



HAL
open science

**Redistribution des états de contrainte dans l'alliage
germanium-étain pour des applications laser
CMOS-compatibles à température ambiante et
accordables en longueur d'onde**

Jérémie Chretien

► **To cite this version:**

Jérémie Chretien. Redistribution des états de contrainte dans l'alliage germanium-étain pour des applications laser CMOS-compatibles à température ambiante et accordables en longueur d'onde. Science des matériaux [cond-mat.mtrl-sci]. Université Grenoble Alpes [2020-..], 2021. Français. NNT : 2021GRALY006 . tel-03371421

HAL Id: tel-03371421

<https://theses.hal.science/tel-03371421v1>

Submitted on 8 Oct 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE GRENOBLE ALPES

Spécialité : **Nanophysique**

Arrêté ministériel : 25 mai 2016

Présentée par

Jérémie CHRETIEN

Thèse co-dirigée par **Nicolas PAUC**
et par **Vincent CALVO**

préparée au sein du **Laboratoire CEA-
IRIG/DEPHY/Pheliqs/SiNaPS**
dans l'**École Doctorale de Physique**

Redistribution des états de contrainte dans l'alliage germanium-étain pour des applications laser CMOS-compatibles à température ambiante et accordables en longueur d'onde

Thèse soutenue publiquement le **23 février 2021**,
devant le jury composé de :

Monsieur Régis André

Directeur de recherche CNRS (Institut Néel), Président du Jury

Monsieur Éric Tournié

Professeur, Université de Montpellier (IES), Rapporteur

Monsieur Xavier Letartre

Directeur de recherche CNRS (INL), Rapporteur

Monsieur Moustafa El Kurdi

Maître de conférences, Université Paris-Sud (C2N), Examineur

Monsieur Alain Morand

Maître de conférences, Université Grenoble-Alpes (IMEP-LaHC),
Examineur

Monsieur Henri Mariette

Directeur de recherche CNRS (Institut Néel), Invité



Table des matières

0.1	De la micro-électronique à la photonique	3
0.2	La déformation du germanium	5
0.2.1	Déformation induite par couche tenseur	6
0.2.2	Application d'une déformation par redistribution de contraintes résiduelles	8
0.3	Démonstration de l'effet laser dans le Germanium-Étain	9
0.3.1	Cavité Fabry-Pérot : Premier laser contraint	10
0.3.2	Disques : structure laser avec une relaxation de la contrainte résiduelle compressive	11
0.3.3	Couches de GeSn avec une teneur d'étain plus élevée	12
0.4	Problématique de la thèse	13
1	Détermination de la déformation et modélisation des structures de bandes	15
1.1	Symétrie du cristal et axes de déformation	16
1.1.1	Réseau direct et paramètre de maille	16
1.1.2	Définitions générales des tenseurs de déformations et de contraintes et simplifications pour GeSn	17
1.1.3	Plaques à disposition	20
1.1.4	Estimation de la déformation par modélisation à éléments finis	30
1.2	Dépendance des bords de bandes électroniques avec la concentration en étain et la déformation selon le modèle des potentiels de déformation	35
1.2.1	Évolution des bords de bandes en fonction de la concentration de l'étain	35
1.2.2	Modèle des potentiels de déformation	36
1.2.3	Déformations biaxiale (001) - uniaxiale [100]	37
1.3	Structure de bandes et modélisation de la courbe de gain optique par la méthode de potentiels empiriques	38
1.3.1	Présentation du modèle [57]	38
1.3.2	Interaction avec un photon	41

TABLE DES MATIÈRES

1.3.3	En pratique	43
1.4	Conclusion	47
2	Etude de l'effet laser sous l'application d'une contrainte bi-axiale selon le plan (001)	49
2.1	Déformation bi-axiale via une couche tenseur de SiN	50
2.1.1	Technique d'encapsulation des micro-disques	50
2.1.2	Discussion sur l'état de contrainte de la couche de nitrure	51
2.1.3	Estimation de la déformation des micro-disques contraints	53
2.1.4	Photoluminescence et effet laser observé	59
2.1.5	Discussion sur le désaccord entre effet laser observé et le gain théorique	73
2.2	Membranes de GeSn suspendues déformées en tension	78
2.2.1	Position du problème	78
2.2.2	Cavité optique	79
2.2.3	Réalisation des structures	80
2.2.4	Membranes avec 12,7 % d'étain	83
2.2.5	Membranes avec 15,7 % d'étain	89
2.3	Conclusion	97
3	Déformation uni-axiale selon l'axe [100] induite par des structures micro-ponts	99
3.1	Micro-ponts relaxés témoins	100
3.2	Fabrication de ponts suspendus	103
3.3	Couche de 13 % : Loi empirique Raman uni-axiale et lien avec la température de l'effet laser	103
3.3.1	Simulation de la déformation via COMSOL	103
3.3.2	Correspondance décalage Raman et déformation absolue.	107
3.3.3	Évolution de la Température limite de l'effet laser sous l'action de la contrainte uni-axiale [100]	115
3.4	Couche de 16 % : Effet laser à 273 K	124
3.4.1	Photoluminescence	124
3.4.2	Effet Laser	125
3.5	Conclusion	136
	Conclusion et Perspectives	137
	Contributions scientifiques	141

