

Département d'Automatique, Télécommunication et d'Electronique

Projet de Fin d'Etudes

Pour l'obtention du diplôme de Master

Filière : Electronique

Spécialité : Instrumentation

Thème

Détermination théorique de l'indice de réfraction dans les empilements périodiques GaAs /AlGaAs

Préparé par :

- AHOUARI Mahand
- KACI Melissa

Dirigé par :

M.KESSI Ferhat

Examiné par :

Mme. IDJEDARENE

M.LAHRECHE

Année universitaire : 2023/2024

Remerciement

Tout d'abord, nous souhaitons exprimer notre profonde gratitude envers le Tout-Puissant, qui nous a dotés de la force et du courage nécessaires pour avancer sur notre chemin de la vie et devenir la personne que nous sommes aujourd'hui, **Al-Hamdou Lillah**.

Nous tenons également à exprimer notre gratitude envers notre encadrant, Monsieur **KESSI Ferhat**, dont la disponibilité et l'expertise ont contribué à la réalisation d'un travail scientifique de qualité.

Nous tenons également à exprimer notre gratitude au président et aux membres du jury pour leur présence et le temps qu'ils ont généreusement consacré à l'évaluation de ce travail.

Nous remercions également tous les enseignants de département **ATE** de l'université **Abderrahmane MiRA Bejaia** qui ont participé à notre formation pendant tout le cycle universitaire.

Enfin, nous sommes reconnaissants envers tous nos amis qui nous ont adressés leurs vœux de réussite, leurs soutiens moraux étaient d'une grande importance pour nous.

Dédicace

Je dédie ce modeste travail scientifique à **MES PARENTS**, ces guides inestimables qui ont façonné mon chemin et ont contribué à forger l'être que je suis aujourd'hui.

Je dédie également cette œuvre à tous mes enseignants, des premières années de primaire jusqu'aux hautes sphères académiques de l'université, chacun méritant une part de cette dédicace pour avoir nourri mon esprit de leur savoir et de leur passion.

Je dédie ce travail à mon frère **BILLAL**, à mes sœurs **BESMA**, **HANANE**, **HASSIBA**, **SALEMA** et **ROMAÏSSA**, à ma nièce **DILINA** et à mon neveu **DILANE**, symboles de soutien et d'amour dans les moments de doute et de succès.

De même, je le dédie à tous les membres de ma famille et à mes amis, reconnaissant en chacun leur influence et leur soutien précieux.

Je le dédie à tous les fervents de la science et de la recherche, dont la quête incessante du savoir inspire et motive sans cesse.

Enfin je le dédie à ma binôme **MELISSA** qui m'a soutenu tout au long de notre mémoire.

AHOUARI Mahand

Dédicace

Je dédie ce mémoire avec toute ma gratitude et mon amour à mes parents : à mon père **OMAR**, mon idole, qui m'a toujours soutenu depuis mon jeune âge, son soutien inconditionnel, ses sacrifices et ses encouragements insécables m'ont permis de parvenir à ce jour. A ma mère **NADIA**, mon exemple de courage, de patience, de force, de sagesse et son amour inouï ont été une source d'inspiration et de motivation tout au long de ce parcours. Je tiens à leur témoigner toute ma reconnaissance car sans leur présence et leurs conseils avisés, ce travail n'aurait pas vu le jour.

Je dédie ce mémoire à ma grande sœur **SONIA** et son mari **DIAA**, à ma sœur **KATIA** et à mes frères **ADEL** et **NASSIM** qui étaient toujours là pour moi dans les meilleurs comme dans les pires moments de ma vie. Ils m'ont toujours soutenue et encouragée. Leur confiance en moi et leur courage ponctuel m'ont permis d'affronter mes peurs et d'aller jusqu'au bout du tunnel.

Je le dédie à mon oncle **MOUHAMED**, sa femme **KAMILIA**, leurs enfants **ALICIA** et **ISLEM**, à ma grand-mère **OUANISSA**.

Je le dédie également à mes amies **DJIDA**, **NASSIMA** et **ANIES**, qui étaient présentes en permanence pour m'encourager et me soutenir moralement malgré la distance.

Enfin je le dédie à mon binôme **MAHAND** qui m'a soutenu tout au long de notre travail.

KACI Melissa

Table des matières

Table des matières	4
Liste des figures	
Introduction générale	1
Chapitre I Propriétés optiques des semi-conducteurs GaAs et AlGaAs et modèles d'indice de réfraction pour les milieux multicouches.....	4
I.1 Introduction :	4
I.2 Propriétés des semi-conducteurs GaAs et AlGaAs :	4
I.2.1 Introduction :	4
I.2.2 Structure cristalline :	5
I.2.3 Propriétés électroniques :	6
I.2.4 Propriétés optiques :	8
I.2.4.1 Indice optique complexe :	8
I.2.4.2 Absorption optique et coefficient d'extinction :	9
I.2.4.3 Émission de lumière :	10
I.2.4.4 Indice de réfraction :	10
I.2.4.5 Effet de la dispersion des indices optiques :	10
I.2.5 Hétérostructures à alternance périodique GaAs/AlGaAs :	11
I.2.5.1 Superréseaux et puits quantiques couplés :	11
I.2.5.2 Miroirs de Bragg :	12
I.2.5.3 Cristaux photoniques :	12
I.2.6 Croissance et fabrication :	13
I.3 Modèle de l'indice de réfraction :	14
I.3.1 Introduction :	14
I.3.2 Approximation des milieux effectifs :	15
I.3.2.1 Approximation de l'indice de réfraction moyenné :	15
I.3.2.2 Approximation de l'indice de réfraction équivalent :	16
I.3.3 Rappels d'électromagnétismes :	17
I.3.3.1 Théorie des modes couplés :	20
I.3.4 Méthode rigoureuse des ondes planes (RCWA) :	21
I.3.5 Méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) :	22
I.3.6 Méthode des éléments finis (FEM) :	22
I.3.7 Méthode de la matrice de transfert :	22
I.4 Conclusion :	24
Chapitre II Formalisme théorique des matrices de transfert optique pour les milieux stratifiés.....	25
II.1 Formalise des matrices de Transfert Optique :	25
II.1.1 Introduction :	25
II.1.2 Équations fondamentales de l'optique des milieux stratifiés :	25
II.1.3 Matrices de transfert pour une interface :	29
II.1.4 Matrices de transfert pour une couche homogène :	31

II.1.5 Milieux stratifiés multicouches :.....	33
II.1.6 Coefficient de réflexion, transmission et d'absorption :	36
II.1.7 Distribution du champ électromagnétique :	37
II.2 Application à la structure multicouche périodique GaAs/AlGaAs :.....	38
II.3 Conclusion :	39
Chapitre III Simulation numérique et analyse des propriétés optiques des empilements GaAs/AlGaAs	40
III.1 Introduction :	40
III.2 Algorithme et programme de calcul :	40
III.3 Données d'entrée :	41
III.4 Simulation des propriétés optiques fondamentales :.....	42
III.4.1 Coefficients de réflexion et de transmission :	42
III.4.1.1 Spectres de réflexion et de transmission pour les polarisations TE et TM :...	42
III.4.1.2 Influence de l'épaisseur des couches :	44
III.4.1.3 Influence de l'angle d'incidence :	45
III.4.1.4 Influence du nombre de couches :	46
III.4.2 L'indice de réfraction effectif :.....	47
III.4.2.1 Spectres de l'indice de réfraction effectif pour les polarisations TE et TM :.	47
III.4.2.2 Influence de l'épaisseur :.....	48
III.4.2.3 Influence de l'angle d'incidence :	49
III.4.2.4 Influence du nombre de couches :	50
III.5 Optimisation et applications :.....	51
III.6 Conclusion :	52
Conclusion.....	53
Liste des références.....	55

Liste des figures

Figure I.1 : Maille cristalline du GaAs. En jaune les atomes de l'Arséniure et en gris les atomes du Gallium.....	6
Figure I.2 : Maille cristalline du AlAs. En jaune les atomes de l'Arséniure (As^{3+}) et en gris les atomes du Gallium (Ga^{3-}).....	6
Figure I.3 : Structure de bande du GaAs.....	7
Figure I.4 : Structure de bande d'énergie d'un semi-conducteur à gap direct).....	7
Figure I.5 : Superréseau montrant l'élargissement des niveaux d'énergies fondamentaux en mini-bandes : sous-bande de conduction pour les électrons en bleu et une sous-bande de valence pour les trous en jaune.....	12
Figure I.6 : Configurations des structures photoniques périodiques à une dimension (1D), deux dimensions (2D) et trois dimensions (3D).....	13
Figure I.7 : Exemple de bâti épitaxie par jet moléculaire	14
Figure II.1 : Représentation des champs électromagnétiques et vecteurs d'onde dans deux couches successives d'une structure multicouche dans le cas d'une polarisation p.....	28
Figure II.2 : Champs électriques de part et d'autre d'une interface.....	30
Figure II.3 : Champs électriques de à l'intérieur d'une couche.....	32
Figure II.4 : Champs électriques dans une structure multicouche.....	34
Figure III.1 : Spectre de transmission et de réflexion pour les polarisations TE et TM.....	43
Figure III.2 : Influence de l'épaisseur des couches sur les spectres de transmission et de réflexion pour les polarisations TE et TM.....	44
Figure III.3 : Influence de l'angle d'incidence sur les spectres de transmission et de réflexion pour les polarisations TE et TM.....	45
Figure III.4 : Influence de la longueur d'onde en fonction de nombre de couches pour les polarisations TE et TM.....	46
Figure III.5 : Spectres de l'indice de réfraction effectif pour les polarisations TE et TM	48
Figure III.6 : Variation de l'indice de réfraction effectif en fonction de l'épaisseur pour les polarisations TE et TM.....	49
Figure III.7 : Variation de l'indice de réfraction effectif en fonction de l'angle d'incidence pour les polarisations TE et TM.....	50
Figure III.8 : Variation de l'indice de réfraction effectif en fonction de nombre de couches pour les polarisations TE et TM.....	51

Introduction générale

L'ingénierie des matériaux semi-conducteurs a connu des avancées remarquables au cours des dernières décennies, permettant le développement de nombreux dispositifs optoélectroniques et photoniques innovants. Parmi les matériaux clés, les composés III-V comme l'arséniure de gallium (GaAs) et l'arséniure d'aluminium gallium (AlGaAs) occupent une place prépondérante grâce à leurs propriétés optoélectroniques exceptionnelles et à la maturité de leurs techniques d'épitaxie [1]

Le GaAs massif, avec un gap direct de 1,42 eV à température ambiante, est très prisé pour la réalisation de composants émettant ou détectant dans le proche infrarouge. Ses propriétés de transport électronique élevées le rendent également attractif pour les applications hyperfréquences. L'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ permet d'ajuster continûment la largeur de bande interdite entre 1,42 eV (GaAs) et 2,16 eV (AlAs), offrant un excellent contrôle des propriétés optiques et électroniques.

Un atout majeur de ce système de matériaux réside dans leur quasi-accord de maille, permettant la croissance épitaxiale de superréseaux et multicouches avec une grande pureté cristalline. Cette structuration à l'échelle nanométrique ouvre de nouvelles perspectives en ingénierie optique, notamment pour le développement de cristaux photoniques et de milieux à indice de réfraction contrôlé.

Dans ce contexte, la détermination précise de l'indice effectif des empilements GaAs/AlGaAs revêt une importance cruciale pour la conception optimale de dispositifs optiques intégrés exploitant ces hétérostructures. En effet, l'indice conditionne les phénomènes fondamentaux de propagation, réflexion, réfraction et confinement de la lumière.

De nombreuses études ont porté sur les propriétés optiques de ces multicouches, la plupart se concentrent sur des configurations simples avec un faible nombre de périodes. Dans ce cas, des modèles approchés basés sur des méthodes de milieu effectif ou d'ondes couplées peuvent être appliqués. Cependant, lorsque le nombre de bicouches augmente, les modèles analytiques se complexifient rapidement et l'on doit alors recourir à des simulations numériques par éléments finis ou différences finies temporelles.

Bien que précises, ces approches numériques manquent souvent d'intuition physique, requièrent d'importantes ressources de calcul et ne permettent pas d'obtenir aisément des expressions simples reliant l'indice effectif aux paramètres structuraux. Un modèle analytique prédictif représenterait donc un outil puissant pour la conception rationnelle de structures multicouches à indice contrôlé.

Ce travail vise ainsi à développer un formalisme théorique rigoureux pour le calcul de l'indice de réfraction effectif d'un empilement périodique GaAs/AlGaAs (Arséniure de gallium et Arséniure d'aluminium-gallium) dans le domaine spectral visible. Un bref aperçu des différents chapitres permet d'introduire la démarche adoptée.

Le premier chapitre pose les bases théoriques nécessaires à la modélisation des multicouches GaAs/AlGaAs. Les propriétés optiques fondamentales des deux matériaux constitutifs seront d'abord rappelées, en insistant sur leur dépendance spectrale. Le concept d'indice de réfraction effectif pour un milieu stratifié sera ensuite rigoureusement défini.

La section principale sera consacrée à la présentation détaillée du formalisme matriciel de transfert optique, qui constitue l'outil mathématique central du modèle développé. Après avoir introduit les matrices caractéristiques pour une interface et pour la propagation dans un milieu homogène, les règles de concaténation permettant de traiter des structures multicouches seront explicitées. Enfin, la dérivation de la relation de dispersion effective à partir de la condition de résonance des ondes de Bloch sera décrite.

Dans le second chapitre, on appliquera le formalisme matriciel détaillé précédemment au cas spécifique des empilements GaAs/AlGaAs. La structure périodique constituée d'une alternance de bicouches GaAs/AlGaAs sera d'abord définie de manière rigoureuse.

Les matrices de transfert caractéristiques d'une bicouche élémentaire seront ensuite calculées à partir des indices et épaisseurs des deux couches constitutives. La condition de résonance des ondes de Bloch au sein du réseau périodique permettra alors de déterminer la relation de dispersion effective du milieu multicouche. Enfin, une expression analytique reliant l'indice effectif aux paramètres géométriques et optiques de la structure sera déduite.

Dans le troisième chapitre, le modèle développé sera appliqué à différentes configurations d'empilements GaAs/AlGaAs réalistes. Des simulations numériques permettront d'évaluer la dépendance spectrale de l'indice effectif en fonction des épaisseurs des couches GaAs et AlGaAs constituant la bicouche élémentaire.

Un aspect important sera la recherche des structures optimales permettant d'atteindre un indice effectif cible sur une large gamme spectrale. Cette démarche rationnelle de conception est cruciale pour les applications photoniques visant à contrôler et guider les flux de photons au mieux.

Les prédictions théoriques du modèle seront ensuite confrontées à des résultats expérimentaux issus de la littérature scientifique. Cette étape de validation permettra d'évaluer les forces et limitations de l'approche proposée. Les éventuels écarts seront analysés et des pistes d'amélioration seront proposées.

Pour conclure ce travail, les principaux objectifs et enjeux sur la détermination de l'indice effectif dans les multicouches GaAs/AlGaAs seront récapitulés. L'intérêt d'un tel modèle analytique prédictif à la fois rigoureux et intuitif sera souligné, tant pour les aspects fondamentaux d'électromagnétisme dans les milieux périodiques que pour les applications photoniques concrètes. Les défis théoriques et pratiques à relever seront également soulignés.

Chapitre I :
Propriétés optiques des semi-
conducteurs GaAs et AlGaAs et
modèles d'indice de réfraction pour
les milieux multicouches

Chapitre I :

Propriétés optiques des semi-conducteurs GaAs et AlGaAs et modèles d'indice de réfraction pour les milieux multicouches

I.1 Introduction :

Les matériaux semi-conducteurs composés comme l'arséniure de gallium (GaAs) et l'arséniure d'aluminium gallium (AlGaAs) présentent des propriétés remarquables qui en font des candidats de choix pour de nombreuses applications optoélectroniques. La maîtrise de ces matériaux semi-conducteurs III-V et la compréhension fine de leurs propriétés à différentes échelles sont cruciales pour le développement de dispositifs optoélectroniques innovants et performants pour les télécommunications, l'affichage, l'éclairage et bien d'autres domaines.

Ce chapitre explore les caractéristiques fondamentales de ces matériaux, ainsi que les hétérostructures et nanostructures dérivées dans lesquelles ils sont mis en œuvre.

Nous commencerons par examiner les propriétés intrinsèques du GaAs et de l'AlGaAs, notamment leur structure cristalline, leurs propriétés électroniques et optiques telles que l'absorption, l'émission et l'indice de réfraction. La compréhension de ces propriétés de base est essentielle pour appréhender le comportement de ces matériaux dans des dispositifs.

Nous aborderons ensuite les hétérostructures périodiques GaAs/AlGaAs comme les superréseaux, les puits quantiques couplés, les miroirs de Bragg et les cristaux photoniques. Ces architectures stratifiées ouvrent la voie à un contrôle fin des propriétés optiques et électroniques.

Les techniques de croissance épitaxiale et de fabrication permettant d'obtenir ces hétérostructures et nanostructures seront abordées, en mettant l'accent sur les défis liés à la maîtrise des procédés à l'échelle nanométrique.

Enfin, nous examinerons en détail les différents modèles et méthodes de calcul utilisés pour modéliser et simuler les propriétés optiques de ces structures, tels que l'approximation des milieux effectifs, la théorie des ondes couplées, les méthodes de la matrice de transfert, RCWA, FDTD, FEM et FMM.

I.2 Propriétés des semi-conducteurs GaAs et AlGaAs :

I.2.1 Introduction :

Les semi-conducteurs composés à base d'éléments des groupes III et V du tableau périodique, communément appelés semi-conducteurs III-V, occupent une place prépondérante

dans les domaines de l'électronique et de l'optoélectronique modernes. Grâce à leurs propriétés uniques, ces matériaux ont permis des avancées majeures dans des applications allant des dispositifs haute fréquence aux lasers et diodes électroluminescentes [2].

Parmi les semi-conducteurs III-V les plus répandus, on retrouve l'arséniure de gallium (GaAs) et les alliages ternaires tels que l'arséniure d'aluminium-gallium (AlGaAs). Ces matériaux offrent une mobilité élevée des porteurs de charge, une grande vitesse de saturation des électrons et une meilleure tenue en température par rapport au silicium, ce qui les rend particulièrement intéressants pour les applications de puissance et hyperfréquences.

