

TD 8 : Optique dans les semi-conducteurs et diode lasers

Dans ce TD, on s'intéresse à une classe de lasers construits à partir de semi-conducteurs : les diodes lasers. Rappelons que pour obtenir un effet laser, il y a besoin de deux éléments fondamentaux : une amplification par un milieu à gain et une cavité optique.

1 Optique dans les semi-conducteurs

Avant d'étudier l'effet laser dans les semi-conducteurs, on s'intéresse dans cette partie à l'interaction entre photons, électrons et trous, près du gap du semi-conducteur. *In fine*, on cherche à déterminer le taux d'absorption net R_{abs} d'un tel milieu.

- Rappeler la définition du *gap* d'un semi-conducteur, son ordre de grandeur, ainsi que la structure de bandes d'un semi-conducteur à *gap* direct. Qu'est-ce que la densité d'états ? Que représente le vecteur \vec{k} ?

Correction

Dans un semi-conducteur, à $T = 0$, toutes les bandes sont vides ou remplies. Le *gap* ou bande interdite est la différence d'énergie entre la bande la plus haute remplie (bande de valence BV) et la plus basse vide (bande de conduction BC). En ordre de grandeur : $E_g \sim 1 - 10 \text{ eV}$. Un *gap* direct est tel que le bas de la BC et le haut de la BV sont au même vecteur \vec{k} dans la première zone de Brillouin (fréquent comme GaAs, mais pas tout le temps comme Ge ou Si).

La densité d'états $\rho(E)$ est définie comme : $\rho(E)dE$ est le nombre d'états disponibles par unité de volume et d'énergie entre les énergies E et $E + dE$. Pour la calculer, il y a besoin de trois informations cruciales sur le système : (1) la dimension, (2) le spin des particules, (3) la relation de dispersion $\varepsilon(\vec{k})$. Si cette dernière ne dépend que de $\|\vec{k}\|$, la densité d'états est facilement calculable analytiquement.

Le vecteur \vec{k} est un nombre quantique. Comme dans les atomes où on a les nombres quantiques (n, m, s, m_l, m_s) , dans les solides on a (\vec{k}, n) . Les nombres quantiques permettent d'indexer les états quantiques. Les composantes du vecteur \vec{k} prennent des valeurs discrètes espacées de $2\pi/L$, entre 0 et $2\pi/a$, avec a la taille de la maille du cristal et L la longueur de l'échantillon. Comme $a \ll L$, on pense souvent à \vec{k} comme un vecteur continu dans la PZB. $\hbar\vec{k}$ est appelé *moment cristallin*, et il correspond grossièrement à l'impulsion d'une particule occupant cet état (seulement grossièrement, puisque déjà c'est une quantité périodique).

- À l'équilibre thermique, quelle est la probabilité qu'un état d'énergie E soit occupé ?

Correction

Dès que $T \neq 0$, la BC devient peuplée d'électrons et la BV de trous. Le remplissage des bandes est donné par la fonction de Fermi $f(E) = (1 + e^{\beta(E-\mu)})^{-1}$ avec μ le potentiel chimique. Celui-ci est toujours dans le *gap* d'un semi-conducteur. Sa position exacte étant secondaire, on l'assimile souvent à sa valeur à $T = 0$, qui est l'énergie de Fermi : E_F .

- Pour un processus d'absorption de lumière visible, donner les ordres de grandeur des vecteurs d'onde en jeu. En déduire approximativement le vecteur d'onde final de l'électron ayant absorbé le photon.

Correction

Un processus d'absorption vérifie la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement. Donc $\vec{k}_2 = \vec{k}_{\text{ph}} + \vec{k}_1$. Mais les ordres de grandeur sont assez différents : $k \sim \frac{2\pi}{a} \sim 1 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$ et $k_{\text{ph}} = \frac{2\pi}{\lambda} \sim 1 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$. Ainsi on retiendra que $\vec{k}_2 \approx \vec{k}_1$, les processus d'absorption sont essentiellement verticaux dans la structure de bande.

- On cherche à déterminer le nombre de processus qui autorisent l'absorption d'un photon d'énergie $\hbar\omega$ en respectant la conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement.

- (a) Dans le cas d'une approximation quadratique des relations de dispersion proche du *gap*, exprimer les énergies $E_v(\vec{k})$ et $E_c(\vec{k})$ en fonction du *gap* E_g . On prend le zéro d'énergie au niveau du haut de la bande de valence.