TABLE DES MATIÈRES

A	Grandeurs relatives aux matériaux	143
A.1	Coefficients de dilatation du silicium et germanium	143
A.2	Constantes Matériaux	145
B	Tenseurs Raman	147
B.1	Table de Caractères et fonctions de base [86]	147
B.2	Détermination des modes normaux Raman actifs	149
B.3	Influence de la déformation et de la concentration sur le tenseur Raman	150
B.4	Rétro-diffusion selon (011)	151
C	Température et mesures raman	153
D	Paramètres de simulations	155
E	Détails des courbes de gain	159
F	Spectres complémentaires pour l'étude des croix de 15,7 %	161
G	Modes de cavités Fabry-Pérot	163

Remerciements

Un soir de Décembre, je franchissais pour la première fois les portes du laboratoire CEA-SiNaPs pour un entretien de stage de 6 mois avec Nicolas. Sans le savoir à l'époque, je venais de signer pour quatre ans durant lequel j'ai eu l'occasion de discuter, rencontrer et travailler avec des doctorants, postdocs et chercheurs que je tiens à remercier ici.

En premier lieu, je tiens à remercier Nicolas et Vincent, qui m'ont fait confiance, m'ont encadré en stage puis en thèse avec bienveillance et patience, tout en me délivrant leur savoir, de la fabrication en salle blanche à la spectroscopie optique. Au-delà des connaissances scientifiques, vous m'avez montré des qualités humaines indispensables pour un chercheur. J'admire ta vivacité et ta persévérance, Nicolas et il en faut avec tous les ratés qu'on a pu faire en salle. Ton approche méthodique et rigoureuse, Vincent, m'a permis aussi bien d'éviter les farces de manip comme la vapeur d'eau sur le détecteur que l'écriture du mon premier abstract. Tout deux vous avez su porter ce merveilleux projet à bout de bras, avec passion malgré les difficultés. A l'avenir je m'efforcerais de ne plus faire du "travail de thésard" et j'espère avoir la chance de travailler de nouveau, un jour avec vous.

Je remercie Régis André pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ma thèse. J'adresse également mes remerciements à Messieurs Xavier Letartre, Éric Tournié pour avoir acceptés d'être rapporteurs de cette thèse et Messieurs Moustafa El-Kurdi, Alain Morand et Henri Mariette pour avoir examiné ce manuscrit. Je tiens en particulier à remercier ces deux derniers pour l'intérêt et le suivi dont ils ont fait preuve au cours des différents comités de suivi de thèse.

Je remercie les membres du projet GeSn coté LETI, en commençant par la croissance : un grand merci à vous Jean-Michel, Joris, Rami et Marvin pour votre travail sur la croissance du couches minces de GeSn de bonne qualité et pour vos études très intéressantes présentées durant les "Monthly", rythmés par quelques envolées lyriques sur le SiGe. Merci également à Alexei et Vincent R., pour avoir porté le projet au DOPT, et notamment le second pour ces simulations optiques sur les structures. Je pense également à mes deux co-bureaux successifs, Mathieu et Lara avec qui, nous avons pu s'entraider, grâce à de longues discussions sur le GeSn, les manip optiques, les pauses "goûtés" au distributeur sous fond de musiques trépidantes jusqu'à 20h.

Je remercie les membres (Guillaume, Thomas, Christophe, Stéphane, Jean-Luc) de la salle blanche de la PTA ainsi que ceux de la plateforme PFNC (Denis, Nicolas M., Nicolas B., Patrice) pour leur disponibilité, les nombreuses discussions, la mise à disposition d'équipements de caractérisation ou encore les caractérisations morphologiques qu'ils ont effectuées sur les couches de GeSn. Je remercie également Samuel pour ses mesures de micro-diffractions Laue.

Mes remerciements vont également à l'ensemble des doctorants et permanents de mon laboratoire d'accueil. Tout d'abord, merci à Pascal G. pour toutes ses anecdotes sur le CEA d'antan, merci aussi à Jean-Baptiste J. pour venir me chercher à chaque fois à 11h18 pour aller manger, et pour les conseils sur les meilleurs endroits autour de Grenoble pour aller courir. Merci aussi à Éric D. qui non seulement a évité l'utilisation excessive du scotch double-face avec des pièces mécaniques sur-mesures de qualité, mais aussi a pris le temps de me montrer comment fonctionner

Remerciements

certaines équipements, toujours avec bonne humeur. Merci à Emmanuel Hadji et à Emmanuel Picard pour leurs discussions. Je remercie les non-permanents qui m'ont précédé Manon, Dhruv, Anthony, Michael, Lise, Alexis, Prisca avec qui j'ai passé de très bonnes soirées, et pour certains de bons moments à la piscine. Je tiens tout particulièrement à remercier Quang Thai-Minh, dont j'admire la quantité et la qualité de travail qu'il a fourni pendant sa thèse, tout en prenant le temps de me faire découvrir Python, de m'expliquer avec patience ses codes sur Fortran pour le calcul des structures de bandes et de gain et avec qui j'ai eu la chance de partager le banc de spectroscopie, ainsi que les mails de rappels pour donner un titre aux présentations de "Monthly". Merci enfin aux prédécesseurs sur le sujet du GeSn/Ge déformé, Alban Gassenq, Kevin Guillois qui par l'intermédiaire de leur code, ou par leurs papiers m'ont appris beaucoup sur la thématique.

J'exprime toute ma reconnaissance à Hans Sigg et Francesco Armand Pilon pour nous avoir permis de caractériser nos structures sur votre banc de spectroscopie et de collaborer de manière très sincère et fructueuse. Je remercie également la collaboration que j'ai pu avoir avec le C2N dans le cadre de l'ANR Elégante, en particulier Moustafa El-Kurdi. Malgré quelques points de vue divergents sur nos interprétations physiques, j'ai beaucoup appris sur la thématique grâce aux échanges que j'ai eu avec toi et tes échantillons déformés.

