



ÉTUDE COMPARATIVE DES LASERS A Puits QUANTIQUES CONTRAINS À BASE DE NITRURE WÜRTZITE ET ZINC-BLENDE GaN/AlGaN

N.Mokdad, K.Zitouni, A.Kadri

Laboratoire d'Etude des Matériaux OptoElectroniques et Polymères (LEMOP),
Département de Physique, Faculté des Sciences
Université d'Oran (Es-Senia)

Ce travail porte sur l'étude de diodes lasers à puits quantiques de type I GaN/AlGaN pour deux types de structures : la structure stable würtzite et la structure métastable zinc-blende. On s'intéressera en particulier au gain optique, au gain différentiel et à la densité de courant seuil laser. Pour calculer les sous bandes de conduction, nous utilisons le modèle parabolique. Pour décrire les sous bandes de valence nous adoptons pour la structure zinc-blende le modèle non parabolique H_{ox} de Luttinger-Kohn qui tient compte du couplage spin-orbital et pour la structure würtzite le modèle de Rachba-Sheka-Pikus qui tient compte du champ cristallin et du couplage spin-orbital ; dans les deux structures les effets de la contrainte sont pris en compte via l'hamiltonien de Pikus-Bir. Les calculs de densité de porteurs effectués montrent que l'inversion de population pour la structure zinc-blende se produit avant la structure würtzite. Nous montrons également que le gain optique est plus important pour la structure zinc-blende. Ainsi, l'effet « lasing » se produit à des densités de transparence plus faible dans le GaN Zinc-blende par rapport à la structure würtzite. Ceci est dû au fait que la structure zinc-blende possède une masse effective beaucoup plus faible que celle de la structure würtzite. Par conséquent la densité du courant seuil laser pour la structure zinc-blende est plus faible que celle de la structure würtzite.

Mots clés : Diodes lasers, GaN/AlGaN, gain optique, Wurtzite, Zinc-Blende, théorie **kP**.
* e-mail : kadri.lemop.uo@mail.com

1. Introduction:

La famille des nitrures d'éléments III (GaN[1,2], AlN[3], InN[4] et leurs alliages) cristallisent selon deux phases différentes : l'une cubique et métastable [5] et l'autre hexagonale et stable [6,7]. Ces structures sont utilisées dans la fabrication des transistors à effet de champ avec de grande mobilité d'électrons HEMT (High Electron Mobility Transistor) à hétérojonction GaN/ AlGaN pour atteindre des fréquences de coupure importantes [8]. Elles sont également utilisées dans la photo-détection et l'émission dans le domaine des longueurs des ondes visibles et ultraviolet [9].

La phase cubique présente de nombreux attraits par rapport à la phase hexagonale, la symétrie de

la phase cubique étant plus élevée donnerait lieu à moins de dispersion due aux phonons et engendrerait des propriétés électroniques supérieures.

Dans cet article nous allons commencer par calculer la structure de bande de valence pour le massif GaN mis en sandwich entre $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ au centre de la zone de Brillouin sous compression, dans les cas de la structure würtzite et de la structure zinc-blende. Nous étudierons ensuite le gain optique, le gain différentiel et la densité du courant radiatif pour la structure GaN/AlGaN pour ces deux structures..

Pour décrire les sous-bandes de conduction nous utilisons le modèle parabolique et pour décrire les

bandes de valence de la structure zinc-blende nous utilisons le modèle $H_{6 \times 6}$ de Luttinger-Kohn[10,11]. Pour la structure wurtzite, nous utilisons le modèle $H_{6 \times 6}$ de Rachba-Sheka-Pikus [12]. Nous allons dans un premier temps négliger l'effet du champ électrique qui est présent dans la structure wurtzite.

Nous utilisons ces résultats pour calculer la variation du gain maximum dans la structure laser pour les deux structures zinc-blende et wurtzite et ceux pour une largeur de puits $Lz=50 \text{ \AA}$. Nous présentons ensuite la variation du gain différentiel et nous calculons enfin la densité de courant seuil laser pour ces deux structures.

