

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

SIMULATION DES DISPOSITIFS OPTOÉLECTRONIQUES PAR LA
MÉTHODE MONTE CARLO

ALEV DEVRIM GÜÇLÜ
DÉPARTEMENT DE GÉNIE PHYSIQUE
ET DE GÉNIE DES MATÉRIAUX
ÉCOLE POLYTECHNIQUE

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

MAI 1999

©Alev Devrim Güçlü, 1999.



**National Library
of Canada**

**Acquisitions and
Bibliographic Services**

**395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada**

**Bibliothèque nationale
du Canada**

**Acquisitions et
services bibliographiques**

**395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada**

Your file Votre référence

Our file Notre référence

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

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

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

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

0-612-54037-5

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

SIMULATION DES DISPOSITIFS OPTOÉLECTRONIQUES PAR LA
MÉTHODE MONTE CARLO

présenté par: GÜÇLÜ Alev Devrim

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

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

M. FAUCHER Guy, D.Sc., président

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

M. CHAMPAGNE Alain, D.Sc., membre

À ma famille

Remerciements

J'aimerais remercier tout particulièrement mon directeur de maîtrise M. Romain Maciejko pour m'avoir offert l'opportunité d'accomplir ce travail au sein de son groupe de recherche et avoir stimulé mon intérêt pour l'optoélectronique ainsi que pour son support financier. Nos nombreuses discussions et ses conseils pertinents ont été utiles dans chaque étape de réalisation de cette étude.

Je remercie M. Alain Champagne pour sa participation directe et son soutien informatique tout au long de ce travail.

J'aimerais remercier M. Denis Morris et M. Chedly Rejeb leur sens critique et leurs conseils sur la photoluminescence.

Merci également à mes amis, Greg, Jeff, Pascale et Pascale. Toute aide fut très précieuse.

Finalement, j'adresse un remerciement spécial à ma famille, Anne, Ekin et Evren pour leur support et leur compréhension.

Résumé

Ces dernières années, les hétérostructures à base de InGaAsP/InP ont attiré beaucoup d'attention pour des applications aux dispositifs optoélectroniques, particulièrement aux lasers à puits quantiques contraints opérant aux longueurs d'onde d'absorption minimale et de dispersion nulle des fibres optiques commerciales à base de silice. Une compréhension approfondie de la dynamique des porteurs de charge dans ces hétérostructures est donc nécessaire pour la conception des dispositifs photoniques ultra-rapides. Le principal objectif de ce mémoire a été la modélisation numérique du transport de charge incluant la relaxation, la capture et la recombinaison dans les structures à puits quantiques multiples InGaAsP/InP.

L'outil théorique principal dont nous nous sommes servis a été un simulateur bipolaire Monte Carlo couplé à l'équation de Poisson. De plus, comme outil complémentaire, nous avons utilisé un simulateur classique des équations de diffusion-entraînement et un calcul de bande par la méthode $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$.

Puisque nous voulons étudier des dispositifs réels à forte concentration de porteurs, il est nécessaire d'inclure la recombinaison des électrons avec les trous, les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons optiques polaires dans le simulateur. Or,

à notre connaissance, il n'existe pas de modèle Monte Carlo incluant les processus de recombinaison. Nous avons donc développé une nouvelle technique efficace pour incorporer les mécanismes de recombinaison Auger et spontanée dans le simulateur Monte Carlo. Nous avons validé notre modèle en traitant un cas simple de matériau massif, ce qui nous a permis de comparer les résultats obtenus à ceux obtenus par la résolution directe des équations de taux de recombinaison. En appliquant le modèle à une structure à puits quantiques multiples, nous avons approfondi notre compréhension des expériences réelles de photoluminescence résolue dans le temps.

Pour étudier la validité et les limites de l'approximation de diffusion-entraînement, nous avons effectué une comparaison détaillée avec l'approche Monte Carlo. Les équations de diffusion-entraînement sont une approximation à l'équation de transport de Boltzmann et négligent plusieurs phénomènes physiques importants tels que l'échauffement des porteurs, les collisions inélastiques et les interactions porteur-porteur. Pourtant, cette approche est répandue dans la modélisation des structures laser et ses limites ne sont pas bien connues. Nous avons alors étudié deux cas: une hétérostructure laser à l'équilibre et une hétérostructure laser hors-équilibre. La comparaison des résultats obtenus par les deux méthodes dans la modélisation d'une structure laser à puits quantiques multiples à l'équilibre nous a montré que l'approximation de diffusion-entraînement est suffisante dans cette condition, malgré une erreur d'environ 15 % sur les densités de porteurs dans les puits. Cette étude nous a également montré que le transport des porteurs dans les puits est plus sensible aux interactions porteur-porteur et à la masse effective que dans les barrières. La divergence entre les deux approches devient plus évidente quand on modélise une structure à puits quantiques multiples sous forte injection optique. Les porteurs sont alors chauds et non-thermalisés, les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons optiques deviennent très importants. Le temps de capture des porteurs

dans les puits, le temps de montée et le temps de descente de la photoluminescence prédits par l'approximation de diffusion-entraînement sont alors trop courts. Un simulateur Monte Carlo est donc essentiel à l'étude du transport ultra-rapide des porteurs excités dans les nanostructures.

En modélisant les expériences réelles de photoluminescence résolue dans le temps par la méthode Monte Carlo, nous avons démontré que les interactions porteur-porteur et porteur-phonon optique polaire écrantée étaient nécessaires pour expliquer les spectres de photoluminescence expérimentaux. Les prédictions théoriques des spectres sont alors en bon accord avec les résultats d'expériences. En particulier, l'écrantage des phonons optiques est responsable du refroidissement lent des électrons dans les puits quantiques. En conséquence, entre 2 et 100 ps, le signal de photoluminescence provient principalement de la recombinaison des électrons chauds avec les trous de basse énergie. Nous avons aussi montré que la recombinaison Auger était le principal mécanisme de recombinaison dans la structure étudiée.

À cause du confinement quantique des porteurs dans les puits, les spectres expérimentaux présentent un pic dans la partie de basse énergie, provenant de la recombinaison entre les niveaux quantifiés. Ce phénomène ne peut être expliqué par la méthode Monte Carlo semi-classique et un calcul quantique est alors nécessaire. Nous avons donc calculé la dépendance en énergie des transitions optiques entre les niveaux confinés en utilisant un modèle $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$, pour mieux interpréter les résultats expérimentaux. Nous avons aussi montré que, dépendant de la structure étudiée, l'écart entre les niveaux confinés des puits quantiques peut être assez faible pour que le chevauchement des transitions correspondantes fasse disparaître les pics sur les spectres.

Abstract

In recent years, strained-layer InGaAsP/InP heterostructures have received a great deal of attention for applications in optoelectronic devices, particularly quantum-well lasers operating at the wavelengths of minimal absorption and zero dispersion of commercial silica optical fibers. A detailed knowledge of the carrier dynamics in the active region is therefore desirable for the design of ultrafast photonic devices. The main objective of this work has been the numerical modeling of carrier transport including relaxation, capture and recombination in real InGaAsP/InP multiple-quantum-well structures.

The principal theoretical tool we used was a bipolar Monte Carlo simulator based on a self-consistent Poisson solver. Moreover, we used a classical simulator of drift-diffusion equations and a band structure calculation based on the $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ method as complementary tools.

It is necessary to include the recombination of electrons with holes, carrier-carrier interactions and screening of polar optical phonons in the simulator to study real devices with high carrier densities. But to the best of our knowledge, no study of carrier recombination in a Monte Carlo simulation has been reported to date. We

therefore developed a novel method for including the Auger processes and spontaneous recombination in a Monte Carlo approach. In order to test our model, we studied a simple bulk structure and we compared the results to these obtained by the numerical solution of recombination rate equations. We also found that the model is practical for the interpretation of the results of time-resolved photoluminescence experiments on multiple-quantum-well structures.

In order to study the limits and validity of the drift-diffusion approximation, we provided a detailed comparison with the Monte Carlo approach in multiple-quantum-well device simulations. In the drift-diffusion equations, which are an approximation to the Boltzmann transport equation, several important physical mechanisms such as carrier heating, inelastical collisions and carrier-carrier interactions are neglected. They are nevertheless widely used in laser structure simulations and their limits are not well known. We studied two different cases; quantum-well lasers in steady state and under high optical injection. We showed that the Monte Carlo method and drift-diffusion approximation give similar results in the case of steady state laser simulation, especially in the barrier regions. In the quantum wells though, we observed differences of the order of 15 % in the electron density. We also showed that the carrier transport is quite sensitive to the carriers effective masses and carrier-carrier interactions which are more rigorously treated by the Monte Carlo approach. The discrepancy between the methods becomes clearer when we simulate a structure under high optical injection. In this case, the carriers are hot and non-thermalized and the carrier-carrier and screened phonon interactions are very important. Consequently, the capture time, the photoluminescence rise and decay times are lower in the drift-diffusion simulator. A Monte Carlo simulator is therefore necessary in order to study ultrafast carrier transport in nanostructures.

We also simulated real time-resolved photoluminescence experiments with the Monte Carlo method and showed that the carrier-carrier interactions and the screening effect of the carrier-optical phonon interactions are necessary to explain the experimental spectra. The calculated spectra gave a good agreement with experimental results. We found that the screening effect of polar optical phonons is responsible for the slow cooling of electrons in the quantum wells. Therefore, the photoluminescence signal comes mostly from the recombination of the high energy electrons and low energy holes in the time span between 2-100 ps. We also showed that the Auger recombination is the primary carrier recombination mechanism in the structure under investigation.

Because of the quantum confinement of carriers in the wells, a peak appears in the low energy side of the experimental spectra coming from the recombination between quantized states. This cannot be explained by the semi-classical Monte Carlo approach and a quantum calculation is therefore necessary. We used a $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ model to calculate the energy dependency of the transitions between confined states in order to have a better understanding of experimental results. We also showed that the magnitude of the gap between confined states depends on the device structure and provided it is small enough, the peak does not appear due to the overlap between different transitions.

TABLE DES MATIÈRES

Dédicace	iv
Remerciements	v
Résumé	vi
Abstract	ix
TABLE DES MATIÈRES	xii
LISTE DES TABLEAUX	xvi
LISTE DES FIGURES	xvii
LISTE DES SYMBOLES	xxi
INTRODUCTION	1
CHAPITRE 1 Rappels de la théorie des semi-conducteurs	7
1.1 Introduction	7
1.2 Transport électronique	8
1.2.1 Modèle semi-classique	8
1.2.2 Approximation de diffusion-entraînement	10
1.2.3 Méthode Monte Carlo	12

1.3.1	Hamiltonien de l'interaction électron-lumière	15
1.3.2	Matrice optique	16
1.3.3	Taux de transition	16
1.4	Calcul de bande par la méthode $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$	18

CHAPITRE 2 Modélisation de la recombinaison par la méthode

Monte Carlo	21
2.1 Introduction	21
2.2 Modèle de recombinaison	21
2.3 Algorithme de Monte Carlo	23
2.4 Application à un cas simple	24
2.4.1 Effet du nombre de superparticules	26
2.4.2 Effet du pas de temps de recombinaison	28
2.5 Conclusion	30

CHAPITRE 3 Comparaison entre la méthode Monte Carlo et l'approximation de diffusion-entraînement

3.1	Introduction	31
3.2	Structure des dispositifs	32
3.3	Simulation d'une diode laser à l'équilibre	35
3.3.1	Distribution en densité des porteurs	35
3.3.2	Distribution d'énergie des porteurs	37
3.3.3	Effet des interactions porteur-porteur et de l'écrantage des phonons optiques polaires	38
3.3.4	Effet des diffusions interbande	41
3.4	Simulation du transport et de la recombinaison des porteurs hors- équilibre	42
3.4.1	Capture des porteurs dans les puits	43

3.4.2	Effet des interactions porteur-porteur et de l'écrantage des phonons optiques polaires	47
3.4.3	Recombinaison des porteurs dans les puits	49
3.5	Conclusion	50
CHAPITRE 4 Étude de la dynamique et de la photoluminescence des porteurs hors-équilibres		52
4.1	Introduction	52
4.2	Détails techniques	53
4.3	Résultats et discussion	54
4.3.1	Effet des interactions porteur-porteur et de l'écrantage des phonons optiques polaires	54
4.3.2	Capture et recombinaison des porteurs dans les puits	57
4.3.3	Spectres de photoluminescence calculés et expérimentaux	60
4.4	Conclusion	67
CHAPITRE 5 Calcul de la structure de bandes et des transitions optiques		69
5.1	Introduction	69
5.2	Méthode de solution	70
5.3	Résultats et discussion	72
5.4	Conclusion	78
CONCLUSION		79
BIBLIOGRAPHIE		84
ANNEXES		95

ANNEXE A	Calcul des transitions optiques	96
A.1	Base de Bloch orthonormée	96
A.2	Calcul des éléments de matrice optique	97
ANNEXE B	Liste des publications	99

LISTE DES TABLEAUX

3.1	L'énergie et la densité moyenne des porteurs dans les puits quantiques.	41
4.1	Largeur à mi-hauteur du pic près de 1 eV obtenue par les calculs Monte Carlo et par les données expérimentales pour différents temps.	66

LISTE DES FIGURES

2.1	Organigramme du code de la recombinaison de porteurs.	25
2.2	Densité de porteurs en fonction du temps (a) pour les trous, (b) pour les électrons. Courbe 1, résolution numérique des équations de recombinaison; courbe 2, Monte Carlo avec 5000 superporteurs; courbe 3, Monte Carlo avec 500 superporteurs; courbe 4, Monte Carlo avec 100 superporteurs.	27
2.3	Densité d'électron en fonction du temps. Courbe 1, $\Delta t = 0.01$ ps; courbe 2, $\Delta t = 0.1$ ps; courbe 3, $\Delta t = 1$ ps.	29
2.4	Taux de recombinaison radiative en fonction du temps. Courbe 1, $\Delta t = 0.01$ ps; courbe 2, $\Delta t = 0.1$ ps; courbe 3, $\Delta t = 1$ ps.	29
3.1	Représentation schématique de la structure A: gris foncé, puits quantiques InGaAsP non-dopés ($1.55 \mu m$); gris pâle, barrières InGaAsP p: $4 \times 10^{17} cm^{-3}$ ($1.25Q$). Les valeurs Q sont les bandes interdites en micromètres à la température de la pièce.	33
3.2	Représentation schématique de la structure B: gris foncé, puits quantiques InGaAsP non-dopés ($1.3 \mu m$); gris pâle, barrières InGaAsP p: $4 \times 10^{17} cm^{-3}$ ($1.1Q$). Les valeurs Q sont les bandes interdites en micromètres à la température de la pièce.	34

3.3	Densité de porteurs en fonction de la position (a) pour les trous, (b) pour les électrons: la ligne continue, diffusion-entraînement; la ligne brisée, Monte Carlo.	36
3.4	Fonctions de distribution (a) pour les électrons, (b) pour les trous: Les résultats Monte Carlo (lignes continues) sont comparés à une distribution Maxwellienne à 300 K (lignes pointillées).	38
3.5	Fonction de distribution (a) pour les électrons, (b) pour les trous dans les barrières: lignes brisées, sans les interaction porteur-porteur; lignes continues, avec les interactions porteur-porteur; lignes pointillées, distribution Maxwellienne.	39
3.6	Fonctions de distribution (a) pour les trous, (b) pour les électrons dans les puits: lignes brisées, sans les interactions porteur-porteur; lignes continues, avec les interactions porteur-porteur; lignes pointillées, avec les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons.	40
3.7	Densités de porteurs en fonction de la position (a) pour les électrons, (b) pour les trous: lignes brisées, avec seulement les trous lourds; lignes continues, avec les trous lourds et légers.	42
3.8	Densité de porteurs en fonction de la position à 2 ps obtenue (a) par les équations de diffusion-entraînement, (b) par la méthode Monte Carlo: lignes continues, électrons; lignes pointillées, trous.	44
3.9	Densité de porteurs en fonction de la position à 10 ps obtenue (a) par les équations de diffusion-entraînement, (b) par la méthode Monte Carlo: lignes continues, électrons; lignes pointillées, trous.	44
3.10	Évolution de la densité de porteurs dans les puits obtenue par les équations de diffusion-entraînement, (a) pour les électrons, (b) pour les trous.	45

3.11 Évolution de la densité de porteurs dans les puits obtenue par la méthode Monte Carlo, (a) pour les électrons, (b) pour les trous.	45
3.12 Champ électrique en fonction de la position obtenu par les équations de diffusion-entraînement.	46
3.13 Évolution de l'énergie moyenne dans les puits quantiques obtenue par la méthode Monte Carlo (a) sans les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons, (b) avec les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons.	48
3.14 Évolution de la densité de porteur moyenne dans les puits quantiques obtenue par la méthode Monte Carlo (a) sans les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons, (b) avec les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons.	48
3.15 Évolution des taux de recombinaison (a) Auger, (b) spontanée dans les puits quantiques: courbe 1, diffusion-entraînement; courbe 2, Monte Carlo sans les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons; courbe 3, Monte Carlo avec les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons.	50
4.1 Énergie moyenne calculée des électrons en fonction du temps (a) dans les puits et (b) dans les barrières; courbe 1, p-p et p-phe négligées; courbe 2, avec p-phe; courbe 3, avec p-phe, e-e et h-h; courbe 4, avec p-phe, e-e, h-h et e-h.	56
4.2 Fonctions de distribution calculées (a) dans les puits, (b) dans les barrières $1.25Q$ pour les électrons et les trous à 5 ps, $T=77$ K.	58
4.3 Densité de porteurs en fonction de la position (a) à 0 ps, (b) à 10 ps, (c) à 50 ps et (d) à 100 ps, $T=77$ K.	59

4.4	Évolution des densités de porteurs moyennes calculée; ligne continue, électrons; ligne brisée, trous.	61
4.5	Dérivée par rapport au temps des densités de porteurs; ligne continue, électrons; ligne brisée, trous.	61
4.6	Taux de recombinaison calculés pour $T=77$ K; (a) recombinaison Auger, (b) recombinaison spontanée.	62
4.7	Signal de photoluminescence calculé en fonction de l'énergie et du temps pour 77 K, émis par (a) les puits quantiques, (b) par les barrières 1.25Q.	63
4.8	Signal de photoluminescence calculé en fonction de l'énergie à 10 ps. émis par (a) les puits quantiques, (b) par les barrières 1.25Q; ligne continue, p-p et p-phe négligées; ligne brisée, avec p-p et p-phe.	63
4.9	Spectres de photoluminescence (a) expérimentaux à $P=40$ mW. (b) expérimentaux à $P=125$ mW et (c) calculés à $T=77$ K	65
5.1	Diagramme de bandes des niveaux confinés dans les puits de la structure A (a) pour les électrons. (b) pour les trous.	73
5.2	Diagramme de bandes des niveaux confinés dans les puits de la structure B (a) pour les électrons, (b) pour les trous.	74
5.3	Transitions optiques dans la structure A; (a) les éléments de matrice optique calculés, (b) les spectres de photoluminescence expérimentaux. 1.25Q représente le gap des barrières de confinement en micron.	76
5.4	Transitions optiques dans la structure B; (a) les éléments de matrice optique calculés, (b) les spectres de photoluminescence expérimentaux. 1.1Q représente le gap des barrières de confinement en micron.	77

LISTE DES SYMBOLES

$\mathbf{k}$	Vecteur d'onde
$\mathbf{r}$	Position
$\mathbf{p}$	Quantité de mouvement généralisée
g	Fonction de distribution
f	Fonction de distribution en énergie
$\mathbf{E}$	Champ électrique
ψ	Fonction d'onde
u	Fonction de Bloch
F	Fonction enveloppe
H	Hamiltonien
M	Matrice optique
r_{sp}	Taux d'émission spontanée
α	Taux d'absorption total
R_{rec}	Taux de recombinaison total
c	Indice de bande de conduction
v	Indice de bande de valence
n	Densité d'électrons ou indice de bande
p	Densité de trous
N	Nombre de superélectrons
P	Nombre de supertrous
S_e	Supercharge

INTRODUCTION

Depuis la réalisation de la première fibre optique avec moins de 20 dB/km de pertes et du premier laser à semi-conducteurs opérant à la température ambiante en 1970, la technologie des systèmes de transmission optique a connu une évolution très rapide. À l'heure actuelle, l'autoroute de l'information est en plein expansion et on exige des débits d'information de plus en plus élevés pour satisfaire à la demande. On cherche donc à améliorer la performance des diodes lasers (bande passante de modulation plus élevée, courant de seuil et largeur de raie plus faibles) qui servent à coder l'information qui est ensuite transmise par les fibres optiques.

Les premières diodes laser à être introduites opéraient à une longueur d'onde dans le voisinage de $0.83\ \mu\text{m}$ et avaient une région active d'environ 200 nm d'épaisseur. De nos jours, les hétérostructures à base d'InGaAsP épitaxiées sur substrat d'InP reçoivent beaucoup d'attention car elles opèrent aux longueurs d'onde d'absorption minimale ($1.55\ \mu\text{m}$) et de dispersion nulle ($1.3\ \mu\text{m}$) des fibres optiques commerciales à base de silice. Grâce à des technologies avancées d'épitaxie comme la technologie MOCVD (Metal-Organic-Chemical-Vapor-Deposition), on retrouve de plus en plus de diodes laser à puits quantiques, c'est-à-dire formées de couches très minces, environ 5 nm d'épaisseur, qui offrent une plus haute performance.

Parmi les principaux processus physiques qui limitent la bande passante de modulation maximale dans les lasers à puits quantiques multiples, on retrouve: (a) le gain différentiel et le temps de vie des photons dans la cavité qui sont déterminés par les propriétés des matériaux et par la structure du dispositif (Bowers, 1987); (b) le coefficient de gain optique non-linéaire qui est affecté par le brûlage de trou (*spectral hole burning*) et l'effet de la saturation du gain (Agrawal, 1988; Schönfelder et collab., 1994); (c) le transport de porteurs de charge (Lan, 1993; Tsai, 1995), incluant l'effet tunnel entre les puits (Nagarajan et collab., 1991), la capture et le transfert entre les puits et les barrières (Kan et collab., 1992); (d) l'échauffement dynamique dû à l'injection, à l'émission stimulée et spontanée (Gomatam et DeFonzo, 1990), à l'absorption des porteurs libres (Gomatam et DeFonzo, 1990; Willatzen et collab., 1991) et au processus Auger qui causent l'effet des phonons et porteurs chauds (Lester et Ridley, 1992). Malgré un nombre important de travaux expérimentaux et théoriques réalisés jusqu'à maintenant, les mécanismes physiques impliqués à la dynamique des porteurs dans les lasers à puits quantiques ne sont pas bien compris.

Les travaux théoriques visant à expliquer le processus de capture ont suivi deux approches différentes. Shichijo et collab. (1978) et Tang et collab. (1982) ont utilisé une description semi-classique pour démontrer que l'efficacité d'injection des porteurs dans les puits diminuait lorsque la largeur de ceux-ci devenait plus petite que le parcours libre limité par les phonons optiques. Mais, quelques années plus tard, deux groupes de recherche (Brum et Bastard, 1986; Kozyrev et Shik, 1986) ont utilisé indépendamment une approche quantique plus élaborée et ont prédit des oscillations de 10 à 100 ps du temps de capture en fonction de la largeur des puits. Cependant, selon les résultats expérimentaux de photoluminescence, la plupart des temps de capture mesurés semblent contredire les prédictions théoriques (Feldman et collab., 1987; Deveaud et collab., 1988; Kersting et collab., 1993), sauf quelques

travaux réalisés pour des structures de conception spéciale (Morris et collab., 1993; Blom et collab., 1993). Aujourd'hui, la controverse à ce sujet existe encore et les deux approches (semi-classique ou quantique) sont autant utilisées l'une que l'autre dans le traitement numérique des structures à puits quantiques.

Grâce à l'accroissement de la capacité de calcul des ordinateurs, la modélisation numérique atteint des objectifs de plus en plus difficiles et donne des résultats qui s'accordent de plus en plus aux mesures expérimentales. La méthode la plus répandue pour la simulation des dispositifs électroniques est basée sur les équations de diffusion-entraînement qui approximent l'équation de transport de Boltzmann. L'approximation de diffusion-entraînement a un domaine d'application très large grâce à la facilité d'implémentation dans un calcul numérique. Cette technique est utilisée dans des modèles uni- et bi-dimensionnels de différents types de transistors à effet de champ, de transistor à électrons de haute mobilité et de diode à effet Gunn. Les premières applications de cette technique pour simuler des diodes laser ont été faites par Wilt et Yariv (1981), Kumar, Ormondroyd et Rozzi (1986), Othoshi et collab. (1987) et Kahen (1988). Plus tard, Tessler et Eisenstein (1993) ont développé un modèle incluant les équations de Poisson et de Schrödinger pour tenir compte des interactions électron-trou.

Un défi majeur pour les méthodes numériques est la modélisation des effets des porteurs chauds et des effets non locaux comme le phénomène du dépassement de vitesse (*velocity overshoot*) qui a lieu dans les régions à champ fort. En effet, l'approximation de diffusion-entraînement suppose en général que le système se trouve à une température constante et que la distribution en énergie des porteurs est proche de la distribution de l'équilibre thermodynamique. Or, dans les puits quantiques d'une structure laser, le champ électrique local devient très fort. Ceci cause un

échauffement et une variation d'énergie considérable des porteurs. Bien qu'utilisées largement, les équations de diffusion-entraînement peuvent donc induire des erreurs dans la simulation des structures à puits quantiques multiples, dont les conséquences ne sont pas bien connues. La modélisation des effets non-stationnaires d'une manière plus fondamentale est possible en générant des fonctions de distribution dans le temps et dans l'espace de phase par la simulation directe des trajectoires des particules. Cette méthode est connue sous le nom de méthode Monte Carlo (Jacoboni et Lugli, 1986) et elle est équivalente à résoudre l'équation de transport de Boltzmann.