Enfin je tiens à remercier grandement mes amis qui m'ont supporté durant toutes ces années, Thomas, Ismaël, Marion, Claire, Oriane, Clémence, Paul, Manon, Lara, Simon, Damien, Antoine, ainsi que ma famille : vous avez tous contribué à rendre ces quatre années inoubliables, grâce à des sorties ski et raquettes en hiver et des randonnées en été dans les massifs environnements, de la Grèce à la Suisse, de Paris à Moscou et de la ruta de los volcanes au mont Bromo. Merci à vous.

À mon grand-père,
Qui m'a appris le sens du mot travail.

Introduction

0.1 De la micro-électronique à la photonique



FIGURE 1 – Premier transistor en germanium à pointes de contact.

Le germanium, nommé en l'honneur de l'Allemagne, fut isolé pour la première fois en 1886 par le chimiste allemand Clemens Winkler. Il fut utilisé comme matériau de base pour le tout premier transistor dit à pointes de contact [1], réalisé par Bardeen et Brattain¹ en 1947 (figure 1). Il a été très vite délaissé au profit du silicium, qui possède un oxyde thermique naturel plus stable [3] permettant la réalisation de transistors Métal-Oxyde-Semiconducteur (MOS). Ce type de transistor MOS plus durable dans le temps et également plus simple à réaliser, a permis au fil des années, une réduction drastique de la taille d'un transistor et donc d'augmenter la densité de transistors sur puce suivant une figure de mérite empirique appelée loi de Moore dans laquelle le nombre de transistors par processeur est multiplié par deux tous les 18 mois (figure 2).

Toutefois, cette course à la miniaturisation atteint ses limites. Il est de plus en plus difficile

1. Shockley a quant-à-lui réalisé le premier transistor bipolaire en germanium. [2]

Introduction

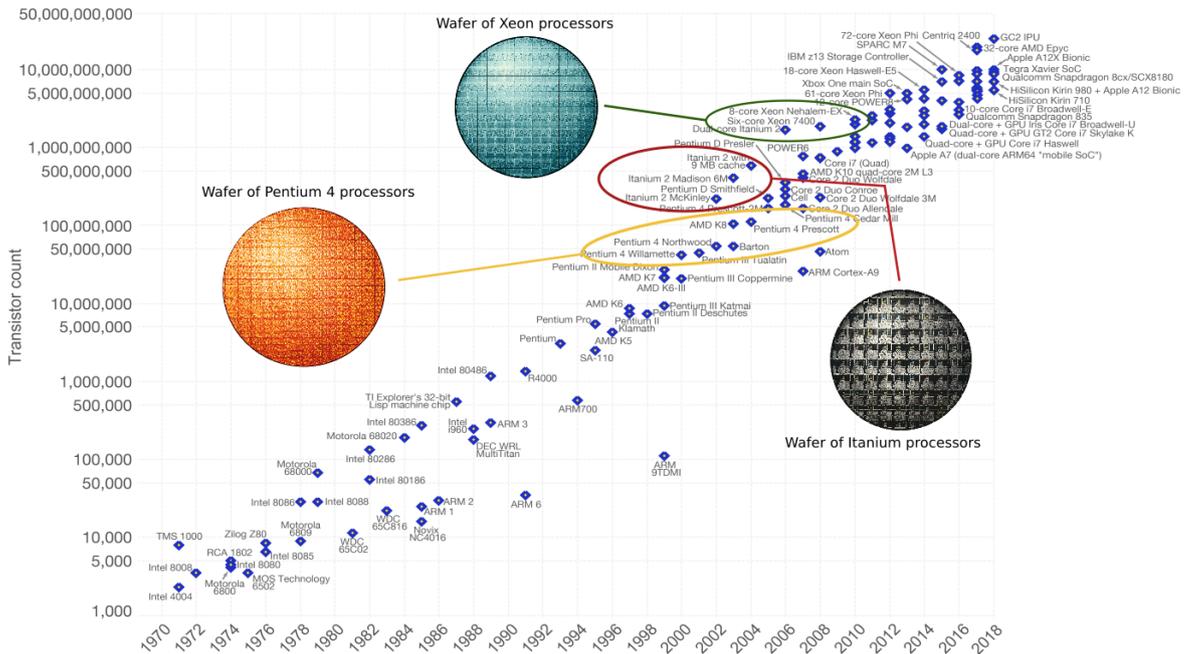


FIGURE 2 – Loi de Moore de 1970 à 2018 [4] avec la représentation de wafers intégrant les processeurs Pentium 4, Itanium et Xeon. [5]

pour les industriels de suivre cette loi prédictive à cause notamment de l'oxyde de grille, devenu trop fin et sujet à effet tunnel, et à des problèmes de dissipation thermique. A l'heure actuelle, seul un cercle très restreint de fondeurs poursuit la course à la miniaturisation, avec une taille de grille mise en production descendant à 7 nm, car la plupart des acteurs du domaine ne peuvent assumer les investissements colossaux que nécessite la course à la miniaturisation.

