hélium-néon	5×10 <sup>-3</sup>	1100
Laser à CO <sub>2</sub>	20	$4 \times 10^{6}$

**Tableau II-1 :** Comparaison de la puissance et l'intensité n de différentes sources lumineuse

### **II-3-3** Monochromatique

Contrairement à la lumière émise par le soleil ou par une ampoule à incandescence qui est polychromatique (constituée de plusieurs longueurs d'onde), la lumière produite par un laser est monochromatique. Elle contient très peu de longueurs d'onde d'opération du laser [35].

## II-3-4 Cohérent

La lumière produite par un laser est ordonnée dans le temps et dans l'espace.

Ainsi, chaque photon qui la compose oscille en même temps de la même manière. La directivité de la lumière laser est d'ailleurs une conséquence de sa cohérence.



Figure II-5 : Comparaison entre la lumière ordinaire et le laser.

## II-4 Différents types de laser

#### II-4-1 Lasers à gaz

Dans le laser à gaz, le milieu amplificateur est à l'état gazeux. On distingue les lasers à gaz atomique, où l'on utilise une transition électronique entre deux niveaux d'un atome neutre, et les lasers à gaz ionique où l'on utilise des transitions entre deux niveaux d'un atome ionisé. Les lasers à gaz atomique émettent généralement une lumière dans le rouge ou proche infrarouge, le laser He-Ne par exemple possède des lignes d'émission laser à 0,63  $\mu$ m, 1,15

 $\mu$ m et 3,39  $\mu$ m. Un laser à gaz ionisé typique est le laser à Argon, il émet principalement dans le bleu et le vert (0,488  $\mu$ m et 0,514  $\mu$ m). Dans les lasers à gaz moléculaire on utilise des transitions entre des niveaux vibrationnels et rotationnels des molécules actives. Leurs émissions se situent dans le domaine infrarouge moyen et lointain. L'exemple le plus répandu est le laser à dioxyde de carbone (C0<sub>2</sub>) émettant une lumière très intense vers 10,6  $\mu$ m. Dans les lasers excimer, ce sont des transitions entre des états excités stables et un état fondamental instable de molécules diatomiques qui donnent lieu à l'émission laser, qui est située dans l'ultra-violet [34].

#### II-4-1-a Laser Hélium-Néon (He-Ne)

Le schéma de niveaux de l'atome de Néon est donné dans la figure (II-5). Les trois transitions les plus importantes sont situées dans l'infrarouge à 3,3913  $\mu$ m et 11523  $\mu$ m et dans le rouge à 632,8 nm. Le choix de la transition se fait par les caractéristiques des multicouches diélectriques qui ne réfléchissent qu'à la longueur d'onde de la ligne choisie. Mais d'autres transitions donnant lieu à des émissions à 1,5231  $\mu$ m (infrarouge), 611,8 nm (orange), 594,1 nm (jaune) et 543,3 nm (vert) sont aussi utilisables.



Figure II-6 : Schéma de niveaux du laser He-Ne.

L'inversion de population nécessaire pour l'oscillation laser est produite par excitation [34] sélective du niveau supérieur de la transition laser, à l'aide de l'hélium additionnel présent dans le tube. L'Hélium lui-même est excité par les collisions électroniques dans la décharge électrique. Les états excités  $2^3$ S et  $2^1$ S de l'Hélium ayant une énergie très proche de l'énergie des niveaux excités  $2S_2$ , et  $3S_2$ , du Néon, le mécanisme de transfert d'énergie par collisions résonantes (chocs de deuxième espèce) est efficace et conduit à l'inversion de population désirée.

#### II-4-1-b Laser excimer

Un excimer est un gaz constitué de molécules n'existant qu'à l'état (électronique) excité, et ce sont avant tout des combinaisons diatomiques entre un atome de gaz rare et un atome de gaz halogène, comme par exemple ArF\*, KrF\*, XeCl\* ou XeF\* (l'astérisque indique qu'il s'agit d'un état excité de la molécule). Vu que ces excimers n'existent qu'à l'état excité, l'état fondamental est toujours totalement vide et ces gaz sont donc très intéressants pour la création d'une inversion de population. Par contre, la faible amplification dans ces milieux nécessite un pompage très intense pour aboutir à une oscillation laser.

Le pompage se fait généralement soit par un faisceau d'électrons intense soit par une décharge électrique à tension élevée, ou même une combinaison des deux, directement dans le gaz composé typiquement de 5-10% de gaz noble actif, p. ex. Krypton (Kr), 0,1-0,2% de gaz halogène, p. ex. Fluor (F et un gaz tampon léger tel que l'Hélium ou le Néon, à une pression totale de 1,5 - 4 bar. Cette décharge haute tension nécessite une densité de puissance très élevée qui ne peut être maintenue que durant quelques dizaines de ns et, jusqu'à quelque 100 Hz. L'efficacité peut atteindre 1% et les puissances moyennes 300-500 W. Les lasers excimer sont actuellement les sources de radiation ultra violette largement les plus intenses. On peut trouver aujourd'hui des lasers excimer émettant à 351 nm (XeF\*), 308 nm (XeCI\*), 249 nm (KrF\*) et 193 nm (ArF\*), avec des énergies par impulsion de l'ordre de 0,5 J et quelques dizaines de W de puissance moyenne. Leur émission se fait généralement avec beaucoup de modes longitudinaux et transversaux simultanément, et elle ne présente pas de cohérence spatiale et temporelle élevée. Ils sont principalement utilisés pour leur forte intensité UV, comme par exemple pour le pompage des lasers à colorant, pour des processus photochimiques, l'usinage et le micro-usinage des matériaux et en médecine.