La méthode Monte Carlo, première fois utilisée par Lord Kelvin pour étudier le mouvement moléculaire, a trouvé sa forme actuelle dans les travaux de Fermi, Von Neumann et Ulam pendant la construction de la première bombe atomique. Ses domaines d'application vont de la physique de phase liquide-solide à l'astrophysique (Hockney et Eastwood, 1988). La première application de la méthode aux dispositifs à semi-conducteur a été réalisée par Kurosawa (1966). Dans les années 1980, le confinement quantique a été abordé comme application (Price, 1981; Ridley, 1982; Yokoyama et Hess, 1986). Ces dernières années, quelques travaux de recherche ont été effectués pour étudier le temps de capture et le temps de montée de la luminescence dans les puits quantiques par la méthode Monte Carlo (Goodnick et Lugli, 1988; Stanton et collab., 1988; Lam et Singh, 1993; Abou-Khalil et collab., 1996; Abou-Khalil et collab., 1997). Lam et Singh (1994) ont simulé les effets de compression de gain par la technique Monte Carlo combinée avec des calculs de gain optique dans les lasers à puits quantiques. Récemment, Alam et Lunsdtrom (1997) ont utilisé une approche de matrice de transition en résolvant le système couplé d'électron, de photon et de phonon, pour étudier l'échauffement des porteurs dans un laser. Crow et Abram (1997) ont développé une méthode Monte Carlo où ils ont considéré un temps de capture phénoménologique.

Ce travail aborde le traitement numérique des structures à puits quantiques multiples pour étudier les processus physiques impliqués, notamment le transport, la relaxation des porteurs chauds, la capture et la recombinaison, en se servant des outils de modélisation numérique (simulateur Monte Carlo, simulateur de diffusion-entraînement) existant au Laboratoire d'optoélectronique du département de génie physique de l'École Polytechnique de Montréal. Les objectifs principaux sont de mettre en évidence les limites et la validité de l'approche de diffusion-entraînement par comparaison avec la méthode Monte Carlo et d'étudier des phénomènes mal connus tels que l'effet des interactions électron-électron et de l'écrantage des phonons optiques polaires sur le transport dans une approche semi-classique. Une contribution importante de ce travail a été l'inclusion de la recombinaison spontanée et Auger dans la méthode Monte Carlo, ce qui, à notre connaissance, n'a jamais été fait auparavant. Nous proposons également une méthode de calcul de spectres de photoluminescence en utilisant les résultats des simulations Monte Carlo, qui nous permet de comparer les résultats théoriques aux résultats expérimentaux.

Au chapitre 1, nous rappelons brièvement certaines notions de base de la théorie des semi-conducteurs, notamment le transport semi-classique, les équations de diffusion-entraînement, la méthode Monte Carlo, les transitions optiques et la méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ pour le calcul de bande.

Le chapitre 2 est consacré à la description du modèle et de l'algorithme utilisés pour inclure la recombinaison Auger et la recombinaison radiative dans le simulateur Monte Carlo. Ensuite, nous appliquons notre modèle à un cas simple pour tester sa validité.

Au chapitre 3, nous abordons le traitement des structures à puits quantiques mul-

tiples. L'objectif principal de ce chapitre est de faire une comparaison entre l'approche Monte Carlo et le modèle de diffusion-entraînement, afin de voir les limites de ce dernier. Cette étude se fait en deux étapes: nous commençons d'abord par le cas d'un laser à l'équilibre où nous comparons les distributions en densité et en énergie des porteurs dans la région active, obtenues par les deux méthodes. Ensuite, nous étudions le cas d'une injection optique où les porteurs sont fortement hors-équilibre. Nous comparons les densités de porteurs, les taux de capture et de recombinaison en fonction du temps obtenus par les deux méthodes. Dans chacun des cas, nous étudions également l'effet des interactions porteur-porteur et de l'écrantage des phonons optiques polaires sur la distribution et le transport des porteurs.

Les résultats des simulations Monte Carlo d'une expérience réelle de photoluminescence résolue dans le temps réalisée par le groupe de recherche d'optoélectronique du département de génie physique, sont présentés au chapitre 4. Nous commençons par une étude détaillée des effets des interactions porteur-phonon écrantées et porteur-porteur dans la région active de la structure à puits quantiques multiples. Ensuite, nous abordons l'étude de la capture et de la recombinaison dans les puits. Finalement, nous calculons les spectres de photoluminescence à partir des résultats Monte Carlo afin de les comparer aux résultats expérimentaux.

Le chapitre 5 est consacré à l'étude de la structure de bande et des éléments de matrice optique des structures étudiées aux chapitres précédents. Nous présentons d'abord la méthode de solution qui est basée sur un modèle $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$. Par la suite, nous étudions les niveaux quantifiés et la force de l'oscillateur des transitions optiques dans les puits. Ceci nous permet de traiter la région de basse énergie des spectres de photoluminescence expérimentaux qui ne peut être expliquée par l'approche Monte Carlo semi-classique.

CHAPITRE 1

Rappels de la théorie des semi-conducteurs

1.1 Introduction

La physique des dispositifs à semi-conducteurs peut être basée sur des concepts très simples tels que les équations de Newton, mais aussi, sur des phénomènes plus complexes où la mécanique quantique entre en jeu. Particulièrement dans les dispositifs électroniques modernes, les notions classiques comme la diffusion ou l'entraînement s'appliquent aussi bien que les notions quantiques comme la structure de bande et la localisation. Il faut alors souvent recourir aux expériences pour juger à quel point la physique impliquée doit être complexe et pour déterminer les bonnes approximations à faire.

Le but de ce chapitre n'est évidemment pas de présenter une théorie complète des semi-conducteurs mais de souligner certains aspects de cette théorie sur lesquels les méthodes utilisées dans ce mémoire sont basées, tout en mettant l'accent sur les approximations en jeu: en quoi consiste l'approximation de diffusion-

entraînement? Comment la mécanique quantique intervient-elle dans le modèle Monte Carlo? Quelles approximations peut-on utiliser pour traiter les transitions induites par la lumière? Dans les prochains chapitres, nous nous référerons souvent aux approximations et aux équations présentées dans ce chapitre.

1.2 Transport électronique

1.2.1 Modèle semi-classique

Le modèle semi-classique prédit comment la position $\mathbf{r}$ et le vecteur d'onde $\mathbf{k}$ de chaque électron évolue dans le temps sous l'effet des forces externes et en absence des collisions. Cette prédiction est basée sur la connaissance de la structure de bande du semi-conducteur, c'est-à-dire la relation de dispersion entre l'énergie ε et le vecteur d'onde $\mathbf{k}$. Le but du modèle est donc de relier la structure de bande aux propriétés de transport des porteurs de charge.

Dans l'approche semi-classique, on associe à chaque électron une position $\mathbf{r}$, un vecteur d'onde $\mathbf{k}$ et un indice de bande n qui, sous la présence d'un champ électrique $\mathbf{E}$ (nous négligeons le champ magnétique dans ce travail), obéissent aux règles suivantes (Ashcroft et Mermin, 1976):

- (i) L'indice de bande n est une constante du mouvement. Le modèle semi-classique ignore la possibilité des transitions interbande (cependant, nous verrons plus tard que l'approche Monte Carlo permet de traiter ces transitions).
- (ii) L'évolution de la position et du vecteur d'onde de l'électron est déterminée par

les équations de Newton modifiées:

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{r}} &= \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{n\mathbf{k}}, \\ \hbar \dot{\mathbf{k}} &= -e\mathbf{E}(\mathbf{r}, t).\end{aligned}\tag{1.1}$$

(iii) Si $\mathbf{K}$ est un vecteur du réseau réciproque, l'état $(n, \mathbf{r}, \mathbf{k})$ et l'état $(n, \mathbf{r}, \mathbf{k} + \mathbf{K})$ sont deux façons équivalentes pour décrire le même électron. Cette règle est une reformulation de l'aspect de la théorie de Bloch quantique qui est retenu dans le modèle semi-classique.

Pour justifier ce modèle au point de vue de la mécanique quantique, l'électron de Bloch est décrit en termes de paquet d'ondes, en analogie avec le paquet d'ondes de l'électron libre:

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}'} g(\mathbf{k}') \psi_{n\mathbf{k}'} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_{n\mathbf{k}'} t\right),\tag{1.2}$$

$$g(\mathbf{k}') \approx 0 \text{ si } |\mathbf{k}' - \mathbf{k}| > \Delta k.$$

$\psi_{n\mathbf{k}'}$ est une fonction de Bloch qui satisfait la relation:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}),\tag{1.3}$$

où $u_{n\mathbf{k}}$ a la périodicité du réseau. La largeur du paquet d'ondes Δk doit être petite comparée aux dimensions de la zone de Brillouin pour que l'énergie de l'électron soit bien définie. Ceci est équivalent à dire que la largeur de l'électron ΔR dans l'espace $\mathbf{r}$, doit être plus grande que le pas du réseau. En outre, pour que le champ électrique puisse être traité classiquement, sa longueur d'onde doit être beaucoup plus grande que ΔR . Cependant, le champ périodique dû aux ions varie rapidement comparé aux dimensions du paquet d'ondes et doit être traité quantiquement.

1.2.2 Approximation de diffusion-entraînement

Pour caractériser complètement l'opération d'un dispositif à semi-conducteurs, nous devons en principe résoudre les équations (1.1) pour chaque électron, ce qui est une tâche extrêmement laborieuse. Alternativement, nous pouvons calculer la probabilité de trouver le porteur avec un vecteur d'onde $\mathbf{k}$, à une position $\mathbf{r}$ et au temps t . Cette probabilité, à partir de laquelle on peut déduire des quantités telles que la densité de porteurs, de courant ou de l'énergie, est appelée la fonction de distribution $g(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$. Notons que, à l'équilibre thermique, la fonction de distribution devient simplement la distribution de Fermi-Dirac:

$$f(\varepsilon_{\mathbf{n}\mathbf{k}}) = \frac{1}{e^{(\varepsilon_{\mathbf{n}\mathbf{k}} - \mu)/k_B T} + 1}. \quad (1.4)$$

À partir des équations (1.1), nous pouvons démontrer que $g(\mathbf{k}, \mathbf{r}, t)$ obéit à la relation suivante (Ashcroft et Mermin, 1976):

$$\frac{\partial g}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} g + (-e\mathbf{E}) \cdot \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} g = \left(\frac{\partial g}{\partial t} \right)_{coll} + s. \quad (1.5)$$

C'est l'équation de transport de Boltzmann bien connue qui est au coeur de la théorie du transport dans les solides. Dans cette relation, s est un terme de génération-recombinaison. Le premier terme du membre de droite dépend des différents processus de collision subis par les porteurs et est donné par

$$\left(\frac{\partial g}{\partial t} \right)_{coll} = - \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} [W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} g(\mathbf{k})(1 - g(\mathbf{k}')) - W_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} g(\mathbf{k}')(1 - g(\mathbf{k}))] \quad (1.6)$$

où $W_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ est une probabilité de transition due aux collisions qui est en général calculée par la règle d'or de Fermi. C'est donc un autre aspect quantique qu'on ajoute au modèle semi-classique. Notons que la validité de l'équation de Boltzmann implique 3 approximations importantes: i) les collisions sont instantanées, ii) les probabilités

de collisions sont indépendantes des forces externes et iii) les interactions porteur-porteur sont négligées.

L'équation de transport de Boltzmann est une équation intégral-différentielle qui contient 7 variables indépendantes extrêmement difficile à résoudre sauf pour des cas particuliers. Cependant il existe des nombreuses techniques visant à simplifier cette équation afin d'extraire de l'information sur la fonction de distribution. La technique la plus populaire pour simuler des dispositifs à semi-conducteurs est l'approximation de diffusion-entraînement. Plusieurs références existent sur la dérivation de ce modèle (Selberherr, 1984; Lundstrom, 1990). Ici, nous nous contentons de donner les équations de diffusion-entraînement et les approximations utilisées pour les obtenir. Ces équations sont

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_n &= en\mu_n\mathbf{E} + eD_n \nabla n \\ \mathbf{J}_p &= ep\mu_p\mathbf{E} - eD_p \nabla p\end{aligned}\tag{1.7}$$

où $\mathbf{J}$ est la densité de courant, μ est la mobilité des porteurs. D est la constante de diffusion donnée par les équations d'Einstein. n et p représentent la densité des électrons et des trous, respectivement. À ces équations, nous devons ajouter les équations de continuité:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{J}_n - e \frac{\partial n}{\partial t} &= -e(R_{rec} - R_{gen}) \\ \nabla \cdot \mathbf{J}_p + e \frac{\partial p}{\partial t} &= e(R_{rec} - R_{gen})\end{aligned}\tag{1.8}$$

où R_{rec} et R_{gen} sont des termes de recombinaison et de génération.

Pour obtenir les équations (1.7), plusieurs approximations importantes doivent être faites (Selberherr, 1984):

(i) les processus de collisions inélastiques comme la diffusion par les phonons optiques, sont négligés;

- (ii) la variation temporelle et spatiale de la température des porteurs est négligée. c'est-à-dire que les porteurs se trouvent toujours à la température du réseau;
- (iii) la variation spatiale du temps de collision est négligée;
- (iv) on suppose que les bandes d'énergie sont paraboliques;
- (v) on suppose que le dispositif est infiniment large. L'approximation devrait donc échouer près des interfaces et des contacts.

Nous verrons plus tard que surtout les deux premières approximations mentionnées ci-dessus peuvent induire de sérieuses erreurs dans l'étude des phénomènes tels que la capture et les porteurs chauds. Il est alors nécessaire d'élaborer des méthodes plus sophistiquées pour la simulation des dispositifs à semi-conducteurs. Depuis plusieurs décennies, une approche équivalente à la résolution de l'équation de Boltzmann a été mise au point: la méthode Monte Carlo qui devient de plus en plus populaire car elle traite directement, et donc d'une façon plus précise, la physique microscopique du transport.

1.2.3 Méthode Monte Carlo

L'idée générale du simulateur Monte Carlo pour modéliser des dispositifs à semi-conducteurs est d'étudier la dynamique des porteurs de charge pendant leur déplacement. Ce déplacement comprend deux étapes successives: le mouvement sous l'effet des forces externes, c'est-à-dire le libre parcours, et la réaction du porteur aux interactions physiques dans le matériau, soit la diffusion. De plus, le mouvement des porteurs influe sur la distribution du potentiel dans le dispositif à cause du champ coulombien. On effectue alors un calcul auto-consistant entre la résolution de l'équation de Poisson et la simulation Monte Carlo.

Dans un dispositif à semi-conducteurs, le nombre de porteurs de charge s'élève à 10^{18} cm^{-3} . Or, suivre les coordonnées (position, vecteur d'onde, énergie, bande etc.) d'un tel nombre de particules requiert des ressources informatiques inaccessibles. On emploie alors un nombre déterminé de particules simulées qui peut varier entre 10^4 et 10^5 . Ces particules fictives s'appellent superparticules et se différencient des vrais porteurs par leur charge électronique.

Durant leur parcours, les porteurs peuvent subir plusieurs types d'interactions (émission et absorption des phonons optiques et accoustiques, diffusion par les impuretés ionisées etc.). Comme dans l'équation de transport de Boltzmann, nous supposons que les collisions sont instantanées et leurs probabilités sont indépendantes des forces externes. Cependant, dans l'approche Monte Carlo, nous pouvons tenir compte des interactions porteur-porteur, ce qui n'est pas possible avec l'équation de Boltzmann.

Le taux de collision pour chaque type de diffusion est calculé par la règle d'or de Fermi qui donne la probabilité de transition W_{if} d'un état initial $|n_i, \mathbf{k}_i\rangle$ à un état final $|n_f, \mathbf{k}_f\rangle$ (les transitions interbandes sont donc permises dans ce modèle):

$$W_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n_f, \mathbf{k}_f | H | n_i, \mathbf{k}_i \rangle|^2 \delta[\varepsilon_{n_f, \mathbf{k}_f} - \varepsilon_{n_i, \mathbf{k}_i} \pm \Delta\varepsilon] \quad (1.9)$$

où H représente l'Hamiltonien de l'interaction du processus de diffusion et

$$\langle \mathbf{r} | n, \mathbf{k} \rangle \equiv \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.10)$$

En intégrant $W_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_f}$ sur tous les états finaux $\mathbf{k}_f$, nous obtenons le taux de diffusion $1/\tau(\mathbf{k})$ pour chaque type de collision. La durée du parcours libre t_c est alors calculée par un choix des nombres aléatoires en utilisant la relation (Lundstrom, 1990)

$$t_c = -\tau_{tot} \ln(r) \quad (1.11)$$

où $1/\tau_{tot}$ est le taux de collision total et r est un nombre aléatoire entre 0 et 1. Pendant leur parcours libre, les particules obéissent aux équations du mouvement

semi-classique (1.1) avec une masse effective bien déterminée. À la fin du parcours libre, le choix du mécanisme de diffusion que le superporteur doit subir se fait de nouveau par un choix des nombres aléatoires, puis l'énergie et le vecteur d'onde de la particule sont modifiés en conséquence.

La qualité du simulateur dépend du réalisme de la physique qui est incluse. En particulier, la structure de bande et les mécanismes de diffusion sont importants. Le simulateur que nous utilisons est décrit ailleurs (Abou-Khalil, 1996) et permet des simulations bi-dimensionnelles dans les matériaux III-V de structure cristalline zinc-blende. Il incorpore trois bandes de conduction (Γ , L et X) dans une approximation de bandes non-paraboliques, et trois bandes de valence (les trous lourds, les trous légers et les trous *split-off*) dans l'approximation de bandes paraboliques. Les mécanismes de diffusion qu'on retrouve dans le simulateur sont basés sur les diffusions par les phonons optiques et accoustiques (interbande et intrabande), par les impuretés, par le potentiel aléatoire des alliages et porteur-porteur de courte portée. En particulier, les effets des interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons optiques polaires dans les dispositifs à hétérostructure ne sont pas bien connus et sont étudiés en détail dans ce travail. Une autre contribution de ce mémoire a été l'inclusion de la recombinaison radiative et non-radiative dans le simulateur Monte Carlo qui sera traitée au chapitre suivant.

1.3 Transitions optiques

1.3.1 Hamiltonien de l'interaction électron-lumière

Pour décrire le champ électromagnétique, nous introduisons un vecteur potentiel $\mathbf{A}$ dont le choix n'est pas unique. Dans la jauge de Coulomb, c'est-à-dire $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, le champ électrique $\mathbf{E}$ et le champ magnétique $\mathbf{B}$ sont reliés à $\mathbf{A}$ par

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad ; \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (1.12)$$

Physiquement, ce choix correspond à une onde électromagnétique transverse avec

$$\mathbf{A} = A_o \hat{\mathbf{e}}_\lambda \cos(\omega t - \mathbf{K}_\lambda \cdot \mathbf{r}) \quad (1.13)$$

où $\mathbf{K}_\lambda$ est le vecteur d'onde de la lumière, ω est la fréquence et $\hat{\mathbf{e}}_\lambda$ est un vecteur unitaire indiquant la polarisation.

L'Hamiltonienne d'un électron en présence d'un potentiel vecteur s'écrit

$$H = \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (1.14)$$

où $\mathbf{p}$ est la quantité de mouvement généralisée. Pour une onde suffisamment faible, après avoir développé l'équation (1.14), on peut éliminer le terme en A^2 . De plus, la jauge de Coulomb implique que $\mathbf{p}$ commute avec $\mathbf{A}$. On obtient alors

$$H = H_o + H_{e\lambda}(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (1.15)$$

où H_o est l'Hamiltonien du cristal dont les états propres sont les fonctions de Bloch et $H_{e\lambda}$ est l'Hamiltonien de l'interaction électron-photon donné par

$$H_{e\lambda} = -\frac{i\hbar e A_o}{2m} e^{i\mathbf{K}_\lambda \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}}_\lambda \cdot \nabla \quad (1.16)$$

Dans l'équation (1.15), le terme $e^{i\omega t}$ correspond au processus de l'absorption tandis que le terme $e^{-i\omega t}$ correspond à l'émission stimulée.

1.3.2 Matrice optique

L'équation (1.16) est souvent écrite sous la forme

$$H_{e\lambda} = \frac{eA_o}{2m} M \quad (1.17)$$

où M est appelé la *matrice optique* qui, dans l'approximation dipolaire électrique ($e^{i\mathbf{K}\lambda\cdot\mathbf{r}} \approx 1$), est donnée par

$$M = \hat{\mathbf{e}}_\lambda \cdot \mathbf{p}. \quad (1.18)$$

On peut démontrer que les éléments de matrice optique peuvent s'écrire sous la forme (Yu et Cardona, 1996)

$$|M_{fi}|^2 = \delta(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i) |P_{fi}|^2 \quad (1.19)$$

avec

$$|P_{fi}|^2 \equiv \left(\int_{\Omega} u_{n_i, \mathbf{k}_i}^* \hat{\mathbf{e}}_\lambda \cdot \mathbf{p} u_{n_f, \mathbf{k}_f} d\mathbf{r} \right)^2 \quad (1.20)$$

où Ω est le volume d'une maille élémentaire. Dans la relation (1.19), $\delta(\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i)$ implique la conservation de $\mathbf{k}$. Cependant, dans les semi-conducteurs à haute concentration de dopant ou sous forte injection, la densité d'états peut être modifiée (Agrawal et Dutta, 1993). Dans ces cas, la conservation de $\mathbf{k}$ ne s'applique pas. De plus, dans les matériaux III-V de structure cristalline zinc-blende, les $|P_{fi}|^2$ ne dépendent pas fortement de $\mathbf{k}$ (Yu et Cardona, 1996) et ils sont considérés constants dans la plupart des cas.

1.3.3 Taux de transition

Pour obtenir le taux de transition total, nous devons utiliser la règle d'or de Fermi avec la partie indépendante du temps de l'Hamiltonien de perturbation donnée par

l'équation (1.16). Dans l'approche semi-classique (le champ électromagnétique non-quantifié) que nous avons adoptée pour traiter l'interaction lumière-matière, le taux de transition s'annule quand $|A_o|^2$ s'approche de zéro. Or, on peut facilement démontrer (voir par exemple Bebb et Williams, 1972) que $|A_o|^2$ est proportionnel au nombre d'occupation des photons N . Les résultats de l'électrodynamique quantique montrent que la probabilité de l'émission est plutôt proportionnelle à $N + 1$. Donc, des photons peuvent être émis (l'émission spontanée) même si le champ électromagnétique appliqué est zéro.

En incorporant le résultat quantique correct dans la règle d'or de Fermi, nous obtenons le taux d'émission spontanée donné par (Agrawal et Dutta, 1993):

$$r_{sp} = \frac{4\pi e^2 \bar{\mu} \hbar \omega}{m^2 \epsilon_0 c^3 \hbar^2} |M_{if}|^2 \delta(\epsilon_i - \epsilon_f - \hbar \omega) \quad (1.21)$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide, $\bar{\mu}$ est l'indice de réfraction. Pour calculer le taux d'émission spontanée total par unité de volume entre une bande de conduction c et une bande de valence v , nous devons intégrer l'équation (1.21) sur tous les états possibles en tenant compte de la probabilité qu'un électron et un trou existent:

$$R(\hbar \omega) = \frac{4\pi e^2 \bar{\mu} \hbar \omega}{m^2 \epsilon_0 c^3 \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_c(\epsilon_c) g_c(\epsilon_c) \rho_v(\epsilon_c - \hbar \omega) g_v(\epsilon_c - \hbar \omega) |M_{vc}|^2 d\epsilon_c \quad (1.22)$$

où ρ est la densité d'états, g est la fonction de distribution. Dans le chapitre 4, nous évaluerons cette intégrale numériquement pour calculer le spectre de photoluminescence d'une structure à puits quantiques multiples. Notons toutefois qu'il est possible d'obtenir une expression analytique en effectuant l'intégration sur la variable $\mathbf{k}$ plutôt que la variable ϵ tout en tenant compte de l'équation (1.19). Mais paradoxalement, l'équation (1.22) est plus commode dans notre cas, car une intégration négligeant la dépendance en $\mathbf{k}$ de M_{fi} permet de moyenner le bruit statistique des fonctions de distribution provenant des calculs Monte Carlo.

De la même façon, nous pouvons obtenir une expression pour le taux d'absorption total. Mais cette fois, il est préférable d'intégrer sur la variable $\mathbf{k}$. Nous obtenons alors (Singh, 1993)

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 \hbar}{m^2 \epsilon_0} \frac{1}{\hbar\omega} |P_{cv}|^2 \mathcal{D}(\hbar\omega - \varepsilon_g) N \quad (1.23)$$

où $\mathcal{D}$ est la densité d'états conjointe et ε_g est l'énergie du gap. Cette expression sera utilisée plus tard dans les simulations Monte Carlo pour le calcul du nombre relatif d'électrons et de trous excités dans chaque bande après une injection optique.

1.4 Calcul de bande par la méthode $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$

Plusieurs modèles existent pour le calcul de structure de bande des matériaux à semi-conducteur. Les méthodes les plus répandues sont: 1) la méthode du pseudo-potentiel (Cohen et Bergstresser, 1966) qui consiste à supposer que les électrons sont presque libres et que leur fonction d'onde peut être approximée par une onde plane; 2) la combinaison linéaire des orbitales atomiques (Chelikowsky, Chadi et Cohen, 1973) qui, au contraire de la méthode du pseudo-potentiel, suppose que les électrons sont fortement liés à leur noyau et que leurs fonctions d'onde se chevauchent; 3) la méthode $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ (Kane, 1957) fondée sur un calcul perturbatif visant à développer la structure de bandes autour d'un extremum, généralement le point Γ . Cette dernière méthode utilise les $|P_{fi}(\mathbf{k} = 0)|^2$ déterminés par les expériences optiques comme paramètres initiaux. La structure de bande et les éléments de matrice optique peuvent alors être extrapolés pour toute la zone de Brillouin. Pour cette raison, la méthode $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ est particulièrement avantageuse dans l'interprétation des spectres optiques.