Correction

$$E_v(\vec{k}) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_t} \quad \text{et} \quad E_c(\vec{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}.$$

L'écriture de ces approximations a été calquée sur la relation de dispersion des électrons libres $E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Mais ici, les paramètres m_e et m_t bien qu'homogènes à des masses, ne s'interprètent pas comme des « quantités de matière ». L'électron n'est pas plus léger dans un semi-conducteur. En revanche, son inertie est modifiée de part la présence des autres particules.

- (b) En déduire une expression simple de l'énergie du photon $E_{\vec{k}} = \hbar\omega$ absorbé en fonction de \vec{k} .

Correction

La conservation de l'énergie impose :

$$E_{\vec{k}} = \hbar\omega = E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2} \left(\frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_t} \right) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_r}$$

où m_r est appelée *masse réduite*.

- (c) Déterminer le nombre (ou densité) d'états par unité de volume et d'énergie $\rho_j(\hbar\omega)$ accessibles pour réaliser le processus d'absorption. Cette grandeur s'appelle la *densité d'état jointe*.

Correction

On cherche à calculer la densité d'états associée à des particules : (1) $d = 3$, (2) de spin $1/2$, (3) avec la relation de dispersion ci-dessus. Alors

$$\rho(\hbar\omega)dE = \int \rho(\vec{k})d^3\vec{k} = \frac{2}{(2\pi)^3} \times 4\pi k^2 dk = \frac{1}{\pi^2} k^2 dk$$

où on a utilisé que l'énergie ne dépend que de $\|\vec{k}\|$ pour l'intégrale angulaire. En dérivant la relation $E_{\vec{k}} = \hbar\omega = f(\vec{k})$, on a $dE = \frac{\hbar^2 k}{m_r} dk$, d'où

$$\rho_j(E) = \frac{1}{\pi^2} k \frac{kdE}{dE} = \frac{1}{\pi^2} \sqrt{\frac{2m_r(E - E_g)}{\hbar^2}} \frac{m_r}{\hbar^2} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_r}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_g}.$$

5. Reste maintenant à déterminer si le remplissage de ces états permet effectivement de réaliser un processus d'absorption. Pour cela, utilisons le formalisme des coefficients d'Einstein.

- (a) Donner la définition dans le cas d'un atome à deux niveaux des trois coefficients d'Einstein A , B_{21} et B_{12} relatifs aux processus d'émission spontanée, stimulée et d'absorption respectivement, pour une densité de photons $u(\hbar\omega)$.

Correction

Soit $u(\omega)$ la densité de photons, pour avoir un processus d'un état à l'autre, il faut qu'un électron soit disponible pour le réaliser. Donc un processus d'émission est proportionnel à N_2 et un processus d'absorption à N_1 . De plus, contrairement à l'absorption et l'émission stimulée, l'émission spontanée ne dépend pas des photons présents dans le voisinage du système.

$$\begin{cases} dN_{\text{abs}} = B_{12}N_1u(\omega)dt \\ dN_{\text{sti}} = B_{21}N_2u(\omega)dt \\ dN_{\text{sp}} = A_{21}N_2dt \end{cases}$$

(dans cette expression, il manque les effets de saturation $N - N_i$ et les dégénérescences g_i pour coller au cas des semi-conducteurs).

- (b) Revenons dans le cas d'un semi-conducteur. En calquant les expressions précédentes, exprimer les taux d'absorption, d'émission stimulée et d'émission spontanée.

Correction

Pour absorber un photon, il faut qu'un électron soit disponible dans la bande de valence (proba $f(E_v(\vec{k}))$), et qu'un état soit libre dans la bande de conduction (proba $1 - f(E_c(\vec{k}))$). De plus, il faut que la différence d'énergie vérifie $E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) = \hbar\omega$ (condition implicite dans le cas de l'atome : on prend des niveaux résonnants $E_2 - E_1 = \hbar\omega$). Et avec un raisonnement similaire pour l'émission stimulée, on en déduit :

$$\begin{aligned} g_{\text{abs}} &= B_{vc} f(E_v)(1 - f(E_c))u(\hbar\omega) \\ g_{\text{sti}} &= B_{cv} f(E_c)(1 - f(E_v))u(\hbar\omega) \\ g_{\text{spont}} &= A f(E_c)(1 - f(E_v)) \end{aligned}$$

- (c) Sans tenir compte de l'émission spontanée, en déduire l'expression du taux d'absorption net $r_{\text{abs}}(\vec{k})$ pour une densité de photons $u(\hbar\omega)$.