Dans le domaine de l'optoélectronique, le GaAs et l'AlGaAs jouent un rôle majeur grâce à leur capacité d'émission et de détection efficace de la lumière dans le spectre visible et proche infrarouge. Ils sont au cœur de dispositifs clés tels que les diodes laser, les diodes électroluminescentes et les photodétecteurs utilisés dans les télécommunications par fibre optique, les lecteurs/graveurs de disques optiques, etc. [3].

La composition en aluminium (exprimée en fraction molaire x) permet d'ajuster l'énergie de bande interdite de l'alliage entre celle du GaAs ($x=0$) et celle de l'arséniure d'aluminium AlAs ($x=1$). Cette flexibilité dans l'ingénierie de la bande interdite est extrêmement précieuse pour la conception de dispositifs optoélectroniques et de structures à multi-puits quantiques.

I.2.2 Structure cristalline :

L'arséniure de gallium (GaAs) est un semi-conducteur binaire composé de gallium (Ga) et d'arsenic (As). Le GaAs cristallise dans une structure cubique à faces centrées de type zinc-blende. Dans cette structure, chaque atome de gallium (Ga) est entouré de quatre atomes d'arsenic (As) formant un réseau tétraédrique, et vice-versa. Les liaisons entre les atomes Ga et As sont de nature covalente et principalement de type sp^3 .

L'arséniure d'aluminium-gallium (AlGaAs) est un alliage ternaire formé en remplaçant partiellement les atomes de gallium du GaAs par de l'aluminium (Al). En effet, dans cet alliage les atomes d'aluminium (Al) peuvent se substituer de manière aléatoire aux sites des atomes de gallium dans le réseau cristallin du GaAs. Pour indiquer la composition exacte de cet alliage, on utilise la notation $Al_xGa_{1-x}As$, où x représente la fraction molaire de l'aluminium et $(1-x)$ la fraction molaire du gallium. Cette substitution partielle conduit à une déformation du réseau en raison de la différence de taille entre les rayons atomiques d'Al et

Ga. Cependant, la structure zinc-blende est généralement conservée dans les alliages AlGaAs pour de faibles concentrations en aluminium.

Les figures (I.1) et (I.2) illustrent les structures cristallines des semi-conducteurs GaAs et AlAs [4].

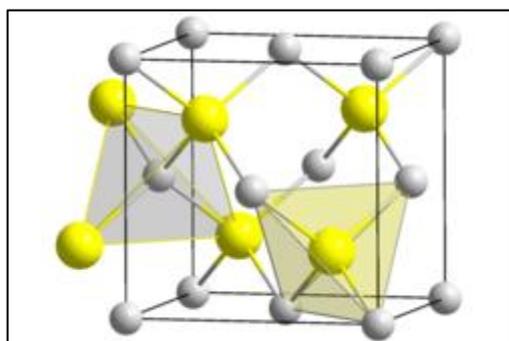


Figure I.1 : Maille cristalline du GaAs.

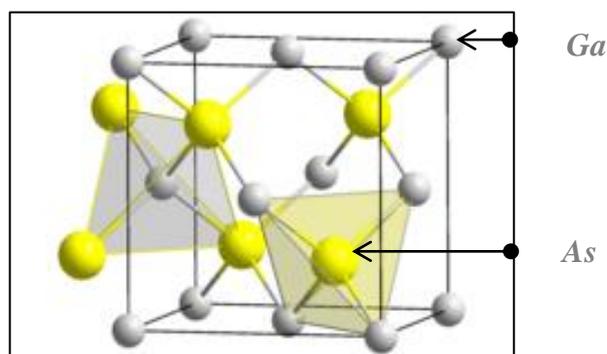


Figure I.2 : Maille cristalline du AlAs.

Le paramètre de maille du GaAs massif à température ambiante est d'environ 5,653 Å. Pour l'AlGaAs, le paramètre de maille varie de manière presque linéaire en fonction de la composition x en aluminium selon la relation suivante [5] :

$$a(x) = 5.6533 - 0.0078x \quad (\text{I.1})$$

La maîtrise de la structure cristalline est cruciale car elle influence directement les propriétés électroniques et optiques de ces matériaux semi-conducteurs, que nous aborderons dans les sections suivantes.

I.2.3 Propriétés électroniques :

Le GaAs est un semi-conducteur à gap direct, c'est-à-dire que le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent au même vecteur d'onde (point Γ de la zone de Brillouin). Cela facilite les transitions optiques verticales entre ces bandes. La figure (I.3) représente la structure des bandes d'énergie du GaAs [6].

progressif les atomes de gallium du GaAs par ceux de l'aluminium (Al), et aura comme effet de transformer le GaAs qui un semi-conducteur à gap direct en un semi-conducteur à gap indirect (voir figure I.4).

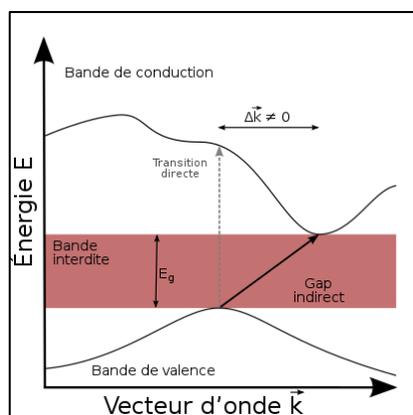


Figure I.4: Structure de bande d'énergie d'un semi-conducteur à gap indirect (AlAs par exemple).

- La mobilité des électrons diminue avec l'augmentation de x en raison du désordre d'alliage.
- La mobilité des trous diminue aussi mais reste supérieure à celle du GaAs jusqu'à $x \approx 0,4$.
- Le dopage de type n reste similaire avec des donneurs peu profonds comme Si. Rappelons qu'un donneur peu profond signifie que l'énergie nécessaire pour arracher les électrons excédentaires de ces atomes dopants au réseau cristallin est faible.
- Pour le dopage de type p, des accepteurs comme Be ou C sont utilisés mais deviennent plus profonds quand x augmente.

Ces variations avec la composition permettent d'ajuster finement les propriétés électroniques de l'AlGaAs pour correspondre aux exigences des différentes applications visées.

La compréhension de ces propriétés électroniques fondamentales est essentielle pour le design et l'optimisation des composants électroniques et optoélectroniques à base de GaAs et AlGaAs.

I.2.4 Propriétés optiques :

I.2.4.1 Indice optique complexe :

Les propriétés optiques d'un matériau sont intrinsèquement liées à son indice de réfraction complexe :

$$\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega) \quad (\text{I.3})$$

La partie réelle $n(\omega)$ décrit les phénomènes de propagation et réfraction, tandis que le coefficient d'extinction $\kappa(\omega)$ rend compte de l'absorption du milieu.

Dans les semi-conducteurs, l'indice optique est fortement dispersif et suit une loi de variation complexe en fonction de l'énergie des photons incidents. Il peut être décrit par des modèles semi-empiriques comme celui d'Adachi [8]. Incorporant des contributions interbandes, intra-bandes, ainsi que des effets excitoniques. Il est important de noter que ces modèles phénoménologiques incorporent un grand nombre de paramètres ajustables, issus de mesures expérimentales sur des échantillons massifs de très haute qualité cristalline. Ils permettent cependant de reproduire avec une excellente précision les données optiques connues pour ces matériaux.

I.2.4.2 Absorption optique et coefficient d'extinction :

Le coefficient d'extinction κ est directement relié au coefficient d'absorption α qui décrit l'atténuation exponentielle de l'intensité lumineuse I dans un milieu absorbant :

$$I(z) = I_0 e^{-\alpha z} \quad (\text{I.4})$$

Où I_0 est l'intensité incidente. La relation fondamentale reliant ces deux grandeurs est :

$$\alpha = \frac{4\pi\kappa}{\lambda} \quad (\text{I.5})$$

Où λ est la longueur d'onde du rayonnement incident dans le vide. On peut donc aisément déduire α des modèles phénoménologiques pour κ .

Dans les semi-conducteurs à gap direct comme le GaAs, les transitions optiques se font verticalement entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction au point Γ de la zone de Brillouin (voir figure I.4).

Les valeurs typiques de α près du seuil sont d'environ 10^4 cm^{-1} pour le GaAs. Pour l'AlGaAs, le seuil d'absorption se décale vers les hautes énergies avec l'augmentation de la teneur en aluminium. Entre les deux seuils E_g (GaAs) et E_g (AlAs), le coefficient d'absorption α reste faible (typiquement $<10^4 \text{ cm}^{-1}$) permettant une bonne transparence optique [9]. Cette fenêtre de transparence, ajustable par la composition x , sera exploitée dans les structures multicouches à étudier. De plus, les différences d'indices complexes entre GaAs et AlGaAs permettront d'obtenir des contrastes optiques intéressants.

I.2.4.3 Émission de lumière :

Sous excitation optique (photons) ou électrique (injection de porteurs), les électrons dans la bande de conduction se recombinent avec les trous dans la bande de valence en émettant des photons par le processus de recombinaison radiative bande à bande. L'énergie des photons émis est déterminée par l'énergie de bande interdite E_g du semi-conducteur :

$$h\nu = E_g \quad (\text{I.6})$$

Où $h\nu$ est l'énergie du photon émis (h est la constante de Planck et ν la fréquence).

Dans le GaAs ($E_g = 1.42 \text{ eV}$), l'émission se produit dans le proche infrarouge à une longueur d'onde d'environ 870 nm à température ambiante.

Dans l'AlGaAs, la longueur d'onde d'émission peut être accordée de l'ultraviolet ($E_g(\text{AlAs}) = 2.16 \text{ eV}$, $\lambda \approx 280 \text{ nm}$) au proche infrarouge en ajustant la composition x en aluminium.

I.2.4.4 Indice de réfraction :

Le GaAs et l'AlGaAs ont un indice de réfraction élevé dans le visible et le proche infrarouge, typiquement $n \approx 3.3 - 3.6$ pour le GaAs à $\lambda = 1 \mu\text{m}$ [10].

L'indice de réfraction présente à la fois une dispersion en fonction de la longueur d'onde (augmente vers les courtes longueurs d'onde) et de la composition d'alliage x dans l'AlGaAs.

Cette forte réfraction permet d'obtenir un fort contraste d'indice avec l'air/vide et donc un confinement optique efficace requis pour les dispositifs optoélectroniques à cavités résonnantes ou guides d'ondes. Les variations d'indice en fonction de x permettent également d'ajuster les propriétés de confinement optique dans les hétérostructures GaAs/ AlGaAs.

I.2.4.5 Effet de la dispersion des indices optiques :

La dispersion, soit la dépendance de l'indice de réfraction à la longueur d'onde λ , est un phénomène clé dans les semi-conducteurs III-V comme le GaAs et l'AlGaAs. Leurs indices optiques élevés dans le visible et le proche infrarouge varient substantiellement avec λ . Cette dispersion provient de la réponse des oscillateurs électroniques aux champs électromagnétiques, décrite par le modèle de Lorentz reliant la constante diélectrique $\varepsilon(\omega)$ à la fréquence ω .

L'indice de réfraction complexe est relié à la constante diélectrique via la formule suivante :

$$\tilde{n}(\omega) = [\tilde{\epsilon}(\omega)]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.7})$$

Pour le GaAs, on passe typiquement de $n \approx 3,6$ à 800 nm à $n \approx 3,3$ à 1,6 μm . Dans l'AlGaAs, la dispersion est ajustable via la fraction molaire x d'aluminium. Par exemple, l'indice à 1,55 μm varie de 3,15 pour $\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{As}$ à 2,95 pour $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{As}$ [11]. Cette forte dispersion doit être exploitée dans la conception des dispositifs photoniques et optoélectroniques fonctionnant sur une large gamme de longueur d'onde.

I.2.5 Hétérostructures à alternance périodique GaAs/AlGaAs :

Une hétérostructure à semi-conducteurs est une structure constituée de plusieurs matériaux semi-conducteurs différents, agencés en couches minces successives. Ces matériaux ont généralement des paramètres de maille et des propriétés électroniques et optiques différentes.

L'empilement contrôlé de ces différents matériaux semi-conducteurs permet de créer des profils de bandes d'énergie complexes dans la direction de croissance. Cela offre un degré de liberté supplémentaire pour l'ingénierie des propriétés des dispositifs à semi-conducteurs par rapport aux matériaux massifs.

Les hétérostructures les plus courantes sont formées en faisant croître de façon épitaxiale des couches d'un semi-conducteur sur un substrat d'un autre semi-conducteur. Par exemple, pour les hétérostructures GaAs/ AlGaAs, on fait typiquement croître des couches alternées de GaAs et d'AlGaAs sur un substrat de GaAs.

I.2.5.1 Superréseaux et puits quantiques couplés :

Un superréseau (voir figure I.5) consiste en un empilement périodique de fines couches alternées de GaAs et d'AlGaAs sur une période typique de quelques nanomètres. Dans cette structure, les puits quantiques GaAs sont couplés par effet tunnel à travers les barrières AlGaAs fines. Ce couplage lève la dégénérescence des niveaux électroniques dans les puits, formant des sous-bandes d'énergie permises dans la direction de croissance. Les superréseaux permettent d'ingénier finement la structure de bandes électronique et d'obtenir des propriétés inhabituelles comme un transport électronique balistique [12].

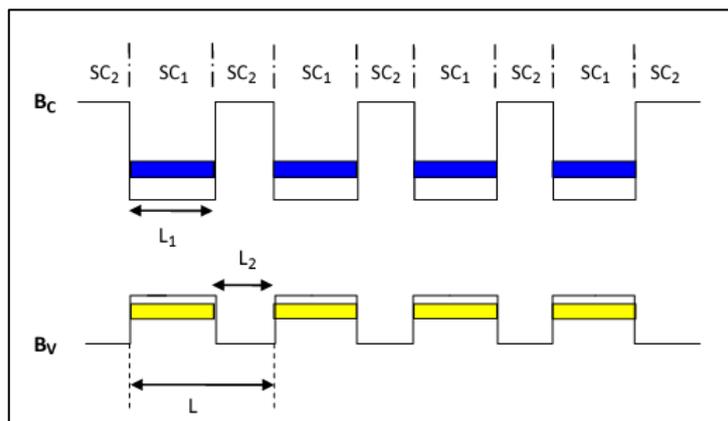


Figure I.5 : superréseau montrant l'élargissement des niveaux d'énergies fondamentaux en mini-bandes : sous-bande de conduction pour les électrons en bleu et une sous-bande de valence pour les trous en jaune.

I.2.5.2 Miroirs de Bragg :

Un miroir de Bragg est une structure photonique constituée d'un empilement périodique de couches minces de matériaux ayant des indices de réfraction alternativement élevés et faibles. Cette alternance d'indices crée des interférences destructives pour une certaine gamme de longueurs d'onde, conduisant à une réflexion presque totale de la lumière incidente dans cette gamme. On peut ainsi réaliser des miroirs hautement réfléchissants pour des longueurs d'onde spécifiques.

Les miroirs de Bragg à base de GaAs/AlGaAs sont très performants et largement utilisés dans les lasers, les diodes électroluminescentes, les cellules solaires multi-jonctions, les micro-cavités, les cristaux photoniques...etc. Leur réflectivité peut atteindre (99,9%) sur une large gamme spectrale [13].

I.2.5.3 Cristaux photoniques :

Les cristaux photoniques sont des structures périodiques diélectriques qui affectent la propagation des ondes électromagnétiques de la même manière que le potentiel périodique d'un cristal affecte les électrons (voir figure I .6). Cette périodicité introduit des bandes interdites photoniques, c'est-à-dire des gammes de fréquences pour lesquelles la lumière ne peut pas se propager dans certaines directions. En contrôlant cette périodicité, on peut ainsi confiner, guider ou inhiber les modes optiques de manière très précise.

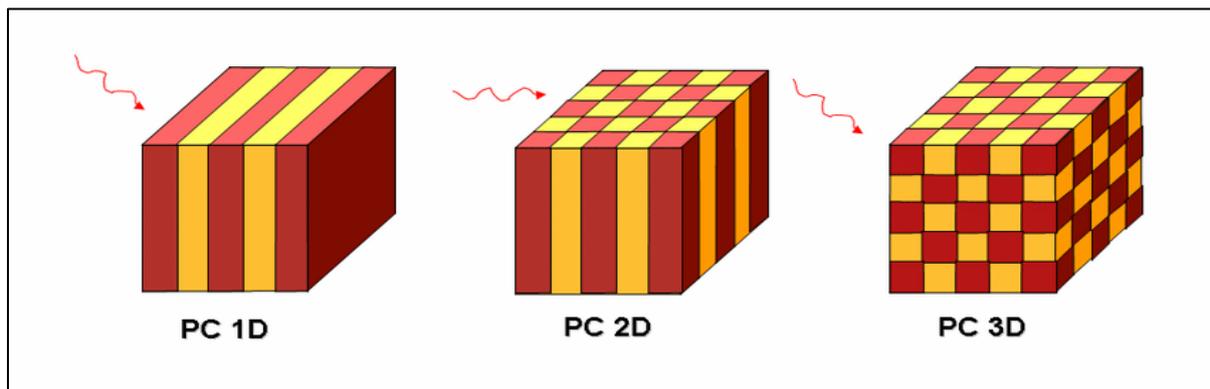


Figure I.6 : Configurations des structures photoniques périodiques à une dimension (1D), deux dimensions (2D) et trois dimensions (3D).

Dans les systèmes GaAs/AlGaAs, les cristaux photoniques trouvent de nombreuses applications grâce à la maturité de ces matériaux III-V et aux techniques d'épitaxie permettant de structurer la périodicité à l'échelle nanométrique : guides d'ondes à cristaux photoniques, couplage et filtrage de la lumière, fibres à cristaux photoniques...etc. [14]

I.2.6 Croissance et fabrication :

La croissance contrôlée d'hétérostructures GaAs /AlGaAs de haute qualité cristalline est essentielle pour exploiter leurs propriétés remarquables. Voici les principales techniques utilisées :

Il existe plusieurs techniques d'épitaxie. Citons en particulier :

- Épitaxie par jets moléculaires (MBE) [15] : Méthode permettant une croissance lente couche par couche sous ultra-vide en contrôlant les flux d'éléments III et V.
- Épitaxie en phase vapeur aux organo-métalliques (MOVPE/MOCVD) [16] : Croissance à partir de précurseurs gazeux organométalliques à plus haute température.

Ces techniques permettent un contrôle précis des épaisseurs, compositions et dopages à l'échelle de la monocouche atomique.