Le modèle $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ peut être déduit de l'équation de Schrödinger dans les approximations de Born-Oppenheimer et l'électron libre (voir par exemple Yu, 1996):

$$\left(\frac{p^2}{2m_o} + V(\mathbf{r}) \right) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{n\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.24)$$

où $V(\mathbf{r})$ est le potentiel périodique du cristal. En insérant l'équation (1.3) dans l'équation (1.24) nous obtenons

$$H u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.25)$$

où

$$H = \frac{p^2}{2m_o} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_o} + \frac{\hbar}{m_o} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$$

À ceci, on ajoute l'Hamiltonien de l'interaction spin-orbite donné par

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4m_o^2 c^2} (\nabla V) \times \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{\hbar^2}{4m_o^2 c^2} (\nabla V) \times \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma}$$

où les $\boldsymbol{\sigma}$ sont les matrices de Pauli. Grâce à un traitement perturbatif, on peut résoudre l'équation (1.25) près de $\mathbf{k} = 0$ en choisissant une base appropriée pour l'Hamiltonien. Plusieurs méthodes existent pour ce traitement, notamment le modèle de Kane à huit bandes (1982), qui assure le couplage entre les bandes de trous lourds, de trous légers, de trous *split-off* et de conductions, incluant les contributions de deux états de spin. L'Hamiltonien est alors une matrice 8×8 et l'équation (1.25) est transformée en un système de huit équations différentielles couplées. Lorsque la bande interdite ou l'écart spin-orbite deviennent très grands, l'Hamiltonien peut être réduit à une matrice 4×4 ou 6×6 (Luttinger 1955, 1956). Dans ce cas, les solutions pour les électrons de conduction et pour les trous *split-off* sont obtenues en résolvant l'équation de Schrödinger dans l'approximation monobande de la masse effective.

Dans les hétérostructures InGaAsP/InP à puits quantiques contraints, le couplage entre les huit vecteurs de la base n'est pas négligeable (Reid, 1997). Pour cette

raison. nous suivrons le modèle décrit par Bahder (1990) qui utilise huit fonctions de Bloch pour base, tenant compte du couplage dû aux contraintes mécaniques. L'application de la méthode **k·p** au calcul de bande et des éléments de matrice optique des hétérostructures à puits quantiques multiples sera traitée au chapitre 5.

CHAPITRE 2

Modélisation de la recombinaison par la méthode Monte Carlo

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous décrivons une nouvelle méthode pour inclure dans le simulateur Monte Carlo, les recombinaisons radiative et Auger, qui sont indispensables pour l'étude du transport de porteurs hors-équilibre et de la photoluminescence dans les structures à puits quantiques. Pour vérifier la validité de notre algorithme de recombinaison, nous l'appliquerons à un cas simple d'un matériau massif. Le traitement des structures à puits quantiques sera présenté aux chapitres 3 et 4.

2.2 Modèle de recombinaison

Les mécanismes de recombinaison peuvent être classifiés en deux groupes, recombinaisons radiatives (spontanée ou stimulée) et non-radiatives. Les mécanismes non-radiatifs incluent, entre autres, la recombinaison par les défauts, la recombinaison de

surface et la recombinaison Auger. Cependant, pour les lasers à semi-conducteurs InGaAsP/InP, le processus Auger est le mécanisme non-radiatif prédominant (Uji et collab., 1983). Dans ce travail, nous tenons compte de 3 processus de recombinaison: 1) la recombinaison spontanée d'un électron et d'un trou, 2) le processus Auger CCHC qui fait intervenir deux électrons et un trou lourd à l'état initial, un électron excité dans la bande de conduction et 3) le processus Auger CHHS qui fait intervenir un électron et deux trous lourds à l'état initial et un trou excité dans la bande *split-off*.

En principe, le taux de recombinaison spontanée total peut être calculé en intégrant l'équation (1.22) sur toutes les énergies. Mais ceci nécessiterait un temps de calcul énorme pour pouvoir être utilisé dans le simulateur Monte Carlo, car il faudrait alors déterminer la distribution des porteurs et effectuer l'intégration double des milliers de fois durant la simulation. Nous avons donc choisi un modèle plus simple qui approxime le taux de recombinaison spontanée par (Bebb et Williams, 1972)

$$R_{sp} = Bnp \quad (2.1)$$

où B est le coefficient de recombinaison spontanée. Plusieurs études expérimentales ont été faites pour déterminer le coefficient B . La valeur généralement acceptée est approximativement $1 \times 10^{-10} \text{ cm}^3\text{s}^{-1}$ (Uji et collab., 1983; Olshansky et collab., 1987; Wintner et Ippen, 1984).

Pour inclure la recombinaison Auger, nous suivons le modèle décrit par Olshansky et collab. (1984). Le taux de recombinaison total, c'est-à-dire le nombre de paires d'électron-trou recombinées par unité de temps est alors donné par

$$R_{rec} = Bnp + C_1 n^2 p + C_2 np^2 \quad (2.2)$$

où C_1 et C_2 sont les coefficients Auger pour les processus CCHC et CHHS, respec-

tivement. Les valeurs expérimentales divergent considérablement selon les auteurs. et varient entre 0.1 et $2 \times 10^{-28} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ (Uji et collab., 1983; Olshansky et collab., 1984; Olshansky et collab., 1987; Wintner et Ippen, 1984; Hausser et collab., 1990; Fuchs et collab., 1993; Wang et collab., 1995).

2.3 Algorithme de Monte Carlo

Pour inclure la recombinaison dans le simulateur Monte Carlo, nous utilisons la forme discrétisée de l'équation du taux de recombinaison:

$$R_i(\bar{n}_i, \bar{p}_i) = \frac{\Delta \bar{n}_i}{\Delta t} = \frac{\Delta \bar{p}_i}{\Delta t} \quad (2.3)$$

où $\bar{n}_i$ est la densité moyenne d'électrons dans la couche i . La relation entre le nombre de superparticules N_i et $\bar{n}_i$ est donnée par

$$N_i = \frac{e}{S_e} \bar{n}_i V_i \quad (2.4)$$

où S_e est la supercharge, e est la charge élémentaire et V_i est le volume de la i^{e} couche.

Notons que, dans l'équation (2.3), nous avons utilisé 2 approximations. La première provient de la discrétisation dans le temps. Pour avoir des résultats valables, Δt doit être choisi tel que le nombre de superparticules à enlever par itération soit près de 1. La deuxième approximation provient de ce que des valeurs moyennes sont utilisées pour les densités de porteurs. Donc, les densités de porteurs dans une couche ne doivent pas varier beaucoup en fonction de la position. Cette condition est satisfaite dans les structures que nous étudions car la recombinaison est importante surtout dans les puits quantiques où la densité de porteurs est uniforme.

Les étapes de l'algorithme sont schématisées dans l'organigramme de la figure 2.1. Pour chaque pas de temps Δt , le nombre de superparticules dans la couche i est compté afin de calculer $\bar{n}_i$ et $\bar{p}_i$ par l'équation (2.4) et $R_i(\bar{n}_i, \bar{p}_i)$ par l'équation (2.3). Ensuite, les équations (2.2) et (2.4) sont utilisées pour déterminer le nombre de superparticules ΔN_i à être recombinaisonnées dans chaque région. Il est clair que ΔN_i calculé n'est pas nécessairement un entier et il peut être inférieur ou supérieur à 1. La partie entière de ΔN_i donne le nombre de superparticules à enlever de la simulation. Alors, des superparticules choisies au hasard sont désactivées et le reste (ΔN_i calculé moins le nombre de superparticules désactivées) est accumulé pour le prochain pas de temps. Par exemple, si $\Delta N_i = 2.3$, nous enlevons 2 superparticules de la simulation et nous ajoutons 0.3 à ΔN_i à la prochaine étape.

Un pas de temps de 50 fs est en général suffisant pour simuler les structures étudiées dans ce travail. Ceci est beaucoup plus grand que le pas de temps utilisé pour l'itération du calcul de l'équation de Poisson et du champ électrique qui est de l'ordre de 0.2 fs. Le modèle nécessite donc peu de temps de calcul. En outre, il peut être généralisé à n'importe quel processus de recombinaison si la dépendance en densité de porteurs est connue, ce qui constitue un autre avantage. Toutefois, la dépendance explicite des mécanismes de recombinaison en énergie est négligée dans ce modèle.

2.4 Application à un cas simple

Dans cette section, nous appliquerons notre modèle de recombinaison à un cas très simple afin de tester la validité de l'algorithme et des approximations utilisées. Pour cela, nous avons choisi un matériau massique InP, dopé à $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $0.1 \mu\text{m}$ de

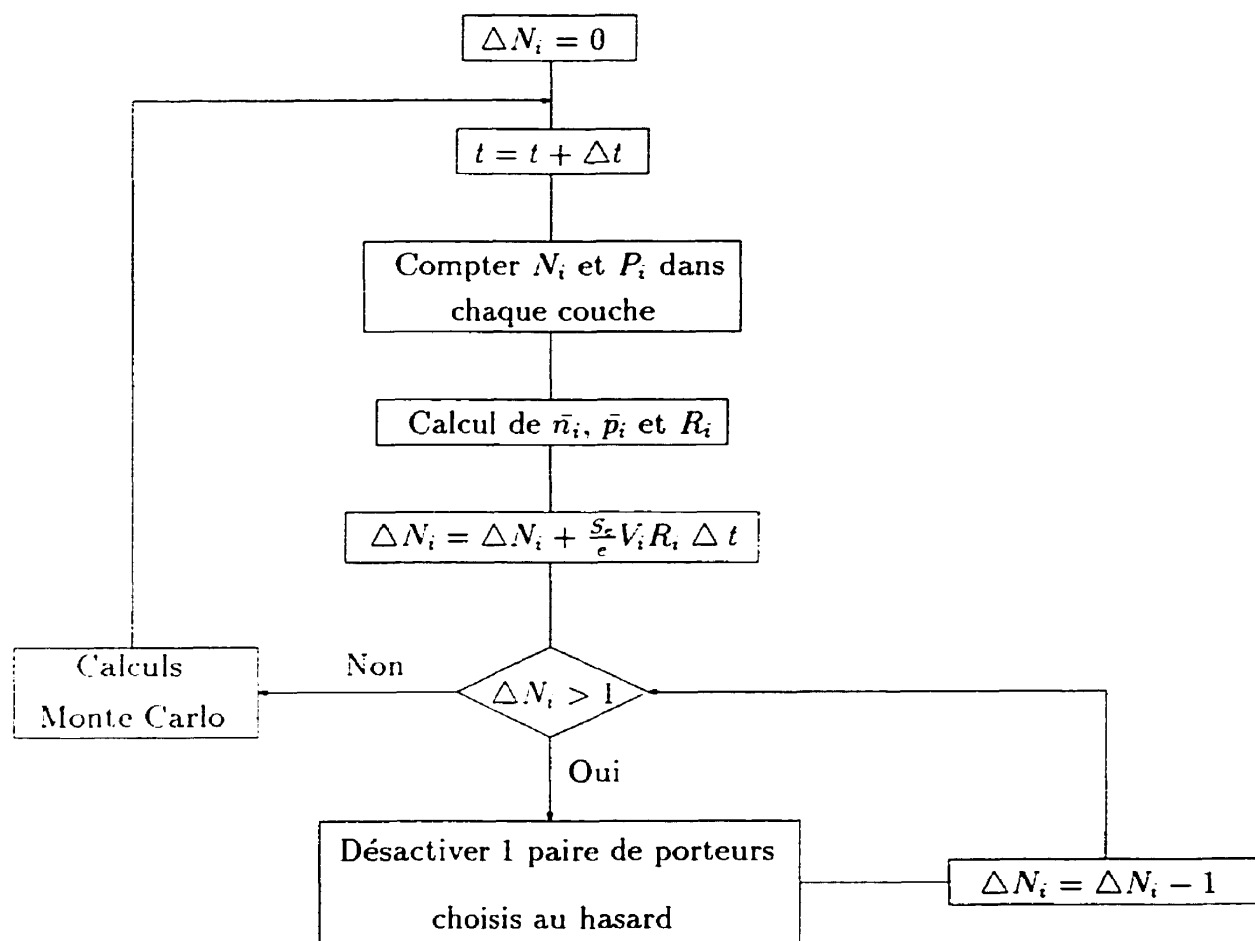


Figure 2.1 : Organigramme du code de la recombinaison de porteurs.

largeur et de hauteur. La densité initiale des trous et des électrons est de l'ordre de $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ respectivement. La constante de recombinaison radiative B a été fixée à $1 \times 10^{-8} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$ et les deux constantes de recombinaison Auger C_1 et C_2 ont été fixées à $1 \times 10^{-26} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$. Nous avons suivi l'évolution des densités de porteurs en fonction du temps jusqu'à 100 ps. Bien que ce cas ne corresponde pas à un problème physique intéressant, son avantage est que l'on peut comparer les résultats des simulations aux résultats obtenus par la résolution numérique directe des équations des taux de recombinaison.

La précision des résultats de Monte Carlo dépend de deux critères majeurs: 1) le nombre de superparticules choisi pour la simulation et 2) le pas de temps de recombinaison Δt . Dans les deux prochaines sous-sections, nous étudions l'effet de ces critères sur les résultats de la simulation.

2.4.1 Effet du nombre de superparticules

Nous avons effectué des simulations pour 3 cas. Dans le premier cas, le nombre total de superparticules était fixé à 5000 (3000 superélectrons et 2000 supertrous). Le deuxième et le troisième cas correspondent à un nombre total de 500 et de 100, respectivement. La supercharge des particules a été modifiée en conséquence pour avoir une même densité de porteurs initiale dans chaque simulation. Aux figures 2.2(a) et 2.2(b), nous présentons la densité de porteurs en fonction du temps pour les électrons et pour les trous. Les densités de porteurs obtenues par la résolution directe des équations de taux de recombinaison sont également présentées sur ces figures (courbe 1). L'accord obtenu entre le calcul Monte Carlo dans le cas où nous avons 5000 superparticules (présenté par la courbe 2) et la résolution numérique est

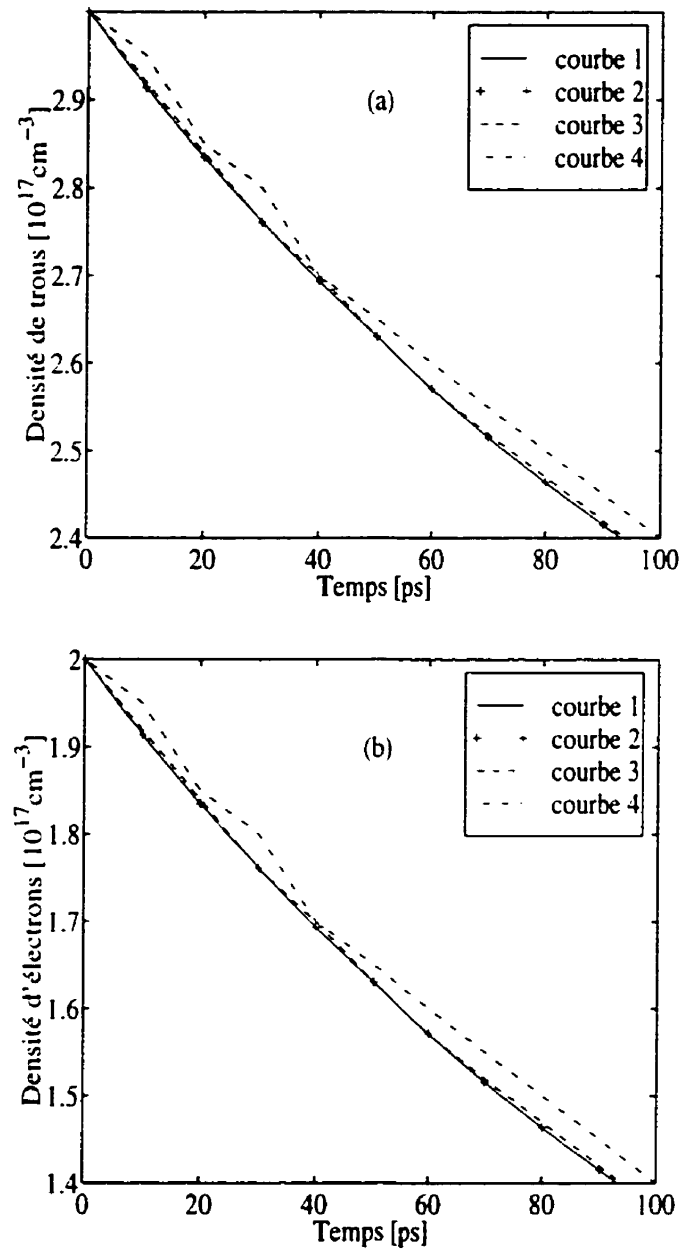


Figure 2.2 : Densité de porteurs en fonction du temps (a) pour les trous, (b) pour les électrons. Courbe 1, résolution numérique des équations de recombinaison; courbe 2, Monte Carlo avec 5000 superporteurs; courbe 3, Monte Carlo avec 500 superporteurs; courbe 4, Monte Carlo avec 100 superporteurs.

quasiment parfait, ce qui nous rassure pour la validité de notre algorithme. Cependant, dans une situation physique plus intéressante, comme les structures à puits quantique multiple que nous traiterons dans les prochains chapitres, le nombre de superparticules par puits varie entre 500 et 1000 pour achever des simulations dans un temps raisonnable. En examinant la courbe 3, au cas où nous avons 500 superporteurs, nous voyons que l'accord est encore excellent (d'environ 0.3%). Et finalement quand nous n'utilisons que 100 superporteurs (la courbe 4), l'erreur relative commise devient plus visible, de l'ordre de 2 %, ce qui est quand même acceptable.

2.4.2 Effet du pas de temps de recombinaison

Pour évaluer l'erreur commise due au pas de temps de recombinaison, nous avons considéré 3 cas pour lesquels le pas de temps était fixé à 0.01 ps, 0.1 ps et 1 ps. Dans ces conditions, au début de la simulation, le nombre de superparticules recombinaison est de l'ordre de 0.1, 1 et 10 respectivement. Dans chaque cas, le nombre de superparticules a été fixé à 500. La densité d'électrons en fonction du temps est présentée à la figure 2.3. Dans le cas où le pas de temps Δt est 0.1 ps (courbe 2), l'erreur relative maximale est de l'ordre de 0.5 %. Si on augmente Δt d'un facteur 10 (courbe 3), l'erreur relative est doublée. À la figure 2.4, nous présentons le taux de recombinaison radiative en fonction du temps. L'erreur relative évaluée est alors approximativement 1% pour $\Delta t = 0.1$ ps et 2% pour $\Delta t = 1$ ps.

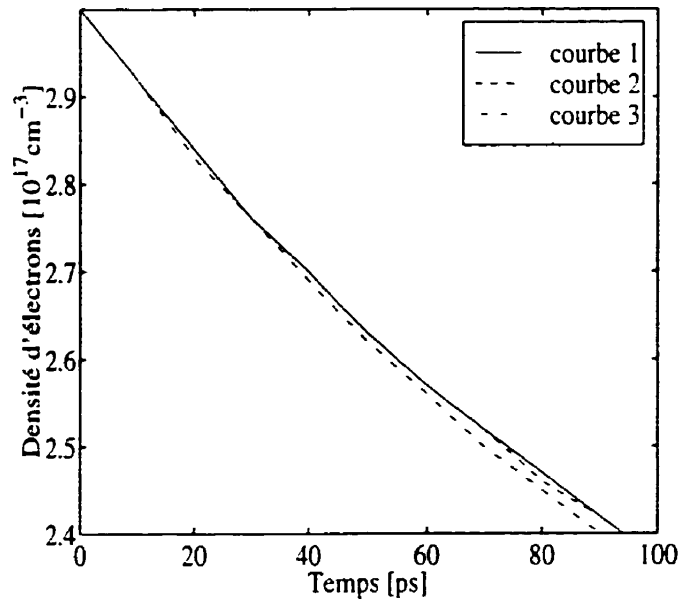


Figure 2.3 : Densité d'électron en fonction du temps. Courbe 1, $\Delta t = 0.01$ ps; courbe 2, $\Delta t = 0.1$ ps; courbe 3, $\Delta t = 1$ ps.

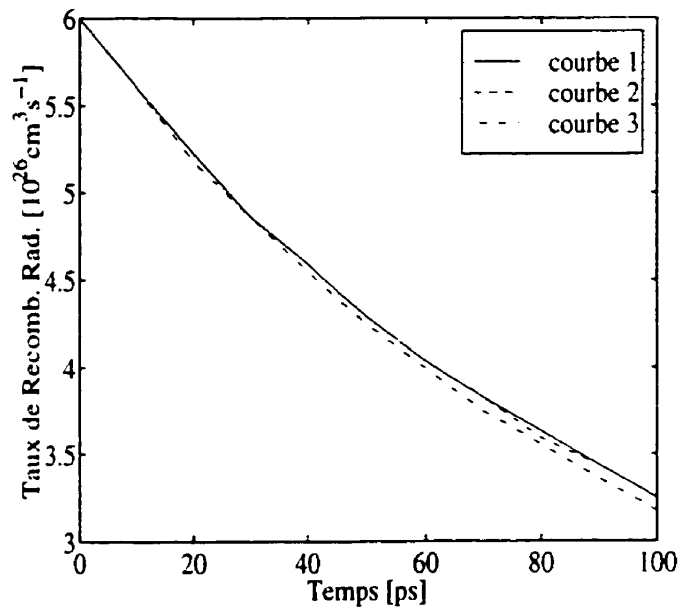


Figure 2.4 : Taux de recombinaison radiative en fonction du temps. Courbe 1, $\Delta t = 0.01$ ps; courbe 2, $\Delta t = 0.1$ ps; courbe 3, $\Delta t = 1$ ps.

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les modèles de recombinaison spontanée et Auger utilisés et nous avons décrit une méthode pratique pour implanter ces mécanismes dans le simulateur Monte Carlo. L'algorithme a deux avantages principaux: 1) il ne coûte pas cher au niveau du temps de simulation et 2) il peut facilement être généralisé pour d'autres mécanismes si la dépendance en densité de porteurs est connue.

Nous avons aussi démontré que les résultats de simulation sont en excellent accord avec les résultats obtenus par la résolution numérique des équations de taux de recombinaison. De plus, la précision des résultats n'est affectée que légèrement par le choix du nombre de superporteurs utilisés et du pas de temps de recombinaison. Dans les chapitres suivants, nous appliquerons notre méthode aux structures à puits quantiques multiples sous injection optique où la densité de porteurs est assez élevée pour que la recombinaison devienne importante.

CHAPITRE 3

Comparaison entre la méthode Monte Carlo et l'approximation de diffusion-entraînement

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous fournissons une première comparaison entre deux méthodes pour simuler des hétérostructures à puits quantiques. La première est l'approximation de diffusion-entraînement qui est la méthode la plus répandue. La deuxième est la méthode Monte Carlo qui devient de plus en plus populaire dans la simulation des hétérostructures. Dans un premier temps, nous décrivons les structures étudiées. Ensuite, nous étudions une diode laser à l'équilibre où nous négligeons la recombinaison. Finalement, nous traitons une structure laser sous injection optique. Dans ce cas, nous appliquons la méthode décrite au chapitre précédent pour étudier la recombinaison des porteurs dans les puits quantiques.

3.2 Structure des dispositifs

Dans ce mémoire, nous nous sommes concentrés sur deux structures contenant une région active de lasers à puits quantiques multiples à base d'InGaAsP. Ces structures ont été utilisées par Nortel pour fabriquer des diodes laser à rétroaction distribuée (DFB) à couplage par gain présentant des caractéristiques très intéressantes: un rendement unimodal à 90 %, une suppression du mode secondaire de 55 dB, une bande passante de modulation de 22 GHz, une puissance de 55 mW, un gain différentiel de $19 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$, une température d'opération allant jusqu'à 100°C et une température caractéristique, T_o , quasi-infinie. Leur croissance a été effectuée par épitaxie en phase vapeur aux organométalliques sur substrat n^+ -InP (dopage $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$).

Ces structures sont présentées aux figures 3.1 (structure A) et 3.2 (structure B). La longueur d'onde d'émission de la structure A est d'environ $1.55 \mu\text{m}$. Elle contient 4 puits quantiques en compression (1.5 %) non dopés, d'une épaisseur de $55 \text{ \AA}$. Ces puits sont séparés par des barrières non-contraintes de type p ($4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), avec une énergie de gap de 0.97 eV. La structure B contient 8 puits quantiques en compression (1.0 %) dont la longueur d'onde d'émission est de $1.3 \mu\text{m}$ à la température de la pièce. Ces puits ont une épaisseur de $35 \text{ \AA}$ et ils sont entourés de barrières non-contraintes de type p ($E_g = 1.26 \text{ eV}$), d'une épaisseur de $100 \text{ \AA}$.

InP	non-dopée
0.07 μm	
InGaAsP 1.15Q	p: $4.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
0.1 μm	
InGaAsP 1.20Q	p: $4.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
0.03 μm	
InGaAsP 1.25Q	p: $4.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
0.03 μm	
InGaAsP 1.25Q	n: $4.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
0.03 μm	
InGaAsP 1.20Q	n: $4.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
0.03 μm	
InGaAsP 1.15Q	n: $4.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
0.03 μm	
InGaAsP 1.05Q	n: $4.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
0.03 μm	
InP	n: $2.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
0.2 μm	

Figure 3.1 : Représentation schématique de la structure A: gris foncé, puits quantiques InGaAsP non-dopés (1.55 μm); gris pâle, barrières InGaAsP p: $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (1.25Q). Les valeurs Q sont les bandes interdites en micromètres à la température de la pièce.