Correction

Le taux d'absorption net est donc :

$$r_{\text{abs}}(\vec{k}) = g_{\text{abs}} - g_{\text{sti}} = B u(\hbar\omega) [f(E_v)(1 - f(E_c)) - f(E_c)(1 - f(E_v))],$$

où on a utilisé que $B_{vc} = B_{cv}$. Cette relation entre les coefficients d'Einstein est déterminée lorsque l'équilibre est atteint, donc lorsque $u(\hbar\omega)$ est égale à la loi de Planck. Mais ces relations ne dépendent pas de la façon dont elles ont été déterminées, donc elles sont toujours vraies hors d'équilibre.

Finalement

$$r_{\text{abs}}(\vec{k}) = B u(\hbar\omega) (f(E_v) - f(E_c)).$$

- (d) Calculer l'absorption totale R_{abs} provoquée par une onde monochromatique à ω_0 .

Correction

Pour une onde monochromatique à la pulsation ω_0 , on a $u(\hbar\omega) = \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_0)$ (on est très loin de la loi de Planck, donc très loin de l'équilibre pour les photons au passage). Le taux d'absorption total s'écrit

$$R_{\text{abs}} = \int r_{\text{abs}}(\vec{k}) \rho_j(\vec{k}) d^3\vec{k} = \int B u(\hbar\omega) (f(E_v) - f(E_c)) \rho_j(E) dE \quad \text{avec} \quad E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) = \hbar\omega_0$$

et l'intégrale se simplifie avec la fonction de Dirac :

$$R_{\text{abs}} = B (f(E_v) - f(E_c)) \rho_j(\hbar\omega_0) \quad \text{avec} \quad E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) = \hbar\omega_0.$$

- (e) Est-il possible d'avoir un effet laser à l'équilibre ?

Correction

Pour avoir un effet laser, il faut que l'absorption se transforme en gain, donc $R_{\text{abs}} < 0$. Mais ceci est impossible à l'équilibre : la fonction de Fermi est une fonction strictement décroissante, donc

$$E_v < E_c \implies f(E_v) > f(E_c).$$

Comme dans le cas atomique, il n'est pas possible d'avoir d'inversion de population à l'équilibre dans un semi-conducteur. Pour obtenir un effet laser, il faut se placer hors d'équilibre.

- (f) Proposer sans calcul une expression pour le taux d'émission spontanée. La simplifier dans le cas où les fonctions de Fermi-Dirac peuvent être approximées à des fonctions de Boltzmann.

Correction

Par analogie avec le taux d'absorption, on peut écrire

$$R_{\text{sp}} = A f(E_c)(1 - f(E_v)) \rho_j(\hbar\omega_0)$$

En général, les BC et BV sont loin l'une de l'autre, et pour la température ambiante on a $\beta(E_c - E_F) \gg 1$

et $\beta(E_F - E_v) \gg 1$. Alors

$$f(E_c) \approx e^{-\beta(E_c - E_F)} \quad \text{et} \quad 1 - f(E_v) = \frac{e^{\beta(E_v - E_F)}}{e^{\beta(E_v - E_F)} + 1} = \frac{1}{e^{\beta(E_F - E_v)} + 1} \approx e^{-\beta(E_F - E_v)}.$$

Finalement, on en déduit que

$$R_{\text{sp}} \propto \sqrt{\hbar\omega_0 - E_g} e^{-\beta(\hbar\omega_0 - E_g)}$$

Lorsqu'on applique une tension sur le semi-conducteur ou qu'on l'éclaire avec de la lumière, on sort de l'équilibre et la description précédente avec la fonction de Fermi n'est en général plus vérifiée. Les processus d'intérêt sont donc le plus souvent hors d'équilibre.

Dans ce cas, les populations d'électrons et de trous ne sont plus en équilibre entre eux, ni même avec le réseau. Un concept dû à Fermi est que faiblement hors d'équilibre, on peut continuer à décrire ces populations avec des fonctions de Fermi. Le niveaux de Fermi E_F est remplacé par des *quasi-niveaux de Fermi*

$$E_{F,c} = E_c - kT \ln\left(\frac{N_c}{n_e}\right) \quad \text{et} \quad E_{F,v} = E_v - kT \ln\left(\frac{N_v}{n_t}\right) \quad (1)$$

où n_e et n_t sont respectivement les densités d'électrons et de trous dans le milieu (supposées très grandes devant les densités dues à l'agitation thermique), et N_c et N_v deux grandeurs relatives aux bandes.