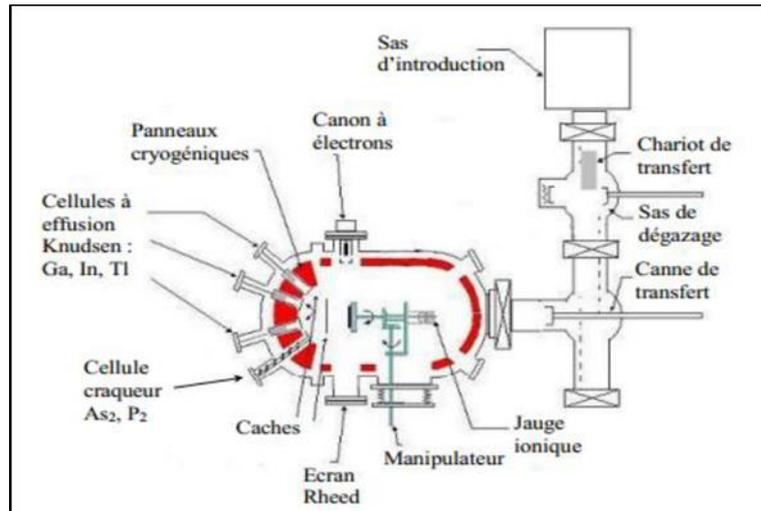


Figure I.7 : Exemple de bâti épitaxie par jet moléculaire [17].

Pour former les hétérostructures périodiques ou à puits/boîtes quantiques, on alterne la croissance de couches ultra-minces de GaAs et AlGaAs pendant l'épitaxie. Des techniques comme la croissance localisée ou les masques ex-situ [18] permettent aussi de fabriquer des nanostructures GaAs/ AlGaAs latéralement contraintes. Un contrôle très précis des conditions de croissance (température, flux...etc.) est indispensable pour éviter les défauts cristallins aux hétérointerfaces.

Après la croissance des hétérostructures, une étape de fabrication comprenant lithographie, gravure, métallisation, etc. permet de réaliser les dispositifs finaux [19]. Des procédés de fabrication collective sur des tranches de semi-conducteurs de taille standard permettent l'industrialisation.

La maîtrise des techniques de croissance épitaxiale a ainsi permis le développement d'une grande variété de dispositifs à base des hétérostructures périodiques GaAs/AlGaAs dans les domaines de l'optoélectronique, de la microélectronique et de la photonique intégrée.

I.3 Modèle de l'indice de réfraction :

I.3.1 Introduction :

L'indice de réfraction effectif n_{eff} représente l'indice "vu" par l'onde se propageant dans le milieu stratifié, tenant compte des réflexions multiples aux interfaces et des couplages entre les modes propres. Il dépend de la polarisation, de la longueur d'onde, des indices et épaisseurs des différentes couches, ainsi que de la géométrie du milieu stratifié.

La connaissance précise de l'indice effectif n_{eff} est cruciale pour la conception et l'optimisation de nombreux dispositifs optoélectroniques et photoniques à base de structures multicouches semi-conductrices. Dans le cas spécifique des hétérostructures GaAs/ AlGaAs, la détermination précise de n_{eff} est essentielle pour prédire et optimiser les propriétés de guidage optique, de confinement des modes, d'accordabilité spectrale, etc. requises pour ces dispositifs clés.

I.3.2 Approximation des milieux effectifs :

L'approximation des milieux effectifs [20] est une approche simple permettant d'estimer l'indice de réfraction effectif n_{eff} d'un milieu stratifié périodique 1D. Elle repose sur la théorie du milieu effectif et consiste à remplacer le milieu réel par un milieu homogène équivalent.

La théorie du milieu effectif stipule que, pour des longueurs d'onde suffisamment grandes devant la période du réseau, les champs électromagnétiques "voient" un milieu homogène avec des propriétés effectives moyennées.

Autrement dit, si la période Λ du réseau est très inférieure à la longueur d'onde λ dans le milieu ambiant, les détails de la structuration périodique deviennent négligeables et le milieu peut être traité comme homogène avec un indice et des propriétés effectives. Cette condition de champ lointain ou quasi-statique s'écrit : $\lambda \gg \Lambda$

I.3.2.1 Approximation de l'indice de réfraction moyenné :

Dans le cadre de l'approximation des milieux effectifs, l'indice effectif n_{eff} du milieu stratifié peut être estimé en calculant une moyenne pondérée des indices des différents matériaux constitutifs :

$$n_{eff} = f_1 n_1 + f_2 n_2 \quad (I.8)$$

Où n_1 et n_2 sont les indices de réfraction des deux matériaux, et f_1 et f_2 leurs fractions volumiques respectives telles que $f_1 + f_2 = 1$.

Pour un réseau 1D constitué de couches d'épaisseurs d_1 et d_2 , avec une période $\Lambda = d_1 + d_2$, les fractions volumiques sont simplement :

$$f_1 = \frac{d_1}{\Lambda} ; f_2 = \frac{d_2}{\Lambda} \quad (I.9)$$

On obtient ainsi la formule approchée :

$$n_{eff} = \left(\frac{d_1}{\Lambda}\right) n_1 + \left(\frac{d_2}{\Lambda}\right) n_2 \quad (\text{I.10})$$

I.3.2.2 Approximation de l'indice de réfraction équivalent :

On considère ici que le front d'onde se propage dans le milieu stratifié comme s'il s'agissait d'un milieu homogène non absorbant. Sur une période Λ , le déphasage $\Delta\Phi$ subi par l'onde est alors :

$$\Delta\Phi = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_{eff} \Lambda \quad (\text{I.11})$$

D'autre part, ce déphasage est aussi la somme des déphasages subis dans chaque couche i :

$$\Delta\Phi = \sum_i \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_i d_i \quad (\text{I.12})$$

Où n_i et d_i sont l'indice de réfraction et l'épaisseur de la couche i . En égalisant les expressions (I.12) et (I.13), on obtient l'approximation suivante pour l'indice effectif :

$$n_{eff} = \sum_i \left(\frac{d_i}{\Lambda}\right) n_i \quad (\text{I.13})$$

Cette formule approchée est souvent utilisée dans le cas des multicouches diélectriques faiblement contrastées. Cependant, comme nous le verrons, elle n'est pas adaptée dans le cas général des empilements GaAs/AlGaAs fortement contrastés qui nous intéressent.

Les expressions (I.11) et (I.14) sont valables pour les polarisations TE (champ électrique parallèle aux couches) et TM (champ magnétique parallèle aux couches).

Bien que simple à mettre en œuvre, les modèles issus de l'approximation des milieux effectifs souffrent de plusieurs limitations :

- Il ne tient pas compte des réflexions multiples aux interfaces qui modifient la distribution du champ électromagnétique dans les couches.
- Les effets de dispersion, d'anisotropie et de non-linéarité ne sont pas pris en compte. On suppose des indices constants.
- La condition $\lambda \gg \Lambda$ (la période) pour la validité de l'approximation des milieux effectifs n'est souvent pas respectée, surtout aux courtes longueurs d'onde.

- Le modèle n'est précis que pour des faibles contrastes d'indice entre les couches. De fortes erreurs apparaissent pour des contrastes élevés (semi-conducteurs/air par exemple).

Pour une meilleure précision, en particulier pour des réseaux fortement contrastés et aux courtes longueurs d'onde, des modèles plus rigoureux basés sur la théorie électromagnétique sont nécessaires.

I.3.3 Rappels d'électromagnétismes :

Les équations de Maxwell décrivent de manière unifiée les phénomènes électromagnétiques. D'une manière générale, elles s'écrivent comme suit [21] :

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (\text{I.14-a})$$

$$\vec{\nabla} \wedge \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j} \quad (\text{I.14-b})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho \quad (\text{I.14-c})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{I.14-d})$$

Où \vec{E} et \vec{H} sont les champs électrique et magnétique, tandis que \vec{D} et \vec{B} sont respectivement l'induction électrique et l'induction magnétique. Les densités de courant électrique \vec{j} et de charges électriques libres ρ jouent le rôle des sources du champ électromagnétique.

Pour relier les champs \vec{E}, \vec{H} aux inductions \vec{D}, \vec{B} , on utilise les relations constitutives qui caractérisent les propriétés électromagnétiques de la matière par l'intermédiaire de la permittivité diélectrique ε et la perméabilité magnétique μ :

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (\text{I.15-a})$$

$$\vec{B} = \mu \vec{H} = \mu_0 \vec{H} + \vec{M} \quad (\text{I.15-b})$$

Où \vec{P} est le vecteur de la polarisation et \vec{M} est le vecteur de l'aimantation. Les quantités ε_0 et μ_0 désignent la permittivité et la perméabilité du vide, respectivement. Les termes $\varepsilon_0 \vec{E}$ et $\mu_0 \vec{H}$ représentent la réponse du vide au champ électromagnétique, tandis que les termes \vec{P} et \vec{M} représentent la réponse du matériau.

Les conditions de continuité du champ électromagnétique à l'interface entre deux milieux décrivent comment les champs électriques et magnétiques se comportent lorsqu'ils

traversent une frontière entre deux matériaux différents. Ces conditions sont importantes pour comprendre comment les ondes électromagnétiques se propagent à travers différents milieux, tels que l'air, l'eau, les métaux, etc.

Ci-dessous les conditions de continuité les plus courantes pour les champs électriques et magnétiques à l'interface entre deux milieux :

- Continuité de la composante tangentielle du champ électrique :

$$E_{1t} = E_{2t} \quad (\text{I.16-a})$$

- Continuité de la composante normale du champ de déplacement électrique :

$$D_{1n} = D_{2n} \quad (\text{I.16-b})$$

- Continuité de la composante tangentielle du champ magnétique :

$$H_{1t} = H_{2t} \quad (\text{I.16-c})$$

- Continuité de la composante normale du champ d'induction magnétique :

$$B_{1n} = B_{2n} \quad (\text{I.16-d})$$

Ces relations supposent que les densités surfaciques de charge σ et de courant \vec{j}_s sont nulles sur l'interface entre les milieux (1) et (2). Dans le cas échéant, on montre que :

$$\vec{H}_{2t} - \vec{H}_{1t} = \vec{j}_s \quad (\text{I.17-a})$$

$$D_{2n} - D_{1n} = \sigma \quad (\text{I.17-b})$$

Le régime harmonique en électromagnétisme est un régime sinusoïdal dans lequel les champs électrique et magnétique varient de manière périodique dans le temps avec une fréquence ω constante. Dans ce régime, les grandeurs électromagnétiques peuvent être décrites par des fonctions sinusoïdales du temps, ce qui permet de simplifier les équations de Maxwell et de faciliter l'analyse des systèmes électromagnétiques.

Dans le régime harmonique, les équations de Maxwell peuvent être écrites sous forme complexe, en utilisant la notation exponentielle complexe pour représenter les grandeurs sinusoïdales. Par exemple, le champ électrique peut être écrit sous la forme :

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r})e^{j\omega t} \quad (\text{I.18})$$

Où $\vec{E}(\vec{r})$ est l'amplitude complexe du champ électrique et j est l'unité imaginaire. De même, les autres grandeurs électromagnétiques, telles que \vec{D} , \vec{B} et \vec{H} , peuvent être écrites sous forme complexe, ce qui permet de simplifier les équations de Maxwell en utilisant les propriétés des

nombres complexes. Cela permet également de se ramener à des équations d'ondes indépendantes du temps pour les amplitudes complexes.

Les ondes planes sont des solutions particulières des équations de Maxwell qui décrivent la propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu homogène et isotrope. Dans une onde plane, les champs électriques et magnétiques sont perpendiculaires l'un à l'autre et à la direction de propagation de l'onde. Les ondes planes sont souvent utilisées pour modéliser la propagation d'ondes électromagnétiques dans des milieux simples tels que l'air ou le vide.

Dans une onde plane, les champs électriques et magnétiques peuvent être décrits par des fonctions sinusoïdales du temps et de l'espace. Par exemple, le champ électrique d'une onde plane se propageant dans la direction z peut être écrit sous la forme :

$$\vec{E}(z, t) = \vec{E}_0 e^{j(\omega t - kz)} \quad (\text{I .19})$$

Où \vec{E}_0 est l'amplitude complexe du champ électrique, k est le nombre d'onde, et j est l'unité imaginaire.

Le champ magnétique associé à cette onde plane peut être déduit des équations de Maxwell et s'écrit sous la forme :

$$\vec{H}(z, t) = \vec{H}_0 e^{j(\omega t - kz)} \quad (\text{I .20})$$

Où \vec{H}_0 est l'amplitude complexe du champ magnétique, et liée à \vec{E}_0 par la relation :

$$\vec{H}_0 = \frac{\vec{E}_0}{\eta} \quad (\text{I .21})$$

Où η est l'impédance caractéristique du milieu dans lequel se propage l'onde, donnée par la formule suivante :

$$\eta = \sqrt{\frac{\mu_0 \mu_r}{\epsilon_0 \epsilon_r}} = \eta_0 \sqrt{\frac{\mu_r}{\epsilon_r}} \quad (\text{I .22})$$

Où $\eta_0 = (\mu_0 / \epsilon_0)^{\frac{1}{2}} = 377 \Omega$ est l'impédance caractéristique du vide.

Il est clair aussi que :

$$\vec{k} \perp \vec{E}_0 \perp \vec{H}_0 \quad (\text{I .23})$$

Les ondes planes sont des solutions importantes des équations de Maxwell car elles permettent de comprendre la propagation d'ondes électromagnétiques dans des milieux simples. Elles sont également utilisées comme base pour la modélisation de la propagation d'ondes électromagnétiques dans des milieux plus complexes, tels que les guides d'ondes et les fibres optiques. Enfin, les ondes planes sont utilisées dans de nombreuses applications pratiques de l'électromagnétisme, telles que la transmission de signaux, la génération de champs magnétiques pour l'imagerie médicale, et bien plus encore.

La polarisation d'une onde plane électromagnétique décrit l'orientation du champ électrique par rapport à la direction de propagation de l'onde. Il existe deux types de polarisation pour les ondes planes :

- Polarisation transverse électrique (TE) : Dans ce cas, le champ électrique est perpendiculaire à la direction de propagation de l'onde. Le champ magnétique oscille dans le plan perpendiculaire à la fois au champ électrique et à la direction de propagation.
- Polarisation transverse magnétique (TM) : Dans ce cas, le champ magnétique est perpendiculaire à la direction de propagation de l'onde. Le champ électrique oscille dans le plan formé par la direction de propagation et le champ magnétique.

Pour une onde plane, les équations de Maxwell découplent ces deux polarisations TE et TM qui peuvent être traitées séparément. Ce découplage des polarisations TE et TM simplifie grandement la résolution des problèmes électromagnétiques, notamment dans les milieux multicouches périodiques 1D étudiés par la théorie des ondes couplées.

I.3.3.1 Théorie des modes couplés :

La méthode des modes couplés, également connue sous le nom de formalisme des modes couplés [22], est une approche rigoureuse fondée sur les équations de Maxwell pour décrire la propagation des ondes électromagnétiques dans des milieux diélectriques stratifiés périodiques. Cette méthode est particulièrement utile pour analyser les structures photoniques, telles que les fibres optiques, les guides d'ondes et les cristaux photoniques.

Le principe de base de la méthode des modes couplés consiste à décomposer le champ électromagnétique total en une somme de modes propres, qui sont des solutions des équations de Maxwell dans chaque couche individuelle. Ces modes propres sont ensuite reliés entre les couches adjacentes en utilisant les conditions de continuité appropriées des champs

électromagnétiques. Cela conduit à la construction d'une matrice de transfert qui relie les amplitudes des modes à l'entrée et à la sortie de la structure périodique. La condition de périodicité de Bloch est alors imposée, ce qui donne lieu à une équation de dispersion reliant les vecteurs d'onde effectifs aux propriétés de la structure. En résolvant cette équation, on obtient les valeurs des vecteurs d'onde effectifs, qui permettent de déterminer l'indice de réfraction effectif correspondant.

La méthode des modes couplés implique généralement des calculs mathématiques complexes, mais elle fournit des informations détaillées sur la propagation des ondes électromagnétiques dans des structures périodiques. Elle est largement utilisée dans la recherche et le développement de dispositifs photoniques avancés.

I.3.4 Méthode rigoureuse des ondes planes (RCWA) :

La Méthode rigoureuse des ondes planes (RCWA pour Rigorous Coupled-Wave Analysis) [23] est une autre approche puissante pour étudier la propagation des ondes électromagnétiques dans les structures multicouches périodiques, y compris pour déterminer leur indice de réfraction effectif.

La RCWA repose sur le principe de décomposer les champs électromagnétiques en une somme d'ondes planes périodiques, ou modes de Fourier, dans chaque région homogène de la structure. Ces modes de Fourier satisfont les équations de Maxwell et sont reliés entre les différentes régions à l'aide des conditions de continuité appropriées pour les champs.

L'algorithme de la RCWA commence par discrétiser la structure multicouche périodique en un empilement de couches minces le long de la direction de périodicité. Les permittivités diélectriques dans chaque couche sont ensuite développées en séries de Fourier pour capturer leur périodicité latérale.

En utilisant ces expansions de Fourier et en appliquant les conditions aux limites, on obtient un système d'équations couplées reliant les amplitudes des modes de Fourier dans les différentes régions. La résolution de ce système conduit à la détermination des coefficients de réflexion et de transmission de la structure.

Pour calculer l'indice de réfraction effectif, on utilise la condition de guidage qui stipule que les modes guidés doivent être des ondes évanescentes dans la direction perpendiculaire aux couches. Cette condition conduit à une équation de dispersion reliant l'indice effectif aux propriétés de la structure et à la fréquence.

La grande force de la RCWA réside dans sa capacité à traiter de manière rigoureuse des structures multicouches périodiques avec des géométries arbitraires, y compris des profils de rugosité ou des motifs complexes. Elle fournit des résultats précis pour les propriétés optiques, y compris l'indice de réfraction effectif, en tenant compte de tous les ordres de diffraction.

Bien que les calculs RCWA puissent être lourds, cette méthode est devenue un outil standard pour la conception et l'optimisation de structures photoniques périodiques telles que les cristaux photoniques, les réseaux de diffraction et les métamatériaux.

I.3.5 Méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) :

La FDTD [24] résout directement les équations de Maxwell de façon numérique dans le domaine temporel sur un maillage discrétisant le milieu stratifié. En injectant une impulsion et en analysant le signal transmis, on peut extraire les indices effectifs des différents modes par transformée de Fourier.

I.3.6 Méthode des éléments finis (FEM) :

Les méthodes éléments finis [25] permettent de calculer numériquement les modes propres dans des structures stratifiées 1D, 2D ou 3D en discrétisant les équations de Maxwell sur un maillage adapté. Les indices effectifs sont obtenus à partir des valeurs propres du système algébrique résultant.