3.3 Simulation d'une diode laser à l'équilibre

Dans cette section, nous présentons les résultats obtenus par la méthode Monte Carlo et par l'approximation de diffusion-entraînement pour la structure A à l'équilibre. Dans les simulations Monte Carlo, le pas de temps utilisé pour le calcul de l'équation de Poisson a été fixé à 0.2 fs. Un total de 20000 superparticules a été utilisé pour le calcul des fonctions de distribution des électrons et des trous. Afin de réduire le temps de calcul pour atteindre l'équilibre, la distribution initiale des superparticules a été approximée en utilisant les résultats obtenus par le simulateur de diffusion-entraînement. Le voltage appliqué a été fixé à 0.8 V, ce qui donne des densités de porteurs typiques au-dessus du seuil dans les puits quantiques d'un laser. La recombinaison des porteurs a été négligée car elle n'affecte pas beaucoup la densité de porteurs. La température a été fixée à 300 K dans chaque simulation.

3.3.1 Distribution en densité des porteurs

Les figures 3.3(a) et 3.3(b) montrent la densité des porteurs en fonction de la position pour les trous et les électrons obtenue par le simulateur classique des équations de diffusion-entraînement (ligne continue) et par la méthode Monte Carlo (ligne brisée). Dans la simulation Monte Carlo, nous avons tenu compte seulement des électrons de la bande Γ et des trous lourds. Nous avons aussi négligé les interactions particule-particule et l'écrantage des phonons optiques polaires. Pour réduire le bruit statistique, les résultats Monte Carlo ont été moyennés dans le temps. Les deux méthodes donnent des résultats très semblables dans les régions de confinement. Cependant, dans les puits quantiques, la densité d'électrons obtenue par la méthode Monte Carlo est de 15 % supérieure à celle obtenue par les simulations

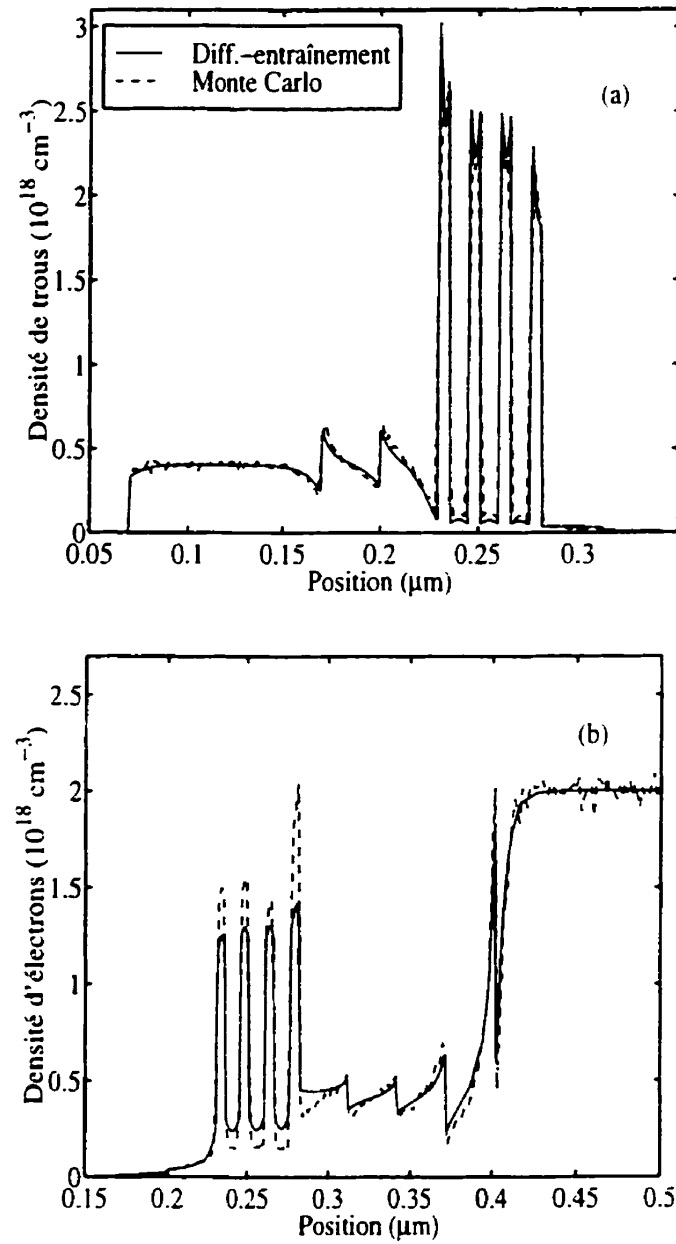


Figure 3.3 : Densité de porteurs en fonction de la position (a) pour les trous, (b) pour les électrons: la ligne continue, diffusion-entraînement; la ligne brisée, Monte Carlo.

de diffusion-entraînement. Nous attribuons cette différence aux approximations faites pour déduire les équations de diffusion-entraînement à partir de l'équation de transport de Boltzmann. Ces résultats confirment le fait que les équations de diffusion-entraînement sont moins fiables dans les nanostructures. Nous fournissons une estimation de cette divergence. L'approche Monte Carlo, où la mécanique quantique donne la relation $\varepsilon(\mathbf{k})$ utilisée pour évaluer la vitesse des porteurs et les taux de diffusion, fournit une solution plus rigoureuse. Dans la région de barrières, les équations de diffusion-entraînement restent une bonne approximation.

3.3.2 Distribution d'énergie des porteurs

Une information importante que les équations de diffusion-entraînement ne peuvent pas fournir est la fonction de distribution en énergie. Dans cette approximation, les porteurs de charge sont supposés être à la température du réseau et ils obéissent aux statistiques de Fermi-Dirac ce qui n'est pas toujours vrai. Aux figures 3.4(a) et 3.4(b), nous présentons la distribution en énergie obtenue par les simulations Monte Carlo pour les électrons et les trous. Nous avons aussi tracé, à titre de comparaison, la distribution de Maxwell-Boltzmann à 300 K. Notons que les porteurs n'obéissent pas exactement à la distribution Maxwellienne. Pour les électrons, ceci est dû au champ électrique non-constant en fonction de la position dans le dispositif. Ainsi, l'énergie cinétique des particules a deux composantes: 1) l'énergie thermique ($\frac{3}{2}kT$) qui résulte de la distribution Maxwellienne et 2) l'énergie cinétique supplémentaire (connue sous le nom de l'énergie d'entraînement) qui dépend de la grandeur du champ électrique et de la masse effective du porteur (Lundstrom, 1990). Les électrons, étant plus légers que les trous, sont plus affectés par le champ électrique interne et ils obéissent à une distribution Maxwellienne dérivée (Yu et Cardona,

1996). D'autre part, dans la distribution des trous, nous remarquons l'existence de pics qui résultent de la diffusion par les phonons optiques. L'écart entre ces pics correspond à l'énergie des phonons optiques (35 meV).

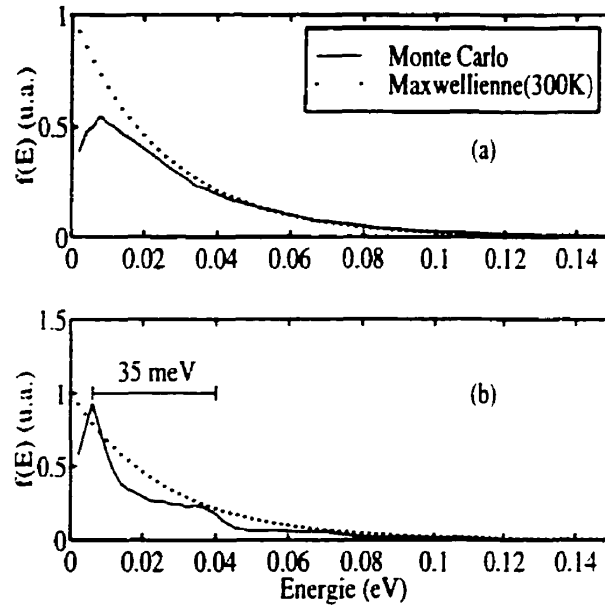


Figure 3.4 : Fonctions de distribution (a) pour les électrons, (b) pour les trous: Les résultats Monte Carlo (lignes continues) sont comparés à une distribution Maxwellienne à 300 K (lignes pointillées).

3.3.3 Effet des interactions porteur-porteur et de l'écrantage des phonons optiques polaires

Aux figures 3.5(a) et 3.5(b), nous présentons l'effet d'inclure les interactions porteur-porteur dans les régions de barrières. Dans ces régions, seulement les interactions électron-électron et trou-trou sont importantes car classiquement, il n'y a presque pas d'électrons (trous) dans les régions de type P (N). Les résultats sont comparés à la distribution de Maxwell-Boltzmann à 300 K. À la suite des interactions

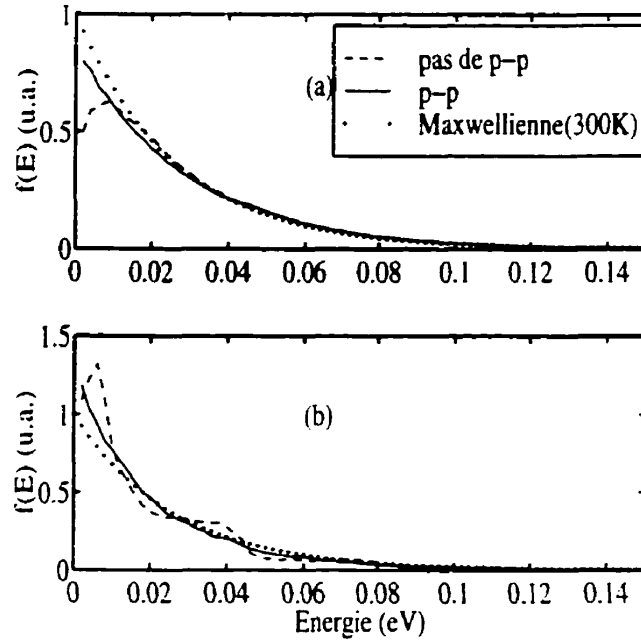


Figure 3.5 : Fonction de distribution (a) pour les électrons. (b) pour les trous dans les barrières: lignes brisées, sans les interaction porteur-porteur; lignes continues, avec les interactions porteur-porteur; lignes pointillées, distribution Maxwellienne.

porteur-porteur, les particules échangent de l'énergie entre elles et elles sont ainsi thermalisées. Cependant, leur énergie moyenne reste inchangée. D'autre part, les interactions électron-trou sont plus importantes dans les puits quantiques. Ces effets sont visibles à la figure 3.6. Sans les interactions électron-trou, l'énergie moyenne des électrons est de 47.2 meV, ce qui est plus grand que l'énergie moyenne des trous (36.3 meV). Cette différence est due à la petite masse effective des électrons, ce qui leur donne une plus grande énergie d'entraînement. Mais les interactions électron-trou causent un échange d'énergie entre les deux systèmes. Les résultats sont résumés au tableau 3.1. Les électrons perdent 16 % de leur énergie alors que l'énergie moyenne des trous n'augmente que de 10 % à cause de leur masse effective et de leur densité plus élevées. Par conséquent, la capture des électrons dans les

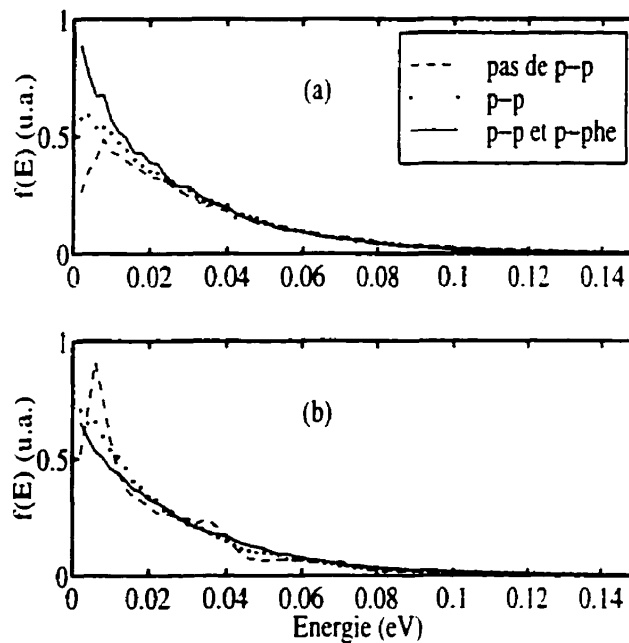


Figure 3.6 : Fonctions de distribution (a) pour les trous, (b) pour les électrons dans les puits: lignes brisées, sans les interactions porteur-porteur; lignes continues, avec les interactions porteur-porteur; lignes pointillées, avec les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons.

puits est plus efficace et leur densité augmente. D'une façon similaire, nous devrions nous attendre à une diminution de la densité des trous suite à l'augmentation de leur énergie moyenne mais, à cause du processus bipolaire, ils suivent les électrons et leur densité augmente également. Aussi, dû à l'écrantage des interactions avec les phonons optiques polaires, les interactions porteur-porteur sont plus importantes et les deux systèmes ont alors la même énergie moyenne, soit 39.7 meV. Cette valeur correspond à une température de 307 K, légèrement plus haute que la température du réseau. Notons aussi que la neutralité de la charge n'est pas satisfaite dans la région active.

Tableau 3.1 : L'énergie et la densité moyenne des porteurs dans les puits quantiques.

		pas de p-p	p-p	p-p et p-phe
Énergie	e	47.2	43.0	39.7
(meV)	h	36.3	36.9	39.8
Densité	e	1.76	1.84	1.88
($\times 10^{18} cm^{-3}$)	h	2.40	2.48	2.50

3.3.4 Effet des diffusions interbande

Nous avons aussi effectué des calculs Monte Carlo pour étudier les effets des diffusions interbande en incluant les vallées L , X , les bandes *split-off* et de trous légers. Nous avons trouvé que, à l'équilibre thermodynamique, le champ électrique dans la région active n'est pas assez élevé pour donner l'énergie nécessaire aux porteurs pour diffuser vers les vallées L , X , ou vers la bande *split-off*. En effet, leur énergie moyenne est beaucoup plus petite que les séparations $\Gamma-L$ et trou lourd-*split-off* (0.75 et 0.3 eV, respectivement) et cela n'induit pas d'effets observables. Cependant, 5 % des trous se trouvent dans la bande de trou léger. Les effets des trous légers sont présentés aux figures 3.7(a) et 3.7(b). À cause de leur mobilité supérieure, les trous légers provenant des régions dopées p pénètrent facilement dans la région des puits. En conséquence, on trouve moins de trous dans le premier puits et plus dans les trois autres. Aussi, à cause du processus bipolaire, la densité d'électrons diminue dans le premier puits et augmente dans les autres. Nous n'observons aucun changement dans la région de barrières.

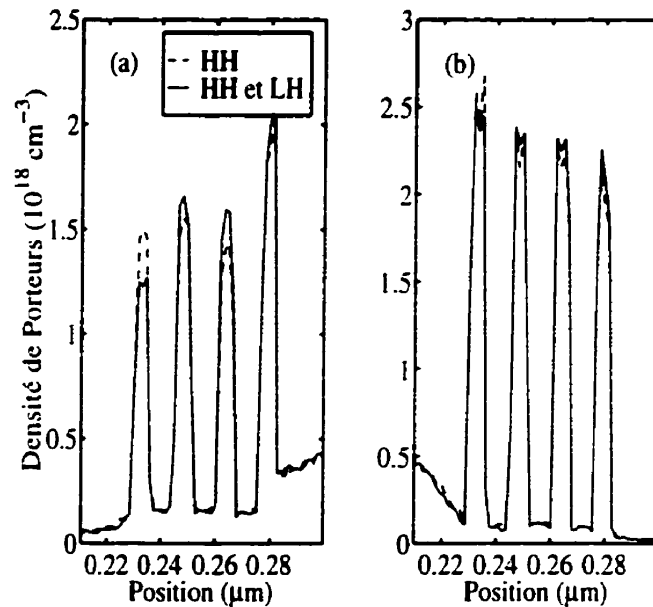


Figure 3.7 : Densités de porteurs en fonction de la position (a) pour les électrons, (b) pour les trous: lignes brisées, avec seulement les trous lourds; lignes continues, avec les trous lourds et légers.

3.4 Simulation du transport et de la recombinaison des porteurs hors-équilibre

Dans la section précédente, nous avons montré que l'approximation de diffusion-entraînement donne des résultats similaires à ceux de la méthode Monte Carlo (avec une marge d'erreur maximale de 15 %) dans la simulation d'une diode laser à l'équilibre. Cependant, nous verrons dans cette section que la divergence entre deux méthodes est beaucoup plus significative dans l'étude du transport ultra-rapide des porteurs dans les structures à puits quantiques sous forte injection optique.

Pour la comparaison, nous avons choisi la structure B (voir section 4.2). Dans le simulateur Monte Carlo, le pas de temps pour le calcul de l'équation de Poisson

et le pas de temps de recombinaison ont été fixés à 0,2 fs et 50 fs respectivement. La température a été fixée à 77 K. Nous avons utilisé 30000 superporteurs pour le calcul des fonctions de distribution des électrons et des trous jusqu'à 50 ps. Dans ces conditions, une simulation par la méthode Monte Carlo nécessite un temps de calcul d'environ 1 semaine tandis que le simulateur classique nécessite seulement quelques minutes!

Pour rendre la comparaison plus significative, nous avons approximé l'état initial du système dans les simulations Monte Carlo par les résultats des équations de diffusion-entraînement. Comme nous le verrons dans le chapitre suivant, une solution plus rigoureuse peut être obtenue en calculant le nombre relatif de porteurs générés par les transitions des bandes de trou léger, lourd et *split-off*, à la bande de conduction et l'énergie de ces porteurs excités par les lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement.

3.4.1 Capture des porteurs dans les puits

Les figures 3.8 et 3.9 montrent les densités de porteurs en fonction de la position, obtenues par l'approximation de diffusion-entraînement et le modèle Monte Carlo, à 2 ps et à 10 ps respectivement. La différence la plus frappante que nous voyons en examinant les résultats des deux méthodes est la densité de porteurs élevée obtenue par le simulateur classique dans les puits numérotés 1 et 8, qui est de 3 à 4 fois supérieure à celle des puits intérieurs. Dans les résultats Monte Carlo, la densité de porteurs est plus uniforme. Nous remarquons également que, dans le simulateur classique, on ne trouve presque pas de particules dans les barrières qui séparent les puits. Pour obtenir les temps de capture, nous montrons les densités

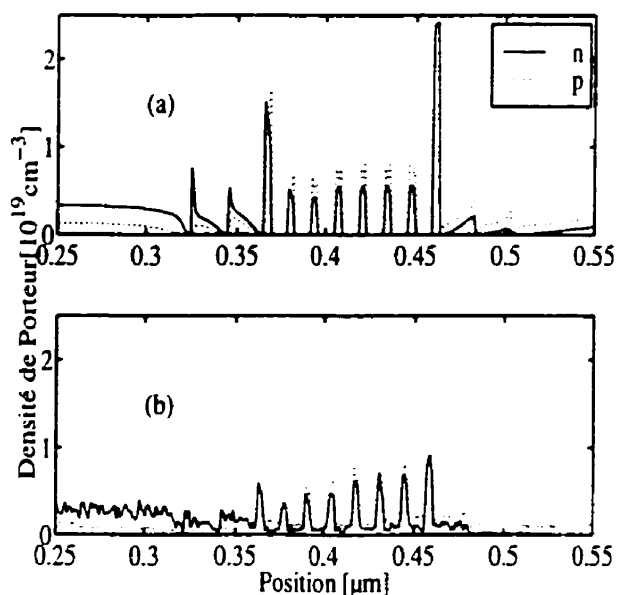


Figure 3.8 : Densité de porteurs en fonction de la position à 2 ps obtenue (a) par les équations de diffusion-entraînement, (b) par la méthode Monte Carlo: lignes continues, électrons; lignes pointillées, trous.

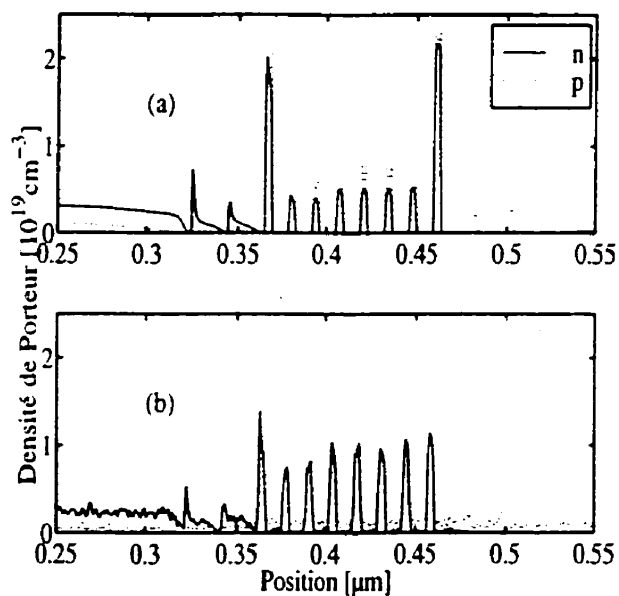


Figure 3.9 : Densité de porteurs en fonction de la position à 10 ps obtenue (a) par les équations de diffusion-entraînement, (b) par la méthode Monte Carlo: lignes continues, électrons; lignes pointillées, trous.

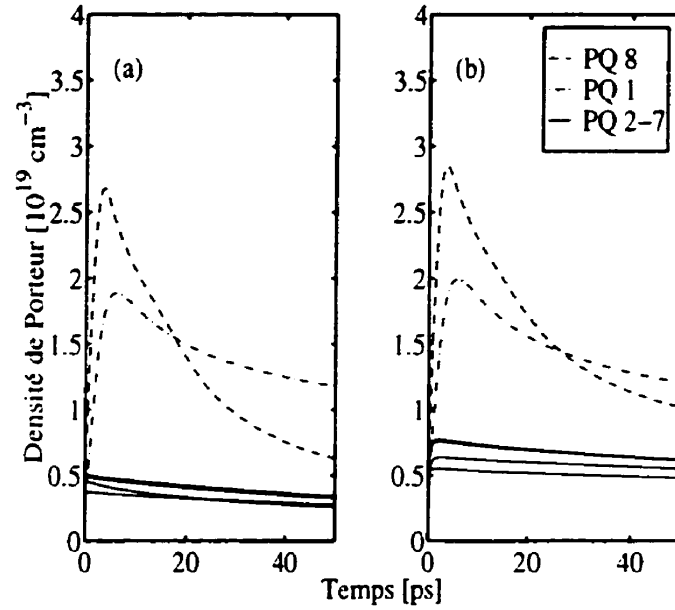


Figure 3.10 : Évolution de la densité de porteurs dans les puits obtenue par les équations de diffusion-entraînement, (a) pour les électrons, (b) pour les trous.

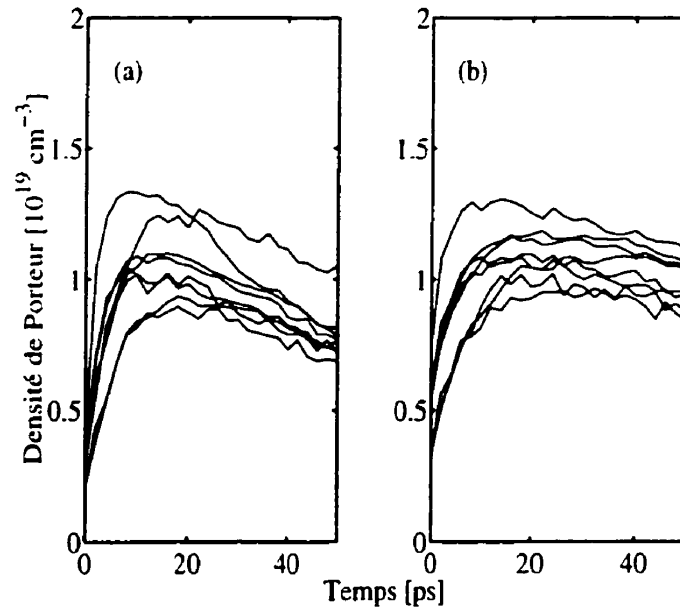


Figure 3.11 : Évolution de la densité de porteurs dans les puits obtenue par la méthode Monte Carlo, (a) pour les électrons, (b) pour les trous.

moyennes des particules dans chaque puits quantique, obtenues par les simulations de diffusion-entraînement et Monte Carlo, aux figures 3.10 et 3.11 respectivement. Dans la simulation de diffusion-entraînement, le temps de capture dans les puits intérieurs est de moins de 2 ps, tandis que, dans les puits extérieurs, les porteurs sont capturés en 3 ps approximativement. Dans les résultats de Monte Carlo, les temps de capture varient entre 5 et 10 ps selon le puits. Pour expliquer cette divergence, nous devons rappeler que la dépendance en énergie des porteurs n'est pas négligée dans la méthode Monte Carlo. Ainsi, les particules injectées qui entrent dans la région des puits quantiques peuvent facilement pénétrer vers les puits intérieurs avant de perdre leur énergie par l'émission de phonons optiques. En outre, le champ électrique dans la région active peut être aussi élevé que 0.15 MV/cm (voir figure 3.12), ce qui donne de l'énergie cinétique supplémentaire aux porteurs. Dans les simulations de diffusion-entraînement, les particules qui entrent dans la région de puits quantiques sont rapidement capturées par les puits extérieurs et, comme elles sont supposées être à la température du réseau, elles peuvent difficilement migrer vers les puits intérieurs.

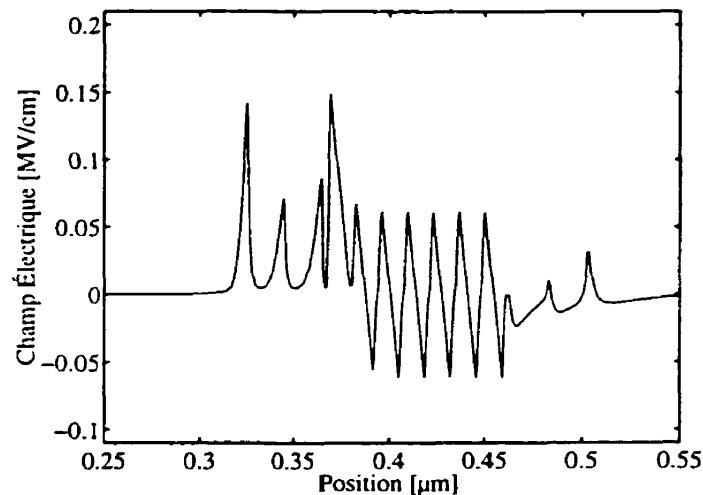


Figure 3.12 : Champ électrique en fonction de la position obtenu par les équations de diffusion-entraînement.