Plusieurs alternatives sont donc envisagées pour continuer à accroître les performances sur puce en terme de débits d'informations, comme le passage à une intégration 3D de transistors, l'utilisation d'autres matériaux tel que le graphène, ou encore la photonique sur silicium. Ces approches, que certains regroupent sous le terme de More than Moore, peuvent sembler séduisantes à bien des égards. En effet, sentant la fin de la loi de Moore arriver, de nombreux acteurs du domaine ont délaissé la course onéreuse à la miniaturisation qu'ils ne pouvaient de toute façon pas supporter, au profit d'autres approches pour le traitement de l'information. Ce "More than Moore" renouvelle donc les perspectives du traitement de l'information pour la plupart des intervenants en déplaçant le vieux paradigme de la micro-électronique centré sur la puissance de calcul vers une multitude d'autres approches où la contrainte "technologique" est plus relaxée.

La photonique sur silicium est une des voies les plus avancées. Un ensemble de dispositifs passifs présentés figure 3 (modulateurs, taper, multiplexeurs, démultiplexeurs, photodétecteurs) n'utilisant que des matériaux CMOS compatibles a été développé à des longueurs d'onde des télécommunications (1,3 μm et 1,55 μm) pour être directement intégré sur puce silicium. Toutes ces fonctions passives sont déjà regroupées sur puce et proposées par des entreprises telles que Aca-cia communicationsTM ou LuxeraTM. Le laser reste cependant la brique manquante. Et pour

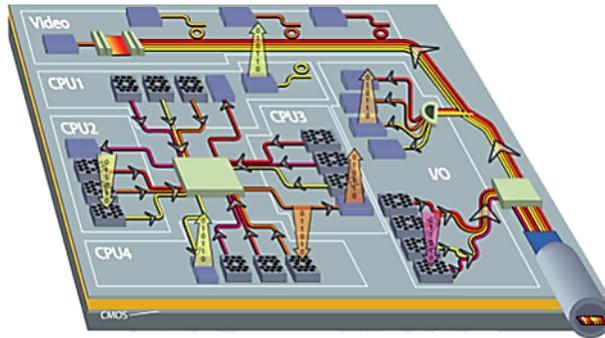


FIGURE 3 – Ensemble de dispositifs optiques pour la télécommunication directement intégrés sur silicium.

cause, le silicium, par sa structure de bande énergétique à transition fondamentale indirecte², est un très mauvais émetteur de lumière. De l'autre côté, les matériaux III-V principalement utilisés pour la fabrication de diodes laser en télécommunications, sont interdits sur les plateformes silicium de micro-électronique car ils sont considérés comme de potentielles sources de contaminations (centres de recombinaison rapides, dopants potentiels du silicium).

Une alternative à ce problème, la plus aboutie et prometteuse à ce jour, est le collage des matériaux III-V sur silicium. Elle reste néanmoins coûteuse.

Une autre piste est d'utiliser le germanium [6]. Ce matériau possède lui aussi un gap indirect à l'état relaxé. Mais, à la différence du silicium, le germanium possède une transition énergétique directe en Γ juste au dessus de son gap indirect, à environ 140 meV.

En le déformant en tension, il est alors possible d'inverser ces deux transitions et d'obtenir un gap direct, nécessaire pour l'effet laser (figure 4). Dans cette optique, on définit la directivité, notée $\Delta E = E_L - E_\Gamma$ comme l'écart énergétique entre les vallées Γ et L , traduisant le caractère direct du matériau.

0.2 La déformation du germanium

Plusieurs méthodes sont possibles pour déformer le germanium. Certaines techniques emploient des dispositifs externes tels qu'un flux de pression exercé contre une membrane de Ge ou encore l'application de pointes sur le matériau (figure 5 (c)) mais elles présentent le désavantage d'être difficilement intégrables sur puce. Les deux procédés de déformation du germanium introduits ici, qui seront ensuite employés sur un alliage germanium étain (GeSn), ne demandent pas de dispositifs de contraintes macroscopiques et sont compatibles avec le savoir-faire des plateformes silicium. L'un impose une déformation par une couche tenseur au contact du matériau, l'autre redistribue la contrainte résiduelle du matériau pour le mettre en tension localement.

2. Pour plus de simplicité, on utilisera par la suite l'anglicisme "gap énergétique" couramment utilisé dans la physique du solide.

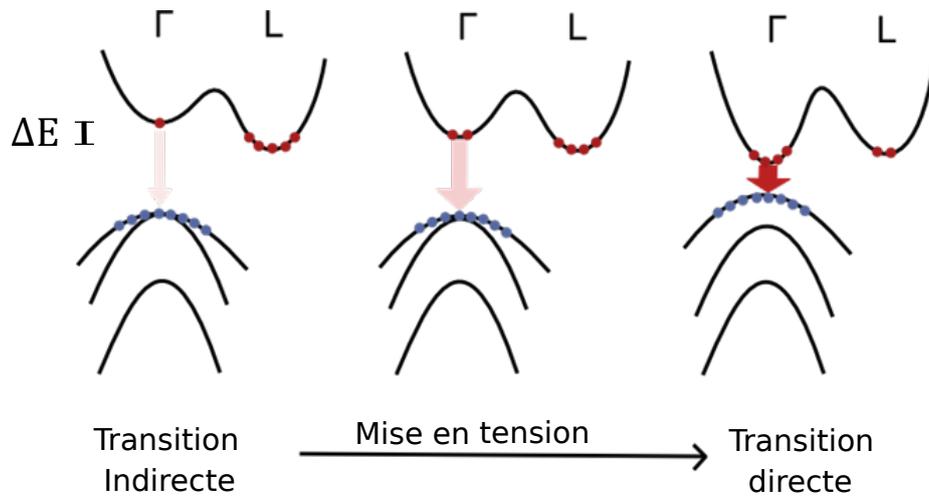


FIGURE 4 – Schéma représentant l'évolution des structures de bandes en Γ et L du germanium lors d'une mise en tension.