I.3.7 Méthode de la matrice de transfert :

La méthode de la matrice de transfert, aussi connue sous le nom de méthode des matrices d'admittance, est une approche numérique développée dans les années 1950-1960 pour modéliser la propagation des ondes électromagnétiques dans les milieux multicouches stratifiés.

Cette technique a été introduite initialement par Abelès [26] en 1950 pour les milieux isotropes, puis étendue par Herskowitz et al. [27] en 1954 aux couches anisotropes. Yamamoto et al. [28] l'ont appliquée en 1994 au calcul des modes guidés dans les fibres optiques à saut d'indice. Depuis, elle est devenue une méthode standard pour l'analyse des guides d'ondes plans et rubans multicouches [29].

L'idée fondamentale consiste à construire une unique matrice de transfert représentative de l'ensemble de la structure stratifiée. Cette matrice globale relie les

composantes tangentielles des champs électromagnétiques à l'interface d'entrée de la structure multicouche à celles à l'interface de sortie.

Pour obtenir cette matrice caractéristique de la structure complète, on procède par un enchaînement successif des matrices élémentaires associées à chaque interface et chaque couche. À chaque interface entre deux milieux, on calcule la matrice des coefficients de réflexion/transmission de Fresnel qui décrit le comportement en réflexion et transmission des champs. Ensuite, pour chaque couche homogène, on détermine la matrice de propagation qui traduit le déphasage subi par les ondes lors de leur traversée.

Ainsi, en multipliant dans l'ordre les matrices d'interface et de propagation pour chacune des couches successives, on obtient la matrice de transfert globale décrivant rigoureusement la propagation à travers l'ensemble de la structure multicouche stratifiée. Cette matrice finale permet alors de relier les amplitudes des champs électromagnétiques incidents et réfléchis/transmis de part et d'autre du milieu.

L'avantage principal de cette méthode réside dans sa généralité. Elle peut traiter des empilements quelconques de couches isotropes ou anisotropes, avec différents indices, épaisseurs, etc. Aucune périodicité n'est requise. De plus, la formulation matricielle rend son implémentation numérique systématique et efficace.

Cependant, pour des structures très épaisses comportant un très grand nombre de couches, la méthode de la matrice de transfert peut souffrir de problèmes de précision numérique dus à la propagation d'erreurs d'arrondi. Des techniques de normalisation des matrices sont alors nécessaires.

Malgré cette limitation, la méthode de la matrice de transfert reste très utilisée pour modéliser les guides d'ondes optiques plans ou rubans, les miroirs de Bragg diélectriques, les cristaux photoniques 1D, etc. Sa simplicité de mise en œuvre et sa flexibilité en font un outil puissant pour concevoir et optimiser de nombreux dispositifs photoniques multicouches. C'est cette méthode que nous avons adoptée et que nous allons utiliser dans notre travail de modélisation.

I.4 Conclusion :

Les matériaux GaAs et AlGaAs, grâce à leurs excellentes propriétés cristallines, optiques et électroniques, sont indispensables dans l'industrie des semi-conducteurs. Les hétérostructures formées par ces matériaux permettent de réaliser des dispositifs à haute performance, tandis que les méthodes de la matrice de transfert offrent des outils puissants pour la conception et l'analyse de ces dispositifs. Ces technologies continuent de jouer un rôle crucial dans le développement des communications optiques, des systèmes informatiques à haute vitesse et des technologies photovoltaïques.

Chapitre II

*Formalisme théorique des matrices
de transfert optique pour les milieux
stratifiés*

Chapitre II :

Formalisme théorique des matrices de transfert optique pour les milieux stratifiés

II.1 Formalise des matrices de Transfert Optique :

II.1.1 Introduction :

Le formalisme des matrices de transfert est un outil puissant pour modéliser la propagation de la lumière à travers des milieux stratifiés, composés de plusieurs couches avec des indices de réfraction différents. Cette approche trouve de nombreuses applications dans l'analyse et la conception de dispositifs optiques multicouches tels que les revêtements antireflets, les filtres interférentiels, les miroirs diélectriques et les guides d'ondes.

Comparé aux méthodes rigoureuses de calcul électromagnétique, le formalisme des matrices de transfert offre une approche semi-analytique efficace pour obtenir des résultats précis avec un coût de calcul réduit. Il permet de déterminer les coefficients de réflexion, de transmission, ainsi que le champ électromagnétique à l'intérieur de la structure multicouche, en tenant compte des effets d'interférences et de polarisation.

Dans ce texte, nous explorerons en détail les fondements théoriques et les applications du formalisme des matrices de transfert pour les milieux stratifiés. Nous commencerons par présenter les équations de base de l'optique des milieux stratifiés, puis nous dériverons les expressions des matrices de transfert pour différentes configurations. Nous montrerons comment combiner ces matrices pour modéliser des empilements complexes et comment en déduire les principales grandeurs d'intérêt. Enfin, nous illustrerons l'utilisation de cette méthode à travers divers exemples pratiques.

II.1.2 Équations fondamentales de l'optique des milieux stratifiés :

Avant d'aborder le formalisme des matrices de transfert, il est essentiel de poser les bases de l'optique des milieux stratifiés. Nous considérerons une structure composée de N couches séparées par des interfaces. Chaque couche i est caractérisée par son indice de réfraction n_i et son épaisseur d_i .

Dans le cadre de notre travail, nous allons considérer des couches planes, d'épaisseur constante, homogènes (propriétés optiques constantes dans le volume), isotropes (propriétés optiques identiques dans toutes les directions), non magnétiques (perméabilité égale à celle du vide), diélectriques, linéaires, non chargés et sans courants.

Nous allons également considérer des interfaces planes et parallèles entre les couches sans charges, ni courants surfaciques.

Ces conditions permettent d'appliquer simplement les équations de Maxwell pour calculer la propagation, la réflexion et la transmission des ondes d'une couche à l'autre.

Le champ électromagnétique dans chaque couche peut être décrit par deux ondes planes se propageant dans des directions opposées, une onde progressive et une onde rétrograde. Ce fait est essentiel pour prendre en compte les réflexions multiples entre les interfaces. L'onde incidente génère une onde réfléchie rétrograde à chaque interface. Il faut donc considérer les ondes se propageant dans les deux sens. De plus, comme nous allons le voir par la suite, pour pouvoir appliquer le formalisme des matrices de transfert qui relie les amplitudes des ondes de part et d'autre d'une couche, il est nécessaire d'écrire le champ sous la forme d'une combinaison linéaire d'ondes planes progressives et rétrogrades. Pour une onde plane progressive se propageant dans la direction (+z), le champ électrique s'écrit :

$$\vec{E}_i^+(z) = \begin{bmatrix} E_{i,p}^+ \\ E_{i,s}^+ \end{bmatrix} e^{j(k_{z,i}z - \omega t)} \quad (\text{II.1})$$

Où les indices p et s désignent les polarisations respectives parallèle (p) et perpendiculaire (s) au plan d'incidence. Les polarisations p et s font référence aux composantes du champ électromagnétique par rapport au plan d'incidence, dans le cas d'une onde électromagnétique réfléchie ou transmise à l'interface entre deux milieux :

- La polarisation p correspond à la composante du champ électrique parallèle au plan d'incidence (mode TM ou transverse magnétique). Par conséquent, le champ magnétique est perpendiculaire à ce plan.
- La polarisation s correspond à la composante du champ électrique perpendiculaire au plan d'incidence (mode TE ou transverse électrique). Par conséquent, le champ magnétique est parallèle à ce plan.

La quantité $k_{z,i}$ est la composante du vecteur d'onde selon z . Elle est donnée par la relation suivante :

$$k_{z,i} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_i \cos \theta_i \quad (\text{II.2})$$

Avec θ_i l'angle de propagation dans la couche i , défini par rapport à la normale.

De manière similaire, pour l'onde rétrograde, on a :

$$\vec{E}_i^-(z) = \begin{bmatrix} E_{i,p}^- \\ E_{i,s}^- \end{bmatrix} e^{j(-k_{z,i}z - \omega t)} \quad (\text{II.3})$$

Le champ total dans la couche i est la superposition de ces deux ondes :

$$\vec{E}_i(z) = \vec{E}_i^+(z) + \vec{E}_i^-(z) \quad (\text{II.4})$$

Les amplitudes des champs $E_{j,p}^\pm$ et $E_{j,s}^\pm$ sont reliées par les conditions aux interfaces imposées par les équations de Maxwell. Ces conditions imposent la continuité des composantes tangentielles des champs \vec{E} et \vec{H} à chaque interface $i/i + 1$:

$$E_{i,t} = E_{i+1,t} \quad (\text{II.5-a})$$

$$H_{i,t} = H_{i+1,t} \quad (\text{II.5-b})$$

En écrivant les expressions générales de ces composantes tangentielles de part et d'autre d'une interface en fonction des amplitudes complexes des ondes progressives et rétrogrades, puis en appliquant les conditions de continuité, on obtient un système d'équations linéaires reliant ces amplitudes complexes entre les milieux adjacents.

C'est ce système d'équations linéaires qui peut alors être reformulé sous une forme matricielle compacte, faisant intervenir des matrices d'interface reliant les vecteurs d'amplitudes complexes de part et d'autre de l'interface.

Ce formalisme matriciel sera ensuite généralisé au cas complet d'une structure multicouche en introduisant les matrices de propagation dans chaque couche et en combinant matrices d'interface et de propagation. Mais les conditions de continuité sur les composantes tangentielles de \vec{E} et \vec{H} restent à la base de la dérivation de toutes ces matrices.

Avant de développer le formalisme des matrices de transfert optique pour les structures multicouches, nous allons décrire la géométrie de ces structures :

Le plan qui contient les couches est le plan (XY). L'axe Z est la direction de propagation de l'onde, perpendiculaire aux interfaces planes entre les couches. Chaque couche s'étend de manière uniforme dans les directions X et Y. Les interfaces entre les couches successives sont donc des plans parallèles au plan (XY). Le plan (XZ) est appelé le plan d'incidence, car il contient la direction de propagation Z et la composante selon X du vecteur d'onde. Les grandeurs électromagnétiques (champs \vec{E}, \vec{H} et le vecteur d'onde \vec{k}) varient en fonction de Z mais sont invariantes le long des directions X et Y à l'intérieur d'une même couche.

Il est également essentiel de prendre en compte des composantes des champs électrique et magnétique qui interviendront dans le formalisme des matrices de transfert optique. Selon la géométrie que nous avons définie.

Pour une polarisation p (TM), on considère E_z et H_y comme composantes non nulles de \vec{E} et \vec{H} . Pour une polarisation s (TE), on considère E_y et H_z comme composantes non nulles. Ce sont les amplitudes complexes de ces 4 composantes (E_z, H_y, E_x, H_x) qui sont propagées à travers les matrices de transfert.

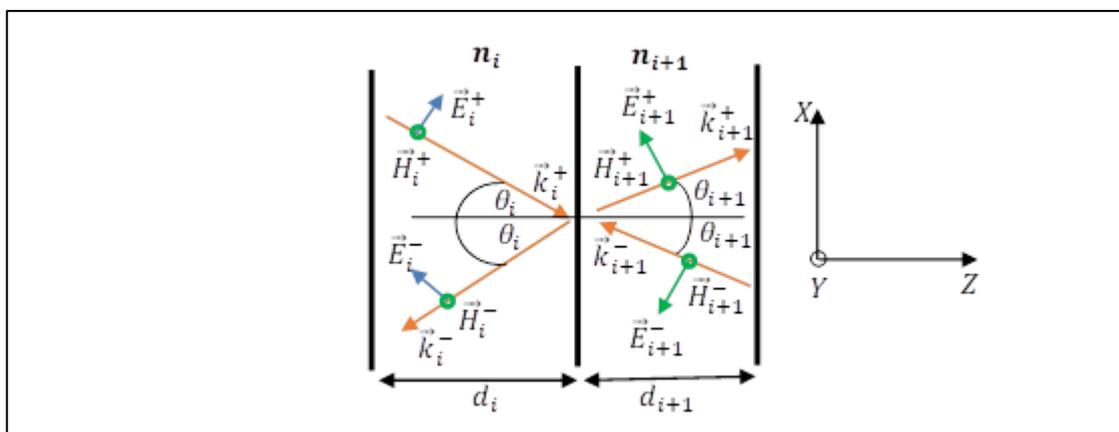


Figure II.1 : Représentation des champs électromagnétiques et vecteurs d'onde dans deux couches successives d'une structure multicouche dans le cas d'une polarisation p.

La figure (II.1) représente deux couches successives i et $i + 1$ d'une structure multicouche optique. La couche i a un indice de réfraction n_i et une épaisseur d_i , tandis que la couche $i + 1$ a un indice n_{i+1} et une épaisseur d_{i+1} . La figure montre également

l'orientation relative de ces vecteurs \vec{E} , \vec{H} et \vec{k} dans les deux couches successives par rapport au repère $(OXYZ)$, ainsi que les angles θ_i et θ_{i+1} que fait la direction de propagation avec la normale aux interfaces dans chaque couche.

Cette représentation schématique permet de bien visualiser la géométrie et les grandeurs électromagnétiques intervenant dans le formalisme des matrices de transfert appliqué à ce type de structures multicouches planes.

II.1.3 Matrices de transfert pour une interface :

Considérons d'abord une simple interface plane séparant deux milieux semi-infinis d'indices de réfraction n_1 et n_2 (voir figure II.2).

Pour déterminer les matrices de transfert à une interface plane séparant deux milieux d'indices optiques différents, on écrit tout d'abord les expressions générales des champs électrique \vec{E} ou magnétique \vec{H} de part et d'autre de l'interface. Ces expressions font intervenir les amplitudes complexes des ondes progressives (se propageant vers l'avant) et rétrogrades (se propageant vers l'arrière) dans chaque milieu. Ensuite, on applique les conditions de continuité imposées par les équations de Maxwell sur les composantes tangentielles de ces champs à la traversée de l'interface. Cela signifie que les composantes E_z et H_y (pour la polarisation p) ainsi que E_x et H_z (pour la polarisation s) doivent être continues lors du passage d'un milieu à l'autre. En injectant les expressions générales des champs dans ces conditions de continuité, on obtient alors un système de deux équations linéaires reliant les amplitudes complexes des ondes incidentes, réfléchies et transmises à l'interface pour chaque polarisation. On peut alors réécrire ce système sous une forme matricielle compacte, faisant apparaître une matrice 2x2 qui relie les vecteurs d'amplitudes complexes des ondes de part et d'autre de l'interface. Cette matrice 2x2 est appelée la matrice de transfert à l'interface. Ses éléments dépendent des coefficients de réflexion et de transmission de Fresnel qui caractérisent le comportement de l'interface optique vis-à-vis de la réflexion et de la transmission.

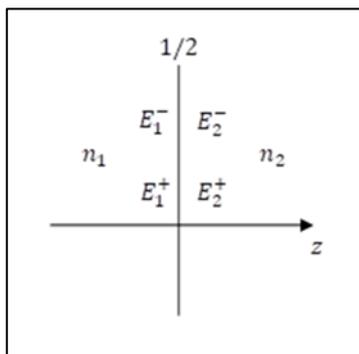


Figure II .2 : Champs électriques de part et d'autre d'une interface.

Les amplitudes des champs électriques de part et d'autre de l'interface 1/2 sont reliées par les relations suivantes :

- En polarisation p (parallèle) :

$$\begin{bmatrix} E_{1,p}^+ \\ E_{1,p}^- \end{bmatrix} = \frac{1}{t_{p,1/2}} \begin{bmatrix} 1 & r_{p,1/2} \\ r_{p,1/2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{2,p}^+ \\ E_{2,p}^- \end{bmatrix} \quad (\text{II.6})$$

- Et en polarisation s (perpendiculaire) :

$$\begin{bmatrix} E_{1,s}^+ \\ E_{1,s}^- \end{bmatrix} = \frac{1}{t_{s,1/2}} \begin{bmatrix} 1 & r_{s,1/2} \\ r_{s,1/2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{2,s}^+ \\ E_{2,s}^- \end{bmatrix} \quad (\text{II.7})$$

Où $r_{p,1/2}$, $r_{s,1/2}$, $t_{p,1/2}$ et $t_{s,1/2}$ sont les coefficients de Fresnel, qui correspondent aux coefficients de réflexion et de transmission, respectivement. Rappelons que le coefficient de réflexion r représente le rapport entre l'amplitude de l'onde réfléchie et l'amplitude de l'onde incidente. Il quantifie donc la proportion d'intensité de l'onde incidente qui est réfléchie à l'interface. Par contre, le coefficient de transmission t représente le rapport entre l'amplitude de l'onde transmise et l'amplitude de l'onde incidente. Il quantifie donc la proportion d'intensité de l'onde incidente qui est transmise dans le second milieu. On montre que les coefficients de Fresnel sont définis par :

$$r_{p,1/2} = \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} \quad (\text{II.8-a})$$

$$r_{s,1/2} = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \quad (\text{II.8-b})$$

$$t_{p,1/2} = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} \quad (\text{II.8-c})$$

$$t_{s,1/2} = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \quad (\text{II.8-d})$$

Où θ_1 et θ_2 sont les angles de propagations dans les milieux 1 et 2 par rapport à la normale. Ces angles sont reliés par la loi de Shell-Descartes :

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (\text{II.9})$$

On a défini ainsi deux matrices :

$$M_{p,1/2} = \frac{1}{t_{p,1/2}} \begin{bmatrix} 1 & r_{p,1/2} \\ r_{p,1/2} & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{II.10-a})$$

$$M_{s,1/2} = \frac{1}{t_{s,1/2}} \begin{bmatrix} 1 & r_{s,1/2} \\ r_{s,1/2} & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{II.10-b})$$

Les matrices $M_{p,1/0}$ et $M_{s,1/0}$ sont les matrices de transfert de l'interface pour les polarisations p et s respectivement. Elles caractérisent complètement le comportement de l'interface 1/0 vis-à-vis de la propagation des ondes électromagnétiques. Cette matrice permet de relier les amplitudes des champs électromagnétiques de part et d'autre d'une interface diélectrique plane.