3.4.2 Effet des interactions porteur-porteur et de l'écrantage des phonons optiques polaires

Comme nous avons vu dans la sous-section précédente, la densité de porteurs dans les puits est de l'ordre de $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Dans ces conditions, nous nous attendons à ce que les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons optiques soient très importants. Aux figures 3.13(a) et 3.13(b), nous montrons les effets de ces interactions sur l'énergie moyenne des particules dans les puits. À 0 ps, juste avant l'injection, l'énergie moyenne des porteurs est de 10 meV, ce qui correspond à l'énergie des porteurs à l'équilibre thermodynamique ($\frac{3}{2}kT$, à $T = 77K$). Quand le processus de capture commence, l'énergie moyenne des porteurs dans les puits augmente rapidement dans la première picoseconde. En suite, les porteurs se refroidissent. Entre 10 et 50 ps, l'énergie moyenne reste à peu près constante. Sans les interactions porteur-porteur, l'énergie moyenne des électrons et des trous est de 25 meV (figure 3.13(a)). Quand nous ajoutons les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons, le refroidissement des électrons s'arrête à 50 meV, ce qui est le double du cas où ces effets sont ignorés. Ceci peut s'expliquer par le fait que les phonons sont fortement écrantés et que les électrons refroidissent plus lentement. Par conséquent, ils peuvent facilement s'échapper vers les barrières et la capture est moins efficace. D'autre part, l'énergie moyenne des trous est légèrement inférieure si on tient compte de ces effets car, à cause de l'interaction trou-trou, certains trous augmentent leur énergie au-dessus du seuil d'émission de phonons optiques (37 meV) mais pas assez pour migrer vers les barrières. Alors, ils peuvent se refroidir en émettant des phonons optiques. Une étude plus détaillée des effets des interactions électron-électron, trou-trou et électron-trou sera présentée au prochain chapitre.

Les figures 3.14(a) et 3.14(b) montrent l'effet de la dépendance en énergie des por-

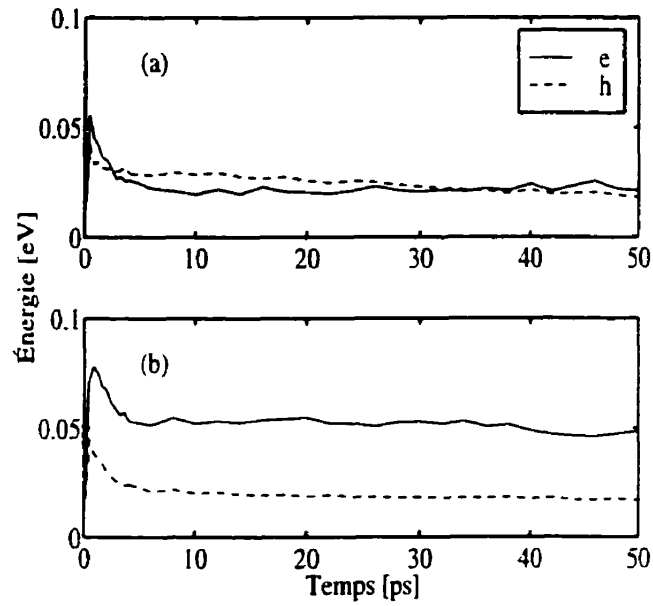


Figure 3.13 : Évolution de l'énergie moyenne dans les puits quantiques obtenue par la méthode Monte Carlo (a) sans les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons, (b) avec les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons.

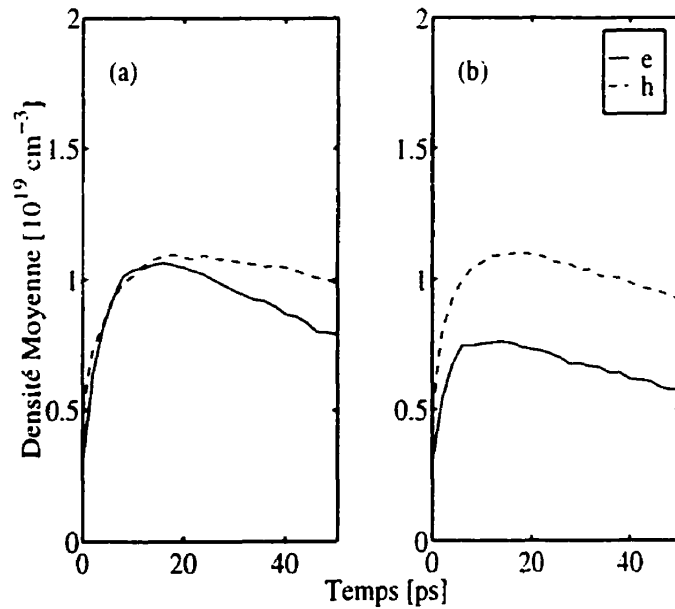


Figure 3.14 : Évolution de la densité de porteur moyenne dans les puits quantiques obtenue par la méthode Monte Carlo (a) sans les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons. (b) avec les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons.

teurs sur la densité moyenne dans les puits. Quand les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons optiques polaires sont présents, la capture des électrons est moins efficace à cause de leur énergie plus élevée. Cependant, la densité des trous ne varie pas beaucoup, car leur énergie est peu affectée par ces interactions.

3.4.3 Recombinaison des porteurs dans les puits

Aux figures 3.15(a) et 3.15(b), nous présentons les taux de recombinaison Auger et spontanée respectivement. Le taux de recombinaison Auger obtenu par les équations de diffusion-entraînement (lignes continues) augmente plus rapidement que dans les résultats de Monte Carlo. En particulier, le maximum de la recombinaison Auger est 2.5 fois plus élevé dans les résultats de diffusion-entraînement. Ceci est dû à la densité de porteurs très élevée dans les puits extérieurs. De plus, le taux de recombinaison diminue très rapidement car tous les porteurs sont capturés en moins de 5 ps, alors que dans les calculs Monte Carlo, le processus de capture continue même après 20 ps. Les lignes pointillées montrent l'effet des diffusions porteur-porteur et de l'écrantage des phonons optiques. La recombinaison est moins importante dans ce cas à cause de la densité d'électrons moins élevée dans les puits. Un paramètre important fourni par les expériences de photoluminescence résolue dans le temps est le temps de montée de 10-90 % du signal optique qui est, en première approximation, proportionnel au taux de recombinaison radiative. Le temps de montée calculé à partir des résultats de diffusion-entraînement est 2.5 ps. Les résultats de Monte Carlo où les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons sont ignorés donnent 9 ps, alors que si on tient compte de ces effets, on obtient un temps de montée de 6 ps, ce qui est plus proche du résultat de la simulation de diffusion-entraînement. Le temps de montée obtenu expérimentalement pour la même structure est approxi-

mativement 12 ps (Rejeb et collab., à publier). Ceci est en meilleur accord avec les résultats de Monte Carlo.

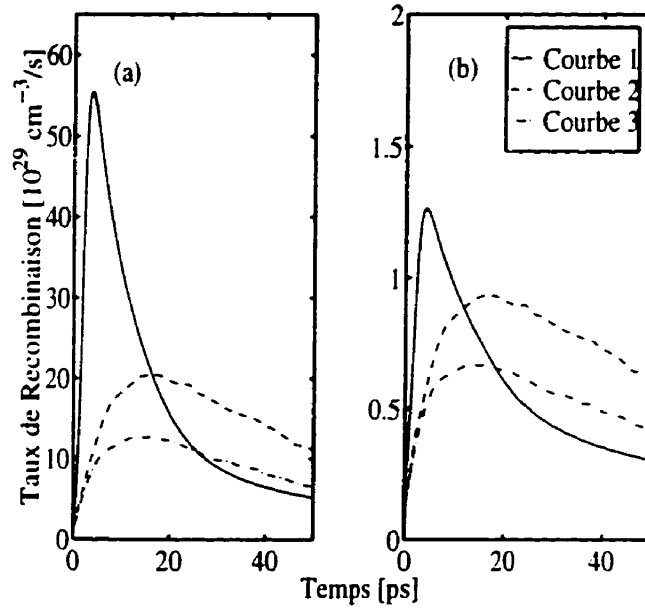


Figure 3.15 : Évolution des taux de recombinaison (a) Auger, (b) spontanée dans les puits quantiques: courbe 1, diffusion-entraînement; courbe 2, Monte Carlo sans les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons; courbe 3, Monte Carlo avec les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons.

3.5 Conclusion

Pour conclure, nous avons fourni une comparaison entre la méthode Monte Carlo et l'approximation de diffusion-entraînement dans la simulation de dispositifs à puits quantiques multiples. Pour cela, nous avons considéré deux cas: le premier consistait en une diode laser à l'équilibre et le deuxième, en une jonction p-n semblable à la première mais, cette fois-ci, sous injection optique, donc hors-équilibre.

Les résultats indiquent que, dans l'étude de la diode laser à l'équilibre, les deux approches donnent des résultats similaires. En effet, l'accord est presque parfait dans les régions où l'épaisseur des couches est de l'ordre de $300 \text{ \AA}$, malgré que nous observions de légères différences entre les densités de porteurs obtenues par les deux méthodes dans les puits quantiques dont l'épaisseur est de l'ordre de $55 \text{ \AA}$. Ceci n'est pas très surprenant car dans cette région, le champ électrique est assez intense pour affecter la distribution en énergie des porteurs. Ce phénomène ne peut s'observer que dans les simulations Monte Carlo, car les équations de diffusion-entraînement supposent que les porteurs sont toujours en équilibre thermodynamiques. De plus, nous avons démontré que la densité de porteurs dans les puits quantiques était sensible à la masse effective et à l'énergie des porteurs qui sont plus rigoureusement traitées par la méthode Monte Carlo.

La divergence entre les deux méthodes devient plus évidente quand nous étudions une structure sous injection optique. Dans ce cas, les porteurs de charge sont hors-équilibre (chauds et non-thérmalisés) et leur transport dépend fortement de leur énergie, qui à son tour dépend du champ électrique interne du dispositif. Par conséquent, dans les simulations des équations de diffusion-entraînement, la capture des porteurs dans les puits est plus rapide que dans le modèle Monte Carlo. Ainsi, les temps de montée et de descente de la photoluminescence sont plus courts et les taux de recombinaisons sont plus élevés. Nous avons aussi étudié les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons optiques polaires. Ces mécanismes ont pour effet d'augmenter l'énergie des électrons confinés. Alors la densité de porteurs et les taux de recombinaison diminuent dans les puits.

CHAPITRE 4

Étude de la dynamique et de la photoluminescence des porteurs hors-équilibres

4.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons démontré que les équations de diffusion-entraînement n'étaient pas suffisantes pour étudier le comportement des porteurs hors-équilibre dans une structure à puits quantiques multiples. Mais, bien sûr, cela n'implique pas que la méthode Monte Carlo semi-classique soit suffisante pour bien décrire une expérience réelle d'injection optique. Nous devons donc faire une comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux. Dans ce chapitre, nous présentons une étude de la photoluminescence et de la dynamique des porteurs hors-équilibre incluant le refroidissement, la capture et la recombinaison. Nous comparons les spectres de photoluminescence théoriques aux spectres de photoluminescence expérimentaux, ce qui nous permettra de juger la validité du modèle utilisé et de faciliter l'interprétation des spectres expérimentaux.

4.2 Détails techniques

Pour modéliser les expériences de photoluminescence résolue dans le temps, nous avons utilisé la méthode Monte Carlo combinée avec l'équation de Poisson et avec l'algorithme de recombinaison tel que décrit au chapitre 2. Pour minimiser les fluctuations du champ dans le calcul du potentiel dans la région active, nous avons utilisé un maillage adapté (Abou-Khalil, 1996). Le pas de temps pour la résolution de l'équation de Poisson a été fixé à 0.5 fs et le pas de temps de la recombinaison à 50 fs. Nous avons utilisé un total de 30000 superporteurs. Toutes les simulations ont été effectuées pour $T=77$ K afin de correspondre aux résultats expérimentaux.

Pour obtenir la distribution de porteurs initiale juste après l'injection optique, nous avons ajouté la distribution de porteurs injectés aux porteurs en équilibre thermodynamique. Afin de réduire le temps de simulation nécessaire pour atteindre l'équilibre avant l'injection optique, nous avons approximé la distribution spatiale initiale des particules en utilisant les résultats des simulations des équations de diffusion-entraînement. Une des difficultés pour simuler les conditions expérimentales est l'incertitude de la densité de porteurs injectés, autrement dit, la puissance d'excitation du laser utilisé. En outre, les taux de recombinaison dépendent des densités de porteurs et le coefficient de recombinaison Auger n'est pas bien connu. Le meilleur accord entre les résultats expérimentaux et les calculs théoriques a été obtenu en prenant $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ pour la densité d'excitation à la surface et $1 \times 10^{-28} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ pour le coefficient Auger.

Une fois l'équilibre atteint, l'impulsion laser crée des transitions des bandes de trous légers, lourds et *split-off* à la bande de conduction. Le nombre relatif de porteurs

généérés par chaque transition i est obtenu à partir des taux d'absorption donnés par l'équation suivante (voir section 1.3):

$$\alpha_i(\hbar\omega) = \frac{4\pi^2 e^2 \hbar}{m^2 \epsilon_0} \frac{1}{\hbar\omega} |P_{cv}|^2 \mathcal{D}(\hbar\omega - \varepsilon_g^i) N \quad (4.1)$$

L'énergie des porteurs créés par ces transitions est alors calculée par les lois de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement (Abou-Khalil, 1996). Finalement, les porteurs sont distribués exponentiellement dans l'espace selon la loi de Beer-Lambert.

Les expériences de photoluminescence résolue dans le temps ont été réalisées par Rejeb et collab. (à publier). Un laser à impulsion Ti-saphir ($\lambda=740$ nm, 100 fs, 82 MHz) a été utilisé comme source d'excitation. L'échantillon étudié est la structure A décrite au chapitre 3. Une technique de détection, dite de conversion vers les hautes fréquences (*upconversion*), de résolution temporelle de l'ordre de la subpico-seconde, et ainsi qu'un photomultiplicateur GaAs ont été utilisés pour la collection du signal.

4.3 Résultats et discussion

4.3.1 Effet des interactions porteur-porteur et de l'écrantage des phonons optiques polaires

Dans cette sous-section, nous examinons l'effet des interactions électron-électron (e-e), électron-trou (e-h), trou-trou (h-h) et de l'écrantage des phonons optiques polaires (p-phe) sur la relaxation ultra-rapide des porteurs photoexcités dans la région active du dispositif. Le dispositif étant sous forte injection, ces interactions

deviennent très importantes. En particulier, l'écrantage affaiblit considérablement les interactions électron-phonon comparées aux interactions trou-phonon. À la figure 4.1, nous illustrons l'énergie moyenne des électrons dans les puits quantiques et dans les barrières 1.25Q en fonction du temps. La courbe 1 correspond à la situation où les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons optiques polaires sont totalement ignorées. Les électrons sont rapidement thermalisés et à 5 ps, leur énergie moyenne est approximativement 0.02 eV, ce qui est le double de l'énergie correspondant à l'équilibre thermodynamique ($\frac{3}{2}kT$ à $T = 77\text{ K}$). Comme nous l'avons mentionné au chapitre précédent, cet excès d'énergie est dû au champ électrique intense dans la région active de la structure. En examinant la courbe 2, où nous avons tenu compte de l'écrantage des phonons, nous voyons que le taux de refroidissement est réduit d'une façon significative après 0.5 ps. Ceci est dû au fait que, comme les porteurs sont capturés, leur densité augmente et les phonons optiques polaires sont alors fortement écrantés. En particulier, dans les puits quantiques, l'énergie moyenne des porteurs est 12 fois plus grande que celle où l'écrantage est négligé. Quand nous incluons les interactions e-e et h-h (courbe 3), nous n'observons pas de changement significatif dans les puits quantiques. Mais dans les barrières 1.25Q, l'énergie moyenne des électrons croît légèrement. Ceci est attribué au fait que les interactions e-e redistribuent les électrons dans les régions de basse et haute énergie et, comme les porteurs sont moins chauds dans les barrières que dans les puits, certains électrons se trouvent alors dans les régions où ils ne peuvent plus émettre de phonons optiques. Alors, en moyenne, ils refroidissent moins vite. Les interactions e-h et h-e causent un transfert d'énergie des électrons chauds vers les trous moins chauds. Par conséquent, l'énergie moyenne des électrons diminue comme on peut le voir par la courbe 4. Ces résultats sont en accord avec les calculs Monte Carlo de Osman et Ferry (1987) qui ont montré que, à haute concentration de porteurs, le flux d'énergie des électrons au réseau se fait principalement par les interaction e-h

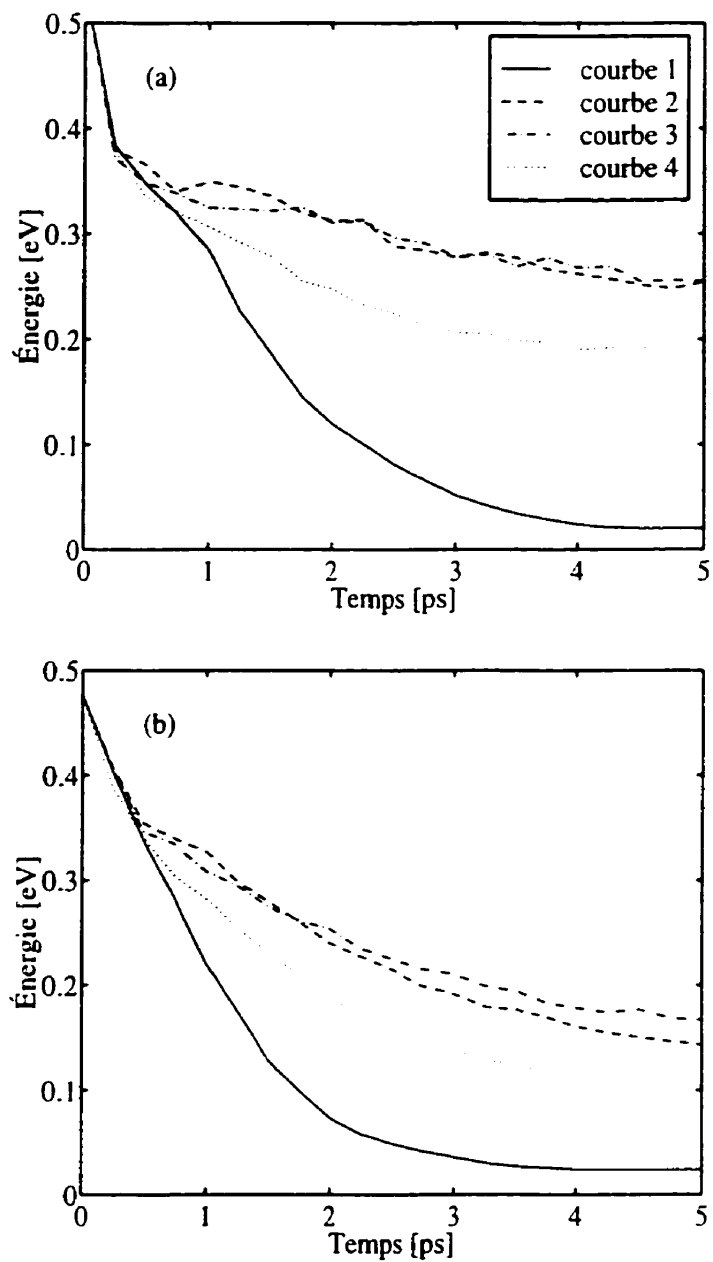


Figure 4.1 : Énergie moyenne calculée des électrons en fonction du temps (a) dans les puits et (b) dans les barrières; courbe 1, p-p et p-phe négligées; courbe 2, avec p-phe; courbe 3, avec p-phe, e-e et h-h; courbe 4, avec p-phe, e-e, h-h et e-h.

et, ensuite, par les interactions h-ph.

Aux figures 4.2(a) et 4.2(b), nous montrons la fonction de distribution des porteurs à 5 ps dans les puits quantiques et dans les barrières respectivement. Nous voyons clairement que les électrons des puits ne sont pas en équilibre thermique avec les électrons des barrières. Notons aussi que dans les puits quantiques, l'énergie moyenne des électrons est plus élevée que la profondeur du puits quantique (0.1 eV), ce qui veut dire qu'ils peuvent facilement s'échapper vers les barrières. En conséquence, le refroidissement est encore moins rapide. D'autre part, les trous étant plus lourds que les électrons, ils sont en équilibre thermique avec le réseau et donc, mieux confinés dans les puits.

4.3.2 Capture et recombinaison des porteurs dans les puits

Dans cette sous-section, nous présentons les résultats de nos calculs Monte Carlo appliqués à l'étude de la capture et de la recombinaison dans la région des puits. La figure 4.3 montre l'évolution des densités d'électrons et de trous en fonction de la position pour 0, 10, 50 et 100 ps. À 0 ps, juste après l'injection optique, il y a 5000 superparticules en équilibre thermodynamique et 25000 superparticules injectées, distribuées exponentiellement dans l'espace selon la loi de Beer-Lambert. La densité d'excitation à la surface du dispositif est approximativement $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. À 10 ps, les densités de porteurs dans les puits atteignent leur maximum. La neutralité de charge n'est pas satisfaite dans les puits à cause de la masse effective élevée des trous. Par conséquent, la densité de trous est 1.5 fois supérieure à la densité d'électrons. Quand la recombinaison est négligée, les calculs montrent que le système n'évolue pas après 10 ps. D'autre part, les changements que nous voyons

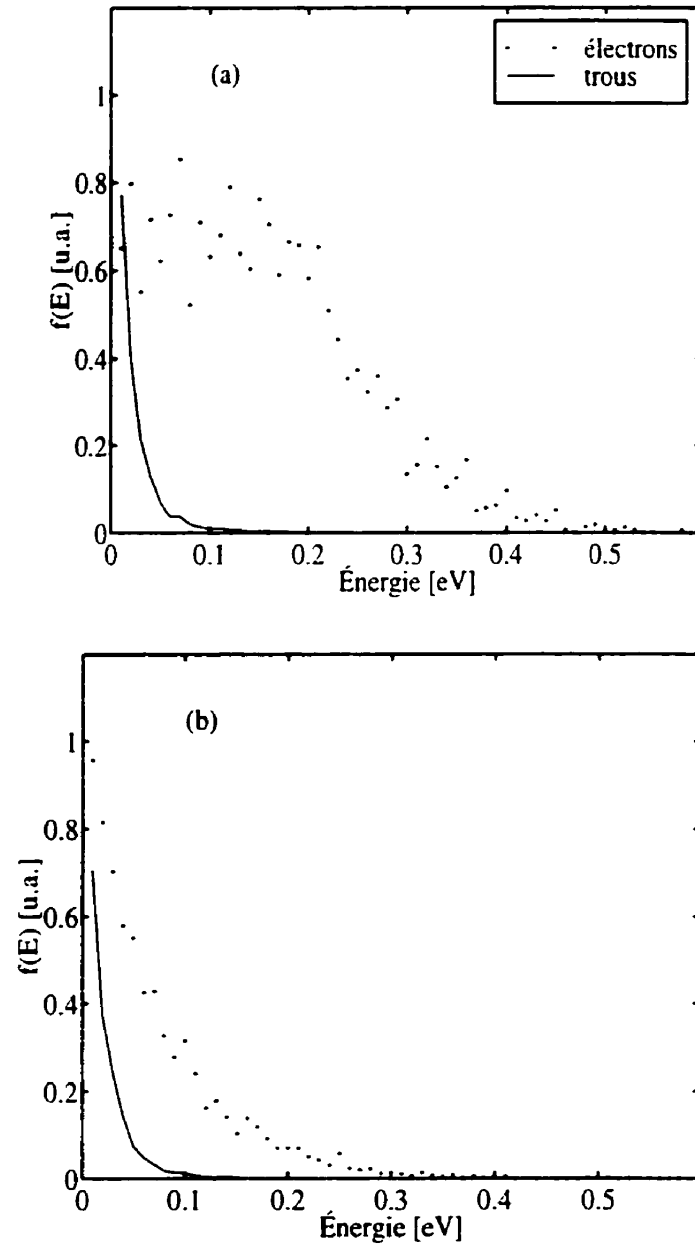


Figure 4.2 : Fonctions de distribution calculées (a) dans les puits, (b) dans les barrières $1.25Q$ pour les électrons et les trous à 5 ps, $T=77$ K.