6. Donner l'expression des nouvelles fonctions de Fermi f_c et f_v qui donne les populations des électrons et des trous respectivement. Adapter l'expression du taux d'absorption de la question 5.(c) à cette situation.

Correction

En adaptant les fonctions de Fermi, on a :

$$f_c(E) = \frac{1}{e^{\beta(E - E_{F,c})} + 1} \quad \text{et} \quad f_v(E) = \frac{1}{e^{\beta(E - E_{F,v})} + 1}.$$

Sans refaire les calculs en détail, on devine que le taux d'absorption peut se mettre sous la forme :

$$R_{\text{abs}} = B(f_c(E_c) - f_v(E_v))\rho_j(\hbar\omega_0).$$

7. Est-il possible de rendre le milieu transparent ?

Correction

Rendre le milieu transparent signifie que l'absorption n'a plus lieu. Donc $R_{\text{abs}} \leq 0$. Pour cela, il faut donc $f_c(E_c) \leq f_v(E_v)$. Avec les expressions de la question précédente, on trouve donc que :

$$\hbar\omega = E_c(\vec{k}) - E_v(\vec{k}) \leq E_{F,c} - E_{F,v}.$$

Cette inégalité appelée critère de Bernard-Durrafourg, montre qu'une inversion de population est possible à condition que les potentiels chimiques des électrons et des trous soient suffisamment différents.

Ces quasi-niveaux de Fermi sont fonction de la densité des porteurs de charges. Plus il y a de trous et d'électrons, plus les deux niveaux sont écartés. L'objectif dans la suite est d'apporter des porteurs de charge en imposant un courant électrique dans le semi-conducteur.

2 Fonctionnement d'une LED

Une LED n'est jamais un semi-conducteur seul, il s'agit souvent d'une jonction $p - n$. En effet, une telle jonction de deux semi-conducteurs est un milieu où il est facile d'apporter des courants d'électrons J_e et de trous J_t . La proximité spatiale des porteurs de charges au niveau de la jonction permet une recombinaison électron-trou (qui va compenser cet apport de charges). Pour simplifier, on suppose que la densité d'électrons au niveau de la jonction est la même que celle des trous : $n_e = n_t = n$.

8. Justifier que $J_e = J_t$. On le notera simplement J par la suite.

Correction

Si on a J_e électrons et J_t trous qui entrent dans la jonction par unité de temps, maintenir l'électro-neutralité de la jonction impose $J_e = J_t$.

9. Ce courant de particules entrant dans la jonction est compensé par plusieurs mécanismes de recombinaison. À l'équilibre, on écrit :

$$\frac{J}{qd} = An + Bn^2 + Cn^3 \quad (2)$$

avec d la taille de la jonction. Selon vous, quel est le processus qui correspond à une recombinaison radiative électron-trou ? Proposer une justification des autres termes.

Correction

Une recombinaison électron-trou demande la collision entre un électron et un trou. La probabilité dépend donc de $n_e \times n_t$, donc ici n^2 . On en déduit que c'est le second terme qui décrit ce processus.

Le premier terme ne fait apparaître que n . C'est un processus avec un porteur de charge, et un atome du réseau, un défaut par exemple. Le terme en n^3 fait intervenir 3 porteurs de charges. C'est le phénomène non-radiatif en compétition avec l'émission de photons : en se désintégrant, au lieu de libérer l'énergie sous forme de photon, celle-ci est donnée à un autre porteur (un électron) du système. Celui-ci est alors ionisé, ou promu dans la structure de bandes. Le processus est non-radiatif (en tout cas pas à la longueur d'onde recherchée), c'est l'équivalent de l'effet Auger dans les atomes.

10. Avec la partie précédente, justifier que la longueur d'onde de la lumière émise dépend de la température. Comment varie la largeur spectrale de la lumière émise selon la longueur d'onde ?