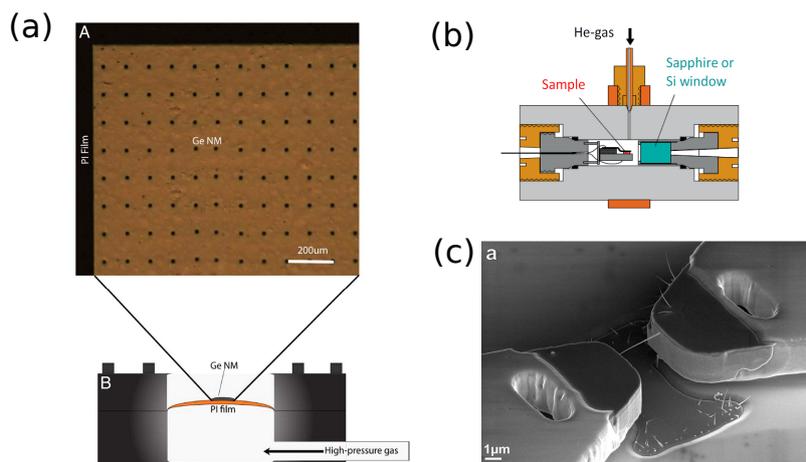


FIGURE 5 – Déformations induites par des systèmes externes imposants des pressions proposées (a) par [7], (b) par [8] ou déformant avec un module 3 points. [9]

0.2.1 Déformation induite par couche tenseur

Lors d'un dépôt de films minces, il est possible d'ajuster les paramètres de pression, température et flux de gaz de façon à obtenir une couche plus ou moins contrainte sur le substrat receveur, généralement en silicium. La contrainte est alors transférée du film à la couche du dessous [10], [13], [14]. Le matériau tenseur principalement utilisé pour contraindre le germanium est le nitrure de silicium Si_3N_4 . Après dépôt, la contrainte en compression du film peut

Introduction

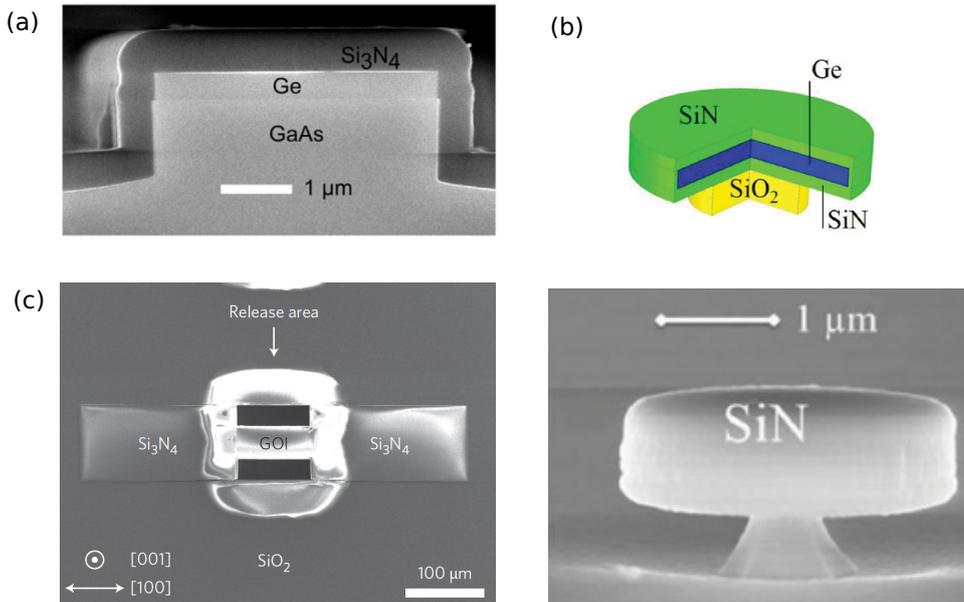


FIGURE 6 – Utilisation d'une couche de tenseur en Si_3N_4 utilisé par Ghrib et al. pour déformer (a) uni-axialement un guide [10] et (b) biaxialement un microdisque. [11] (c) Zone de germanium déformée par plots de nitrure de silicium [12]

atteindre - 1,8 GPa. [11]. L'équilibre des forces mécaniques entre la couche supérieure et le substrat, bien plus épais, entraîne l'apparition d'un gradient du champ de déformation dans la profondeur du substrat, s'annulant et s'inversant vers son milieu. Cette infime déformation, peu exploitable en vue de la modification des états électroniques du cristal sous jacent, trouve en revanche une manifestation spectaculaire à l'échelle macroscopique avec la courbure prise par le wafer après dépôt, pouvant être significative, et faisant prendre à ce dernier des allures de verre de montre. Cette mesure du rayon de courbure est par ailleurs utilisée pour calculer, à partir d'autres constantes physiques du matériau, la contrainte à l'oeuvre dans la couche superficielle (voir l'approche développée par Stoney). En utilisant cette couche tenseur, il est alors possible de concentrer la contrainte et de déformer en tension par transfert de contrainte de manière uni-axiale le germanium en utilisant des dispositifs en forme de guide (figure 6 a) atteignant 1 % de déformation. Les géométries utilisées doivent être considérées avec soin car c'est grâce à la microstructuration du matériau sous-jacent au tenseur que l'on pourra accumuler une déformation significative dans celui-ci, déformation qui était "étalée dans toute la profondeur" du substrat avant structuration. Une autre méthode proposée par Jain et al. [12], présentée figure 6 (c) est de déposer des plots de nitrure de part et d'autre d'un pont central carré de germanium, déformé sous l'action de ces bras tenseurs. Enfin, il est possible de déposer du nitrure de silicium sur des micro-disques de germanium comme le montre la figure 6, ce qui permet d'atteindre 1,5% de déformation bi-axiale lorsque le micro-disque est complètement encapsulé. Cette dernière méthode a l'avantage de synthétiser une cavité contrainte avec des modes de galerie ayant un grand facteur de qualité (Q valant $10^3 - 10^5$ [15]).