#### II-4-2 Lasers à corps solide [32, 34].

Le milieu actif d'un laser à corps solide est constitué d'ions incorporés en faible quantité dans un hôte cristallin ou vitreux. On utilise principalement des ions métalliques ou de terres rares pour le dopage. Leurs transitions laser se situent généralement dans le visible ou proche infrarouge. Par l'influence de l'hôte (réseau cristallin ou milieu vitreux), le profil d'amplification des ions actifs est élargi de façon homogène. La largeur de ligne est plus importante que dans le cas des lasers à gaz et dépend de plus, pour un même ion actif, du milieu hôte dans lequel il est incorporé.

C'est par pompage optique qu'on produit généralement l'inversion de population. Pour le laser à trois niveaux (Fig. II-7-a), le pompage a lieu à partir du niveau fondamental  $E_1$  dans une bande d'absorption  $E_4$  La transition non radiative de  $E_4$  dans le niveau laser supérieur  $E_3$  est très rapide. Le niveau d'arrivée de la transition laser est le niveau fondamental  $E_1$ . Il s'ensuit que pour obtenir une inversion de population, la durée de vie du niveau  $E_3$  doit être suffisamment longue et la moitié des ions au moins doit se trouver dans un état excité (lumière de pompage très intense).

Le seuil de pompage est donc généralement élevé pour un laser à trois niveaux, et on obtiendra plus facilement un fonctionnement en régime pulsé qu'en régime continu. Un représentant typique de cette espèce est le laser à rubis (premier laser réalisé pratiquement).

Le laser à quatre niveaux montre les mêmes principes de fonctionnement, à part que le niveau d'arrivée  $E_2$  de la transition laser se situe au dessus du niveau fondamental  $E_1$  et qu'il est de courte durée de vie (Fig. II-7-b).



Figure II-7-a : Schéma de niveau pour un laser a trois niveaux.

Pour une séparation de ces deux niveaux  $E_2 - E_1 \gg kT$ , donc plus grande que l'énergie thermique (k = constante de Boltzmann, T = température absolue), le niveau  $E_2$  est pratiquement inoccupé. Il suffit donc d'un pompage faible pour obtenir une inversion de population, et le seuil d'oscillation est assez bas. Au cas où la différence d'énergie des niveaux  $E_1$  et  $E_2$  est de l'ordre de l'énergie thermique kT, le seuil de pompage dépendra fortement de la température, et si  $(E_2 - E_1) < kT$ , le comportement ressemblera plutôt à celui d'un laser à trois niveaux. Le laser à néodyme est un représentant typique de la classe des lasers à quatre niveaux, avec une différence ( $E_2 - E_1 >> kT$ ).

Une tête de laser typique est constituée d'un barreau laser de 5 à 20 cm de long et de 5 à 10 mm de diamètre et d'une source de lumière.



Figure II-7-b : Schéma de niveaux pour un laser à quatre niveaux.

#### II-5 Lasers à semi-conducteurs

Dans le laser à semi-conducteur ou diode laser, l'amplification de la lumière provient de la transition d'électrons entre la bande de conduction et la bande de valence, induite artificiellement. Le milieu actif est un cristal semi-conducteur constitué d'atomes neutres arrangés dans le réseau cristallin correspondant au matériau considéré. Les semi-conducteurs les plus connus sont le silicium (Si) et le germanium (Ge) utilisés couramment dans la fabrication des semi-conducteurs tels que les transistors et les diodes. Par suite de l'interaction des atomes avec le réseau cristallin environnant, les niveaux d'énergie des électrons sont élargis pour devenir des bandes d'énergies permises, séparées par des bandes d'énergies interdites.

La bande d'électrons pleine et plus haute énergie (en équilibre thermique) est appelée bande de valence; la bande suivante, vide, est appelée bande de conduction.

Si, en perturbant l'équilibre, on fait passer des électrons de la bande de valence dans la bande de conduction, ceux-ci peuvent contribuer à une conduction de courant électrique dans le semi-conducteur. La place vacante laissée par l'électron qui a passé dans la bande de conduction est appelée trou et se comporte dans le cristal comme une particule de charge positive. La transition d'un électron de la bande de conduction dans la bande de valence peut alors aussi être interprétée comme recombinaison d'un électron avec un trou. C'est précisément cette recombinaison électron-trou qui donne lieu à l'émission soit d'un phonon (vibration du réseau) soit d'un photon, quantum de lumière, et c'est cette lumière qui est appelée émission par recombinaison (Fig. II-8).