II.1.4 Matrices de transfert pour une couche homogène :

Pour obtenir les matrices de propagation P à travers une couche homogène d'indice de réfraction n et d'épaisseur d , on commence par écrire les expressions générales du champ électrique \vec{E} ou du champ magnétique \vec{H} dans cette couche, en considérant les ondes se propageant dans les deux sens. Ces expressions, données dans le paragraphe précédent, font intervenir les amplitudes complexes des ondes progressives et rétrogrades, ainsi que le terme de propagation de phase représente la composante selon z du vecteur d'onde. On évalue ensuite ces expressions des champs à l'entrée ($z = 0$) et à la sortie ($z = d$) de la couche. Cela permet de relier les vecteurs d'amplitudes $[E^+(d), E^-(d)]$ et $[E^+(0), E^-(0)]$ à l'entrée et la sortie par une matrice de passage (voir figure II .3). La forme spécifique de cette matrice est alors obtenue en identifiant terme à terme les coefficients des équations reliant les amplitudes à l'entrée et la sortie. On trouve ainsi les expressions des matrices de propagation, faisant intervenir les termes qui décrivent le déphasage accumulé lors de la propagation sur la distance d à travers un milieu d'indice n .

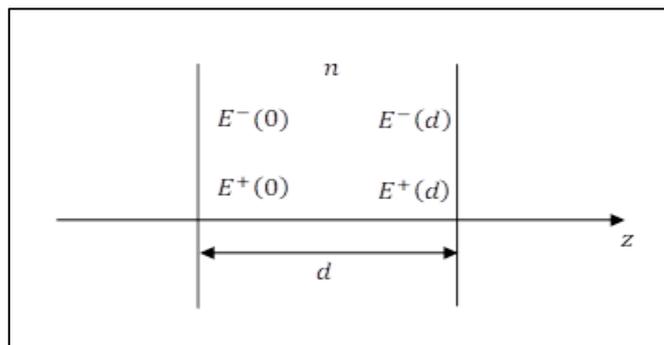


Figure II.3 : Champs électriques de à l'intérieur d'une couche.

On montre alors que La relation de transfert s'écrit sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{bmatrix} E^+(0) \\ E^-(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi & j\psi \\ j\psi & \phi^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E^+(d) \\ E^-(d) \end{bmatrix} \quad (\text{II.11})$$

Où nous avons introduit la matrice :

$$P = \begin{bmatrix} \phi & j\psi \\ j\psi & \phi^* \end{bmatrix} \quad (\text{II.12})$$

Dite matrice de propagation, où ϕ^* est le complexe conjugué de ϕ . Cette matrice décrivant la propagation à travers une couche homogène d'épaisseur d .

Les quantités ϕ et ψ sont des coefficients dépendant de la polarisation. Ils représentent les déphasages longitudinal φ_i et transverse ψ en polarisation p et s dans la couche :

$$\phi = e^{jk_z d} \cos(k_x d) \quad (\text{II.13-a})$$

$$\psi = \begin{cases} n^2 \cos \theta \sin(k_x d) & \text{pour une polarisation p} \\ \cos \theta \sin(k_x d) & \text{pour une polarisation s} \end{cases} \quad (\text{II.13-b})$$

Où k_x et k_z sont les composantes transverse et longitudinale du vecteur d'onde dans la couche, en d'autres termes, dans le plan perpendiculaire au plan d'incidence. L'angle θ est l'angle de propagation dans la couche par rapport à la normale, déterminé par les lois de Shell-Descartes à l'interface d'entrée. Cet angle θ définit les composantes k_x et k_z du vecteur d'onde dans la couche. La composante est donnée par la relation :

$$k_{x,i} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_i \sin \theta_i \quad (\text{II.14})$$

Dans la matrice de propagation, il est utile de préciser que :

- Le terme $e^{jk_z d}$ dans la matrice représente le déphasage accumulé lors de la propagation sur une épaisseur d selon z . Ce terme tient compte de l'indice n de la couche, qui modifie la phase de l'onde par rapport au vide. Si la couche est absorbante, k_z est complexe avec une partie imaginaire traduisant l'absorption. Le terme de phase devient alors aussi complexe.
- Le terme ψ en sinus et cosinus décrit la variation latérale de l'amplitude dans la couche d'épaisseur, liée à k_x . Si la couche est absorbante, ψ acquiert aussi une partie imaginaire traduisant l'atténuation latérale.

Le déphasage transverse ψ pour les polarisations s et p s'annule dans certaines conditions particulières:

- Pour une incidence normale (angle d'incidence $\theta = 0$), $\psi = 0$ quelle que soit la couche.
- Pour des interfaces planes (pas de changement d'indice latéral $k_x = 0$), $\psi = 0$ quel que soit l'angle.

Dans ce cas, la matrice de propagation se réduit à la forme suivante :

$$P = \begin{bmatrix} \phi & 0 \\ 0 & \phi^* \end{bmatrix} \quad (\text{II.15})$$

Avec :

$$\phi = e^{jk_z d} \quad (\text{II.16})$$

II.1.5 Milieux stratifiés multicouches :

Maintenant que nous avons défini les matrices de transfert pour une interface et une couche homogène, nous pouvons les combiner pour modéliser des structures multicouches arbitraires.

Soit une structure plane constituée de N couches d'indices n_1, n_2, \dots, n_N séparées par $N + 1$ interfaces planes et parallèles. On considère une onde plane arrivant avec un angle d'incidence θ_0 sur la première interface (voir figure II.4).

Dans chaque milieu i d'indice n_i , l'onde se propage selon deux composantes :

- Une onde plane progressive d'amplitude E_i^+ se propageant dans le sens des z croissants.
- Une onde plane rétrograde d'amplitude E_i^- se propageant dans le sens des z décroissants.

À chaque interface $i/i + 1$, ces deux ondes vont donner naissance à une onde réfléchie dans le milieu i et une onde transmise dans le milieu $i + 1$, selon les coefficients de Fresnel définis précédemment. Donc, la propagation de l'onde de la première à la dernière interface fait intervenir les successions de :

- Transmissions/réflexions aux interfaces (matrices $M_{i/i+1}$).
- Propagations dans les couches (matrices P_i).

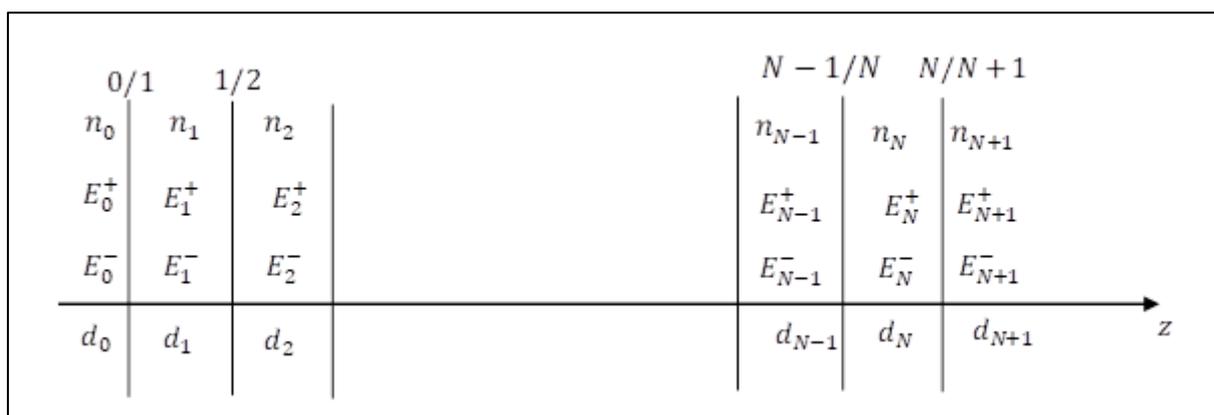


Figure II.4 : Champs électriques dans une structure multicouche.

Finalement, les amplitudes de l'onde à la première interface et transmise après la dernière interface sont reliées par la relation suivante :

$$\begin{bmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} E_{N+1}^+ \\ E_{N+1}^- \end{bmatrix} \quad (\text{II} .17)$$

La matrice de transfert M représente le produit de l'ensemble des matrices caractéristiques pour tout l'empilement :

$$M = m_{0/1} P_1 m_{1/2} P_2 \dots m_{N/N+1} = m_{0/1} \prod_{i=1}^N m_{i/i+1} P_i = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{II}.18)$$

Elle contient l'ensemble des informations sur la structure stratifiée (indices, épaisseurs, angles) et permet de calculer les amplitudes complexes résultantes des ondes réfléchi et transmise. Rappelons que l'ordre de multiplication est primordial, en commençant toujours par la première interface et en remontant vers les autres couches et interfaces dans l'ordre.

Dans la relation (II.18), P_i est la matrice de transfert de propagation de la $i^{\text{ème}}$ couche, M_i la matrice de transfert d' $i^{\text{ème}}$ interface et M_0 la matrice de transfert pour l'interface d'entrée (air/couche1) pour initialiser la propagation des champs incidents. Ces trois matrices sont données par les expressions suivantes :

$$M_{i/i+1} = \frac{1}{t_{i/i+1}} \begin{bmatrix} 1 & r_{i/i+1} \\ r_{i/i+1} & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{II.19})$$

$$P_i = \begin{bmatrix} \phi_i^* & j\psi_i \\ j\psi_i & \phi_i^* \end{bmatrix} \quad (\text{II.20})$$

$$M_0 = \frac{1}{t_0} \begin{bmatrix} 1 & r_0 \\ r_0 & 1 \end{bmatrix} \quad (\text{II.21})$$

Les coefficients de réflexion et de transmission de Fresnel en polarisation p et s à l'interface $i/i + 1$ sont donnés par les relations suivantes :

$$r_{i/i+1,p} = \frac{n_{i+1} \cos \theta_i - n_i \cos \theta_{i+1}}{n_{i+1} \cos \theta_i + n_i \cos \theta_{i+1}} \quad (\text{II.22-a})$$

$$r_{i/i+1,s} = \frac{n_i \cos \theta_i - n_{i+1} \cos \theta_{i+1}}{n_i \cos \theta_i + n_{i+1} \cos \theta_{i+1}} \quad (\text{II.22-b})$$

$$t_{i/i+1,p} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_{i+1} \cos \theta_i + n_i \cos \theta_{i+1}} \quad (\text{II.22-c})$$

$$t_{i/i+1,s} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i + n_{i+1} \cos \theta_{i+1}} \quad (\text{II.22-d})$$

Où n_i Indice de réfraction du milieu i et θ_i l'angle de propagation dans la couche i défini par rapport à la normale. Les déphasages longitudinal ϕ_i et transverse ψ_i en polarisation p et s dans la couche i sont donnés par les équations suivantes :

$$\phi_i = e^{jk_{z,i}d_i} \cos(k_{x,i}d_i) \quad (\text{II.23})$$

$$\psi_i = \begin{cases} n_i^2 \cos \theta_i \sin(k_{x,i}d_i) & \text{pour une polarisation } p \\ \cos \theta_i \sin(k_{x,i}d_i) & \text{pour une polarisation } s \end{cases} \quad (\text{II.24})$$

Où d_i est l'épaisseur de la couche i , λ la longueur d'onde de l'onde électromagnétique incidente et $k_{x,i}$ et $k_{z,i}$ les composantes transverse et longitudinale du vecteur d'onde dans la couche i . Le vecteur d'onde $k_{z,i}$ est donné par la relation (II.2) et le vecteur d'onde $k_{x,i}$ est défini par la relation :

$$k_{x,i} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_i \sin \theta_i \quad (\text{II.25})$$

Le déphasage transverse ψ_i pour les polarisations s et p s'annule dans les cas d'une incidence normale (angle d'incidence $\theta_i = 0$), et pour des interfaces planes (pas de changement d'indice latéral($k_{x,i} = 0$)).

Dans ces cas, la matrice de propagation se réduit à la forme suivante :

$$P_i = \begin{bmatrix} \phi_i & 0 \\ 0 & \phi_i^* \end{bmatrix} \quad (\text{II.26})$$

Avec :

$$\phi_i = e^{jk_{z,i}d_i} \quad (\text{II.27})$$

II.1.6 Coefficient de réflexion, transmission et d'absorption :

Une fois la matrice M connue, on peut en déduire les coefficients de réflexion, transmission et absorption de la structure complète, pour chaque polarisation.

Le coefficient de réflexion en amplitude r se déduit simplement des coefficients de la matrice M comme suit :

$$r = \left. \frac{E_0^-}{E_0^+} \right|_{E_{N+1}^- = 0} = \frac{M_{21}}{M_{11}} \quad (\text{II.28})$$

La condition $E_{N+1}^- = 0$ explicite le fait qu'il n'y a pas d'onde réfléchie après la dernière interface. Le coefficient de transmission t est obtenu en inversant la première ligne de M :

$$t = \left. \frac{E_{N+1}^+}{E_0^+} \right|_{E_{N+1}^- = 0} = \frac{1}{M_{11}} \quad (\text{II.29})$$

À partir de ces coefficients, on peut déduire la réflectance R , la transmittance T de la structure comme suit :

$$R = |r|^2 \quad (\text{II.30})$$

$$T = \frac{n_{N+1} \cos \theta_{N+1}}{n_0 \cos \theta_0} \quad (\text{II.31})$$

Cette expression de T suppose que les milieux d'entrée et de sortie de la structure sont sans perte.

Concernant l'absorbance, elle découle du principe de conservation de l'énergie et elle est donnée par la relation suivante :

$$A = 1 - R - T \quad (\text{II.32})$$

Rappelons que la réflectance et la transmittance expriment respectivement la fraction de l'intensité lumineuse incidente qui est réfléchiée et transmise la structure multicouche. Ce sont des grandeurs sans dimensions qui varient entre 0 et 1. Ils peuvent être considérés comme des coefficients de réflexion et de transmission en énergie ou puissance.

Les quantités R, T et A décrivent le comportement optique de la structure multicouche pour une longueur d'onde et un angle d'incidence donnés.

II.1.7 Distribution du champ électromagnétique :

Au-delà des coefficients globaux, le formalisme des matrices de transfert permet également de calculer la distribution détaillée du champ électromagnétique à l'intérieur de la structure. En partant des conditions aux limites à l'interface d'entrée ($z = 0$) :

$$\begin{bmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} \quad (\text{II.33})$$

On peut propager cette condition à travers chaque couche i successivement :

$$\begin{bmatrix} E_i^+ \\ E_i^- \end{bmatrix} = P \begin{bmatrix} E_{i-1}^+ \\ E_{i-1}^- \end{bmatrix} \quad (\text{II.34})$$

Jusqu'à obtenir l'amplitude des champs aux interfaces désirées. Cela permet par exemple de visualiser la formation d'ondes stationnaires à l'intérieur des couches ou d'étudier les effets de couplage entre couches minces.

Notons enfin que la méthode des matrices de transfert optique peut être étendue pour inclure des milieux absorbants avec des indices complexes. Dans ce cas, ces derniers s'écrivent sous la forme :

$$\tilde{n}_i = n_i - j\kappa_i \quad (\text{II.35})$$

Où κ_i est le coefficient d'extinction lié au coefficient d'absorption α_i par la relation suivante :

$$\kappa_i = \frac{\alpha_i \lambda}{4\pi} \quad (\text{II.36})$$

Où l'équation de α_i est donné déjà par la relation (I.5).

Ainsi, pour un milieu absorbant, La partie réelle n représente la vitesse de propagation de l'onde dans le milieu, tandis que la partie imaginaire κ est liée à l'absorption du milieu.

Bien sûr, nous allons développer ces deux points avec les détails théoriques et les formules nécessaires.

II.2 Application à la structure multicouche périodique GaAs/AlGaAs :

La bicouche élémentaire GaAs/AlGaAs constitue la brique de base du milieu multicouche périodique étudié. On considère une onde plane se propageant selon l'axe z , avec un angle d'incidence θ par rapport à la normale aux couches.

La matrice de transfert optique M décrivant la propagation à travers cette bicouche s'écrit comme le produit des matrices de propagation dans chaque milieu et des matrices d'interfaces correspondantes :

$$M = M(\text{Interface 1})P(\text{GaAs})M(\text{interface 2})P(\text{AlGaAs}) \quad (\text{II.37})$$

Chacune de deux couches est caractérisée par son indice de réfraction (n_1, n_2) et son épaisseur (d_1, d_2) .

La relation de dispersion du milieu multicouche périodique est donnée par la condition :

$$\cos(k_z \Lambda) = \frac{1}{2} \text{Tr}(M) \quad (\text{II.38})$$

Où k_z est la composante z du vecteur d'onde et Λ la période de la structure (somme des épaisseurs GaAs et AlGaAs) et $\text{Tr}(M)$ la trace de la matrice M .

La relation (II.38) provient de la condition de périodicité du milieu multicouche. Elle exprime le fait que pour qu'une onde plane de vecteur d'onde $\vec{k}(k_x, k_y, k_z)$ puisse se propager de manière périodique dans un réseau multicouche de période Λ , il faut que sa composante k_z selon z satisfasse cette équation. Ce dernier est transcendant en k_z admet une infinité de solutions $k_z(\omega, k_x, k_y)$ qui correspondent aux différents modes de Bloch se propageant dans le réseau à la pulsation ω selon la direction z . Rappelons que les modes de Bloch sont les

solutions des équations de propagation dans un milieu périodique infini comme un réseau multicouche ou un cristal photonique. Les modes de Bloch ont une périodicité spatiale égale à celle du milieu périodique. A chaque vecteur d'onde \vec{k} correspond une relation de dispersion $\omega(\vec{k})$ qui donne la pulsation du mode en fonction de son vecteur d'onde. Ainsi, la relation (II.37) relie les propriétés de propagation du milieu multicouche périodique à sa matrice de transfert caractéristique.

Le mode fondamental perpendiculaire aux couches est obtenu pour $k_x = k_y = 0$, et permet de déterminer l'indice effectif n_{eff} .

Cet indice est défini par la relation suivante :

$$n_{eff} = \frac{k_z}{k_0} = \left(\frac{c}{\omega}\right) k_z(\omega, 0) \quad (\text{II.39})$$

C'est cette grandeur que l'on cherche à optimiser en jouant sur les épaisseurs des couches constitutives.

Nous allons également déterminer les coefficients de réflexion/transmission en énergie du milieu multicouche à partir des éléments de la matrice M globale.

Ce formalisme de matrices de transfert optique, résolu par des méthodes numériques, permet ainsi de modéliser de façon précise et complète les propriétés de dispersion et d'indice effectif de la structure multicouche périodique GaAs/AlGaAs.

II.3 Conclusion :

Le formalisme des matrices de transfert optique est crucial pour l'analyse et la conception de dispositifs utilisant des matériaux GaAs et AlGaAs. En modélisant précisément la réflexion, la transmission et l'absorption à travers des interfaces et des couches homogènes, cette méthode permet d'optimiser les performances des structures multicouches dans une multitude d'applications optoélectroniques.