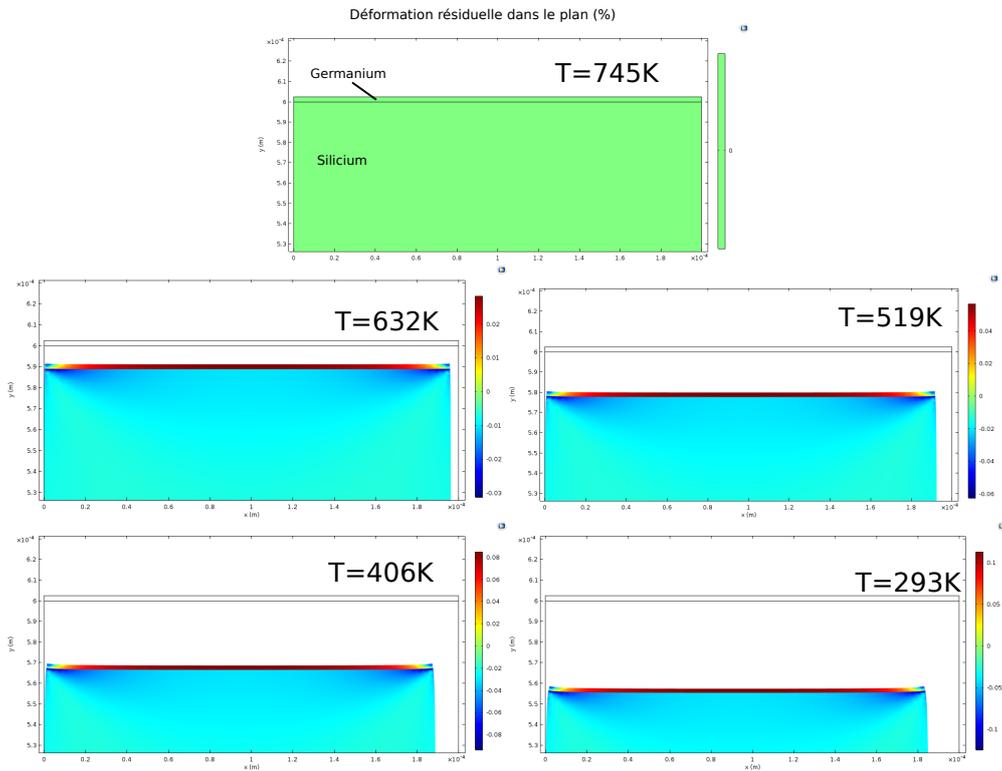


FIGURE 7 – Évolution de la déformation résiduelle lors d'un refroidissement jusqu'à température ambiante d'une couche de germanium de $2,5 \mu\text{m}$, déposée à 745 K sur un substrat de silicium. A cette température, la déformation est nulle. Le refroidissement va engendrer une contrainte thermique. Ce modèle à coefficient de dilatation constant prévoit une déformation résiduelle à 293 K de 0,105 %, moins que ce qui est obtenu expérimentalement. Comme on le verra par la suite, ce modèle est donc trop grossier et demande à être affiné.

0.2.2 Application d'une déformation par redistribution de contraintes résiduelles

L'autre voie pour déformer le germanium en tension est la redistribution de contraintes résiduelles de la couche de semiconducteur. Le germanium peut être épitaxié par dépôt chimique sous phase vapeur sur un substrat de silicium à une température de dépôt entre 700°C et 800°C . La différence de coefficient de dilatation thermique avec le silicium provoque une contrainte thermique en tension dans le germanium lorsque le matériau refroidit (figure 7). A température ambiante, cette déformation en tension résiduelle est de l'ordre de 0,16 % et est de nature biaxiale. A l'origine, cette déformation résiduelle en tension fut utilisée pour le germanium, dans des applications passives comme des photo-détecteurs dans la bande L des télécoms [21].

En utilisant des structures dites de micro-ponts et de croix présentées figure 8, il est possible de redistribuer cette contrainte résiduelle et de déformer plus amplement encore, respectivement