*Figure II-8 : Structure de bandes et radiation de recombinaison lors du passage d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence.* 

La différence d'énergie entre la bande de valence et la bande de conduction (band-gap) est de l'ordre de l'électronvolt (eV) pour les semi-conducteurs et, par conséquent, l'émission de recombinaison se situe dans le visible ou le proche infrarouge. La largeur spectrale de l'émission est grande, de l'ordre de 10 nm, car il s'agit d'une émission provenant de transitions entre deux bandes d'énergie relativement larges, à l'opposition des niveaux bien localisés des électrons dans un atome isolé [36].

Généralement, les bandes d'énergie dans un semi-conducteur cristallin ne sont pas uniformément constantes, mais elles présentent une structure de minima et de maxima dans les différentes directions du réseau cristallin, en fonction de l'impulsion des électrons. On distingue des semi-conducteurs directs, où le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont au même endroit, et des semi-conducteurs indirects, où ces deux points correspondent à des impulsions différentes. Dans le cas des semi-conducteurs directs, lors d'une transition d'un électron, celui-ci ne doit pas changer d'impulsion. Pour un semiconducteur indirect, une transition comporte nécessairement un changement d'impulsion. L'émission d'un photon ne comportant pas de changement d'impulsion, ce ne sont que les semi-conducteurs directs qui peuvent servir dans une émission de recombinaison radiative. C'est pour cette raison que le germanium (Ge) et le silicium (Si) tellement utilisés dans l'électronique actuelle n'entrent pas en ligne de compte. Les plus importants matériaux semiconducteurs utilisés pour la fabrication de diodes laser et leurs longueurs d'ondes associées (Y = hv/DE) sont l'arséniure de gallium (GaAs) pour les longueurs d'onde de 0,87 µm, le phosphure d'indium (InP) à 0,93 µm, l'antimoniure de gallium (GaSb) à 1,7 µm, l'arséniure d'indium (InAs) à 3,5 µm et l'antimoniure d'indium (InSb) à 6,9 µm. A l'aide de cristaux mixtes tels que Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As (où x désigne la fraction d'atomes de gallium remplacés par des atomes d'aluminium), ou Ga<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>As<sub>1-y</sub>P<sub>y</sub> on peut fabriquer des diodes laser pour des longueurs d'onde intermédiaires, et ce sont les rapports de mélange x et y qui déterminent la longueur d'onde exacte. Le problème principal de ces cristaux mixtes est la constante de réseau différente pour les différents matériaux et leur adaptation. Ces matériaux font partie du groupe des semi-conducteurs III-V et, selon le nombre de composants, ils font partie des semi-conducteurs binaires, ternaires ou quaternaires.

Pour un solide, la répartition des électrons dans les bandes d'énergie est décrite par la distribution de Fermi-Dirac (Fig. II-9-a) et, à l'équilibre thermique, la probabilité de trouver un électron à une énergie E vaut :

$$F(E) = \left[1 + exp\left\{\frac{E - E_F}{KT}\right\}\right]^{-1}$$
(II-3)



Figure II-9: a) Distribution de Fermi-Dirac F(E) des électrons dans un semi-conducteur.b) Position du niveau de Fermi dans un semi-conducteur pur.

Où kT est l'énergie thermique et E<sub>F</sub> l'énergie du niveau de Fermi.

Dans un semi-conducteur pur; le niveau de Fermi est situé approximativement au milieu entre la bande de valence et la bande de conduction (fig. II- 9-b) et, à basse température, la bande

de valence est complètement occupée, tandis que la bande de conduction est vide; le semiconducteur est un très mauvais conducteur de courant. Au fur et à mesure que la température s'élève, de plus en plus d'électrons sont excités thermiquement et montent dans la bande de conduction; la conductivité électrique augmente. Cette conductivité du semi-conducteur pur est appelée conductivité intrinsèque.

Par dopage du matériau semi-conducteur pur avec des éléments étrangers, on peut influencer dans une large mesure le niveau de Fermi ainsi que la conductivité électrique. Ces atomes de dopage sont incorporés dans le réseau cristallin et se substituent aux atomes de l'hôte. Ils agissent comme donneurs d'électrons si leur valence est plus grande que la valence de l'hôte, et comme accepteurs d'électrons si leur valence est plus petite. Le dopage par des atomes de valence plus grande donne lieu à un semi-conducteur du type n; la conduction est essentiellement due à des électrons provenant des niveaux donneurs qui montent dans la bande de conduction. Le niveau de Fermi aussi monte et peut même aboutir dans la bande de conduction pour un dopage fort (Fig. II-10-a). Le dopage par des atomes de valence inférieure à l'hôte donne lieu à un semi-conducteur du type p.



Figure II-10 : Niveau de Fermi pour des semi-conducteurs dopés: a) donneur b) accepteur

Les atomes étrangers peuvent accepter des électrons de la bande de valence et la conduction est due surtout aux trous, de charge positive, dans la bande de valence. Le niveau de Fermi est abaissé et tombe même à l'intérieur de la bande de valence pour un dopage fort (Fig. II-10b).

Pour un laser à semi-conducteur, comme pour tout autre laser, il est nécessaire de produire une inversion de population. Ceci revient donc à créer une situation où il y a beaucoup d'électrons dans la bande de conduction et beaucoup de trous dans la bande de valence. On peut alors stimuler leur recombinaison et produire ainsi une émission lumineuse. L'inversion de population dans le laser à semi-conducteur est habituellement produite par injection d'électrons dans la bande de conduction d'un semi-conducteur de type p.