Chapitre III

*Simulation numérique et analyse
des propriétés optiques des
empilements GaAs/AlGaAs*

Chapitre III

Simulation numérique et analyse des propriétés optiques des empilements GaAs/AlGaAs

III.1 Introduction :

Ce chapitre est consacré à la simulation de la réponse optique des structures multicouches périodiques GaAs/AlGaAs sur la base du modèle théorique fondé sur le formalisme des matrices de transfert optiques, que nous avons détaillé dans le chapitre précédent.

Nous commencerons par présenter l'algorithme suivi pour développer le programme de simulations sous l'environnement Python. Nous exploiterons ensuite les résultats de ces simulations en deux étapes. Dans un premier temps, nous étudierons les spectres de réflexion et de transmission, ainsi que l'influence de l'épaisseur des couches, de l'angle d'incidence et du nombre de couches sur ces derniers.

Dans un second temps, nous nous intéresserons à l'indice de réfraction effectif et analyserons l'influence des paramètres précédemment cités sur cet indice. Nous terminerons ce chapitre en évoquant l'optimisation de l'indice de réfraction en vue d'éventuelles applications en optoélectronique et en électronique.

III.2 Algorithme et programme de calcul :

L'algorithme de calcul de l'indice de réfraction effectif des empilements GaAs/AlGaAs comprend les étapes suivantes :

- Définition des paramètres d'entrée : indices optiques n et κ des matériaux GaAs et AlGaAs, gamme de longueurs d'onde d'intérêt, nombre de périodes N de l'empilement, épaisseurs des couches, angles d'incidence et polarisation TE ou TM.
- Pour la bicouche élémentaire GaAs/AlGaAs:
 - Calcul de l'angle d'incidence pour chaque interface en utilisant les lois de Snell-Descartes.
 - Pour chaque interface :
 - Calcul des coefficients de Fresnel ($r_{i/i+1}, t_{i/i+1}$) pour les polarisations TE et TM.

- Détermination de la matrice interface $M_{i/i+1}$ à partir des coefficients de Fresnel.
 - Pour chaque couche : détermination de la matrice de propagation P_i en fonction de l'épaisseur et du vecteur d'onde dans la couche. Cette étape sous-entend le calcul du vecteur d'onde dans chaque couche.
- Calcul de la matrice de transfert M_{BC} pour la bicouche élémentaire.
- Calcul de matrice globale de la structure multicouche par un produit itératif des matrices transferts pour la bicouche élémentaire sur N périodes : $M = M_{BC}^N$.
- Détermination des coefficients de réflexion et transmission en énergie du milieu multicouche à partir des éléments de la matrice globale.
- Calcul de la constante de propagation complexe effective k_z en utilisant la relation de dispersion.
- Calcul de l'indice effectif n_{eff} de la structure multicouche périodique.
- Hormis la première étape, toutes les autres étapes sont répétées pour chaque longueur d'onde dans la gamme spectrale désirée, permettant de tracer les courbes de dispersion $n(\lambda)$ de l'indice effectif ainsi que celle des coefficients R et T .

Ce programme permet ainsi d'étudier finement l'impact des paramètres géométriques sur la réponse optique des empilements GaAs/AlGaAs périodiques.

Le langage de programmation Python a été privilégié pour développer le code de simulation numérique, en raison de ses atouts pour le calcul scientifique et le traitement de données. Python offre un environnement complet intégrant à la fois un puissant noyau de calcul numérique optimisé pour les opérations sur les vecteurs et matrices omniprésentes en algèbre linéaire, ainsi que des bibliothèques spécialisées comme NumPy et SciPy facilitant grandement les calculs scientifiques. De plus, Python dispose de fonctionnalités graphiques avancées pour la visualisation des résultats grâce à des bibliothèques comme Matplotlib. Son langage de haut niveau orienté objet permet une mise en œuvre aisée d'algorithmes complexes.

III.3 Données d'entrée :

Les simulations reposent sur un ensemble de données d'entrée caractérisant les matériaux GaAs et AlGaAs constituant l'empilement périodique, ainsi que les paramètres géométriques et spectraux d'intérêt.

Tout d'abord, les indices de réfraction $n(\lambda)$ des deux semiconducteurs III-V sont pris en compte sur la gamme 300-1200 nm, en utilisant les modèles empiriques décrits par les relations de Gurnick et Perry [30] :

$$n_{GaAs}(\lambda) = \sqrt{10.90596 + \frac{0.67354}{1 - \left(\frac{0.29169}{\lambda}\right)^2} + \frac{2.57456}{1 - \left(\frac{36.9166}{\lambda}\right)^2}} \quad (III.1)$$

$$n_{AlGaAs}(\lambda) = \sqrt{8.16 + \frac{1.54}{1 - \left(\frac{0.266}{\lambda}\right)^2} + \frac{3.07}{1 - \left(\frac{33}{\lambda}\right)^2}} \quad (III.2)$$

Avec λ en micromètre. Les coefficients sont ajustés pour une concentration de 30% d'Aluminium dans l'alliage AlGaAs. Ces modèles phénoménologiques reproduisent fidèlement la dispersion caractéristique observée expérimentalement.

Les épaisseurs des couches GaAs et AlGaAs constituent des paramètres clés à optimiser. Une plage allant de 50 à 1000 nm a été explorée pour chaque matériau.

Pour l'angle d'incidence du rayonnement sur l'empilement multicouche, nous avons choisi une plage allant de 0° (incidence normale) et 90° (incidence rasante) par rapport à la normale pour cette étude. Les deux états de polarisation, TE (s) et TM (p), ont été considérés séparément.

Enfin, les simulations ont été menées sur une gamme spectrale de 300 à 1200 nm, correspondant au domaine du spectre optique.

Cette large plage de paramètres d'entrée a permis de modéliser avec précision la réponse optique des structures GaAs/AlGaAs périodiques et d'identifier les configurations idéales pour un comportement cible de l'indice effectif sur le spectre optique.

III.4 Simulation des propriétés optiques fondamentales :

Dans cette section, nous allons donner et interpréter les résultats des simulations des propriétés optiques fondamentales de notre cellule solaire à base de Cadmium Telluride Solar Panels (CDTE). En particulier, les spectres de transmission, de réflexion et d'absorption.

III.4.1 Coefficients de réflexion et de transmission :

III.4.1.1 Spectres de réflexion et de transmission pour les polarisations TE et TM :

Les figures (III.1) représentent les spectres de réflexion et de transmission obtenus pour les polarisations TM et TE. Nous avons choisi la même épaisseur de 100 nm pour les

couches GaAs et AlGaAs, un angle d'incidence de 30° , une gamme de longueur d'onde s'étalant de 300 nm à 1200 nm (spectre optique) et un nombre de couches égale à 10.

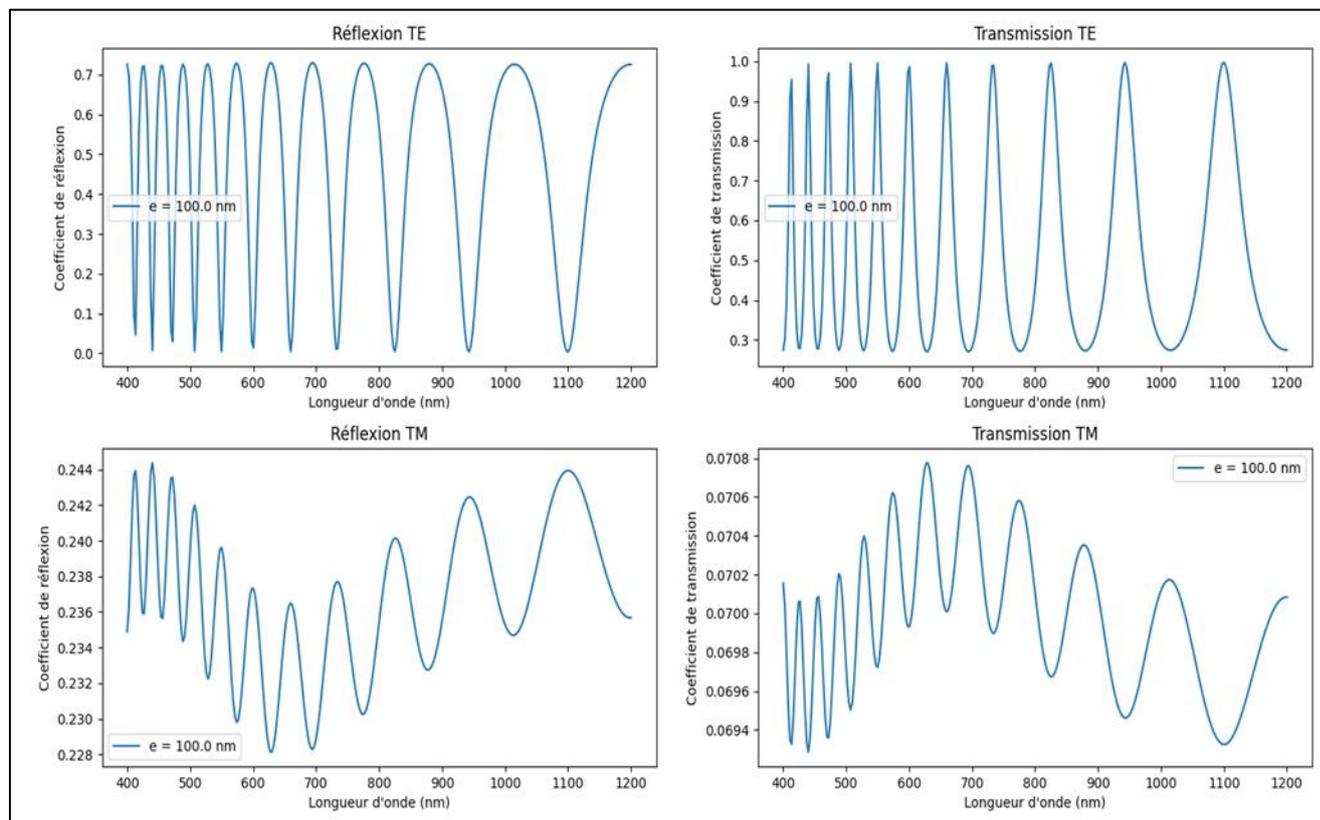


Figure III.1 : Spectres de transmission et de réflexion pour les polarisations TE et TM.

Les spectres de transmission et de réflexion d'une structure multicouche présentent des oscillations périodiques en fonction de la longueur d'onde, dues aux interférences optiques résultant des réflexions partielles à chaque interface entre les couches de différents matériaux. L'interférence est constructive ou destructive selon la longueur d'onde et l'épaisseur des couches, générant ainsi les modulations périodiques observées.

Pour la polarisation TE, l'amplitude des oscillations reste constante avec la longueur d'onde, mais leur largeur augmente. En polarisation TM, l'amplitude et la largeur des oscillations varient toutes deux avec la longueur d'onde, et leur espacement s'accroît également.

Ces différences de comportement entre TE et TM proviennent de la dépendance à la polarisation dans les équations de Fresnel régissant la réflexion/transmission aux interfaces. La dispersion des indices de réfraction des matériaux constitutifs joue aussi un rôle sur l'évolution de la largeur et de l'espacement des oscillations en fonction de la longueur d'onde.

III.4.1.2 Influence de l'épaisseur des couches :

Les figures (III.2) représentent les spectres de réflexion et de transmission obtenus pour les polarisations TE et TE, où avons considéré trois épaisseurs différentes des couches GaAs et AlGaAs (100 nm, 200 nm et 300 nm). Les couches GaAs et AlGaAs ont la même épaisseur. Nous avons choisi un angle d'incidence de 30° , une gamme de longueur d'onde s'étalant de 800 nm à 1200 nm (spectre optique) et un nombre de couche égale à 10.

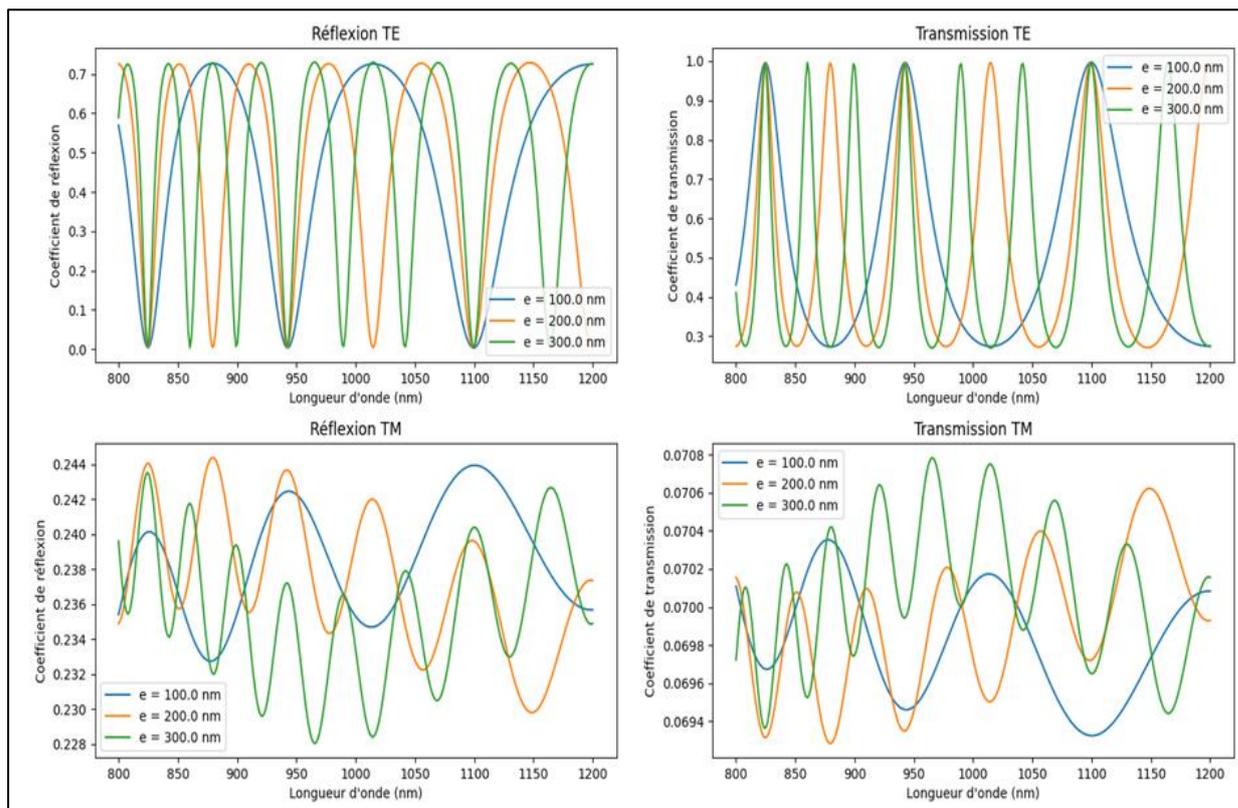


Figure III.2 : Influence de l'épaisseur des couches sur les spectres de transmission et de réflexion pour les polarisations TE et TM.

Lorsque l'épaisseur des couches GaAs/AlGaAs augmente, la largeur des oscillations dans les spectres diminue avec l'augmentation de l'épaisseur des couches. Cela signifie que les oscillations deviennent plus resserrées et étroites pour des couches plus épaisses. On observe aussi que le nombre d'oscillations sur une gamme de longueurs d'onde donnée augmente avec l'épaisseur des couches. Par exemple, une épaisseur de 300 nm présentera plus d'oscillations qu'une épaisseur de 200 nm ou 100 nm sur la même gamme de longueurs d'onde.

Ces observations sont liées au phénomène d'interférences optiques dans les couches minces. Lorsque l'épaisseur augmente, les chemins optiques parcourus par la lumière réfléchi

et transmise à travers les couches deviennent plus longs, ce qui entraîne une modulation plus rapide des interférences constructives et destructives. Cela se traduit par des oscillations plus resserrées (largeur plus étroite) et un plus grand nombre d'oscillations sur une gamme de longueurs d'onde donnée.

III.4.1.3 Influence de l'angle d'incidence :

Les figures (III.3) représentent les spectres de réflexion et de transmission obtenus pour les polarisations TM et TE, pour trois angles d'incidence (30° , 50° et 70°). Nous avons choisi la même épaisseur de 100 nm pour les couches GaAs et AlGaAs, une gamme de longueur d'onde s'étalant de 400 nm à 800 nm (spectre optique) et un nombre de couche égale à 10.

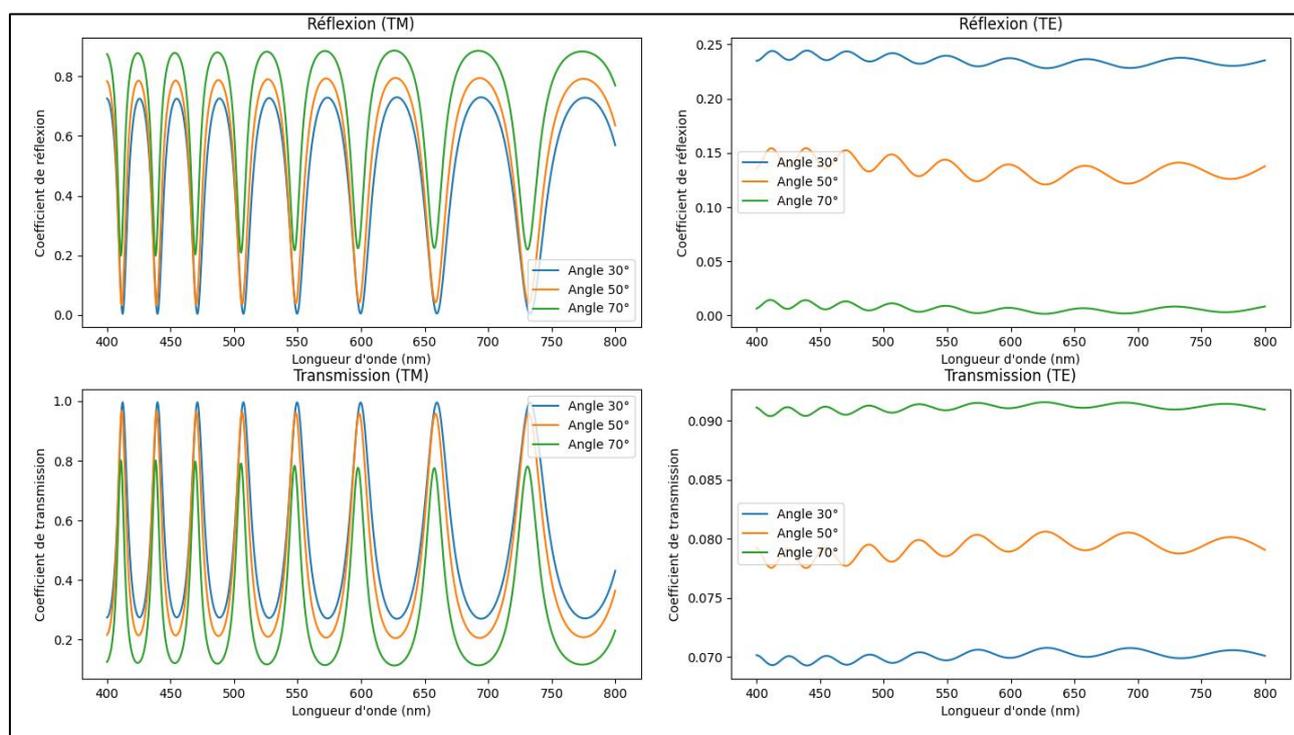


Figure III.3 : Influence de l'angle d'incidence sur les spectres de transmission et de réflexion pour les polarisations TE et TM.