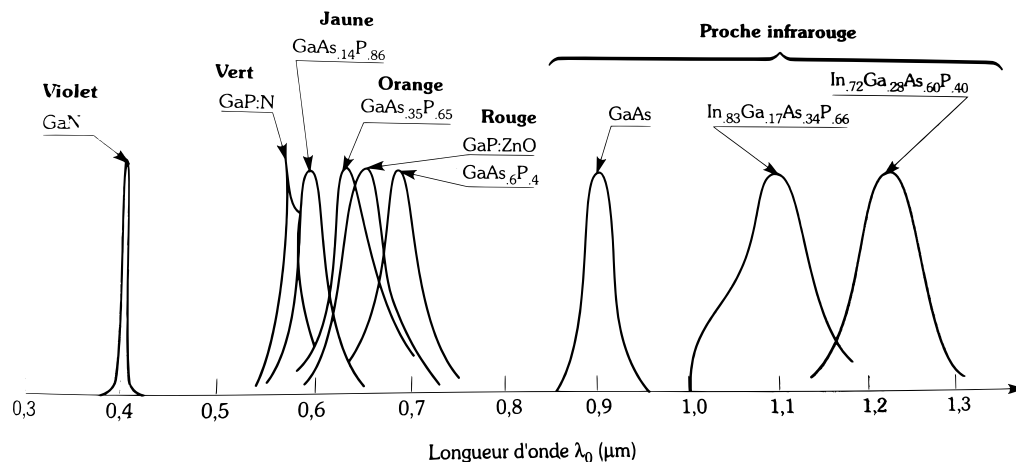
Correction

Ici, l'émission est intégralement due à l'émission spontanée. Reprenons la formule de la question 5.(e), on a $R_{sp} \propto \sqrt{\hbar\omega_0 - E_g} e^{\beta(\hbar\omega_0 - E_g)}$. Dériver cette expression par rapport à ω_0 montre que le maximum est atteint pour

$$\hbar\omega_{\max} = E_g + \frac{kT}{2}$$

Cette expression est intéressante : la couleur d'une diode est donc directement reliée à sa température ! Bon, en regardant les ordres de grandeur ($E_g \sim 1$ eV et $kT \sim 25$ meV), on ne va pas changer une diode rouge en bleue...

En regardant la largeur à mi-hauteur, on voit que celle-ci aussi dépend de la température : $\Delta E = 1,8kT$. Si on regarde en longueur d'onde, cela signifie que $\Delta\lambda = 1,45\lambda_{\max}^2 kT$. La largeur spectrale en longueur d'onde dépend donc de la longueur d'onde maximale. On peut l'observer sur la figure ci-dessous. Les spectres dans l'UV sont très fins, alors que ceux dans l'IR sont larges.



La densité de porteurs est donc reliée au courant injecté par la relation (2). Si on augmente suffisamment J , on arrivera dans un régime hors d'équilibre où l'émission stimulée domine : le régime de *super-luminescence*.

3 Fonctionnement en diode laser

11. Pour espérer avoir un effet laser, il y a besoin d'une cavité. Celle-ci est simplement déterminée par les bords de l'échantillon. L'indice optique du GaAs étant typiquement 3,5, déterminer le coefficient de réflexion R des « miroirs ».

Correction

La réflexion en intensité sur les bords de l'échantillon est donnée par la formule de Fresnel : $R = \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^2$. Pour le GaAs, on trouve $R \sim 30\%$, ce qui en fait un très mauvais miroir. On s'attend donc à beaucoup de pertes, peu d'aller-retours dans la cavité, donc une grande largeur spectrale en sortie.

Malgré ces défauts, cliver un échantillon se fait de façon industrielle, et permet d'avoir des lasers pour des coûts ridiculement faibles, avec un encombrement minimal.

12. Si α (resp. γ) est le coefficient de pertes linéaires (resp. le gain par unité de longueur) dans le milieu et L la longueur effective de la cavité, déterminer l'expression du gain linéique nécessaire γ_{seuil} pour obtenir une amplification laser. Dans les lasers à gaz, on cherche à avoir un très bon R pour abaisser ce seuil. Qu'en est-il dans les diodes lasers ?