Les électrons proviennent eux d'un domaine du semi-conducteur dopé différemment, de type n (Fig. II-11).



*Figure II-11 : Production de l'inversion de population par injection d'électrons dans une jonction p-n.* 

Cet assemblage s'appelle une diode ou jonction p-n, et la situation décrite ci-dessus est réalisé au moment où un courant circule dans le sens direct de la diode. Le milieu actif d'une diode laser est donc constitué par cette région de jonction p-n de très faibles dimensions, typiquement 0,2 mm x 0,2 mm de surface et 2  $\mu$ m d'épaisseur Le résonateur optique est constitué par les surfaces parallèles de clivage du monocristal aux deux côtés opposés de la jonction p-n (Fig. II-12). Par suite de l'indice de réfraction élevé des matériaux semiconducteurs. La réflexion aux surfaces est de l'ordre de 30% et, vu l'amplification importante qu'on peut obtenir dans un laser à semi-conducteur, cette réflexion est suffisante pour atteindre le seuil d'oscillation laser. La différence d'indice de réfraction entre la jonction et les régions de dopage p et n peut en outre être utilisée comme effet guide d'onde et peut ainsi diminuer les pertes par diffraction dans le résonateur.



Figure II-12 : Structure d'un laser à semi-conducteur à homojonction

#### **II-6** Le laser a homojonction [37,38]

Pour avoir le gain optique dans une homojonction, il faut polariser la jonction avec une DDP supérieure au gap du semi-conducteur. L'inversion de population n'est alors réalisée que dans la zone de charge d'espace, là où à la fois les quasi-niveaux de Fermi  $E_{Fc}$  et  $E_{Fv}$  sont respectivement supérieur et inférieur au bas de la bande de conduction et au sommet de la bande de valence (entre les lignes pointillées du schéma ci-dessous). Cette zone est étroite et sa largeur dépend fortement de la DDP appliquée. En fait elle n'existe que si la DDP appliquée est suffisamment élevée. En pratique l'obtention de cette zone d'inversion de population requiert une telle DDP que le courant associé est très grand ce qui a pour effet de chauffer fortement la jonction. L'échauffement est si fort que pour conserver les propriétés de la jonction intacte, il faut refroidir le système à l'azote liquide (77 K). Une telle solution n'est évidemment pas acceptable pour les applications du laser à semi-conducteur.



Figure II-13 : Diagramme de bande d'une homojonction.

#### II-7 Le laser a hétérojonction

Le laser à semi-conducteur est devenu accessible pour les applications grâce à l'invention de la double hétérojonction. La structure en double hétérojonction crée une double barrière de potentiel pour les porteurs minoritaires injectés.



Figure II-14 : Diagramme de bande d'une double-hétérojonction.

Le confinement de porteurs qui en résulte conduit à une grande facilité d'inversion de population. La DDP appliquée ne doit pas être très importante (elle doit juste excéder le petit gap de la structure) et la diode laser peut fonctionner à température ambiante. De plus, la

.

largeur de la zone d'inversion de population est maintenant fixée lors de la fabrication du dispositif et ne dépend donc plus de la DDP, le contrôle du fonctionnement de la diode laser est donc fortement simplifié.

### **Bibliographie - Chapitre II**

[32] D. Dangoisse, D. Hennequin et V. Zehnlé-Dhaoui, Les lasers, Dunod, 2004.

[33] ROMAIN MACIEJKO, Optoélectronique, Montréal, Presse internationale Polytechnique, 2002.

[34] Luc DETTWILLER, Les lasers et leurs applications, Paris, ellipses, 1998.

[35] Mark Csele, FUNDAMENTALS OF LIGHT SOURCES AND LASERS, United States of America, A Wiley-Interscience publication, 2004.

[36] R. Dändliker, les lasers, principe et fonctionnement, Lausanne, Presses, Polytechniques et universitaires ROMANDES, 1996.

[37] V. Berger, principes physiques des lasers à semiconducteurs, France, EDP Science 2002.

[38] Ali Guermache, Étude et réalisation de lasers de pompe 1480 nm pour l'amplification Raman, thèse doctoral, école nationale supérieure des Télécommunications, PARIS, 2005.

# <u>Chapitre III</u>

# Logiciel de simulation SILVACO ATLAS

# <u>Sommaire</u>

III-1 Logic	ciel de simulation SILVACO ATLAS	52			
III-2 Utilis	ation d'ATLAS SILVAC	53			
III-3 Struc	cture de fichier d'entrée	54			
III-4 Spéci	ification de la structure étudiée	54			
III-4-a	Maillage	55			
III-4-b	Région	56			
III-4-c	Electrodes	57			
III-4-d	Dopage	58			
III-5 Spéci	ification du modèle et du matériau	59			
III-5-a	Matérielle	59			
III-5-b	Modèle	59			
III-5-c	Contact	60			
III-5-d	Interface	60			
III-6 Méth	odes numérique à sélectionner	60			
III-7 Spéci	ification de Solution	61			
III-7-a	Log	61			
III-7-b	Solve ( <i>Résoudre</i> )	61			
III-7-c	Load et save (chargement et sauvegarde)	61			
III-8 Analyse des résultats					

Les micro-ordinateurs sont actuellement des plates formes privilégiées pour les applications de simulation, ils offrent en effet une très grande variété d'outils logiciels pour le développement des programmes de simulation et de traitement de données.