Lors de l'étude de l'influence de l'angle d'incidence sur les spectres de réflexion et transmission de la structure multicouche GaAs/AlGaAs, on observe une absence de décalage spectral. La position des oscillations dans les spectres reste inchangée en termes de longueur d'onde, quelle que soit la variation de l'angle d'incidence. La condition d'interférence constructive ou destructive n'est donc pas affectée.

Cependant, une augmentation de l'amplitude des oscillations est notable lorsque l'angle d'incidence augmente. Les maxima et minima des oscillations deviennent plus prononcés dans les spectres de réflexion et de transmission, en raison des changements des coefficients de Fresnel aux interfaces, dépendants de cet angle. De plus, il est observé que la largeur des oscillations s'élargit avec l'augmentation de l'angle d'incidence. Les oscillations deviennent moins resserrées et plus larges dans les spectres, également lié aux variations des coefficients de Fresnel en fonction de l'angle et des composantes du champ électrique.

III.4.1.4 Influence du nombre de couches :

La figure (III.4) représente les spectres de réflexion et de transmission obtenus pour les polarisations TM et TE, pour différents nombres de couches GaAs et AlGaAs (10, 20 et 30). Nous avons choisi une épaisseur de 100 nm pour les couches de GaAs et AlGaAs, une gamme de longueur d'onde s'étalant de 800 nm à 1200 nm, un angle d'incidence de 30°.

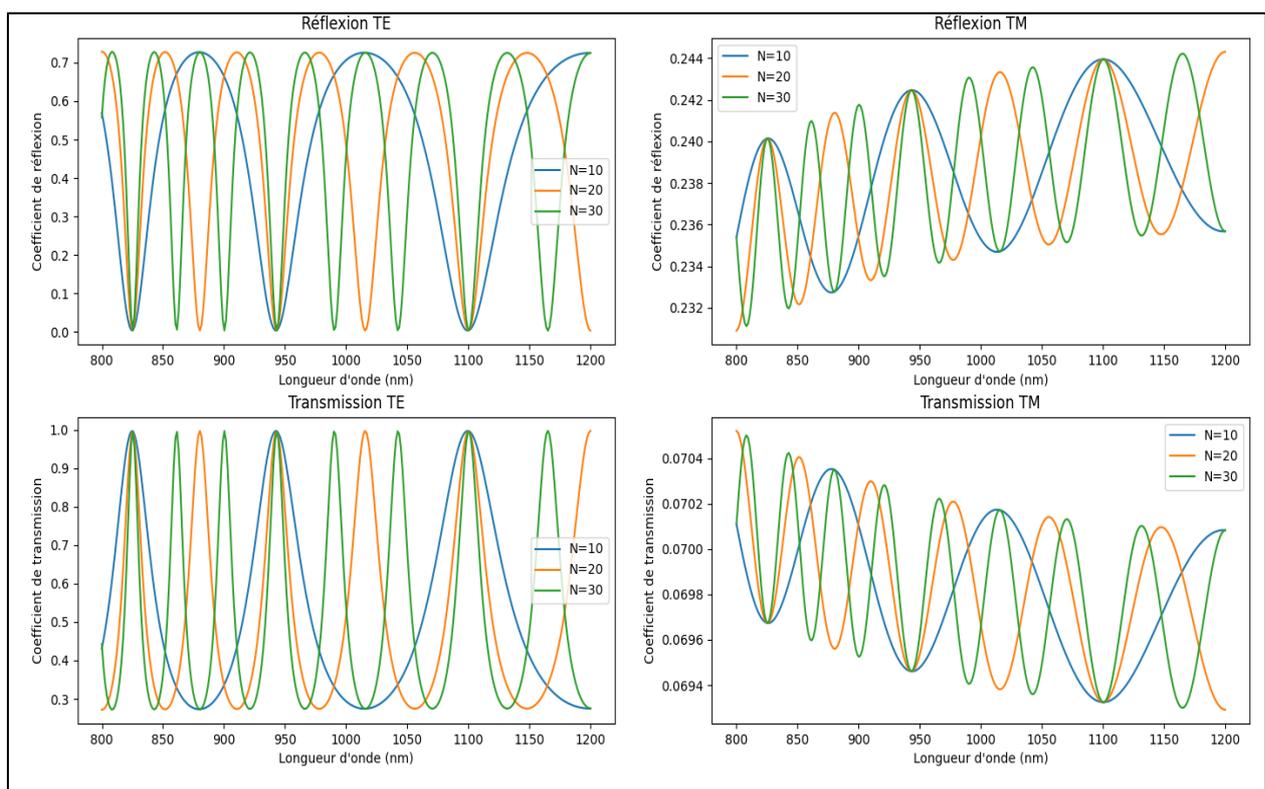


Figure III.4 : Influence de la longueur d'onde en fonction de nombre de couches pour les polarisations TE et TM.

L'augmentation du nombre de couches dans les empilements GaAs/AlGaAs n'affecte pas les valeurs maximale ou minimale des coefficients de réflexion et de transmission. Cela s'explique par le fait que les amplitudes maximales et minimales sont essentiellement

déterminées par les coefficients de réflexion et de transmission aux interfaces entre le milieu incident (généralement l'air) et la première couche de l'empilement d'une part, et entre la dernière couche et le milieu de sortie d'autre part. Ces coefficients dépendent des indices optiques des matériaux et de l'angle d'incidence, mais pas du nombre total de couches.

Cependant, contrairement à ce qui a été indiqué initialement, on observe que la largeur des oscillations dans les spectres R et T diminue avec l'augmentation du nombre de couches. Ce comportement est une conséquence directe des interférences optiques multiples au sein de l'empilement multicouche. Lorsque le nombre de couches augmente, les chemins optiques parcourus par les ondes se réfléchissant sur les différentes interfaces s'allongent. Cela modifie les conditions d'interférences constructives et destructives de telle sorte que les maxima et minima d'interférences se rapprochent les uns des autres sur l'axe des longueurs d'onde. Il en résulte un rétrécissement de la largeur des oscillations observées dans les spectres. Ainsi, plus le nombre de couches est élevé, plus les effets d'interférences multiples complexes se renforcent, conduisant à des oscillations spectrales de plus en plus fines et resserrées dans les spectres de réflexion et de transmission.

III.4.2 L'indice de réfraction effectif :

III.4.2.1 Spectres de l'indice de réfraction effectif pour les polarisations TE et TM :

La figure (III.5) représente les spectres de l'indice de réfraction effectif pour les polarisations TE et TM. Nous avons choisi la même épaisseur de 100 nm pour les couches GaAs et AlGaAs, un angle d'incidence de 30° , une gamme de longueur d'onde s'étalant de 400 nm à 800 nm (spectre optique) et un nombre de couche égale à 10.

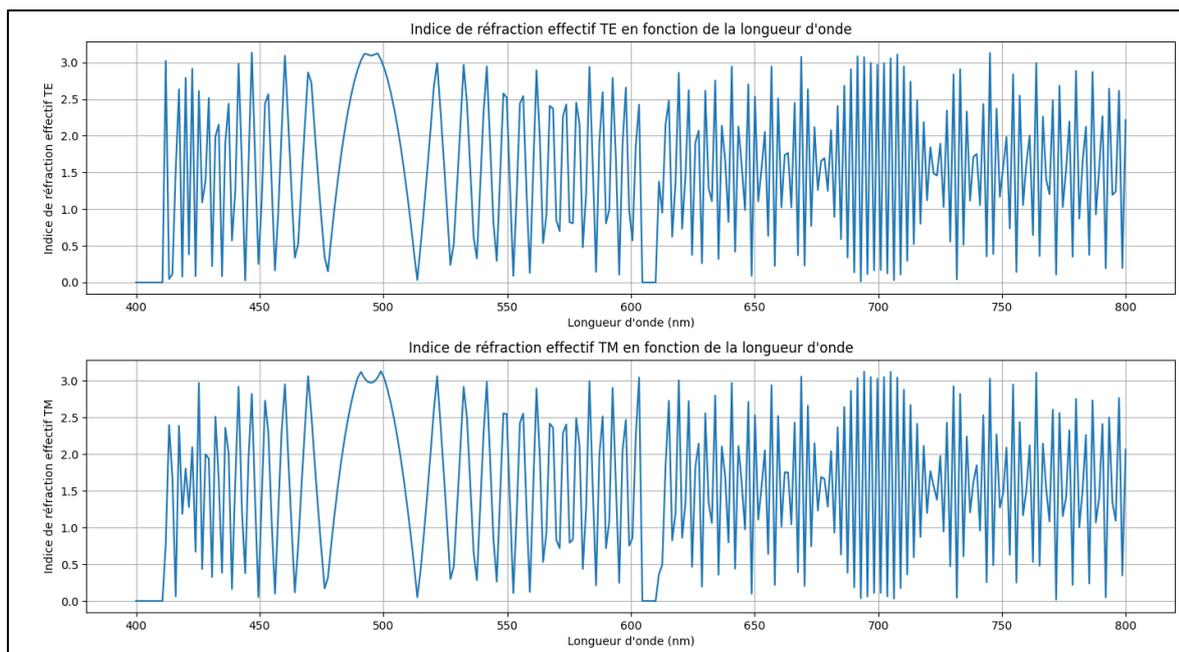


Figure III. 5 : Spectres de l'indice de réfraction effectif pour les polarisations TE et TM.

Le spectre de l'indice de réfraction effectif des couches GaAs/AlGaAs présente des oscillations non périodiques, contrairement aux spectres de réflexion et de transmission qui montrent des oscillations périodiques. L'amplitude et la largeur des oscillations de l'indice effectif varient de manière irrégulière en fonction de la longueur d'onde. Cependant, le spectre de l'indice effectif est indépendant de la polarisation (TE ou TM) de la lumière incidente, à la différence des spectres de réflexion/transmission qui peuvent varier avec la polarisation.

Cette absence de périodicité régulière et cette indépendance à la polarisation s'expliquent par la structure complexe multicouche des couches GaAs/AlGaAs. Les multiples couches minces empilées avec des épaisseurs et indices légèrement différents peuvent entraîner des interférences multiples et des couplages de modes, brisant la périodicité. La symétrie de rotation dans le plan des couches conduit également à une isotropie de l'indice effectif intégré en profondeur.

III.4.2.2 Influence de l'épaisseur :

La figure (III.6) représente la variation de l'indice de réfraction effectif pour les polarisations TE et TM en fonction de l'épaisseur des couches GaAs et AlGaAs. Nous avons choisi la même épaisseur pour ces deux couches et nous avons varié cette épaisseur de 50 à 1000 nm. Nous avons choisi une longueur d'onde incidente de 500 nm, un angle d'incidence de 30° et un nombre de couche égale à 10.

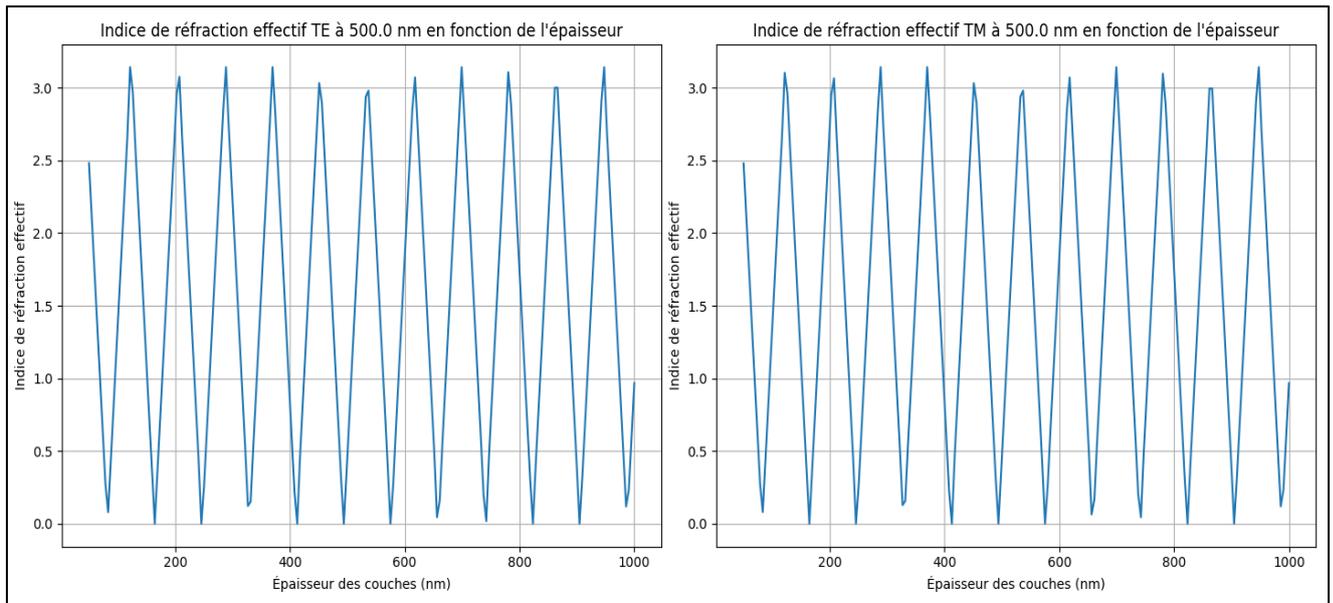


Figure III.6 : Variation de l'indice de réfraction effectif en fonction de l'épaisseur pour les polarisations TE et TM.

La courbe de l'indice de réfraction effectif en fonction de l'épaisseur des couches GaAs/AlGaAs présente une forme périodique caractéristique en triangle avec des maxima et minima. Ce comportement provient des interférences optiques au sein de la structure multicouche. Les couches GaAs et AlGaAs ayant des indices légèrement différents, la lumière subit des réflexions multiples aux interfaces, conduisant à des interférences constructives (maxima d'indice effectif) ou destructives (minima d'indice effectif) selon l'épaisseur des couches et la longueur d'onde. La périodicité de cette courbe en "dents de scie" est directement liée à la condition d'interférence constructive/destructive qui change lorsque l'épaisseur varie d'une demi-longueur d'onde environ dans le matériau, faisant alterner les maxima et minima.

III.4.2.3 Influence de l'angle d'incidence :

La figure (III.7) représente la variation de l'indice de réfraction effectif pour les polarisations TE et TM en fonction de l'angle d'incidence, où nous avons fait varier ce dernier de 0° à 90° . Nous avons choisi la même épaisseur pour les deux couches GaAs et AlGaAs égale à 100 nm. Nous avons également choisi une longueur d'onde incidente de 500 nm et un nombre de couche égale à 10.

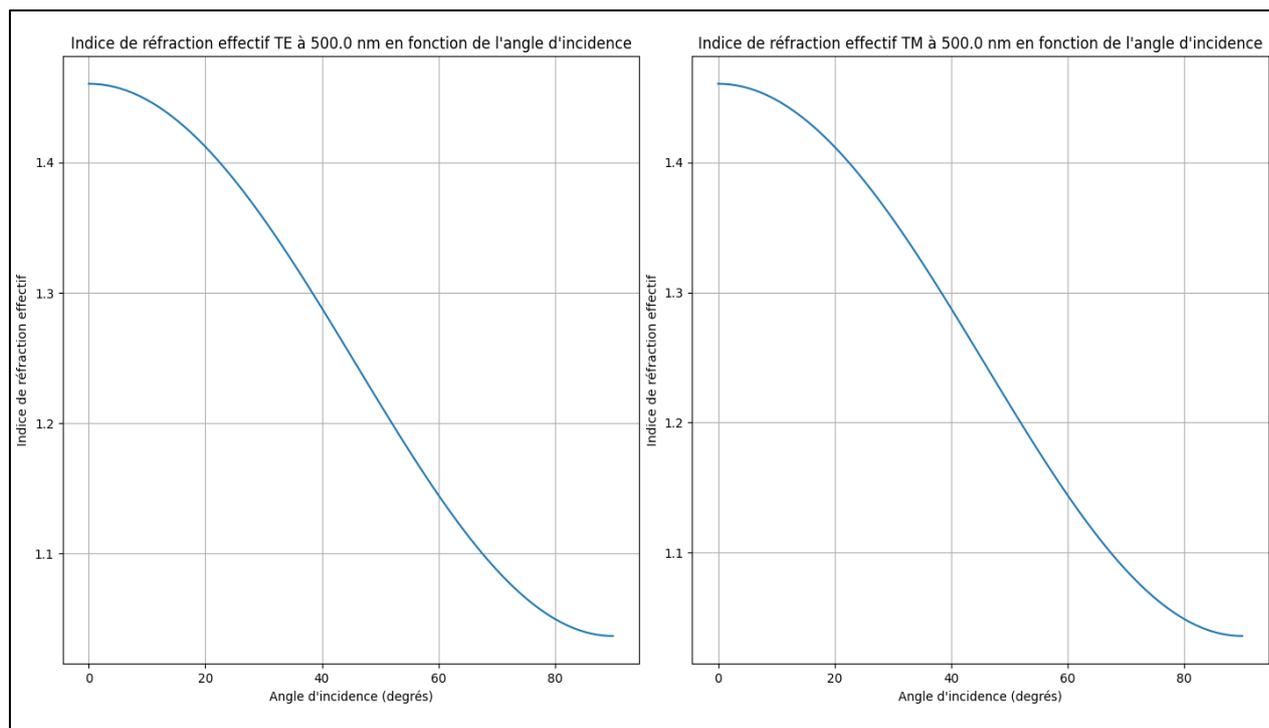


Figure III.7 : Variation de l'indice de réfraction effectif en fonction de l'angle d'incidence pour les polarisations TE et TM.