2. MODÈLE THÉORIQUE:

- 2.1 Structure de bande :

Pour déterminer la structure de la bande de valence nous utilisons la méthode de la fonction enveloppe dans laquelle les effets d'anisotropie pour la structure wurtzite sont pris en compte par l'hamiltonien $H_{6 \times 6}$ donnée par Rachba-Sheka[12] et pour la structure zinc blende via l'hamiltonien $H_{6 \times 6}$ donnée par Luttinger-kohn[10,12]. Les effets de contrainte pour les deux structure sont pris via l'hamiltonien de Pikus-Bir[13]. Le choix de cette méthode s'explique par la facilité relative de sa mise en œuvre, sa description satisfaisante des sous-bandes de conduction et de valence près du centre de zone Brillouin, ainsi que la possibilité qu'elle offre d'inclure dans le modèle des perturbations telles que la contrainte biaxiale, le champ électrique et le champ magnétique, etc.....

2.2 Gain optique:

Le gain optique linéaire pour une structure à puits quantique est donné par[13]:

$$g(\omega) = \frac{2\pi n}{c\hbar} \sum_k \delta(\omega - E_k^c - E_k^v) \left| \langle c, k | \frac{e}{m_0 c} A_p | v, k \rangle \right|^2 \{f_c(E_k^c) + f_h(E_k^v) - 1\}$$

où k est le vecteur d'onde, n l'indice de réfraction, ω est la fréquence angulaire, m_0 est la masse effective de l'électron libre ,

$\delta(\omega - E_k^c - E_k^v)$ est la fonction Lorentzienne qui tient compte du temps de relaxation intrabande qui est estimé de l'ordre de 10^{-13} s ,

$\left| \langle c, k | \frac{e}{m_0 c} A_p | v, k \rangle \right|^2$ est la matrice des moments liée au mode TE qui est générée par les transitions C_1-HH_1 . f_c, f_h sont les fonctions de Fermi données par:

$$f_c = \frac{1}{1 + \exp(\epsilon_{cn} - E_{fc} / k_b T)}$$

$$f_v = \frac{1}{1 + \exp(\epsilon_{vn} - E_{fv} / k_b T)}$$

Où ϵ_{cn} et ϵ_{vn} sont les énergie totales des électrons et des trous pour les sous-bandes n, k_b la constante de Boltzmann, T est la température, E_{fc} et E_{fv} sont les quasis-niveaux de Fermi liés à la densité des électrons et des trous injectés dans le puits.

3. Résultats numériques:

Dans les calculs numériques nous utiliserons pour les hétérostructures GaN/AlGaN les paramètres mentionnés dans les références [15]et[16].

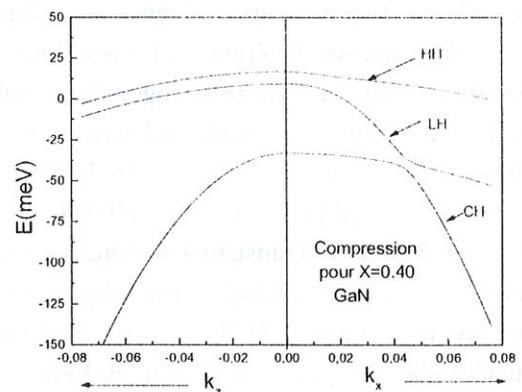


Figure 1: Structure de la bande de valence pour la structure wurtzite GaN mis en sandwich entre $Al_{1-x}Ga_xN$ au centre de la zone de Brillouin Sous compression.

Sur la Figure 2 nous représentons la structure de la bande de valence Pour le massif GaN mis en sandwich entre $Al_{1-x}Ga_xN$ au centre de la zone de Brillouin Sous compression biaxiale pour $x= 0.40$ suivant les deux directions k_x et k_z . Les labels HH, LH, CH représentent l'état trous lourds, légers et le split off du champ cristallin respectivement. Nous remarquons que le split off du champ cristallin (l'écart énergétique entre l'état de trous lourd et la bande de champ cristallin) devient large, notamment la masse effective de la bande HH est lourde suivant les deux directions et la densité conjointe d'état (DOS) au sommet de la bande de valence n'est pas réduite, ceci est dû aux propriétés de la structure WZ contrainte qui appartient au même groupe de symétrie que la structure WZ non contrainte C_{6v} .