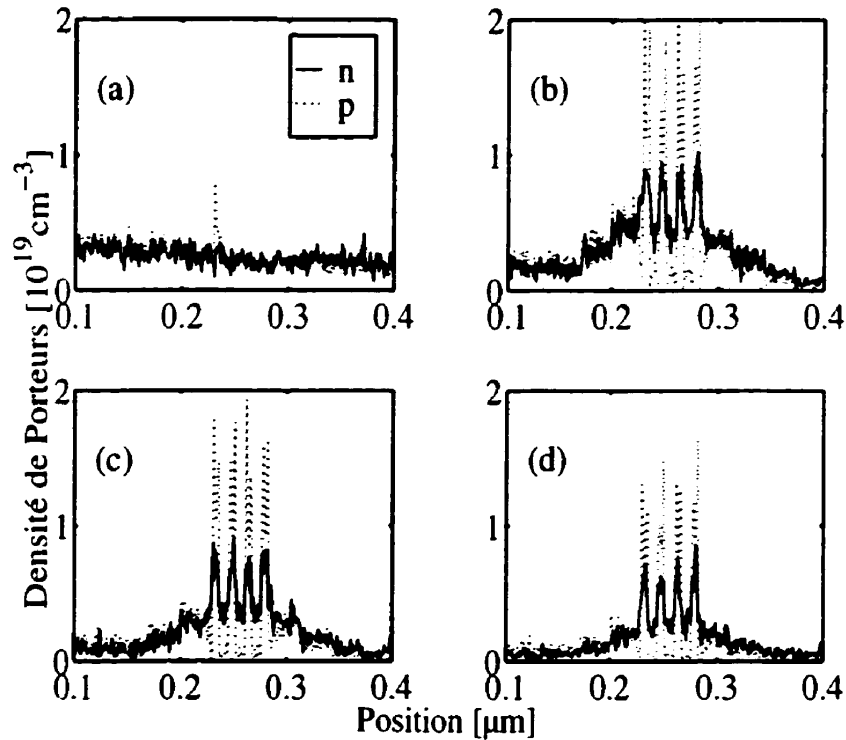


Figure 4.3 : Densité de porteurs en fonction de la position (a) à 0 ps. (b) à 10 ps. (c) à 50 ps et (d) à 100 ps. $T=77$ K.

dans les figures 4.3(c) et 4.3(d) résultent directement de la recombinaison dans les puits. Dans les barrières, la recombinaison est plus faible mais les densités de porteurs diminuent plus rapidement que dans les puits à cause du transfert des barrières vers les puits. La dynamique des porteurs dans les puits est plus visible à la figure 4.4, où nous avons illustré les densités moyennes d'électrons et de trous. Le 90% du maximum des densités est atteint en 6 ps. Comme les trous sont excités à des énergies plus basses en comparaison des électrons, ils sont capturés plus rapidement dans les puits. Ceci est explicitement présenté à la figure 4.5 où nous montrons la dérivée par rapport au temps des densités de porteurs moyennes. Mais comme le maximum de la densité de trous est plus grand que celui des électrons, le temps de capture reste le même pour les deux systèmes. À partir de 20 ps, les densités de porteurs diminuent lentement à cause de la recombinaison des porteurs, et le taux

de perte net (le taux de recombinaison moins le taux de transfert vers les puits) des deux systèmes est le même.

Aux figures 4.6(a) et 4.6(b), nous montrons les taux de recombinaison Auger et spontanée respectivement. À la densité d'excitation que nous avons considérée, la recombinaison Auger est 20 fois plus grande que la recombinaison radiative. Notons toutefois que le coefficient Auger que nous avons utilisé dans nos calculs est approximatif, mais une valeur aussi élevée (bien que dans les limites généralement acceptées) est nécessaire pour expliquer les spectres de photoluminescence résolue dans le temps, comme nous le verrons dans la prochaine sous-section. Ces résultats indiquent que la recombinaison est surtout non-radiative. Le temps de montée du signal de photoluminescence peut se comparer au temps de montée du taux de recombinaison. Cette valeur est approximativement de 8 ps. Cependant, nous devons être prudents quant à l'interprétation de ce résultat car nous avons considéré que les niveaux d'énergie dans les puits ne sont pas quantifiés. Le temps de montée calculé ne correspond donc pas exactement au temps de montée de la luminescence des niveaux fondamentaux. En effet, nous verrons dans la prochaine sous-section que, dans les 100 premières picosecondes, le signal de photoluminescence provient surtout des électrons de haute énergie confinés dans les puits quantiques.

4.3.3 Spectres de photoluminescence calculés et expérimentaux

Dans la section 1.3.3, nous avons vu que le taux d'émission par unité de volume à l'énergie ε et à la position z peut s'écrire comme suit:

$$I(\varepsilon, z, t) = \frac{4\pi e^2 \bar{\mu} \varepsilon}{m_0^2 c^3 h^2} \int_{-\infty}^{\infty} \rho_c(\varepsilon') g_c(\varepsilon', z, t) \rho_v(\varepsilon' - \varepsilon) g_v(\varepsilon' - \varepsilon, z, t) |M_{cv}|^2 d\varepsilon'. \quad (4.2)$$

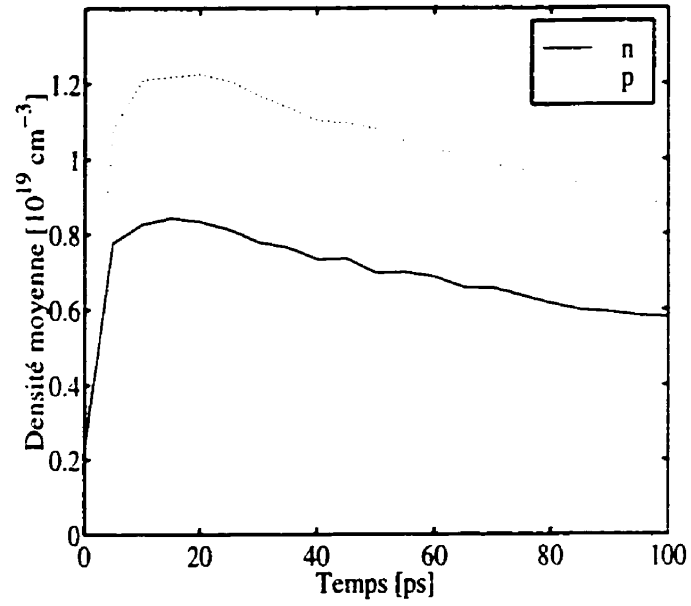


Figure 4.4 : Évolution des densités de porteurs moyennes calculée; ligne continue, électrons; ligne brisée, trous.

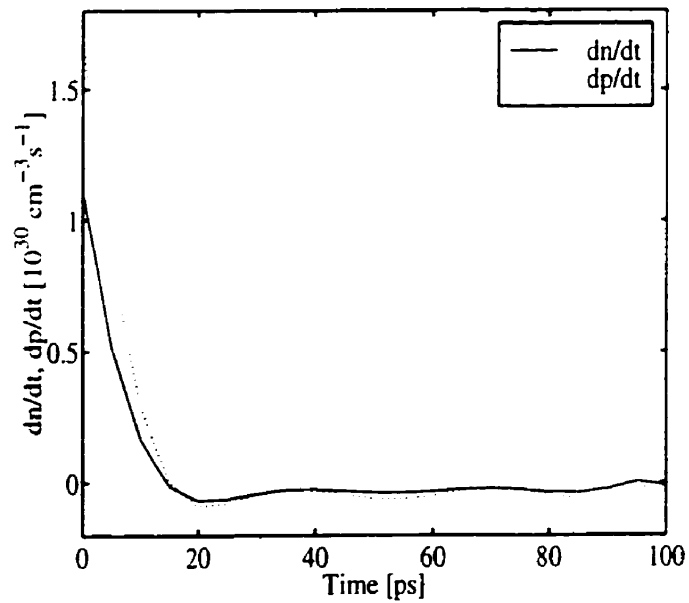


Figure 4.5 : Dérivée par rapport au temps des densités de porteurs; ligne continue, électrons; ligne brisée, trous.

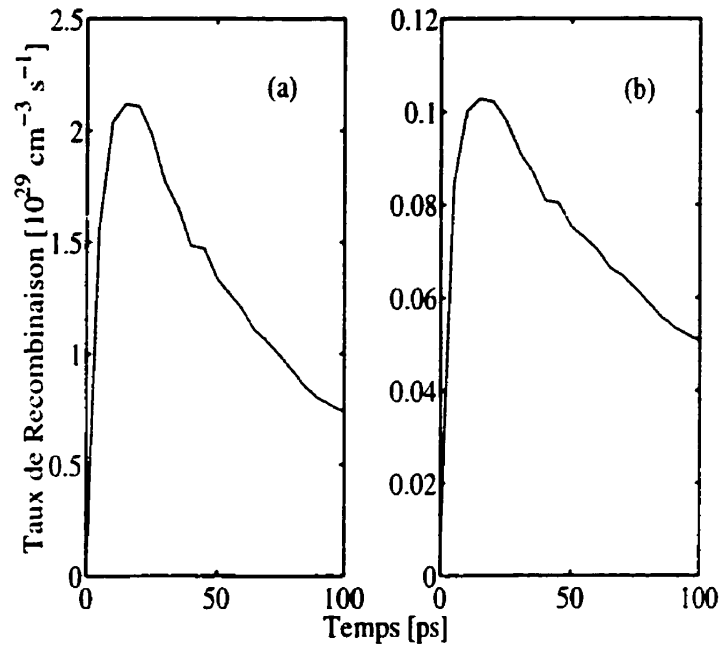


Figure 4.6 : Taux de recombinaison calculés pour $T=77$ K; (a) recombinaison Auger, (b) recombinaison spontanée.

Les produits $\rho_c g_c$ et $\rho_v g_v$ sont calculés par les simulations Monte Carlo à chaque 5 ps, jusqu'à 100 ps. L'intégration de l'équation (4.2) par rapport à z nous donne la photoluminescence de chaque couche. Dans les calculs, nous avons supposé M_{if} constant, où la dépendance en énergie et la règle de sélection pour $\mathbf{k}$ étaient négligées.

Aux figures 4.7(a) et 4.7(b), nous présentons les spectres d'émission calculés des puits et des barrières 1.25Q respectivement. L'émission des barrières est forte dans les 50 premières picosecondes mais diminue rapidement. Après 50 ps, la plus grande partie du signal provient des puits. Dans la sous-section précédente, nous avons montré que le refroidissement des électrons dans la région active est très lent. Ceux-ci se trouvent donc aux énergies supérieures dans les puits. Alors, le signal des puits est principalement dû à la recombinaison de ces électrons chauds avec les trous qui sont mieux confinés. En conséquence, le pic de luminescence provenant des puits

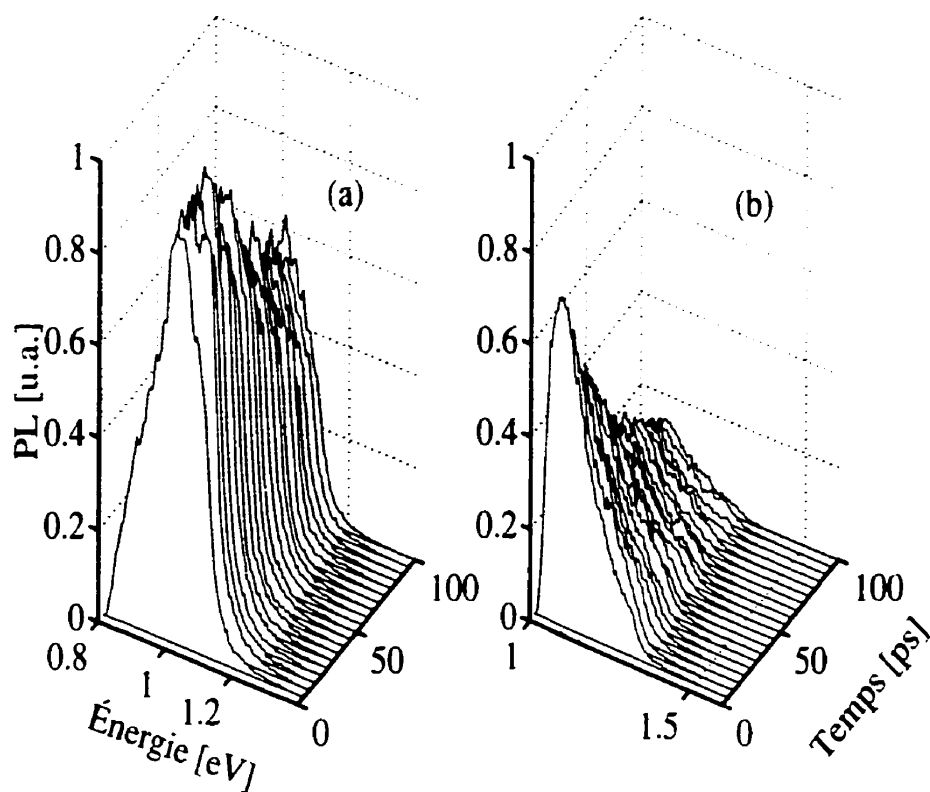


Figure 4.7 : Signal de photoluminescence calculé en fonction de l'énergie et du temps pour 77 K. émis par (a) les puits quantiques, (b) par les barrières 1.25Q.

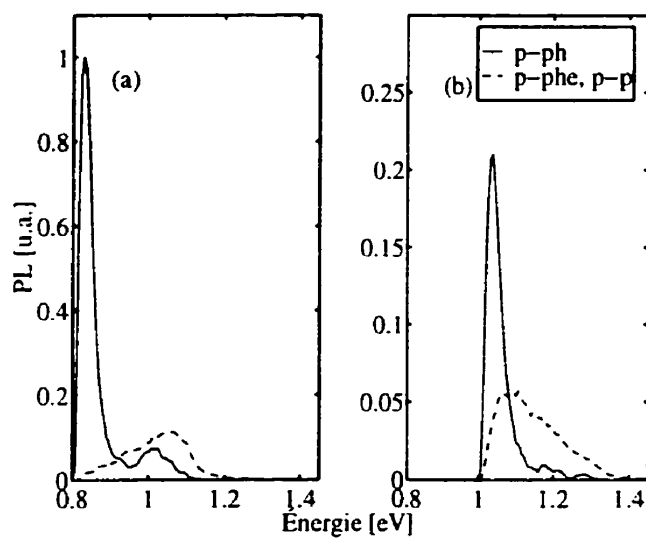


Figure 4.8 : Signal de photoluminescence calculé en fonction de l'énergie à 10 ps, émis par (a) les puits quantiques, (b) par les barrières 1.25Q; ligne continue, p-p et p-phe négligées; ligne brisée, avec p-p et p-phe.

est supérieur à l'énergie du gap des barrières (1 eV). La figure 4.8 montre le spectre d'émission de Monte Carlo négligeant les interactions porteur-phonon écranté et porteur-porteur. Ces résultats montrent que la luminescence des barrières est plus faible et les pics sont beaucoup plus pointus comparés au cas où ces interactions ne sont pas négligées.

Aux figures 4.9(a) et 4.9(b), nous présentons le spectre de photoluminescence résolue dans le temps pour deux densités d'excitation différentes. Nous comparons ces résultats à ceux calculés (figure 4.9(c)), obtenus en sommant le signal de chaque couche. Nous remarquons qu'il y a deux différences frappantes entre les résultats théoriques et expérimentaux: 1) Le pic à 1.42 eV dans les données expérimentales provient de la recombinaison dans InP. Nous ne voyons pas ce pic dans le spectre calculé car seulement une petite fraction du substrat InP a été incluse dans le simulateur Monte Carlo. Une simulation incluant plusieurs microns de substrat aurait nécessité un nombre beaucoup plus grand de superparticules, avec un coût évident pour le temps de calcul. 2) Le petit pic à 0.87 eV provient des transitions entre les premiers états confinés des puits quantiques. Dans notre modèle, nous n'avons pas tenu compte du confinement quantique des porteurs et ce pic n'apparaît pas dans le spectre calculé. Toutefois, nous verrons dans le prochain chapitre qu'un calcul basé sur la méthode **k·p** montre l'existence de 12 transitions près de 0.86 eV, 8 transitions près de 0.9 eV et 16 transitions près de 0.94 eV qui contribuent à la partie de basse énergie du spectre expérimental.

La portion du signal entre 0.9-1.3 eV dû à la luminescence des niveaux supérieurs des puits quantiques et à la luminescence des barrières est bien décrite par l'approche Monte Carlo semi-classique que nous avons adoptée. Au tableau 4.1, nous comparons les largeurs à mi-hauteur du signal près de 1.1 eV obtenues par les calculs Monte

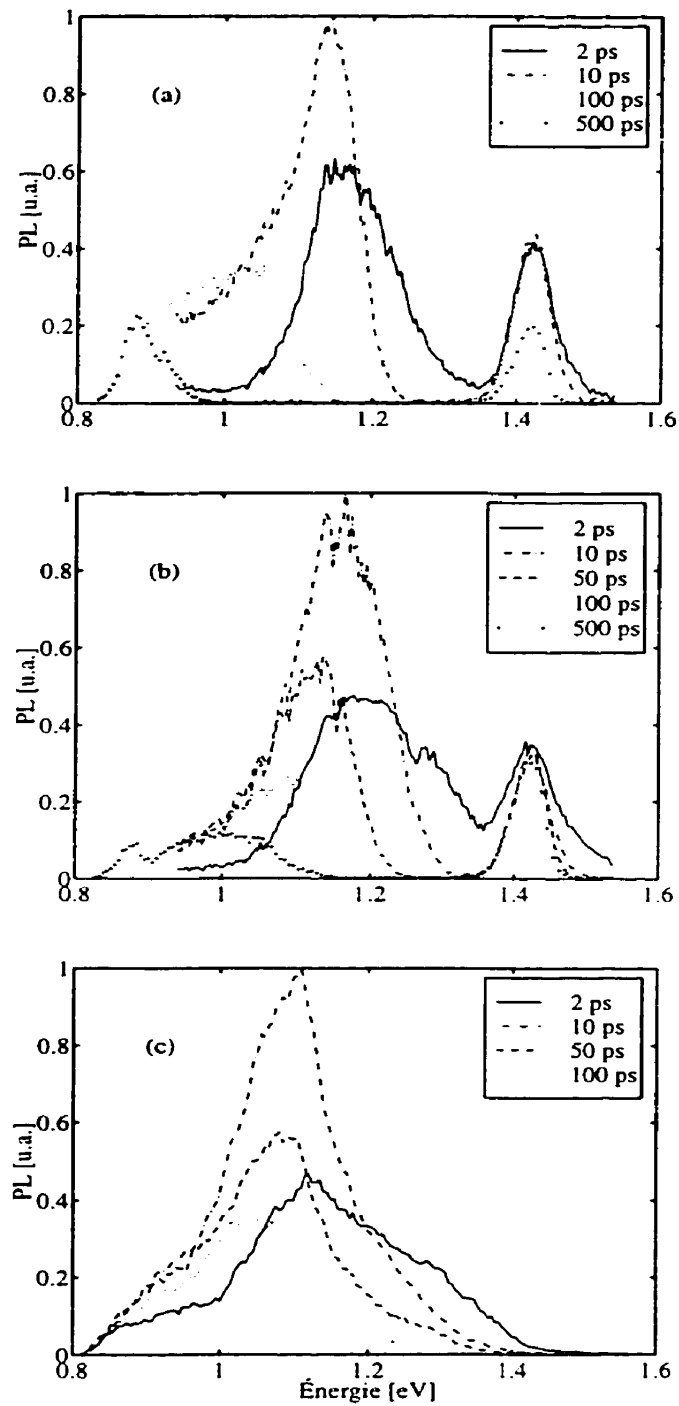


Figure 4.9 : Spectres de photoluminescence (a) expérimentaux à $P=40$ mW, (b) expérimentaux à $P=125$ mW et (c) calculés à $T=77$ K

Tableau 4.1 : Largeur à mi-hauteur du pic près de 1 eV obtenue par les calculs Monte Carlo et par les données expérimentales pour différents temps.

	Monte Carlo	Exp.(125mW)	Exp.(40mW)
	[eV]	[eV]	[eV]
2 ps	0.25	0.22	0.15
10 ps	0.15	0.13	0.15
100 ps	0.17	0.15	0.22

Carlo et par les résultats expérimentaux pour différents temps. L'augmentation de la largeur à mi-hauteur à 100 ps est due au chevauchement entre le signal de photoluminescence des barrières et des puits. Ceci est plus apparent à 40 mW car la luminescence des barrières est plus faible. Pour 125 mW, la différence avec les résultats de Monte Carlo est de l'ordre de 12%. Le bon accord entre les résultats théoriques et les données expérimentales justifie les approximations que nous avons faites et supporte l'interprétation qu'à haute densité ($1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$), la dynamique des porteurs est mieux décrite par l'approche semi-classique.

Les résultats indiquent que dans les 2 premières picosecondes, les porteurs photoexcités chauds se refroidissent par émission de phonons optiques. Entre 2 ps et 10 ps, il y a un transfert net d'électrons et de trous des régions de confinement en escalier vers les barrières de la région active et dans les puits. Alors, la densité de porteurs dans les puits augmente, les interactions avec les phonons optiques polaires sont fortement écrantées et les interactions porteur-porteur deviennent de plus en plus importantes. Par conséquent, la plupart des électrons se trouvent dans la région des puits quantiques mais aux énergies supérieures à la profondeur des puits. Après 10

ps, nous voyons l'effet de la recombinaison des porteurs principalement dû au mécanisme de recombinaison Auger. Alors, l'intensité de photoluminescence décroît. Aussi, quand les porteurs se recombinent, l'écrantage des phonons optiques et les interactions porteur-porteur sont moins importants. Les électrons se refroidissent en émettant des phonons et le maximum du pic se déplace vers les énergies inférieures. Notons toutefois que, dans le modèle de recombinaison que nous avons pris, la dépendance en énergie des coefficients est négligée. Donc, le coefficient Auger des porteurs dans les premiers niveaux confinés peut être différent de la valeur choisie dans nos simulations.

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une étude de la dynamique ultra-rapide des porteurs de charge et de la photoluminescence dans une structure InGaAsP/InP à puits quantiques multiples par l'approche Monte Carlo semi-classique. Ainsi, notre modèle de recombinaison a trouvé une application intéressante et fort utile dans l'interprétation des résultats expérimentaux. Nous avons démontré que la recombinaison Auger est le mécanisme de recombinaison principal dans cette structure dans les conditions de forte excitation. Les spectres de photoluminescence calculés en utilisant la méthode Monte Carlo sont en bon accord avec les spectres expérimentaux, surtout dans les barrières et aux hautes énergies des puits quantiques. Cependant, pour expliquer la portion du spectre due aux niveaux inférieurs des puits, nous devons faire appel aux calculs quantiques des éléments de matrice de transition, ce qui est le sujet du prochain chapitre. Les résultats de ce chapitre fournissent donc une estimation de la validité de l'approche semi-classique dans l'étude des nanostructures.

Nous avons aussi montré qu'à haute densité d'excitation, les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons optiques ont un effet significatif sur la dynamique des porteurs et elles sont nécessaires pour expliquer les spectres de photoluminescence expérimentaux. En particulier, les interactions porteur-phonon écrantées sont responsables du refroidissement lent des électrons dans les puits quantiques. En conséquence, entre 2 ps et 100 ps, le signal de photoluminescence des puits provient surtout de la recombinaison des électrons de haute énergie avec les trous moins chauds tandis que la luminescence des barrières est importante dans les 50 premières picosecondes et décroît rapidement par la suite.

CHAPITRE 5

Calcul de la structure de bandes et des transitions optiques

5.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons utilisé la méthode Monte Carlo semi-classique pour étudier la photoluminescence dans une structure à puits quantiques multiples en négligeant la dépendance en énergie des transitions optiques dans les puits. Cependant, dans les puits quantiques, les éléments de matrice optique peuvent dépendre fortement de l'énergie à cause du confinement quantique des porteurs et on doit, en principe, en tenir compte dans le calcul des spectres de photoluminescence. Dans ce chapitre, nous présentons une méthode pour le calcul de bande et des éléments de matrice optique et nous l'appliquons aux structures A et B. Ceci nous permettra de mieux comprendre et interpréter les résultats présentés au chapitre précédent.

5.2 Méthode de solution

En principe les courbes de dispersion électroniques peuvent être obtenues en résolvant l'équation de Schrödinger donnée par l'équation (1.24). La méthode que nous utilisons est basée sur le modèle $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ que nous avons décrit au chapitre 1. Pour appliquer ce modèle aux hétérostructures, nous utilisons l'approximation des fonctions enveloppes (Bastard et Brum, 1986; Gershoni et collab., 1993), c'est-à-dire que, dans chaque couche de la structure, les fonctions d'onde sont de la forme

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp}}{\sqrt{A}} \sum_n F_n(z) u_{n0}(\mathbf{r}) \quad (5.1)$$

où les $u_{n0}(\mathbf{r})$ sont les ondes de Bloch à $\mathbf{k} = 0$, les $F_n(\mathbf{r})$ sont les fonctions enveloppe. Les $\mathbf{k}_\perp$ et $\mathbf{r}_\perp$ sont les composantes du vecteur d'onde et du vecteur position perpendiculaire à la direction de confinement z . A est une aire de normalisation dans le plan des couches. La sommation est limitée aux ondes de Bloch dont l'énergie est près du gap fondamental. Le choix du nombre de fonctions dépend de la nature du problème et comme nous l'avons déjà mentionné, une base incluant un nombre minimum de 8 fonctions (1 bande de conduction et 3 bandes de valence avec la contribution de 2 états de spin) est nécessaire pour traiter les structures qui nous intéressent. L'équation de Schrödinger est alors transformée en un système de 8 équations différentielles couplées de la forme

$$\sum_n H_{mn}(z, k_z, \mathbf{k}_\perp) F_n(z) = \varepsilon F_m(z). \quad (5.2)$$

L'Hamiltonien H est le même que dans le cas du matériau massif de l'équation (1.25) mais avec les modifications suivantes:

- i) k_z est remplacé par $-i \frac{\partial}{\partial z}$,
- ii) Tous les paramètres dépendants du matériau sont maintenant une fonction de z .

exprimés en terme de la fonction Heaviside. Par exemple, à l'interface z_0 entre deux couches A et B , un paramètre quelconque Q devient

$$Q(z) = Q_A + (Q_B - Q_A)\Theta(z - z_0) \quad (5.3)$$

où $\Theta(z - z_0)$ est la fonction Heaviside.

iii) Pour rendre l'Hamiltonien hermitique, dans tous les termes où un paramètre de matériau Q et k_z apparaissent simultanément, nous effectuons les changements

$$\begin{aligned} Qk_z &\longrightarrow \frac{1}{2}(Qk_z + k_zQ) \\ Qk_z^2 &\longrightarrow k_zQk_z \end{aligned}$$

La façon la plus simple de résoudre les équations (5.2) est de projeter les fonctions enveloppe en séries de Fourier (Gershoni et collab., 1993). Le système d'équations différentielles se transforme alors en un système d'équations algébriques. Les fonctions enveloppe sont données par

$$F_n = \frac{1}{\sqrt{Z}} \sum_j F_{nj} e^{2\pi i j z / Z}, \quad (5.4)$$

où les F_{nj} sont les coefficients de Fourier. Ces fonctions d'onde sont périodiques (de période Z) et sont normalisées sur l'intervalle $[-Z/2, Z/2]$. Cette méthode de solution implique que la structure est périodique. Ceci n'est pas gênant car il suffit de choisir Z assez large (donc des barrières larges) de sorte que les repliques périodiques de la structure n'interagissent pas entre elles.