A fin de simuler les caractéristiques électriques et optiques de notre dispositif LASER objet, on a utilisé le logiciel « Silvaco » qui est un outil de fabrication virtuelle de plaquettes. Il propose une variété d'outils logiciels puissants. Dans le présent chapitre, nous allons parler du logiciel de simulation « Silvaco-Atlas », en expliquant les étapes suivis pour simuler notre structure objet.

## III-1 Logiciel de simulation « Silvaco-Atlas »

La figure (III-1) montre l'environnement de fabrication virtuel des plaquettes du logiciel « Silvaco ». Il est constitué de '7' programmes parmi lesquelles on a utilisé le logiciel « Atlas » qui permet la simulation, en deux et trois dimensions, des dispositifs électroniques à semi-conducteurs.



Figure III-1: Environnement virtuel de fabrication des plaquettes de Silvaco [39]

La Figure (III-2) montre les entrées et les sorties du logiciel «Atlas » dont l'environnement d'exécution «DeckBuild» reçoit les fichiers d'entrée, dans lesquelles «Silvaco-Atlas » a été

appelé à exécuter le code, et « TonyPlot » a été utilisé pour afficher et visualiser la sortie de la simulation.





#### III-2 Utilisation du logiciel « Silvaco-Atlas »

Les modèles physiques inclus dans « Atlas » sont [40]:

- DC, AC small-signal, and full time-dependency.
- Drift-diffusion transport models.
- Energy balance and Hydrodynamic transport models.
- Lattice heating and heatsinks.
- Graded and abrupt heterojunctions.
- Optoelectronic interactions with general ray tracing.
- Amorphous and polycrystalline materials.
- General circuit environments.
- Stimulated emission and radiation
- Fermi-Dirac and Boltzmann statistics.
- Advanced mobility models.
- Heavy doping effects.
- Full acceptor and donor trap dynamics
- Ohmic, Schottky, and insulating contacts.
- SRH, radiative, Auger, and surface recombination.
- Impact ionization (local and non-local).
- Floating gates.
- Band-to-band and Fowler-Nordheim tunneling.
- Hot carrier injection.
- Quantum transport models
- Thermionic emission currents.

# III-3 Structure de fichier d'entrée

« Silvaco-Atlas » reçoit les fichiers d'entrée à travers « DeckBuild ». Le code écrit dans le fichier d'entrée appel « Atlas » pour fonctionner avec la commande suivante:

« Go Atlas »

Suite à cette commande, le fichier d'entrée doit suivre un modèle.

Les groupes de commandes sont indiqués sur la Figure (III-3).

Group	Statements
1. Structure Specification	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Material Models Specification ———	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Numerical Method Selection	METHOD
4. Solution Specification	LOG SOLVE LOAD SAVE
5. Results Analysis	EXTRACT TONYPLOT

Figure III-3 : Groupes de commandes [39].

## III -4 Spécification de la structure étudiée

La spécification de la structure est effectuée en définissant le maillage, les régions, les électrodes et le niveau de dopage.

## III-4-a Maillage

Le maillage est une série de lignes horizontales et verticales. Dans notre étude, le maillage utilisé est à deux dimensions, par conséquent, seuls les paramètres x et y sont définis.

La figure (III-4) montre le maillage de notre structure.



*Figure III-4: Maillage à deux dimensions (x,y).* 

Le format général de définition de maillage est:

MESH X.LOCATION <VALEUR> **ESPACEMENT** <VALEUR> = =MESH Y.LOCATION <VALEUR> **ESPACEMENT** = <VALEUR> = Par exemple, si x.mesh départ à 0 microns avec un espacement de 2 microns, cela signifie qu'il est relativement épais. x.mesh devient plus fin entre 9 et 11 microns avec un espacement de 0,2 microns.

De même pour y.mesh, par exemple y.mesh départ à 0 microns avec un espacement de 0,25 microns, le maillage est plus épais à l'endroit y.mesh de 10 microns, lorsque l'espacement est de 1,5 microns.

La précision de la simulation dépend de l'état de la maille.

Un maillage épais produit une rapide simulation, mais les résultats sont moins précis. Tandis qu'un maillage fin produit un ralentissement de la simulation, mais des résultats plus précis. Donc le maillage fin est plus intéressant de point de vue résultat dans la simulation.

#### III-4-b Régions

Après avoir défini le maillage, il est nécessaire de définir les régions dont le format de définition des régions est le suivant:

REGION nombre = < integer > < material\_type > / < position des paramètres > La figure (III-5) montre les régions du maillage. Il ya dix régions, les limites de chaque région sont explicitement identifiés dans les axes x et y.



Figure III-5: Définition des régions.

La figure (III-6), montre la façon de définition des matériaux pour chaque région. Notons que le code de couleur indique la matière. Les régions ont des lignes verticales et horizontales pour marquer leurs limites.