Pour la structure zinc blende GaN mis en sandwich entre $Al_{1-x}Ga_xN$ sous compression biaxiale pour $x= 0.40$, voir Figure2, nous remarquons que la masse effective de la bande LH est lourde, elle a le même comportement que la bande HH suivant les deux directions, cela est dû à la faible valeur du couplage spin orbitale $\Delta \approx 20$ meV.

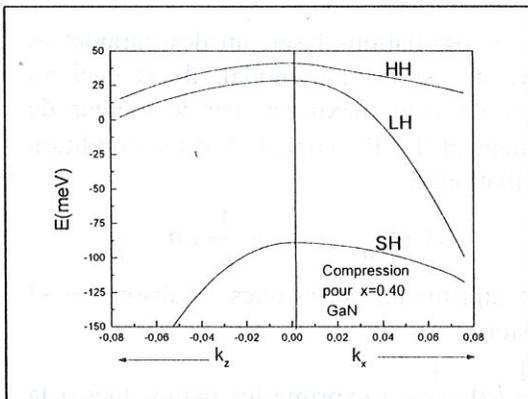


Figure2: Structure de la bande de valence pour la structure zinc-blende GaN mis en sandwich entre $Al_{1-x}Ga_xN$ au centre de la zone de Brillouin Sous compression.

Le calcul des états énergétiques de la bande de conduction et de la bande de valence nous excitonique et la longueur d'onde de l'émission laser en utilisant la relation suivante :

$$\lambda = \frac{1.24}{h\nu} \text{ (}\mu\text{m)} \quad h\nu = E_{tr} = E_g + E_c + E_h \text{ (eV)}$$

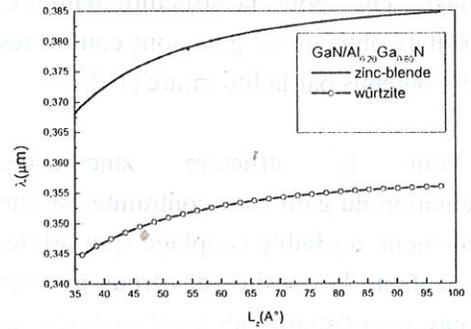


Figure 3: Variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits L_z

Sur la Figure 3 nous représentons la variation de la longueur d'onde en fonction de la largeur du puits L_z en trait plein pour la structure zinc-blende et en cercle vide pour la structure wurtzite. Nous remarquons que les deux structures $GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N$ émettent dans le domaine ultraviolet quelle que soit la largeur du puits considéré.

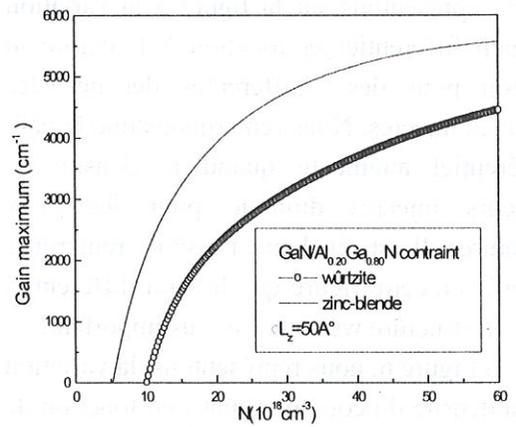


Figure 4: La variation du gain maximum en fonction de la densité des porteurs injectés sous compression biaxiale.