La courbe de l'indice de réfraction effectif en fonction de l'angle d'incidence pour les couches GaAs/AlGaAs adopte une forme de demi-parabole décroissante avec l'augmentation de l'angle. À incidence normale (0°), l'indice effectif est maximal, correspondant au mode guidé fondamental. Quand l'angle augmente légèrement, l'indice effectif décroît quasi-linéairement en raison des changements dans les conditions de guidage du mode. Pour des angles plus élevés, la courbe s'écarte de la linéarité et devient plus parabolique, à cause des effets de réfraction/réflexion importants aux interfaces à grande incidence. La décroissance globale de l'indice effectif avec l'angle est due aux pertes par rayonnement du mode guidé dans les couches supérieures/inférieures à incidence oblique, réduisant la densité d'énergie confinée.

III.4.2.4 Influence du nombre de couches :

La figure (III.8) représente la variation de l'indice de réfraction effectif pour les polarisations TE et TM en fonction du nombre de couches, où nous avons fait varier ce dernier de 2 à 20. Nous avons choisi la même épaisseur pour les deux couches GaAs et AlGaAs égale à 100 nm. Nous avons également choisi une longueur d'onde incidente de 500 nm et un angle d'incidence égale à 30° .

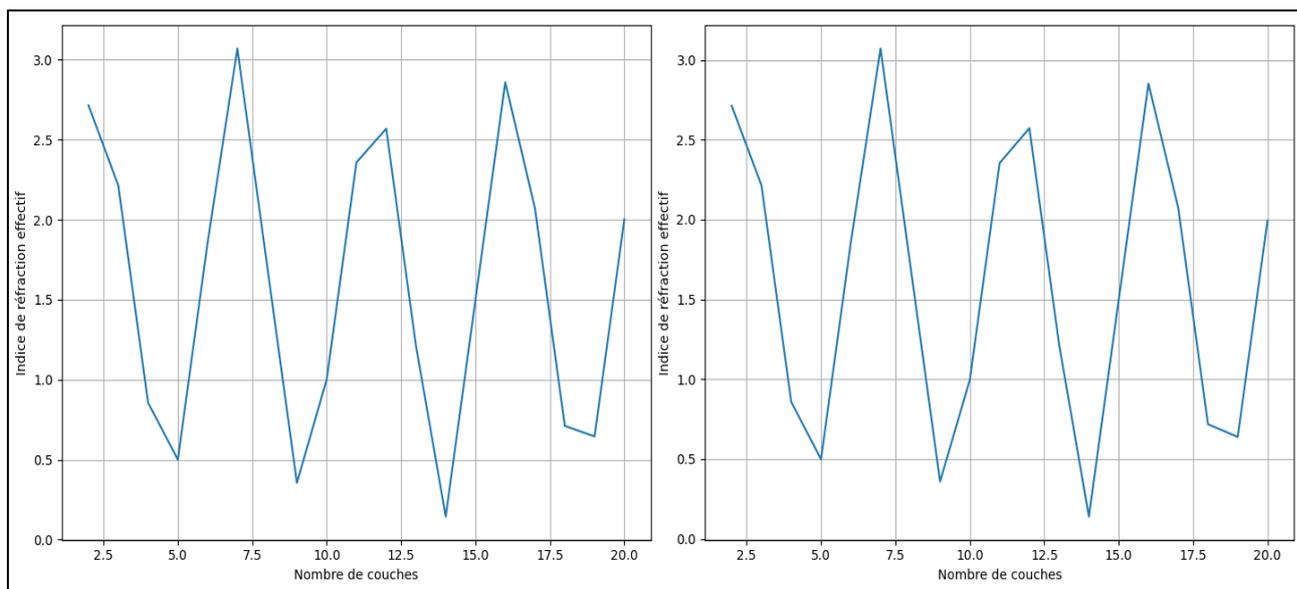


Figure III.8 : Variation de l'indice de réfraction effectif en fonction de nombre de couches pour les polarisations TE et TM.

Lorsqu'on trace l'indice de réfraction effectif en fonction du nombre de couches dans la structure multicouche, la courbe obtenue présente une forme presque aléatoire et périodique. Cette allure périodique provient des interférences optiques se produisant dans la structure. Chaque nombre de couches supplémentaires modifie les conditions d'interférence pour la lumière se propageant, entraînant des variations de l'indice effectif. Les maxima correspondent à des conditions d'interférences constructives, tandis que les minima représentent des conditions d'interférences destructives.

Les valeurs numériques précises des extrema dépendent des paramètres spécifiques de la structure étudiée, tels que les épaisseurs de couches, l'angle d'incidence et la longueur d'onde considérée.

III.5 Optimisation et applications :

L'optimisation de la structure multicouche périodique GaAs/AlGaAs offre la possibilité de contrôler et d'ajuster avec précision l'indice de réfraction effectif sur une large gamme spectrale. En jouant sur les paramètres géométriques tels que les épaisseurs des couches, le nombre de périodes et l'angle d'incidence, on peut façonner le spectre de l'indice effectif selon les besoins applicatifs visés.

Par exemple, en choisissant judicieusement les épaisseurs, on peut concevoir des filtres optiques passe-bande ou coupe-bande à bandes spectrales ajustables. Les maxima et minima de l'indice effectif aux longueurs d'onde souhaitées permettent respectivement la transmission ou le blocage de ces gammes spectrales. Ces filtres peuvent trouver des applications dans les télécommunications optiques, le traitement d'images ou l'instrumentation scientifique.

D'autre part, une structure conçue pour avoir un indice effectif quasi-constant sur une large bande spectrale offrirait des propriétés d'adaptation d'impédance idéales pour les guides d'ondes optiques à large bande. Cela permettrait la transmission de signaux optiques sur une grande plage de longueurs d'onde avec de faibles pertes par réflexion.

Dans le domaine des capteurs optiques, le fort confinement du champ électromagnétique dans ces structures les rend très sensibles aux changements d'indice de réfraction de leur environnement. En concevant une structure avec un indice effectif spécifique, on peut détecter sélectivement la présence de certaines substances ou molécules par les décalages spectraux induits.

Enfin, l'ingénierie de l'indice effectif dans ces matériaux semi-conducteurs ouvre des perspectives pour le développement de nouveaux dispositifs photoniques intégrés tels que des guides d'onde, des cavités résonantes, des modulateurs ou des lasers. La maîtrise de l'indice effectif permet d'optimiser et de contrôler les propriétés de guidage, de confinement et de gain pour ces composants.

III.6 Conclusion :

La simulation numérique et les algorithmes de calcul sont indispensables pour l'étude et l'optimisation des propriétés optiques des matériaux GaAs et AlGaAs. Ils permettent de prédire les comportements optiques, d'optimiser les structures multicouches et de développer des dispositifs optoélectroniques de haute performance. En intégrant des techniques avancées de simulation et d'optimisation, les chercheurs et les ingénieurs peuvent continuer à améliorer les capacités et l'efficacité des dispositifs basés sur GaAs et AlGaAs, ouvrant ainsi la voie à de nouvelles applications dans les domaines des communications, de la détection et de l'énergie.

Conclusion générale

Ce projet vise à développer un modèle analytique pour prédire l'indice de réfraction effectif d'un milieu multicouche périodique composé de couches alternées de GaAs et d'AlGaAs. Ces deux semi-conducteurs III-V sont très utilisés en optoélectronique.

Dans le premier chapitre nous avons présenté les propriétés fondamentales des semi-conducteurs GaAs et AlGaAs, notamment leur structure cristalline, leurs propriétés électroniques et optiques telles que l'indice de réfraction complexe, l'absorption et l'émission. Ensuite, nous avons énuméré quelques exemples d'hétérostructures à alternance périodique GaAs/AlGaAs comme les superréseaux, les puits quantiques couplés, les miroirs de Bragg et les cristaux photoniques, ainsi que leurs méthodes de croissance et de fabrication. Enfin, différents modèles théoriques permettant de calculer l'indice de réfraction effectif de ces milieux multicouches ont été passé en revue, notamment l'approximation des milieux effectifs, la théorie des ondes couplées, les méthodes rigoureuses des ondes planes, des différences finies et des éléments finis et le formalisme matriciel de transfert optique.

Le deuxième chapitre a exploré en détail les fondements théoriques du formalisme matriciel de transfert optique pour modéliser les milieux stratifiés. Après avoir présenté les équations de base de l'optique des milieux stratifiés, les expressions des matrices de transfert ont été dérivées pour différentes configurations élémentaires telles que les interfaces et les couches minces. La combinaison de ces matrices a ensuite permis de modéliser des empilements multicouches complexes et d'en déduire les grandeurs optiques d'intérêt comme les coefficients de transmission, d'absorption, de réflexion ainsi que l'indice de réfraction effectif. Ce formalisme matriciel a finalement été appliqué à l'étude de la réponse optique des structures multicouches périodiques GaAs/AlGaAs, qui constituent le cœur de ce projet.

Le troisième chapitre a présenté l'algorithme et le programme de simulation développés sous Python pour mettre en œuvre le formalisme matriciel afin d'étudier les structures multicouches périodiques GaAs/AlGaAs. Les résultats ont été analysés en deux parties.

Premièrement, les spectres de réflexion et de transmission de ces empilements GaAs/AlGaAs ont été étudiés en fonction de l'épaisseur des couches, de l'angle d'incidence et du nombre de couches, pour les polarisations TE et TM. Des oscillations périodiques ont été observées, dues aux interférences optiques résultant des réflexions partielles aux interfaces GaAs/AlGaAs. Pour la polarisation TE, l'amplitude est constante mais la largeur augmente avec la longueur d'onde. Pour la polarisation TM, amplitude et largeur varient avec la

longueur d'onde à cause de la dépendance en polarisation des coefficients de Fresnel. En augmentant l'épaisseur, les oscillations se resserrent. Avec l'angle d'incidence, elles s'élargissent. Avec l'augmentation nombre de couches, les oscillations sont plus resserrées.

Deuxièmement, l'indice de réfraction effectif de ces structures a été analysé en fonction des mêmes paramètres géométriques. Les courbes présentent des oscillations non périodiques dues aux interférences multiples dans ces multicouches complexes. Une forme en "dents de scie" apparaît avec l'épaisseur à cause des interférences constructives et/ou destructives à demi-longueur d'onde. L'indice décroît avec l'angle à cause des pertes par rayonnement. Une modulation sinusoïdale survient avec le nombre de couches en raison des changements de conditions d'interférence. Ces comportements révèlent l'influence des interférences, du guidage optique et de la structure multicouche. Enfin, ces résultats nous ont permis de proposer quelques pistes d'optimisation de l'indice de réfraction effectif des empilements GaAs/AlGaAs pour l'optoélectronique. Pour clore ce travail, une synthèse finale a été réalisée résumant les principales avancées et contributions du projet.

L'utilisation de l'indice de réfraction dans les empilements périodiques de GaAs et AlGaAs permet de concevoir et de réaliser une vaste gamme de dispositifs optoélectroniques avancés. En manipulant précisément les variations d'indice de réfraction, les ingénieurs peuvent contrôler la propagation de la lumière et optimiser les performances des dispositifs pour des applications spécifiques. Ces technologies continuent de jouer un rôle clé dans le développement de nouveaux dispositifs photoniques et optoélectroniques.

Listes des références

- [1]. Boucher, Y. Propriétés optiques d'empilements multicouches de semiconducteurs III/V GaAs/AlGaAs [Texte imprimé]: application à l'étude de microcavités laser à émission surfacique (Doctoral dissertation, Université Paris Sud-Paris XI), (1993).
- [2]. S.Laval , Physique des semi-conducteurs III-V, Ecole d'été d'optoélectronique, (2002).
- [3].Howard, A. J., Anderson, T. J., Larochelle, S., Bassignana, I. C., Mandeville, P., & Svilans, M. N, Electrically active multilayer n-GaAs-p-AlGaAs quarter wave mirrors grown by molecular beam epitaxy , Canadian Journal of Physics, 67(4), 232-237, (1989).
- [4]. Islam, M., Mourad, M. K., & Abderrahmene, R. Etude par simulation des propriétés électriques des composants HEMTs à base d'hétérostructure ALGaAs/GaAs.
- [5]. EDDINE, H. Z. K. Etude d'une Cellule Solaire Double jonction a base de l'InGaP.
- [6]. C. Kittel, physique de l'état solide, édition Dunod, Paris (1998).
- [7]. Bouarissa, N., & Bechiri, A, Effet du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semiconducteurs III-V, (2006).
- [8]. Adachi, S, Refractive indices of III-V compounds: Key properties of InGaAsP relevant to device design, Journal of Applied Physics, 53(8), 5863-5869, (1982).
- [9]. Bois, D, Etude Experimentale de la Relaxation de Réseau des Centres Profonds dans GaAs. Le Journal de Physique Colloques, 35(C3), C3-241, (1974).
- [10]. Kahen, K. B., & Leburton, J. P, Structure variation of the index of refraction of GaAs-AlAs superlattices and multiple quantum wells. Applied physics letters, 47(5), 508-510, (1985).
- [11]. Adachi, S, Optical dispersion relations for GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, and $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$. Journal Of Applied Physics, 66(12), 6030-6040, . (1989).
- [12]. Julien, F., Swanson, P., Tang, T., Deppe, D. G., Emanuel, M., Detemple, T. A., ... & Holonyak, N, Guides d'ondes enfouis dans des superréseaux GaAs-AlGaAs créés par interdiffusion induite par des impuretés. Annals of Telecommunications, 43(1), 66-72. . (1988).

- [13]. S, Technologies pour sources laser a semiconducteurs III-V, (Doctoral dissertation, Université ParisSud XI). Supélec), (2018).
- [14]. Larrue, A. Sources laser planaires à cristaux photoniques pour une émission monomode à 1 micron en filière GaAs (Doctoral dissertation, Toulouse 3), (2009).
- [15]. Chatenoud, F., Janz, S., Normandin, R., Dai, H., & McCaffrey, J. P, AlGaAs/InGaAs/GaAs optoelectronic structures on (111) B GaAs. Canadian journal of physics, 70(10-11), 1082-1085, (1992).
- [16]. Irvine, S., & Capper, P. (Eds.), Metalorganic vapor phase epitaxy (MOVPE): Growth, materials properties, and applications. John Wiley & Sons, (2019).
- [17]. Desplats, O, Préparation de surfaces structurées et reprise d'épitaxie par jets moléculaires. Réalisation de micro et nanostructures sur GaAs, (Doctoral dissertation, Université Paul Sabatier-Toulouse III), (2008).
- [18]. G. Bastard, "Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures", Les éditions de physique, Paris, (1988).
- [19]. Fellmann, V, Croissance et caractérisations structurales et optiques d'hétérostructures de nitrures d'éléments III émettant dans l'UV (Doctoral dissertation, Université de Grenoble), (2012).
- [20]. P. Kuzel, « OPTIQUE, Electromagnétisme des milieux continus », Licence de Physique, Institut Galilée, Université Paris-Nord, (2000/2001).
- [21]. R. Luo, "Effective medium theories for the optical properties of three-component composite materials", Applied optics, Vol. 36, No. 31, pp. 8153-8158, Nov. (1997).
- [22]. H. Kogelnik, "Coupled wave theory for thick hologram gratings," Bell System Technical Journal, Vol. 48 (9), pp. 2909-2947, (1969).
- [23]. Chong, H. M., Richard, M., O'Faolain, L., Krauss, T. F., Belabas, N., Levenson, A., ... & Roosen, G. 3D photonic crystals based on epitaxial III-V semiconductor structures for nonlinear optical interactions. In Photonic Crystal Materials and Devices III (ie V) (Vol. 6182, pp. 209-214). SPIE. (2006, April).
- [24]. Inan, U. S., & Marshall, R. A. Numerical electromagnetics: the FDTD method. Cambridge University Press. (2011).

- [25]. Ed-Dahmouny, A, étude des effets des perturbations extérieures sur les propriétés optoélectroniques des boîtes quantiques couplées à base de GaAs (Doctoral dissertation, Laboratoire des systèmes intelligents, des géo-ressources et des énergies renouvelables, Faculté des Sciences et Techniques de Fès Maroc), (2023).
- [26]. Abelès, F, la théorie générale des couches minces, *Journal de Physique et le Radium*, 11(7), 307-309, (1950).
- [27]. Erdogan, T, (Fiber grating spectra. *Journal Of Lightwave Technology*, 15(8), 1277-1294, (1997b).
- [28]. Abelès, F, La théorie générale des couches minces. *Journal de Physique et le Radium*, 11(7), 307-309, (1950).
- [29]. Gasparian, G. A., Herskowitz, G. J., & Kobrinski, H. Components for angular division multiplexing. In *Integrated optics and millimeter and microwave integrated circuits* (Vol. 317, pp. 173-178). SPIE, (1982).
- [30]. Tatian, B, Fitting refractive-index data with the Sellmeier dispersion formula. *Applied Optics*, 23(24), 4477. <https://doi.org/10.1364/ao.23.004477>, (1984).

Résumé

Le formalisme des matrices de transfert optique a été utilisé pour étudier l'indice de réfraction effectif d'un empilement périodique GaAs/AlGaAs. Les simulations ont examiné l'influence de divers paramètres (longueur d'onde, polarisation, angle d'incidence, épaisseur des couches) sur cet indice. Les résultats montrent des oscillations non périodiques dans l'indice de réfraction effectif, dues aux interférences multiples dans ces structures complexes. Les spectres de réflexion et de transmission présentent des oscillations périodiques influencées par les mêmes paramètres. Des pistes d'optimisation ont été proposées pour d'éventuelles applications en optoélectronique.

Mots clés : formalisme des matrices de transfert optique, indice de réfraction effectif, empilement périodique GaAs/AlGaAs, les spectres de réflexion et de transmission, optimisation, optoélectronique.

Abstract

The formalism of optical transfer matrices was used to study the effective refractive index of a periodic stack of GaAs and AlGaAs layers. Simulations examined the influence of various parameters (wavelength, polarization, angle of incidence, layer thickness) on this index. The results show non-periodic oscillations in the effective refractive index due to multiple interferences in these complex structures. The reflection and transmission spectra exhibit periodic oscillations influenced by the same parameters. Optimization strategies have been proposed for potential applications in optoelectronics.

Keywords: formalism of optical transfer matrices, effective refractive index, periodic stack of GaAs and AlGaAs layers, the reflection and transmission spectra, optimization, optoelectronics.