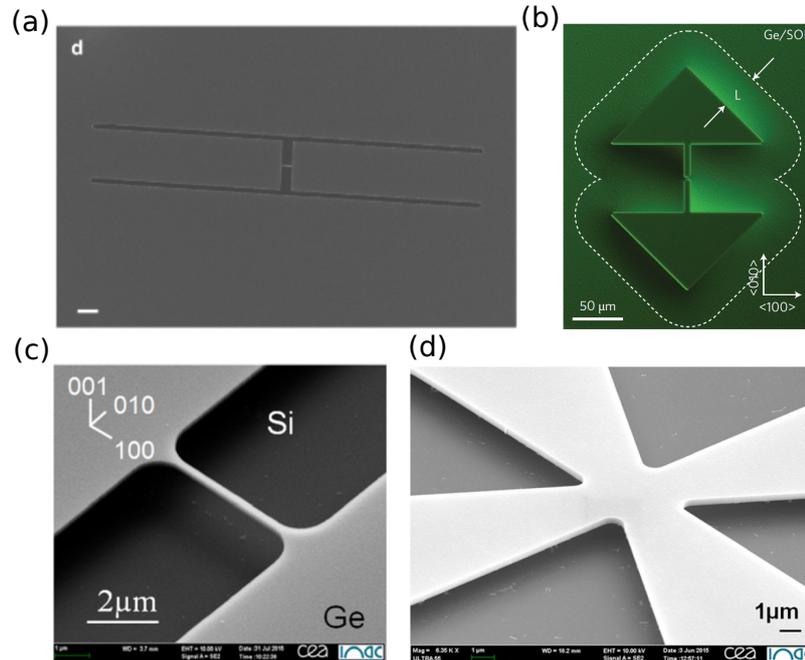


FIGURE 8 – Structures de type micro-ponts en Ge permettant de déformer uni-axialement la constriction exposés par (a) Nam et al. [16], (b) Süess et al. [17] et (c) au sein de notre laboratoire [18], [19]. (d) Membranes suspendues également fabriqués au sein de mon laboratoire pour mettre en tension le germanium de façon bi-axiale [20].

de manière uni-axiale et bi-axiale les constriction. Ces procédés de déformations ont été initialement proposés par Nam et al. [16] et Süess et al. [17]. Ces techniques de mise en déformation ont également été développées au sein de mon laboratoire SiNaPS (CEA-IRIG) avec la fabrication de membranes suspendues de Ge en forme de croix bi-axiales permettant d'atteindre une déformation record de 1,9 % à température ambiante et en forme de ponts pour déformer uni-axialement jusqu'à 4,9 %. La déformation de nanofils de Ge a également été réalisée au sein de notre laboratoire [22]. L'effet laser a finalement été démontré sans équivoque comme l'indique la figure 9 par Armand-Pilon et al. [23] sur des structures de type micro-ponts intégrant des miroirs.

0.3 Démonstration de l'effet laser dans le Germanium-Étain

En parallèle, une autre approche pour inverser les transitions Γ et L afin d'obtenir un gap direct est d'incorporer de l'étain dans le germanium.

En 1983, C.H.L. Goodman énonça la possibilité d'une solution solide à base de germanium et d'étain (GeSn) permettant d'obtenir un gap direct en Γ pour une concentration de 50 % de Sn. Cette prédiction a été ensuite affinée par des calculs de structure de bandes montrant une

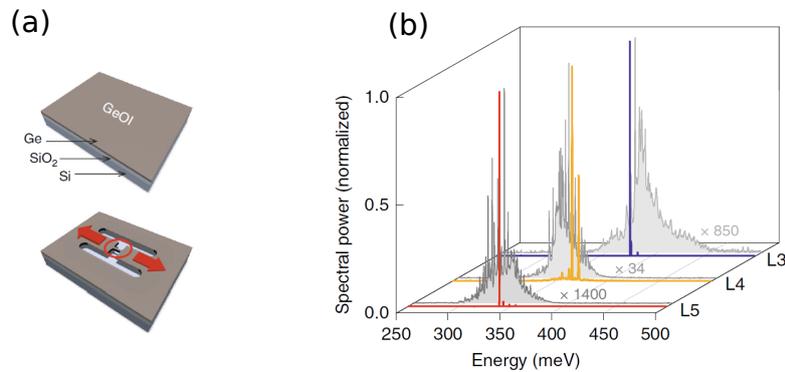


FIGURE 9 – (a) Pont fabriqué sur un substrat GeOI et (b) spectres laser associés [23]. Le régime d’amplification d’émission spontanée (ASE) est également représenté en gris par comparaison, confirmant sans ambiguïté l’effet laser obtenu contrairement aux précédentes revendications [13], [24], [25]

inversion de transitions pour une concentration d’étain de seulement 6%. Et pourtant même pour ces basses concentrations, la croissance de GeSn est restée un défi technologique jusqu’en 2015.

0.3.1 Cavity Fabry-Pérot : Premier laser contraint

S. Wirths et al. [26] ont démontré en 2015, le premier effet laser sur des guides à base de matériau de la colonne IV, en GeSn, et dont la concentration en étain s’élève à environ 12,6%. Les miroirs de la cavité sont définis par les facettes de clivage de l’échantillon formant des cavités Fabry-Pérot avec un coefficient de réflexion d’environ $R \simeq 35\%$. Le seuil mesuré vaut 325 kW.cm^{-2} pour une température de 20 K. L’effet laser disparaît au delà d’une température de 90 K, à cause de l’apparition de recombinaisons des porteurs via le processus Shockley-Read-Hall (SRH) pour cette température. Ainsi, l’ajout d’étain a permis d’obtenir un gap direct pour un alliage GeSn ayant une concentration de Sn supérieure à 8% et d’observer l’effet laser.

Mais cette intégration d’étain dans une matrice de germanium a toutefois un prix : l’atome d’étain, plus gros que celui de germanium, vient déformer la maille de la matrice de Ge, conférant aux couches de GeSn un état de déformation en compression. Cette compression vient contrebalancer en partie l’effet de l’incorporation d’étain dans le germanium et tend à réduire la directivité du matériau. Pour une concentration d’étain de 12,6%, la déformation résiduelle en compression est comprise entre $-0,57\%$ et $-0,71\%$, provoquant d’après la figure 10 d une perte de directivité du matériau d’environ 50 meV par rapport à l’équivalent relaxé. L’étape suivante logique était donc de pouvoir relaxer le matériau par sous-gravure.