Nous représentons sur la Figure 4 la variation du gain maximum en fonction de la densité des porteurs injectés. Nous remarquons que le gain augmente en fonction de la densité des porteurs injectés pour les deux structures, il est plus important pour la structure zinc-blende. Nous pouvons voir également, que l'effet

lasing se produit respectivement à la densité de transparence dans le GaN $N_{tr}=5.26 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ pour la structure zinc-blende et à $N_{tr}=9.7110^{19} \text{ cm}^{-3}$ pour la structure würtzite. Les résultats obtenus du gain sont conformes avec ceux obtenus par la littérature [16].

Pour la structure zinc-bende, l'augmentation du gain sous contrainte est due principalement au faible couplage spin-orbite. En augmentant la densité des trous injectés dans le cas non contraint, les trous occupent le niveau LS_1 qui ne contribue pas à l'émission laser. Par contre dans le cas contraint, l'écart énergétique entre la sous bande de HH_1 et celle de SL_1 augmente. Ce qui diminue la probabilité d'occupation du niveau SL_1 et par conséquent augmente le gain optique.

Le gain différentiel[17] est la dérivée du gain par rapport à la densité des porteurs injectés.

$$G_{diff} = dg/dN$$

Nous représentons sur la figure 5 la variation du gain différentiel en fonction de l'énergie du photon pour des différentes densités des porteurs injectés. Nous remarquons que le gain différentiel augmente quand la densité de porteurs injectés diminue pour les deux structures. Il est également aisé de remarquer à partir de cette figure que le gain différentiel pour la structure würtzite est plus important.

Sur la Figure 6, nous représentons la variation de la densité du courant radiatif en fonction de la densité des porteurs injectés pour les deux structures. Nous remarquons que la densité du courant radiatif est plus importante pour la zinc-blende que dans la würtzite.

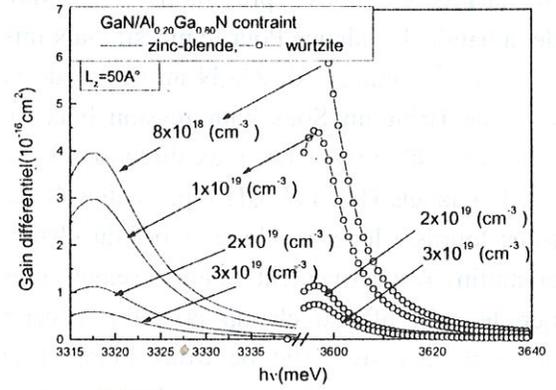


Figure 5: Variation du gain différentiel en fonction de l'énergie du photon.

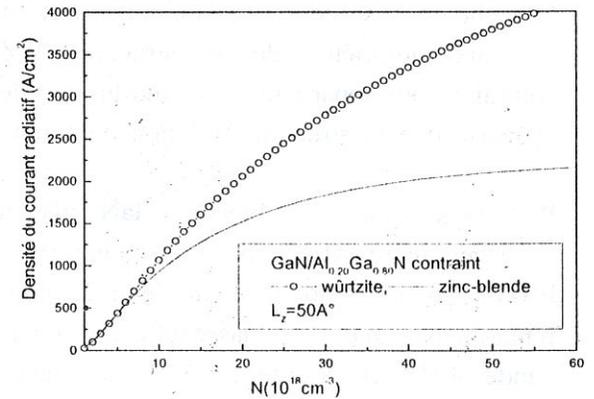


Figure 6: Variation de la densité du courant radiatif en fonction de la densité des porteurs dans la structure GaN/Al_{0.2}Ga_{0.8}N contrainte.

Dans les oscillations laser, un des paramètres importants est le gain modal, il est égal au produit du gain maximum par le facteur de confinement Γ . Il satisfait à cette condition d'oscillation[18] :

$$G g_{th} = \alpha + \frac{1}{L} Ln \frac{1}{R}$$

α : exprime les pertes dues à l'absorption et diffusion

$\frac{1}{L} Ln \frac{1}{R}$: exprime les pertes dues à la transmission des miroirs partiellement réfléchissants.

Γg_{th} : Présente le gain modal au seuil.