Correction

Pour avoir amplification, il faut que les pertes soient inférieures au gain. Les pertes ayant lieu soit sur les miroirs ($1 - R$ est perdu à chaque réflexion), soit dans le milieu (avec des pertes linéiques α). Sur un aller-retour, pour avoir amplification, il faut donc :

$$R^2 e^{-2\alpha L} e^{2\gamma L} \geq 1$$

l'égalité étant atteinte pour $\gamma = \gamma_{\text{seuil}}$ défini par :

$$\gamma_{\text{seuil}} = \alpha + \frac{1}{2L} \ln\left(\frac{1}{R^2}\right)$$

13. Lorsque γ atteint γ_{seuil} , celui-ci y reste saturé, tout comme la densité de porteurs $n \rightarrow n_s$. Dans cette situation, en rajoutant le terme d'émission stimulée $R_{\text{sti}} u$ à l'éq. (2) avec u le nombre de photons dans la cavité, montrer que la puissance de sortie du laser est une fonction affine du courant injecté I .

Correction

Reprenons l'éq. (2), avec une densité maintenue constante, et le terme supplémentaire d'émission stimulée :

$$\frac{J}{qd} = A_{\text{nr}} n_s + B n_s^2 + C_A n_s^3 + R_{\text{sti}} u$$

On obtient donc un flux de photons sortant u qui est une fonction affine de la densité de courant J . u étant proportionnelle à la puissance lumineuse \mathcal{P} , et J au courant électrique I , on en déduit que

$$\mathcal{P} \propto (I - I_s)$$

14. La taille effective de la jonction est de l'ordre de $1 \mu\text{m}$, et la taille de l'échantillon $5 \mu\text{m}$. Déterminer la géométrie du faisceau laser sortant de la diode.

Correction

La géométrie du faisceau est déterminée par les conditions aux limites. En raisonnant comme en diffraction, une taille transverse typique d donne un cône de diffraction en λ/d . Vu les différences de tailles caractéristiques transverses, le faisceau sortant n'est pas du tout à symétrie sphérique (on ne verra pas un point circulaire sur un écran, plutôt une ellipse). En particulier dans la direction transverse à la jonction, on a un cône d'ouverture $\lambda/d \sim 0,5 \text{ rad} \sim 20^\circ$. Cette valeur est sur-estimée, mais typiquement les diodes lasers ont des ouvertures entre 10 et 20°

Correction

t1; dr

On retiendra qu'une diode a **une puissance de sortie qui dépend du courant injecté** dans la diode (car le courant modifie la densité de porteurs n). Elle peut fonctionner en trois modes distincts :

1. Si le gain est négatif, le milieu est opaque, la lumière émise l'est pas émission spontanée. C'est le régime des *diodes électroluminescentes*.
2. Si le gain est positif, mais inférieur au gain γ_s nécessaire pour avoir un milieu amplificateur, l'émission stimulée contribue avec l'émission spontanée à la puissance de sortie : régime de *superluminescence*.
3. Si $\gamma \geq \gamma_s$ (en fait le gain reste clampé à la valeur seuil et ne la dépasse jamais), alors l'émission stimulée est majoritaire, on a une *diode laser*.

La puissance de sortie d'une diode laser s'écrit :

$$\mathcal{P} \propto (I - I_s)$$

À retenir

- ★ Dans un semi-conducteur, les interactions entre photons et électrons sont verticales dans la structure de bandes, puisque le vecteur d'onde des photons est négligeable par rapport à celui des électrons.
- ★ La majorité des phénomènes se passent proches des extrema des bandes de conduction et de valence, qu'on approxime à des paraboles. D'où la notion de masse effective.
- ★ pour le calcul de la densité d'états, quatre paramètres indispensables : 1) les conditions aux limites (toujours les conditions périodiques) 2) la dimension ; 3) le spin ; 4) la relation de dispersion.
- ★ le formalisme des coefficients d'Einstein (absorption, émission spontanée et émission stimulée) pour les atomes fonctionne également dans les semi-conducteurs ;
- ★ le maximum du taux d'émission spontanée dans un semi-conducteur est un compromis entre minimiser l'énergie échangée (transition proche du gap) et l'existence d'états accessibles (densité d'états non nulle). C'est un compromis énergie/entropie, donc pas surprenant que ce maximum dépende de la température.
- ★ Comme dans un nuage d'atomes, avoir un effet laser nécessite d'être hors d'équilibre (donc pas de distribution de Fermi-Dirac unique pour les électrons et les trous)
- ★ En mode diode laser, la puissance de sortie dépend du courant injecté (il n'existe pas d'équivalent dans un laser HeNe par exemple). Ça peut être très pratique pour faire de la modulation ! (et c'est effectivement utilisé de façon universelle)

Références

- [1] Rosencher & Vinter, *Optoélectronique*, ed. Masson (1998)