Figures III-6 : Les régions et les matériaux.

## **III-4-c Electrodes**

« Atlas » a une limite de 50 électrodes qui peuvent être définies. Le format de définition d'électrodes est comme suit:

ELECTRODE NAME = < nom de l'électrode > < position des paramètres > La figure (III-7) montre la position de l'anode et la cathode par des valeurs de x et de y.



Figure III-7 : Définition des électrodes.

# **III-4-d Dopage**

Le dernier aspect de la spécification de la structure qui doit être défini est le dopage. Le format de la déclaration de dopage dans « Atlas » se présente comme suit:

DOPAGE < type de distribution > < type de dopant > / < position des paramètres >

Dans la figure (III-8), les types de dopage et les niveaux de dopage sont définis. Le dopage peut être de type N ou P. Le type de distribution peut être uniforme ou gaussienne.



Figure III-8 : Types de dopage.

#### III-5 Spécification du modèle et du matériau

Après la définition de la structure, il faut spécifier les modèles des matériaux, elle se compose de quatre parties : matériau, modèles, contact et interface.

#### III-5-a Matériau

Le format de la déclaration du matériau est le suivant :

MATERIAL < localisation > < définition du matériau >

Exemple :

Material Material = GaAs MUN = 8000 MUP = 150 TAUN0 = 3e-7 TAUP0 = 2e-5 Dans cet exemple, « Material » apparaît deux fois, le premier est considérée comme la déclaration du matériau et le second est considéré comme un paramètre de localisation. Plusieurs autres paramètres peuvent être définis par la déclaration « Material», comme exemples de ces paramètres : la mobilité d'électrons (MUN) et la mobilité de trous (MUP), (TAUN0) et (TAUP0) qui sont les durées de vie d'électrons et de trous respectivement.

#### III-5-b Modèles

Les modèles physiques sont classés en cinq catégories:

Mobilités des porteurs de charges, mécanismes de génération-recombinaison, les statistiques de transport, l'ionisation par impact et l'effet tunnel.

La syntaxe de la déclaration du modèle est la suivante:

MODEL< paramètres générales > / < paramètres du modèle >

Le choix du modèle dépend des matériaux choisis pour la simulation.

Exemple: SRH FLDMOB CONMOB

SRH est le modèle de Shockley-Read-Hall.

CONMOB est le modèle dépendant de la concentration.

FLDMOB est le modèle dépendant du champ électrique parallèle.

#### III-5-c Contact

Le contact détermine les attributions des électrodes. La syntaxe du contact est la

suivante :

Contact nombre = < n > | NOM = <ename> | ALL

Cette expression montre la déclaration « contact »,

Exemple :

CONTACT NAME = anode current

#### III-5-d Interface

Les limites du semi-conducteur ou de l'isolant sont déterminées dans la déclaration d'interface. La syntaxe est la suivante:

INTERFACE [<parameters>]

#### III-6 Méthodes numérique à sélectionner

Après la précision du modèle de matériaux, la sélection de la méthode numérique doit être indiquée. Parmi les différentes méthodes numériques de résolution des systèmes d'équation, trois types de techniques sont utilisée dans « Silvaco-Atlas »:

- Méthode de Gummel
- Méthode de Newton
- Méthode des blocs

L'exemple suivant illustre l'utilisation de la déclaration de méthode :

#### METHOD Newton Gummel
Dans cet exemple, les équations sont résolues par la méthode Gummel. Si la convergence n'est pas atteinte, les équations sont résolues en utilisant la méthode de Newton.

#### **III -7** Spécification de Solution

Les instructions de spécification de la solution sont: Log, Solve, Load et Save.

#### III-7-a Log

Log enregistre toutes les caractéristiques terminales dans un fichier de données. L'exemple suivant montre un exemple d'utilisation de l'instruction LOG.

LOG OUTFILE = myoutputfile.log

L'exemple montre l'enregistrement de données dans le fichier « myoutputfile.log ».

# III-7-b Solve (Résoudre)

L'instruction SOLVE suit l'instruction LOG. Elle effectue une solution pour un ou plusieurs points de polarisation. Ce qui suit est un exemple de l'instruction SOLVE. SOLVE V2 = 0.8SOLVE V2 = 0.9

#### **III-7-c** Load et Save (chargement et sauvegarde)

L'instruction LOAD introduit, à partir d'un fichier existant, pour chaque point de polarisation les solutions précédentes en tant que proposition initiale.

L'instruction SAVE permet l'enregistrement de toutes les informations obtenues pour un nœud dans un fichier de sortie.

#### **III-8** Analyse des résultats

Les résultats et les informations obtenues par la simulation peuvent être affichés graphiquement avec « TonyPlot ».



Figure III-9 : Affichage graphique des résultats par « TonyPlot ».

# <u> Bibliographie – Chapitre III</u>

# [39] Silvaco International,

http://www.silvaco.com/products/device\_simulation/atlas. html.

[40] Atlas User's Manual, Silvaco International, 2010.