Sur La Figure 7, nous présentons le gain modal de la structure GaN/AlGa_N pour le mode TE, pour une largeur de puits de 50 Å pour les deux structures. Nous remarquons que

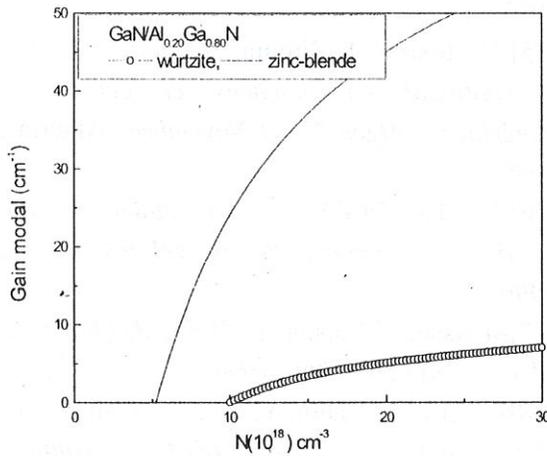


Figure 7 : La variation du gain modal en fonction de la densité des porteurs injectés.

le gain modal pour la structure zinc-blende est plus important que celui de la structure wurtzite ceci est due en particulier au confinement optique plus grand dans la structure zinc-blende à cause de l'indice de réfraction qui est plus important dans la couche active GaN zinc-blende ($n_a=2.91$) que dans les couches adjacentes GaN/Al_{0,2}Ga_{0,8}N ($n_c=2.45$).

Le seuil est atteint lorsque la densité de courant atteint une valeur critique à laquelle le gain est suffisant pour surmonter les pertes de la cavité.

La contrainte affecte la densité du courant seuil et par conséquent la densité des porteurs au seuil. La densité des porteurs au seuil est relié par le gain différentiel et la densité à la transparence par [19] :

$$N_{th} = N_0 + (\Gamma dg/dN)^{-1} \alpha + (\Gamma dg/dNL)^{-1} L_n(1/R)$$

Dans le tableau ci-dessous , nous présentons les valeurs de la densité des porteurs au seuil et la densité du courant du seuil pour une largeur de puits de 50Å et une largeur de cavité de 1000µm pour les deux structures. Nous remarquons que la densité du courant seuil laser pour la structure zinc-blende est plus faible que celle de la structure wurtzite. Nous expliquons cela par le fait que dans la structure zinc-blende la symétrie est brisée et donc la masse des trous lourds est réduite. Cela se traduit par une réduction de la densité d'état au

sommet de la bande de valence et donc le courant seuil est réduit. Ce résultat est conforme avec le résultat du gain modal.

	N_{th} (cm^{-3})	J_{th} (A/cm^2)
Wurtzite	$3.1587 \cdot 10^{19}$	2527
Zinc-blende	$9.219 \cdot 10^{18}$	738

4. Conclusion:

Dans cet article nous avons présenté une étude des diodes lasers à puits quantiques de type I GaN/AlGaN pour deux types de structures : la structure stable wurtzite et la structure métastable zinc-blende. Pour déterminer les propriétés du laser pour les deux structures nous avons considéré la contribution de la transition du premier niveau de la bande de conduction (E_{c1}) et le premier niveau de trous lourds (HH_1). Nous avons montré que ces deux structures émettent dans l'ultraviolet, par conséquent la densité de stockage des informations est très élevées. Cela permet la réalisation des disques compacts (CD :compact disc, CD-RW : compact disc enregistrable, DVD: digital video disc).

Nous avons montré que le gain optique est plus important pour la structure zinc-blende et l'effet « lasing » se produit respectivement à la densité de transparence dans le GaN $N_{tr}=5.26 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ pour la structure zinc-blende qui est plus faible que celle de la structure wurtzite qui est de $N_{tr}=9.7110^{19} \text{ cm}^{-3}$. Nous avons montré que la contrainte biaxiale affecte beaucoup plus la structure zinc-blende que la structure wurtzite ceci est du au propriétés de symétrie de ces deux structures. Pour la structure zinc-blende l'écart énergétique entre les états de trous lourds HH_1 et spin-léger augmente, ce qui entraîne une augmentation du gain optique. Par contre pour la structure wurtzite la contrainte améliore la valeur du gain mais sa valeur reste inférieure à celle de la structure zinc-blende. Par conséquent la densité du courant de seuil

pour la structure zinc-blende est inférieure à celle de la structure wurtzite.