En insérant l'équation (5.4) dans (5.2) et en intégrant sur une période, nous obtenons le système d'équations algébriques suivant:

$$\sum_{n'j'} H_{njn'j'} F_{n'j'} = \varepsilon F_{nj} \quad (5.5)$$

où les éléments de matrice $H_{njn'j'}$ sont

$$H_{njn'j'} = \frac{1}{Z} \int_{-Z/2}^{Z/2} dz e^{-2\pi i j' z / Z} H_{nn'}(z, k_z, \mathbf{k}_\perp) e^{2\pi i j z / Z} \quad (5.6)$$

L'avantage de cette méthode est que ces éléments de matrice sont faciles à évaluer analytiquement car l'intégration des termes qui contiennent des fonctions de Dirac provenant de la dérivé spatiale introduite par k_z , enlève ces discontinuités. Le problème devient alors une simple diagonalisation de matrice qui est en principe de dimension infinie. En général, 200 fonctions de Fourier (ceci donne une matrice 1600×1600 à diagonaliser!) sont suffisantes pour assurer la convergence des solutions.

Après avoir calculé les états et les énergies propres de l'hétérostructure par la méthode que nous venons de décrire, il est aussi intéressant d'évaluer les transitions optiques entre ces états. Dans l'annexe A, nous démontrons que les éléments de matrice optique peuvent être approximés par

$$M_{fi} \approx \hbar \sum_{njn'j'} F_{n'j'}^f F_{nj}^i \text{sinc}[\pi(j' - j)] \hat{\mathbf{e}}_\lambda \cdot \langle u_{n'0} | \mathbf{p} | u_{n0} \rangle \quad (5.7)$$

où les $\langle u_{n'0} | \mathbf{p} | u_{n0} \rangle$ sont déterminés à partir des données expérimentales.

5.3 Résultats et discussion

Dans cette section, nous présentons les résultats obtenus en appliquant la méthode que nous avons décrite ci-dessus aux dispositifs A et B (voir chapitre 3). Les figures 5.1 et 5.2 montrent le diagramme de bandes des états confinés des structures A et B respectivement. Dans ces figures, nous voyons clairement que les bandes d'énergie ne sont pas paraboliques et la dégénérescence entre les trous lourds et les trous légers est levée à $\mathbf{k} = 0$. Ceci est dû au couplage important entre les différentes bandes. Notons toutefois que chaque état est encore doublement dégénéré à cause de la symétrie d'inversion sur les états de spin.

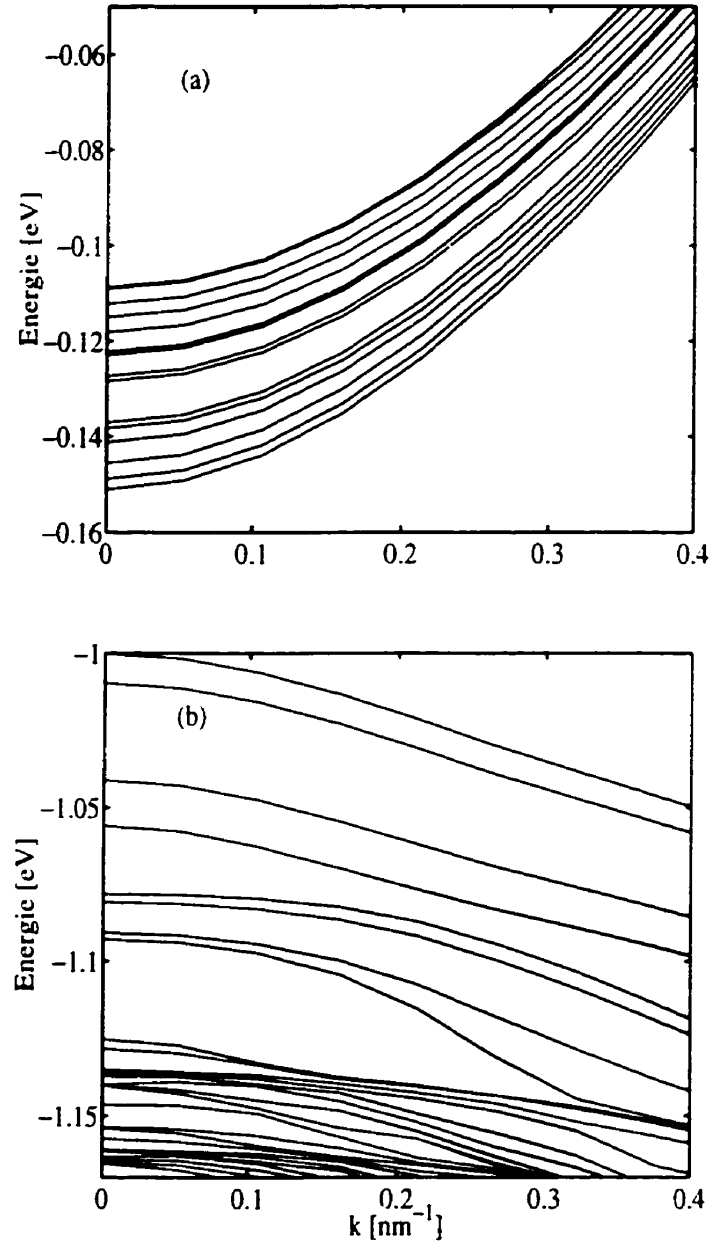


Figure 5.1 : Diagramme de bandes des niveaux confinés dans les puits de la structure A (a) pour les électrons, (b) pour les trous.

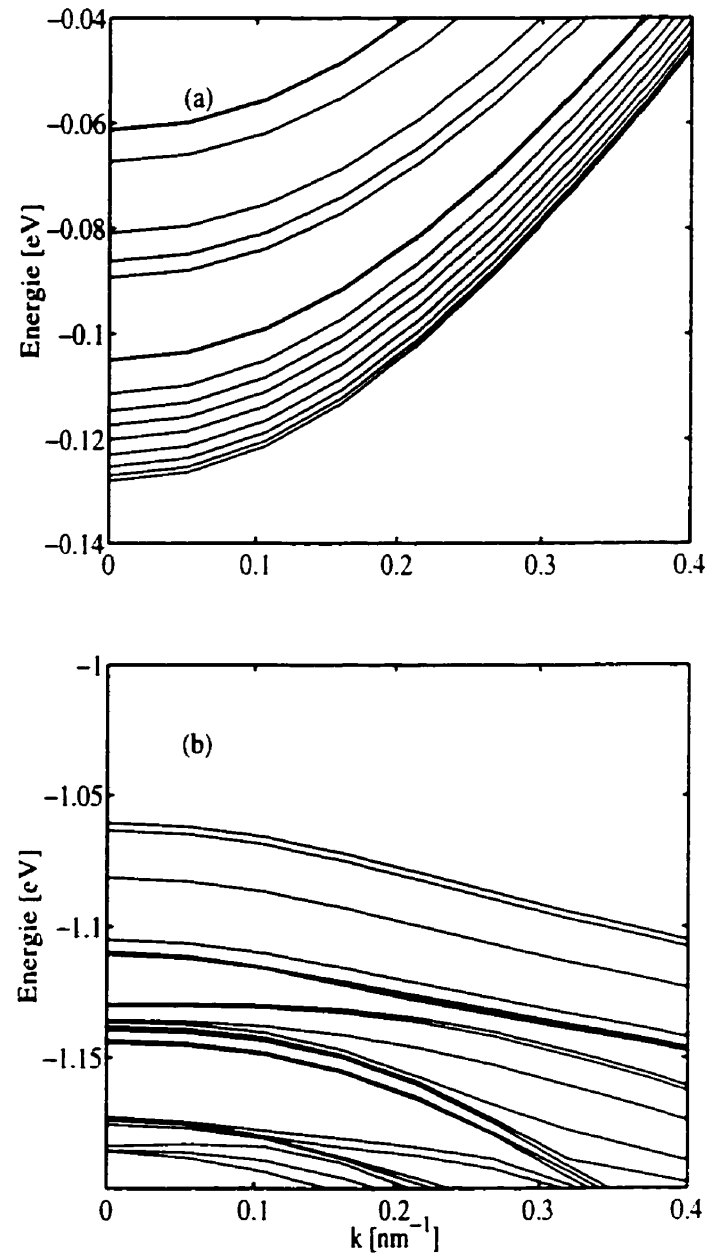


Figure 5.2 : Diagramme de bandes des niveaux confinés dans les puits de la structure B (a) pour les électrons, (b) pour les trous.

En comparant les diagrammes de bande, nous observons que l'écart entre les premiers niveaux de trous n'est pas le même pour la structure A que pour la structure B: les 8 premiers niveaux quantifiés de la structure A sont regroupés dans un intervalle de 0.1 eV tandis que, pour la structure B, nous comptons 16 niveaux quantifiés dans le même intervalle d'énergie. Ceci s'explique par le fait que la profondeur des puits est différente pour chacun des dispositifs. De plus, les résultats d'une étude de Gershoni et collab. publiée en 1993 démontrent que l'écart entre les premiers niveaux de trous s'accroît avec la contrainte des puits quantiques. Rappelons que les puits quantiques de la structure A sont en compression de 1.5% et ceux de la structure B sont en compression de seulement 1%.

Ces résultats ont un effet important sur les spectres de photoluminescence. En effet, plus les niveaux quantifiés sont près les uns des autres, plus le chevauchement entre les signaux de photoluminescence provenant de ces différents niveaux est important. Pour illustrer ce phénomène, nous avons calculé les éléments de matrice optique $M_{cv}(\mathbf{k}_\perp)$ entre chacun des niveaux de conduction c et des niveaux de valence v . À la figure 5.3(a), nous montrons les éléments de matrice des niveaux confinés dans les puits quantiques de la structure A pour $\mathbf{k}_\perp = 0$ en fonction de l'énergie de la transition correspondante. Les niveaux étant doublement dégénérés, à chaque pic correspondent 4 transitions. Les trois premiers pics près de 0.86 eV proviennent des transitions $c4 - v1$, $c3 - v2$ et $c6 - v1$. Notons que, à cause des règles de sélections, certaines transitions, y compris celle entre le premier niveau de conduction et le premier niveau de valence, ne sont pas permises. Nous comparons ces résultats aux spectres de photoluminescence expérimentaux donnés à la figure 5.3(b). Le pic situé près 0.87 eV peut être interprété comme étant la luminescence des transitions $c4 - v1$, $c3 - v2$ et $c6 - v1$. À cause du chevauchement, nous ne distinguons pas les signaux provenant des transitions situées près de 0.9 eV et 0.94 eV.

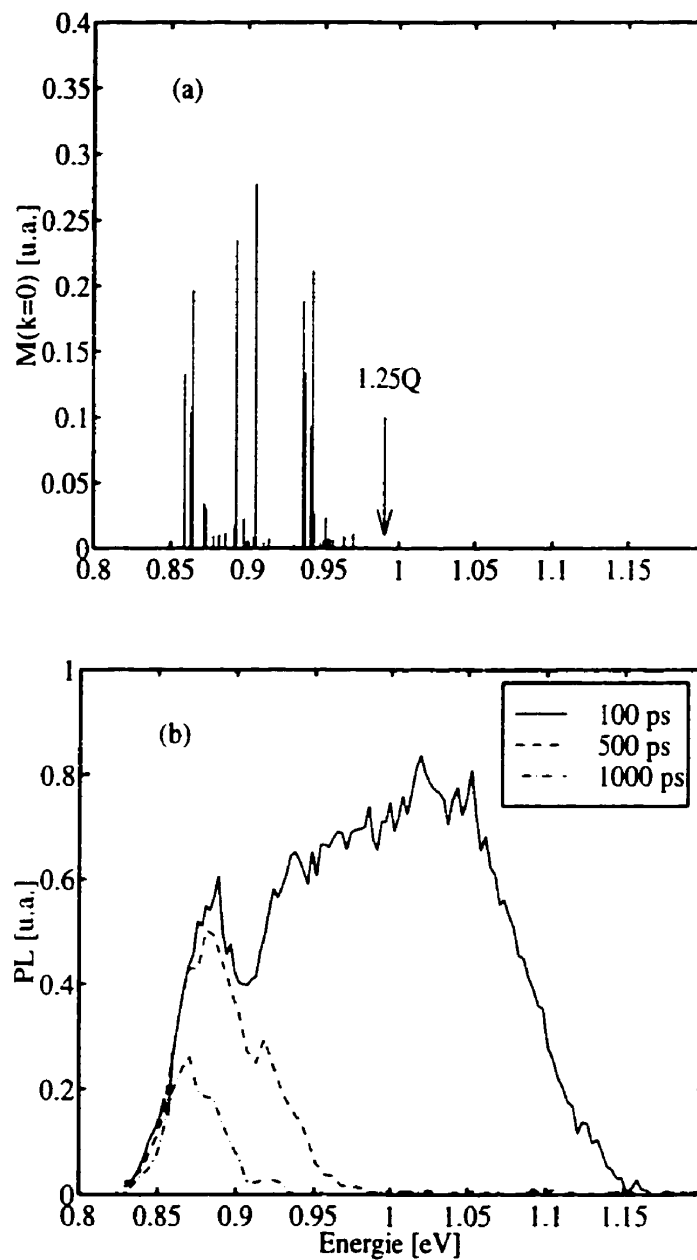


Figure 5.3 : Transitions optiques dans la structure A; (a) les éléments de matrice optique calculés, (b) les spectres de photoluminescence expérimentaux. 1.25Q représente le gap des barrières de confinement en micron.

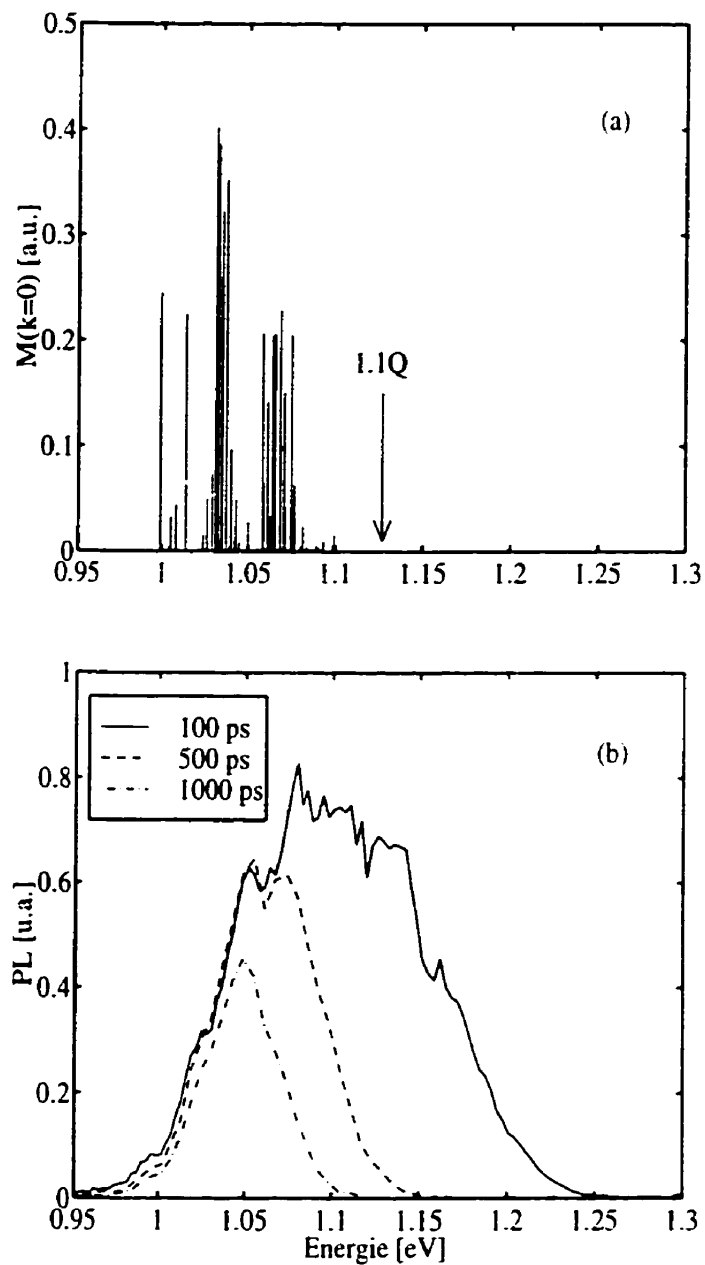


Figure 5.4 : Transitions optiques dans la structure B; (a) les éléments de matrice optique calculés, (b) les spectres de photoluminescence expérimentaux. 1.1Q représente le gap des barrières de confinement en micron.

Pour la structure B, le nombre de niveaux confinés est plus élevé et l'écart entre ces niveaux est plus petit. Les transitions sont alors très rapprochées en fonction de l'énergie comme on peut le voir à la figure 5.4. En conséquence, le chevauchement entre les différentes transitions est plus important et, on ne peut plus distinguer les pics correspondants dans le spectre de photoluminescence.

5.4 Conclusion

Nous avons présenté une méthode basée sur le modèle $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ pour calculer le diagramme de bande et les éléments de matrice des structures à puits quantiques multiples. Nous avons démontré que selon la nature des dispositifs, la structure de bande peut avoir un effet important sur les spectres de photoluminescence. Dans la structure A, l'écart entre les premiers niveaux d'énergie quantifiés est assez grand comparé à la structure B. En conséquence, le chevauchement entre les pics est moins important pour la structure A. Les calculs théoriques sont en bon accord avec les résultats expérimentaux, et expliquent bien la différence entre les spectres des deux structures et la divergence entre les résultats de Monte Carlo et les résultats expérimentaux dans les basses énergies présentés au chapitre précédent.

CONCLUSION

Dans ce mémoire, nous avons étudié le transport des porteurs de charge incluant la capture, la relaxation et la recombinaison, dans les hétérostructures laser à base d'InGaAsP/InP à puits quantiques multiples, en régime stationnaire et hors-équilibre. Pour cela, nous nous sommes essentiellement servis d'un outil théorique très puissant, un simulateur bipolaire Monte Carlo couplé à l'équation de Poisson, et aussi d'un simulateur des équations de diffusion-entraînement et d'un calcul de bande par la méthode $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$.

Dans un premier temps, nous avons présenté un bref rappel de la théorie des semi-conducteurs en mettant l'accent sur les notions sur lesquelles sont basées les méthodes et les approximations utilisées. Cela nous permet de mieux juger de la validité des résultats obtenus dans l'application des approches utilisées.

Au deuxième chapitre, nous avons décrit le modèle et l'algorithme utilisés pour inclure la recombinaison spontanée et Auger qui sont les principaux mécanismes de recombinaison dans les hétérostructures d'InGaAsP/InP à puits quantiques, dans le simulateur Monte Carlo. L'approche que nous avons adoptée a l'avantage d'être relativement facile à implanter et elle peut facilement être appliquée à d'autres

mécanismes de recombinaison si la dépendance en densité de porteurs est connue. De plus, elle ne requiert pas beaucoup de temps de simulation. Pour tester la validité de notre approche, nous l'avons appliquée à un cas simple et nous avons comparé les résultats obtenus à ceux donnés par la résolution directe des équations de taux de recombinaison. Nous avons montré que l'accord entre les résultats obtenus par les deux méthodes était excellent et la précision des résultats n'était affectée que légèrement par le choix du nombre de superporteurs utilisés et du pas de temps de recombinaison.

Pour la présentation des chapitres qui ont suivi, nous avons choisi de refléter *grosso modo* l'ordre dans lequel ce projet de maîtrise a évolué, du plus simple vers le plus sophistiqué. Ainsi, au chapitre 3, nous avons commencé par traiter le cas d'un laser à puits quantiques multiples à l'état stationnaire où les porteurs de charge ne sont pas loin de l'équilibre thermodynamique, en utilisant d'abord l'approche plus simple de l'approximation de diffusion-entraînement et ensuite, l'approche Monte Carlo. La comparaison des résultats obtenus, tels que la densité des porteurs et leurs distributions en énergie, montrent que l'approximation de diffusion-entraînement est suffisante pour caractériser ce genre de dispositifs malgré un désaccord d'environ 15 % dans la région des puits quantiques principalement dû au champ électrique intense qui y règne. Nous avons aussi démontré que la densité de porteurs dans cette région est sensible à l'énergie et à la masse effective des porteurs qui sont, bien sûr, plus rigoureusement traitées par l'approche Monte Carlo. Nous avons ensuite continué notre comparaison en étudiant cette fois-ci la dynamique ultra-rapide des porteurs de charge dans une structure à puits quantiques multiples sous injection optique forte. Les porteurs de charge sont alors chauds et non-thermalisés. En conséquence, les résultats obtenus par l'approche de diffusion-entraînement où la dépendance en énergie des porteurs et le refroidissement par les phonons optiques sont négligés.

divergent considérablement des résultats des simulations Monte Carlo. La capture des porteurs dans les puits se fait alors plus vite, le temps de montée et de descente de la photoluminescence sont plus courts et les taux de recombinaison sont plus élevés. De plus, les simulations Monte Carlo nous ont permis d'étudier l'effet des interactions porteur-porteur et de l'écrantage des phonons optiques polaires qui ont pour effet d'augmenter l'énergie des électrons confinés.

Après avoir démontré au chapitre 3, que l'approximation de diffusion-entraînement n'était pas suffisante pour traiter une hétérostructure à puits quantiques multiples hors-équilibre, nous avons consacré le chapitre 4, à la simulation par la méthode Monte Carlo d'une expérience de photoluminescence résolue dans le temps. Cette méthode, combinée avec le modèle de recombinaison décrite au chapitre 2, nous a permis de faciliter l'interprétation des résultats expérimentaux et aussi de voir la limite de l'approche semi-classique dans l'étude des structures à puits quantiques. Dans un premier temps, nous avons démontré que les interactions porteur-porteur et l'écrantage des phonons optiques avaient un effet significatif sur la dynamique des porteurs et ils étaient nécessaires pour expliquer les spectres de photoluminescence expérimentaux. En particulier, les interactions porteur-phonon écrantées sont responsables du refroidissement lent des électrons dans les puits quantiques. En conséquence, entre 2 et 100 ps, le signal de photoluminescence provient principalement de la recombinaison des électrons de haute énergie avec les trous, tandis que la luminescence des barrières est importante dans les 50 premières picosecondes et décroît rapidement par la suite. Nous avons aussi montré que la recombinaison Auger était le principal mécanisme de recombinaison dans cette structure. Nous avons trouvé que l'accord entre les spectres de photoluminescence théoriques et expérimentaux était bon surtout dans les barrières et aux hautes énergies des puits quantiques. Cependant, l'approche semi-classique ne peut pas expliquer le pic qui apparaît dans

la partie de basse énergie des spectres de photoluminescence expérimentaux, car le confinement quantique des porteurs y est important et il faut tenir compte de la dépendance en énergie des éléments de matrice optique.

Au chapitre 5, nous avons présenté la méthode $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ utilisée pour calculer le diagramme de bande et les éléments de matrice optique et nous l'avons appliqué aux structures à puits quantiques. Les résultats théoriques sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Nous avons montré que l'écart entre les niveaux confinés des puits a un effet important sur les éléments de matrice optique et donc sur les spectres de photoluminescence. Si cet écart est assez élevé, comme dans le cas de la structure étudiée au chapitre 3, un pic provenant de la recombinaison des porteurs des puits confinés apparaît sur le spectre de photoluminescence. Par contre, si cet écart est faible et plusieurs transitions sont permises, le chevauchement entre ces différentes transitions devient important et il efface les pics sur les spectres.

Il reste encore plusieurs améliorations à apporter dans la voie de recherche que nous avons prise. Dans le modèle de recombinaison Auger que nous avons présenté au chapitre 2, nous avons négligé le troisième porteur impliqué dans le processus. L'échauffement dû aux porteurs excités par les collisions Auger peut avoir un effet important. Il serait donc intéressant de l'inclure dans le modèle et d'en étudier les conséquences.

Une autre étape importante à franchir serait de combiner le modèle $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ et l'approche Monte Carlo afin d'inclure le confinement quantique des électrons et des trous dans les simulations et de calculer les spectres de photoluminescence en tenant compte de la dépendance en énergie des éléments de matrice optique. Il serait alors nécessaire de développer de nouvelles expressions des taux de diffusion par les phonons optiques

écranés et des taux de diffusion porteur-porteur.

Il serait aussi intéressant d'inclure les phonons chauds dans le modèle Monte Carlo. En effet, il existe très peu de travail fait dans la littérature à ce sujet malgré son importance dans l'étude du transport ultra-rapide des porteurs excités dans les nano-structures.

BIBLIOGRAPHIE

- ABOU-KHALIL, M. 1996, "Modélisation du transport des porteurs de charge dans les dispositifs actifs à hétérostructures et à puits quantiques par la méthode Monte Carlo", thèse de doctorat, Montréal, École Polytechnique, xxviii-189 p.
- ABOU-KHALIL, M., M. GOANO, B. REID, A. CHAMPAGNE et R. MACIEJKO. 1996, "Capture and escape in quantum wells as scattering events in Monte Carlo simulation", *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 8, n° 1, p.19-21.
- ABOU-KHALIL, M., M. GOANO, B. REID, A. CHAMPAGNE et R. MACIEJKO. 1997, "Monte carlo calculation of the electron capture time in single quantum-wells", *Journal of Applied Physics*, vol. 81, p.6438-6441.
- ABOU-KHALIL, M., D. SCHREURS, B. NAUWELAERS, M. VAN ROSSUM, R. MACIEJKO et K. WU. 1997, "Effect of capture and escape phenomena in Monte Carlo technique on the simulation of the nonlinear characteristics in high electron mobility transistors", *Journal of Applied Physics*, vol. 82, n° 12, p.6312-6318.
- ADACHI, S. 1992, *Physical Properties of III-V Semiconductor Compounds*, New York, John Wiley & Sons, xviii-318 p.