# **Chapitre IV**

# Résultat et interprétation

# <u>Sommaire</u>

IV-1 S	Simulation	des	caractéristiques	électriques	d'une	diode	laser	GaAs-
AlGaAs64								
IV-1	1-1 Variatio	on du ga	ain en fonction du	courant, de la	tension,	de la pui	issance	et de la
densité de	photons	•••••						64
IV-1	1-2 Variati	on de la	a puissance en fon	ction du coura	nt et de l	a tensior	1	67
IV-1	1-3 Variatio	on de la	densité de photor	s en fonction	du coura	nt et de l	a tensio	n68
IV-1	1-4 Variatio	on de la	densité de photor	s en fonction	de la puis	ssance		69
IV-1	1-5 Effet de	e la long	gueur de cavité sur	r le gain				70
Conclusio	)n		• • • • • • • • • • • • • • • • • • • •		•••••			72

# IV-1 Simulation des caractéristiques électriques d'une diode laser GaAs-AlGaAs

Dans ce travail on a simulé, à l'aide du logiciel SILVACO, les caractéristiques électriques et optiques d'une diode LASER

Pour cela, nous avons choisi une structure à double hétérojonction dont la couche active, de type p et d'épaisseur de l'ordre de 0.1-0.3  $\mu$ m, est prise en sandwiche entre deux couches de Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As dopées respectivement n et p. Ce sandwiche confine dans la région active, à la fois les électrons et les photons.

# IV-1-1 Variation du gain en fonction du courant, de la tension, de la puissance et de la densité de photons

L'émission LASER résulte de la recombinaison des porteurs de charges (électrons et trous) dans la région active du dispositif. Sur la figure (IV-1), on constate que pour des faibles tensions de polarisation (< 1.55 v) le gain est négatif ce qui traduit l'absence de l'émission LASER, mais au-delà de cette valeur, il devient positif ce qui traduit l'apparition de l'émission LASER.

En absence de polarisation ou bien si la polarisation est faible, une densité très faible de porteurs arrive à la région active de très petites dimensions, mais elle est insuffisante pour l'émission LASER. Par contre, lorsque la diode laser est polarisée en direct les électrons et les trous sont injectés dans la population de la région active du dispositif où la recombinaison se produit souvent. Ces électrons et les trous se recombinent pour émettre des photons.

Lorsque la tension de polarisation (ou bien la densité de courant) atteint une certaine valeur (>1.55) le gain reste constant, c'est le phénomène de saturation.



Figure IV-1 : Variation du gain en fonction de la tension.



Figure IV-2 : Variation du gain en fonction du courant.



Figure IV-3 : Variation du gain en fonction de la densité de photons.



Figure IV-4 : Variation du gain en fonction de la puissance.

## IV-1-2 Variation de la puissance en fonction du courant et de la tension

Sur les deux figures (IV-5, IV-6), l'endroit ou l'on ne voit pas la pente on parle de l'émission spontané c'est à dire le courant n'arrive pas a réalisé l'inversion de population. L'endroit ou la pente de la courbe augmente brusquement correspond au seuil d'oscillation laser c'est à dire l'émission stimulé.

Si nous poursuivons l'augmentation de la tension de polarisation, on remarque une chute de la puissance LASER expliqué par la destruction du dispositif. Donc il est nécessaire, pour un fonctionnement stable de la diode laser, de régler le courant de la diode



Figure IV-5 : Variation de la puissance en fonction du courant.



Figure IV-6 : Variation de la puissance en fonction de la tension.

#### IV-1-3 Variation de la densité de photons en fonction du courant et de la tension

Lorsqu'on applique une polarisation directe faible la densité d'électrons et de trous injecté est faible, ce qui implique que les photons qui sont émis sont soit absorbé par la cavité soit perdu à l'extérieur, mais au fur et à mesure que la polarisation augmente, les porteurs sont injecté jusqu'à ce que finalement la condition de seuil soit satisfaite et une densité importante de photons commence a s'accumulée dans la cavité, par conséquent l'émission stimulé commence a ce produire et domine l'émission spontané.



Figure IV-7 : Variation de la densité de photon en fonction du courant.



Figure IV-8 : Variation de la densité de photon en fonction de la tension.

## IV-1-4 Variation de la densité de photons en fonction de la puissance

D'après la figure (IV-9), On constate qu'il existe une relation linéaire entre la puissance et la densité de photons de façon que la puissance augmente avec l'augmentation de la densité de photons.



Figure IV-9 : Variation de la densité de photon en fonction de la puissance.

## IV-1-5 Effet de la longueur de cavité sur le gain

Dés qu'on augmente la longueur de cavité le gain devient de plus en plus faible ; ca veux dire que les pertes ont augmentées et pour des faibles longueurs de cavité le gain augmente comme c'est montré dans les figures suivantes.



Figure IV-10 : Variation du gain en fonction de la tension dans la longueur de cavité100µm.



*Figure IV-11 :* Variation du gain en fonction de la tension dans la longueur de cavité 70µm.



Figure IV-12: Variation du gain en fonction de la tension dans la longueur de cavité 50µm.

# Conclusion

Les photons sont confinés dans la couche active de type (P) par la différence d'indice qui existe entre le GaAs et le AlGaAs. Les réflexions totales à l'interface des deux matériaux évitent l'étalement des photons dans le GaAlAs. L'efficacité du confinement est plus grande que dans une homojonction en raison de l'écart d'indice qui est plus important.