Nous avons montré également que le gain modal pour la structure zinc-blende est plus important que celui de la structure wurtzite, ce qui est en accord avec les résultats obtenus précédemment, ceci est due en particulier au confinement optique considérable dans la structure zinc-blende à cause de l'indice de réfraction important dans la couche active GaN zinc-blende et des couches adjacentes GaN/Al_{0,2}Ga_{0,8}N.

Références :

- [1] H. P. Maruska and J.J.Tietjen, *Appl.Phys.Lett.***15**, p. 327,1969
- [2] B.Gil, O.Briot, and R.L.Aulombard, *Phys.Rev.***B.52** , p. R17028, 1995
- [3] W.M. Yim, E.J.Stofko, P,J.Zanzucchi, J.I.Pankove, M.Ettenberg, and S.L.Gilbert, *J.Apply.Phys.***44**, p. 292, 1973
- [4] R.B.Zetterstrom, *J.Mater.Sci***5**,p.1102, (1970)
- [5]M.Muzita, S.Fujieda, Y.Matsumoto and T.Kawamara, *Jpn.J.Appl.Phys.Part2*, **25**, p. L945, 1986
- [6] S.Nakamura, *Jpn.J.Appl. Phys.* **30**,p. 1620, 1991.
- [7] S.Strite, M.E.Lin and H.Morkoç, *Thin Solid Films*, **vol.231**, p. 197, 1993.
- [8] S.Nakamura, M.Senoh,N.Iwasa, S.Nagahama, T.Yamada, and T.Mukai, *Jpn.J.Appl. Phys.Lett.***34**, p. L1332, 1995.
- [9] M. Kneissi, D.W. Treat, M. Teepe, N. Miyashita, N.M. Johnson, *Appl. Phys. Letters*, **82** , 25, 441, 2003.
- [10] J.M.Luttinger and W.Kohn , *Phys. Rev* **97**, p 869, 1955
- [11] C. Meguenni, K. Zitouni, N. Mokdad, A. Kadri *MRS fall Meeting Proceedings Symposium E, Boston, MA, USA, edited by Wetzel C et al. , 442-445, 2004.*
- [12]E.I.Rashba, *Fiz.Tverd.Tela (Leningrad)* **1**, 407 1959, *Sov.Phys.Solid State* **1**, 368, 1959; E.I.Rashba and V.I.Sheka, *special issue of Fiz.Tverd.Tela (Leningrad)*, p.162, 1959.
- [13] G.E.Pikus, *Zh.Eksp.Teor.Fiz.***41**, p.1258 1961, *Sov.Phys.JETP* **14**, p.898, 1962, **41**, p. 1507, 1961.
- [14]S.L.Chuang, J.O'Gorman and A.F. J. Levi, *IEEE.J.Quantum.Electron*, **vol. 29**,p 1631, 1993.
- [15] N.Mokdad, K.Zitouni, A.Kadri, *Congrès International en Sciences et génie des matériaux, Alger 27-30 Novembre Algeria , 1999.*
- [16] W.J.Fan, M.F.Li, T.C.Chong and J.B.Xia, *Solid state Communications*, **vol 98**, p 737, 1996.
- [17]M.Asada,Y.Suematsu, *IEEE. J. Quantum. Electron*, **vol.30**, p 366, 1994.
- [18]Z.M.Li, M.Dion,Y.Zou, J.Wang, M. Davies, and S.P .Mealister , *IEEE. J. Quantum. Electron*, **vol. 30**, p 538, 1994.
- [19]R.L.Aggrawal, J.J.Zaykowski, B.Lax, *Apply. Phys. Lett*, **vol 62**, p2899, 1993