- AGRAWAL, G. P. et N. K. DUTTA. 1986, *Long-Wavelength Semiconductor Lasers*, New York, Van Nostrand Reinhold, xiii-473 p.
- ALAM, M.A. et M.S. LUNDSTROM. 1995, "Transition matrix approach for Monte Carlo simulation of coupled electron/phonon/photon dynamics", *Applied Physics Letters*, vol. 67, p.512-514.
- ASHCROFT, N. W. et N. D. MERMIN. 1976, *Solid State Physics*, Philadelphia, W. B. Saunders Company, xxi-826 p.
- BAHDER, T. B. 1990, "Eight-band $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ model of strained zinc-blende crystals", *Physical Review B*, vol. 41, n° 17, p. 11992-12001.
- BAILEY, D. W., M. A. ARTAKI, C. J. STANTON et K. HESS. 1987. "Ensemble Monte Carlo simulations of femtosecond thermalization of low-energy photoexcited electrons in GaAs quantum wells", *Journal of Applied Physics*, vol. 62, n° 11, p.4638-4641.
- BASTARD, G. et J. A. BRUM. 1986, "Electronic states in semiconductor heterostructures", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 22, n° 9, p. 1625-1644.
- BEBB, H. B. et E. W. WILLIAMS. 1972, "Photoluminescence I: Theory", dans *Transport and Optical Phenomena*, sous la direction de R. K. Willardson et A. C. Beer, vol. 8 de *Semiconductors & Semimetals*, New York, Academic Press, p. 181-320.
- BLOM, P. W. M., J. CLAES, J. E. M. HAVERKORT et J. H. WOLTER. 1994, "Experimental and theoretical study of the carrier capture time", *Optical and Quantum Electronics*, vol. 26, p. S667-S677.

- BLOM, P. W. M., C. SMIT, J. E. M. HAVERKORT et J. H. WOLTER. 1993, "Carrier capture into a semiconductor quantum well", *Physical Review B*, vol. 47, n° 4, p. 2072-2081.
- BRUM, J. A. et G. BASTARD. 1986, "Resonant carrier capture by semiconductor quantum wells", *Physical Review B*, vol. 33, n° 2, p. 1420-1423.
- CHAMPAGNE, A. 1992, "Modélisation des lasers InGaAsP-InP à double hétéro-structure et à double région active", thèse de doctorat, Montréal, École Polytechnique, xxiv-280 p.
- CHELIKOWSKY, J. R., D. J. CHADI, M. L. COHEN. 1973, "Calculated valence band densities of states and photoemission spectra of diamond and zinc-blende semiconductors", *Physical Review B*, vol. 8, p. 2786-2794.
- COHEN, M. L. et T. K. BERGSTRESSER. 1966, "Band structures and pseudopotential form factors for fourteen semiconductors of the diamond and zinc-blende structures", *Physical Review*, vol. 141, n° 2, p. 789-796.
- COHEN-TANNOUDJI, C., B. DIU, F. LALOË. 1994. *Mécanique quantique II*. Hermann, Paris, 600 p.
- CROW, G. C. et R. A. ABRAM. 1997, "Monte Carlo simulations of carrier transport in AlGaInP laser diodes", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 33, n° 9, p. 1551-1556.
- CROW, G. C. et R. A. ABRAM. 1997, "Monte Carlo simulations of charge transport in high speed lasers", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 33, n° 7, p. 1190-1196.
- DATTA, S. 1989, *Quantum Phenomena*, Reading, Addison-Wesley, ix-278 p.

- DAVIS, L. Y. L. LAM, Y. C. CHEN, J. SINGH et P. K. BHATTACHARYA. 1994. "Carrier capture and relaxation in narrow quantum wells", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 30, n° 11, p.2560-2563.
- DEVEAUD, B., J. SHAH, T. C. DAMEN et W. T. TSANG. 1988, "Capture of electrons and holes in quantum wells", *Applied Physics Letters*, vol. 52, n° 22, p. 1886-1888.
- DEVEAUD, B., F. CLÉROT, A. REGRENY, K. FUJIWARA, K. MITSUNAGA et J. OHTA. 1989, "Capture of photoexcited carriers by a laser structure", *Applied Physics Letters*, vol. 55, n° 25, p. 2646-2648.
- DEVEAUD, B., A. CHOMETTE, D. MORRIS et A. REGRENY. 1993. "Carrier capture in quantum wells", *Solid State Communications*, vol. 85, n° 4, p. 367-371.
- DEVEAUD, B., D. MORRIS, A. REGRENY, M. R. X. BARROS, P. BECKER et J. M. GÉRARD. 1994, "Quantum-mechanical versus semiclassical capture and transport properties in quantum well laser structures", *Optical and Quantum Electronics*, vol. 26, p. S679-S689.
- FELDMANN, J., G. PETER, E. O. GÖBEL, K. LEO, H.-J. POLLAND, K. PLOOG, K. FUJIWARA et T. NAKAYAMA. 1987. "Carrier trapping in a single quantum wells with different confinement structures". *Applied Physics Letters*, vol. 51, n° 4, p. 226-228.
- FUCHS, G., C. SCHIEDEL, A. HANGLEITER, V. HÄRLE et F. SCHOLZ. 1993. "Auger recombination in strained and unstrained InGaAs/InGaAsP multiple quantum-well lasers", *Applied Physics Letters*, vol. 62, n° 4, p. 396-398.

- FUJIWARA, A., Y. TAKAHASHI, S. FUKATSU et Y. SHIRAKI. 1995, "Resonant electron capture in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum wells", *Physical Review B*, vol. 51, n° 4, p. 2291-2301.
- GERSHONI, D., C. H. HENRY et G. A. BARAFF. 1993, "Calculating the optical properties of multidimensional heterostructures: Application to the modeling of quaternary quantum well lasers", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 29, n° 9, p. 2433-2450.
- GOODNICK, S. M. et P. LUGLI. 1988a, "Effect of electron-electron scattering on nonequilibrium transport in quantum-well systems", *Physical Review B*, vol. 37, n° 5, p. 2578-2588.
- GOODNICK, S. M. et P. LUGLI. 1988b, "Influence of electron-hole scattering on subpicosecond carrier relaxation in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum wells", *Physical Review B*, vol. 38, n° 14, p. 10135-10138.
- GÜÇLÜ, A.D., R. MACIEJKO, A. CHAMPAGNE et M. ABOU-KHALIL. 1998, "Comparison between the Monte Carlo method and the drift-diffusion approximation in quantum-well laser simulation", *Journal of Applied Physics*, vol. 84, n° 9, p.4673-4676.
- GÜÇLÜ, A.D., R. MACIEJKO, A. CHAMPAGNE, M. ABOU-KHALIL et T. MAKINO. 1998, "Multiple quantum well laser simulation: a comparison between the Monte Carlo method and the drift-diffusion approximation", dans *Application of Photonic Technology 3*, Proceedings of SPIE vol. 3491, p.1077-1081.
- HAUG, A. 1983, "Evidence of the importance of Auger recombination for InGaAsP lasers", *Electronics Letters*, vol. 20, n° 2, p.85-86.

- HAUG, A. 1985, "Theory of the temperature dependence of the threshold current of an InGaAsP laser", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 21, n° 6, p.716-718.
- HAUSSER, S., G. FUCHS, A. HANGLEITER et K. STREUBEL. 1990, "Auger recombination in bulk and quantum well InGaAs", *Applied Physics Letters*, vol. 56, p.913-915.
- HOCKNEY, R. W., et J. W. EASTWOOD. 1988, *Computer simulation using particles*, Adam Hilger, Bristol and New York.
- HOHENESTER, U., P. SUPANCIC, P. KOCEVAR, X. Q. ZHOU, W. KÜTT et H. KURZ. 1993, "Subpicosecond thermalization and relaxation of highly photoexcited electrons and holes in intrinsic and p-types GaAs and InP", *Physical Review B*, vol. 47, n° 20, p. 13233-13245.
- HOLONYAK, N., B. A. VOJAK, H. MORKOC, T. J. DRUMMOND et K. HESS. 1982, "Stimulated emission in a degenerately doped GaAs quantum well", *Applied Physics Letters*, vol. 40, n° 8, p. 658-660.
- JACOBONI, C. et P. LUGLI. 1989. *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*. Wien, Springer-Verlag, x-356 p.
- JONES, G. A. D. SMITH, E.P.O'REILLY, M. SILVER, T.R. BRIGGS, M.J.FICE, A.F.ADAMS, P.D. GREENE, K.SCARROTT et A.VRANIC. 1998, "The influence of tensile strain on differential gain and Auger recombination in 1.5- μm multiple-quantum-well lasers", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 34, n° 5, p.822-833.

- KANE, E. O. 1972, "The $\mathbf{k} - \mathbf{p}$ method", dans *Physical Properties of III-V Compounds*, sous la direction de R. K. Willardson et A. C. Beer, vol. 1 de *Semiconductors & Semimetals*, New York, Academic Press, p. 75-100.
- KERSTING, R., A. KOHL, T. VOSS, K. LEO et H. KURZ. 1992a, "Ultrafast carrier dynamics in strained $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ heterostructures", *Applied Physics A*, vol. 55, p. 596-598.
- KERSTING, R., R. SCHWEDLER, K. WOLTER, K. LEO et H. KURZ. 1992b, "Dynamics of carrier transport and carrier capture in $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ heterostructures", *Physical Review B*, vol. 46, n° 3, p. 1639-1648.
- KERSTING, R., R. SCHWEDLER, A. KOHL, K. LEO et H. KURZ. 1993, "Ultrafast carrier dynamics in $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ heterostructures", *Optical and Quantum Electronics*, vol. 26, p. 705-718.
- KOZYREV, S. V. et A. Y. SHIK. 1985, "Capture of carriers by quantum wells in heterostructures", *Sov. Phys. Semicond.*, vol. 19, p. 1024-1025.
- LAM, Y. et J. SINGH. 1993, "Monte Carlo studies on the well-width dependence of carrier capture time in graded-index separate confinement heterostructure quantum well laser structures", *Applied Physics Letters*, vol. 63, n° 14, p. 1874-1876.
- LAM, Y. et J. SINGH. 1994, "Monte Carlo analysis of the carrier relaxation processes in linear- and parabolic-GRINSCH quantum well laser structures", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 30, n° 5, p.1196-1203.
- LAM, Y. et J. SINGH. 1994, "Monte Carlo simulation of gain compression effects in GRINSCH quantum well laser structures", vol. 30, n° 11, p.2435-2442.

- LAU, K. Y. 1993, "Dynamics of quantum well lasers", dans *Quantum Well Lasers*, sous la direction de P. S. Zory, Boston, Academic Press. p. 217-275.
- LOEHR, J.P., J. SINGH. 1993. "Effect of strain on CHSH Auger recombination in strained InGaAsP on InP", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 29, n° 10, p.2583-2588.
- LUGLI, P., C. JACOBONI et L.REGGIANI. 1987, "Monte Carlo algorithm for hot phonons in polar semiconductors", *Applied Physics Letters*, vol. 50, p.1251-1253.
- LUNDSTROM, M. 1990, *Fundamentals of Carrier Transport*, Reading, Addison-Wesley, x-308 p.
- MARCINKEVICIUS, S., U. OLIN, J. WALLIN, K. STREUBEL et G. LANDGREN. 1994. "Photoexcited carrier transport in InGaAsP/InP quantum well laser structure", *Applied Physics Letters*, vol. 65, n° 16, p. 2057-2059.
- MARCINKEVICIUS, S., U. OLIN, J. WALLIN, K. STREUBEL et G. LANDGREN. 1995, "Femtosecond electron transport in quantum well laser structures with step-graded confinement layers", *Applied Physics Letters*, vol. 66, n° 16, p. 2098-2100.
- MORIN, S., B. DEVEAUD, F. CLEROT, K. FUJIWARA et K. MITSUNAGA. 1991, "Capture of photoexcited carriers in a single quantum well with different confinement structures", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 27, n° 6, p. 1669-1675.
- MORRIS, D., B. DEVEAUD, A. REGRENY et P. AUVRAY. 1993, "Electron and hole capture in multiple-quantum-well structures", *Physical Review B*, vol. 47, n° 11, p. 6819-6822.

- OBERLI, D. Y., J. SHAH, J. L. JEWELL, T. C. DAMEN et N. CHAND. 1989. "Dynamics of carrier capture in an InGaAs/GaAs quantum well trap". *Applied Physics Letters*, vol. 54, n° 11, p. 1028-1030.
- OLSHANSKY, R., C. B. SU, J. MANNING et W. POWAZINIK. 1984, "Measurement of radiative and nonradiative recombination rates in InGaAsP and AlGaAs light sources", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 20, n° 8, p.838-854.
- OLSHANSKY, R., J. LACOURSE, T. CHOW et W. POWAZINIK. 1987, "Measurement of radiative, Auger, and nonradiative currents in 1.3- μm InGaAsP buried heterostructure lasers", *Applied Physics Letters*, vol. 50, p.310-312.
- OSMAN, M. A. et D. K. FERRY. 1987, "Monte Carlo investigation of the electron-hole-interaction effects on the ultrafast relaxation of hot photoexcited carriers in GaAs", *Physical Review B*, vol. 36, p.6018-6032.
- POLLAND, H.-J., K. LEO, K. ROTHER, K. P. J. FELDMANN, G. PETER, E. O. GÖBEL, K. FUJIWARA, T. NAKAYAMA et Y. OHTA. 1988. "Trapping of carriers in single quantum wells with different configurations of the confinement layers", *Physical Review B*, vol. 38, n° 11, p. 7635-7648.
- PREISEL, M. 1994, "Carrier capture and carrier kinetics in biased quantum well devices", thèse de doctorat, Copenhagen, Niels Bohr Institute. viii-110 p.
- PRICE, P.J. 1981, "Two-dimensional electron transport in semiconductor layers. 1. Phonon scattering", *Annals of Physics*, vol. 133, p.217-239.
- RIDLEY, B. K. 1982, "The electron-phonon interaction in quasi-two-dimensional semiconductor quantum-well structures", *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 15, p. 5899-5917.

REJEB. C., R. MACIEJKO, D. MORRIS. à publier.

REID. B. 1997. "Étude de la dynamique ultra-rapide des porteurs dans les nanostructures", thèse de doctorat, Montréal, École Polytechnique.

SHICHIJO, H., R. M. KOLBAS, N. HOLONYAK, R. D. DUPUIS et P. D. DAPKUS. 1978, "Carrier collection in a semiconductor quantum well", *Solid State Communications*, vol. 27, n° 10, p. 1029-1032.

SILVER, M., E. P. O'REILLY et A. R. ADAMS. 1997, "Determination of the wavelength dependence of Auger recombination in lon-wavelength quantum-well semiconductor lasers using hydrostatic pressure", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 33, n° 9, p.1557-1566.

SINGH. J. 1993. *Physics of semiconductors and their heterostructures*. McGraw-Hill. 851 p.

STANTON, C. J., D. W. BAILEY et K. HESS. 1988, "Monte Carlo modeling of femtosecond relaxation processes in AlGaAs/GaAs quantum wells". *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 24, n° 8, p. 1614-1627.

SU, C.B., R. OLSHANSKY. 1982, "Carrier lifetime measurements for determination of recombination rates and doping levels of III-V semiconductor light sources". *Applied Physics Letters*, vol. 41, p.833-835.

TESSLER. N. et G. EISENSTEIN. 1993, "On carrier injection and gain dynamics in quantum well lasers", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 29, n° 6, p. 1586-1595.

UJI, T., K. IWAMOTO et R. LANG. 1983, "Dominance of Auger recombination in InGaAsP light emitting diode current power characteristics", *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 30, n° 4, p.316-320.

- WANG, M. C., K. KASH, C. E. ZAH, R. BHAT et S. L. CHUANG. 1993. "Measurement of nonradiative Auger and radiative recombination rates in strained-layer quantum-well systems", *Applied Physics Letters*, vol. 62, n° 2, p. 166-168.
- WANG, J., P.V. ALLMEN, J-P. LEBURTON et K.J.LINDEN. 1995. "Auger recombination in long-wavelength strained-layer quantum-well structures", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 31, n° 5, p.864-875.
- WEISBUCH, C. et B. VINTER. 1991, *Quantum Semiconductor Structures*, Boston, Academic Press, xii-252 p.
- WEISS, S., J. M. WIESENFELD, D. S. CHEMLA, G. RAYBON, G. SUCHA, M. WEGENER, G. EISENSTEIN, C. A. BURRUS, A. G. DENTAI, U. KOREN, B. I. MILLER, H. TEMKIN, R. A. LOGAN and T. TANBUN-EK. 1992. "Carrier capture times in 1.5 μm multiple quantum well optical amplifiers", *Applied Physics Letters*, vol. 60, p.9-11.
- WINTNER, E. et E. P. IPPEN. 1984, "Nonlinear carrier dynamics in GaInAsP compounds", *Applied Physics Letters*, vol. 44, p.999-1001.
- YOKOYAMA, K. et K. HESS. 1986, "Monte Carlo study of electronic transport in $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$ ", *Physical Review B*, vol. 33, n° 8, p. 5595-5606.
- YU, Y., M. CARDONA. 1996, *Fundamentals of semiconductors*, Springer-Verlag, 613 p.
- ZOU, Y., J. S. OSINSKI, P. GRODZINSKI, P. D. DAPKUS, W. C. RIDEOUT, W. F. SHARFIN, J. SCHLAFFER et F. D. CRAWFORD. 1993, "Experimental study of Auger recombination, gain, and temperature sensitivity of 1.5 μm compressively strained semiconductor lasers", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 29, n° 6, p. 1565-1575.

ANNEXES

ANNEXE A

Calcul des transitions optiques

A.1 Base de Bloch orthonormée

Pour le calcul de la structure de bandes et des éléments de matrice optique par la méthode $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, nous utilisons la base de Bloch orthonormée. Cette base peut être exprimée en fonction des fonctions d'onde hydrogénoïdes, $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ et $|s\rangle$ (Bahder, 1990)

$$\begin{aligned}
 |u_{10}\rangle &= |s\rangle\chi_1, \\
 |u_{20}\rangle &= |s\rangle\chi_1, \\
 |u_{30}\rangle &= \frac{-i}{\sqrt{6}}(|x\rangle + i|y\rangle)\chi_1 + i\sqrt{\frac{2}{3}}|z\rangle\chi_1, \\
 |u_{40}\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}}(|x\rangle + i|y\rangle)\chi_1, \\
 |u_{50}\rangle &= \frac{-i}{\sqrt{2}}(|x\rangle - i|y\rangle)\chi_1, \\
 |u_{60}\rangle &= \frac{i}{\sqrt{6}}(|x\rangle - i|y\rangle)\chi_1 + i\sqrt{\frac{2}{3}}|z\rangle\chi_1, \\
 |u_{70}\rangle &= \frac{-i}{\sqrt{3}}(|x\rangle - i|y\rangle)\chi_1 + \frac{i}{\sqrt{3}}|z\rangle\chi_1, \\
 |u_{80}\rangle &= \frac{-i}{\sqrt{3}}(|x\rangle + i|y\rangle)\chi_1 - \frac{i}{\sqrt{3}}|z\rangle\chi_1,
 \end{aligned} \tag{A.1}$$

où χ_1 et χ_1 représentent les deux états possibles du spin de l'électron. Les u sont les fonctions propres exactes de l'équation (1.25) à $\mathbf{k} = 0$. $u_{1,2}$, $u_{3,6}$, $u_{4,5}$ et $u_{7,8}$

correspondent respectivement aux électrons, trous légers, trous lourds et trous *split-off*.

A.2 Calcul des éléments de matrice optique

Dans l'approximation dipolaire électrique, les éléments de matrice optique sont donnés par

$$M_{fi} = \langle \Psi_f | \hat{\mathbf{e}}_\lambda \cdot \mathbf{p} | \Psi_i \rangle. \quad (\text{A.2})$$

En insérant les équations (5.1) et (5.4) dans (A.2) nous obtenons

$$M_{fi} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{njn'j'} F_{nj}^{f*} F_{n'j'}^i \int_V u_{n0}^* \phi_j^{f*} \hat{\mathbf{e}}_\lambda \cdot \mathbf{p}(u_{n'0} \phi_{j'}^i) d^3r \quad (\text{A.3})$$

où nous avons défini

$$\phi_j \equiv e^{-ik_\perp r_\perp} e^{-2\pi i j z / Z}. \quad (\text{A.4})$$

L'intégrale dans l'équation (A.3) peut s'écrire comme

$$\begin{aligned} & \int_V u_{n0}^* \phi_j^{f*} \hat{\mathbf{e}}_\lambda \cdot \mathbf{p}(u_{n'0} \phi_{j'}^i) d^3r \\ &= \int_V u_{n0}^* \phi_j^{f*} \hat{\mathbf{e}}_\lambda \cdot (\mathbf{p} u_{n'0}) \phi_{j'}^i d^3r + \int_V u_{n0}^* \phi_j^{f*} \hat{\mathbf{e}}_\lambda \cdot (\mathbf{p} \phi_{j'}^i) u_{n'0} d^3r. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Puisque les fonctions enveloppe varient lentement sur une maille élémentaire de volume Ω et en supposant que l'intégrale des fonctions de Bloch sur ces mailles est constante dans toute la structure (la variation typique est de l'ordre de 10%), l'équation (A.5) devient

$$\int_V u_{n0}^* \phi_j^{f*} \hat{\mathbf{e}}_\lambda \cdot \mathbf{p}(u_{n'0} \phi_{j'}^i) d^3r$$

$$= \hat{\mathbf{e}}_\lambda \langle u_{n0} | \mathbf{p} | u_{n'0} \rangle \int_V \phi_j^{f*} \phi_{j'}^i d^3r + \langle u_{n0} | u_{n'0} \rangle \int_V \phi_j^{f*} \hat{\mathbf{e}}_\lambda \cdot (\mathbf{p} \phi_{j'}) d^3r \quad (\text{A.6})$$

où

$$\langle u_{n0} | \mathbf{p} | u_{n'0} \rangle \equiv \int_\Omega u_{n0}^* \mathbf{p} u_{n'0} d^3r. \quad (\text{A.7})$$

Comme nous nous intéressons aux transitions entre les bandes de valence et les bandes de conduction et en supposant que la contribution des états de valence (conduction) aux bandes de conduction (valence) est faible, le deuxième terme de droite de l'équation (A.6) est négligeable dans la sommation de l'équation (A.3).

Nous obtenons alors

$$M_{fi} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{njn'j'} F_{nj}^{f*} F_{n'j'}^i \int_V e^{-i(\mathbf{k}_1^f - \mathbf{k}_1^i) \cdot \mathbf{r}_\perp} e^{-2\pi i(j' - j)z/Z} d^3r \hat{\mathbf{e}}_\lambda \langle u_{n0} | \mathbf{p} | u_{n'0} \rangle. \quad (\text{A.8})$$

Cette intégrale est nulle sauf si $\mathbf{k}_1^f \neq \mathbf{k}_1^i$. Ceci implique la conservation de la quantité de mouvement des porteurs dans le plan de confinement. On obtient finalement

$$M_{fi} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{njn'j'} F_{nj}^{f*} F_{n'j'}^i \text{sinc}[\pi(j' - j)] \hat{\mathbf{e}}_\lambda \langle u_{n0} | \mathbf{p} | u_{n'0} \rangle. \quad (\text{A.9})$$

Pour évaluer numériquement cette relation, nous devons calculer les $\langle u_{n0} | \mathbf{p} | u_{n'0} \rangle$. Pour cela, nous utilisons les relations (A.1). De plus, d'après les propriétés de symétrie des harmoniques sphériques, les seuls éléments de matrice non nuls pour les fonctions $|x\rangle$, $|y\rangle$, $|z\rangle$ et $|s\rangle$ sont les suivants:

$$\langle s | p_z | z \rangle = \langle s | p_y | y \rangle = \langle s | p_x | x \rangle = P_0. \quad (\text{A.10})$$

Or, pour la plupart des matériaux III-V, P_0 vaut environ $1 \times 10^{-28} \text{ kg m s}^{-1}$ (Adachi, 1992).

ANNEXE B

Liste des publications

A. D. Güçlü, R. Maciejko, et A. Champagne. 1999, "Simulation of carrier transport and recombination in quantum well devices: a comparison between the Monte Carlo method and the drift-diffusion approximation", soumis à *Journal of Applied Physics*.

A. D. Güçlü, R. Chedly, R. Maciejko, D. Morris, et A. Champagne. 1999. "Photoluminescence study of carrier dynamics and recombination in InGaAsP/InP MQW structures", accepté pour publication à *Journal of Applied Physics*.

A. D. Güçlü, R. Maciejko, A. Champagne et M. Abou-Khalil. 1998. "Comparison between the Monte Carlo method and the drift-diffusion approximation in quantum-well laser simulation", *Journal of Applied Physics*, vol. 84, n° 9, p.4673-4676.

A. D. Güçlü, R. Maciejko, A. Champagne, M. Abou-Khalil et T. Makino. 1998. "Multiple quantum well laser simulation: a comparison between the Monte Carlo method and the drift-diffusion approximation", dans *Application of Photonic Technology 3*, Proceedings of SPIE vol. 3491, p.1077-1081.

A. D. Güçlü, R. Chedly, R. Maciejko, D. Morris, and A. Champagne. 1999, "Étude théorique et expérimentale de la dynamique des porteurs dans une structure In-GaAsP/InP à PQM", Congrès de l'Acfas, présentation orale, à Ottawa, Canada.