Les électrons sont confinés dans la couche active en raison de la différence de gap qui existe entre le Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As (Eg=1.9) et le GaAs (Eg=1.4). Les deux couches de GaAlAs constituent des barrières de potentielle qui empêche les électrons et les trous de diffuser au-delà du GaAs.

## **Conclusion générale**

Dans cette conclusion, nous tenons, à souligner les points essentiels suivants: Tout d'abord, nous avons étudié les propriétés physiques et électroniques des semiconducteurs III-V, la variation spatiale de la bande interdite, suivant la composition de ces alliages binaires, ternaires et quaternaires, ainsi que les différents hétéro structures peuvent former à partir de ces alliages, nous avons présenté aussi la théorie de l'approximation de la masse effective dans l'hétéro structure, et nous avons présenté le modèle d'Anderson d'une hétérojonction. Nous avons parlé aussi des équations de base du semi-conducteur et les modèles physiques nécessaires pour la simulation laser et ensuite, nous avons effectué une description sur les principes du laser et les caractéristiques de la lumière laser et les déférents types des lasers. Dans le troisième chapitre, nous allons parler du logiciel de simulation « Silvaco-Atlas », en expliquant les étapes suivis pour simuler notre structure objet. Le dernier chapitre présente les résultats obtenus pour la simulation de la diode laser GaAs-AlGaAs, Les modèles que nous avons utilisés permettent une description des propriétés électrique et optique du laser à semiconducteur. Les propriétés électriques du laser sont décrites par l'équation de poisson et l'équation de continuité qui détermine la distribution des densités de courant dans le dispositif. Et Les propriétés optiques du laser sont simulées à l'aide de l'équation d'évolution de la densité de photons qui détermine la puissance émise par le dispositif laser. Dans ce simulateur lasers à semi-conducteurs, les équations de base, sont résolus auto-cohérente avec une équation optique qui détermine la distribution de l'intensité du champ optique.

La structure que nous avons simulée est une diode laser à base de GaAs. La couche active de type p dont l'épaisseur est de l'ordre de  $0.1 - 0.3 \mu m$  est prise en sandwiche entre deux couche de Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As dopée respectivement n et p; ce sandwiche confine dans la région active, à la fois les électrons et les photons.

Les photons sont confinés dans la couche active de GaAs (P) par la différence d'indice qui existe entre GaAs et AlGaAs. Les réflexions totales à l'interface des deux matériaux évitent l'étalement des photons dans le GaAlAs. L'efficacité du confinement est plus grande que dans une homojonction en raison du fait que l'écart d'indice est plus important. En se limitant au système couplé porteur-photons au régime stationnaire, les électrons sont confinés dans la couche active en raison de la différence de gap qui existe entre  $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$  (Eg =1.9) et GaAs (EG=1.4). Les deux couches de GaAlAs constituent des barrières de potentielle qui empêche les électrons et les trous de diffuser au-delà du GaAs donc cette structure nous a conduit d'obtenir un courant de seuil de 0,0125 A et une puissance de 0,018 W à 0,9 µm. Une bonne densité de photon  $2e^{08}$  conduit a une valeur de gain égale à  $28cm^{-1}$ .

L'influence de la variation de la longueur de cavité sur le gain optique à été étudié par une simulation de la variation du gain optique pour trois valeurs de longueur de cavité  $100 \,\mu\text{m}$  et  $70 \,\mu\text{m}$  et  $50 \,\mu\text{m}$  et on a trouvé un gain de  $10 \,\text{cm}^{-1}$  pour une longueur de  $100 \,\mu\text{m}$  et  $14 \,\text{cm}^{-1}$  pour une longueur  $70 \,\mu\text{m}$  et un gain de  $28 \,\text{cm}^{-1}$  pour une longueur de  $50 \,\mu\text{m}$ . donc le gain détermine par la géométrie et les caractéristiques de la cavité, lorsque la longueur de la cavité décroît, le gain augmente ce qui diminue les pertes.

## RESUME

L'objectif de ce travail est l'étude des lasers à base d'hétérojonctions de semiconducteurs III-V.

L'étude du dispositif Laser à semi-conducteurs GaAs-AlGaAS (notions de base des lasers, et propriétés optoélectroniques) qui se limite au régime stationnaire du laser a été présentée.

La simulation par la partie LASER du logiciel de simulation SILVACO ATLAS, a permis d'éclaircir l'influence de quelques paramètres du laser étudié.

# منخص

يهدف هذا العمل إلى تقديم دراسة نظرية لمبدأ عمل الليزر المتكون من أنصاف النواقل المنتمية إلى العمودين الثالث و الخامس من جدول العناصر الكيميائية و بصفة خاصة الليزر المتكون من GaAs-AlGaAs.

{دراسة مفصلة لمبدأ الليزر وبعض خواصه الالكترونية و الضوئية } و التي تقتصر على

الجزء الخاص بالليزر لمكونات برنامج المحاكاة SILVACO ATLAS أستعمل لتوضيح تأثيرا بعض المكونات الأساسية لليزر المدروس.