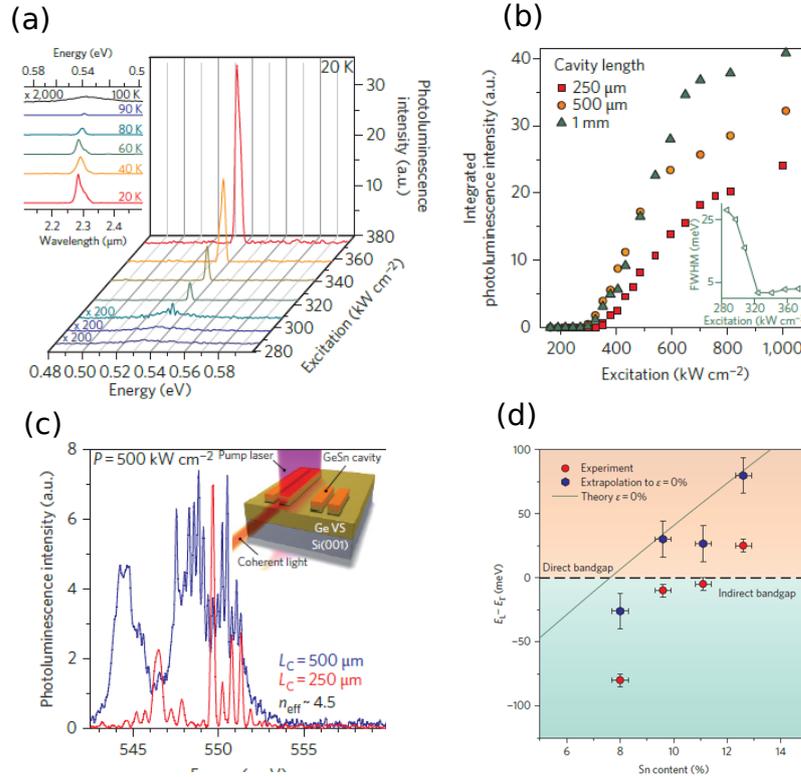


FIGURE 10 – (a) Spectres laser montrant le seuil de $325 \text{ kW} \cdot \text{cm}^{-2}$ à 20 K et la disparition de l'effet laser entre 80 et 90 K. (b) Évolution de l'intensité intégrée du signal en fonction de la puissance d'excitation incidente pour différentes longueurs de cavité. (c) Spectres haute résolution. (d) Évolution de la directivité du matériau en fonction du matériau et son extrapolation dans le cas où le matériau serait pleinement relaxé.

0.3.2 Disques : structure laser avec une relaxation de la contrainte résiduelle compressive

L'utilisation d'une cavité en forme de micro-disques avec des modes de galerie a un double intérêt. D'un point de vue électronique, la structure relaxée a une meilleure directivité comme indiqué dans la partie précédente. D'un point de vue optique, grâce à un meilleur contraste d'indice entre l'air et le GeSn, les modes se propageant au sein de la cavité sont mieux confinés verticalement. Stange et al. [27] ont ainsi montré l'effet laser sur ce type structure pour du GeSn avec une composition de 12,5 % d'étain. Le pic laser se trouve à $2,47 \mu\text{m}$ contre environ $2,3 \mu\text{m}$ pour une cavité ruban de même concentration [26]. Ce décalage en longueur d'onde est caractéristique d'un effet de relaxation du matériau lors de la sous-gravure du germanium. Il est également intéressant de noter que le seuil est plus bas, et la température de fonctionnement de l'effet laser est de 130 K, soit un gain de 40 K par rapport aux précédentes structures.

L'état de contrainte du matériau semble donc être un paramètre clef pour le seuil et la tem-

Introduction

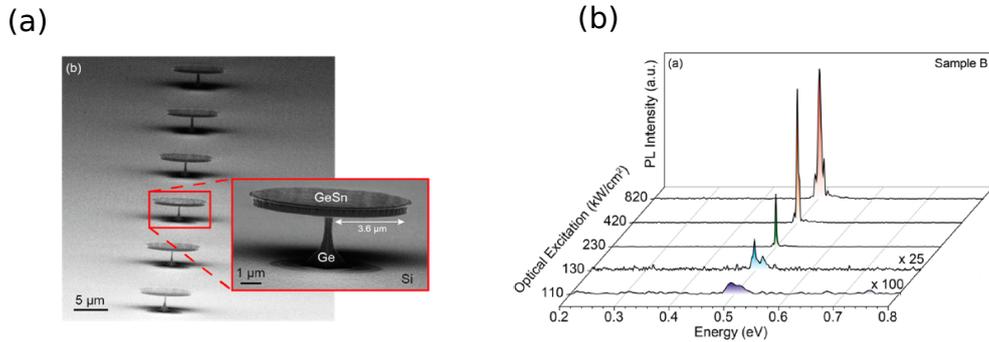


FIGURE 11 – (a) Image réalisée avec un microscope à balayage électronique (MEB) d'une rangée de micro-disques de 12,5 % de Sn. (b) Émission laser associée à 2,47 μm démarrante avec un seuil de 230 $\text{kW}\cdot\text{cm}^{-2}$ pour une température de 50K [27].

pérature de fonctionnement de l'effet laser. Un autre élément important est la composition de l'alliage en étain.

0.3.3 Couches de GeSn avec une teneur d'étain plus élevée

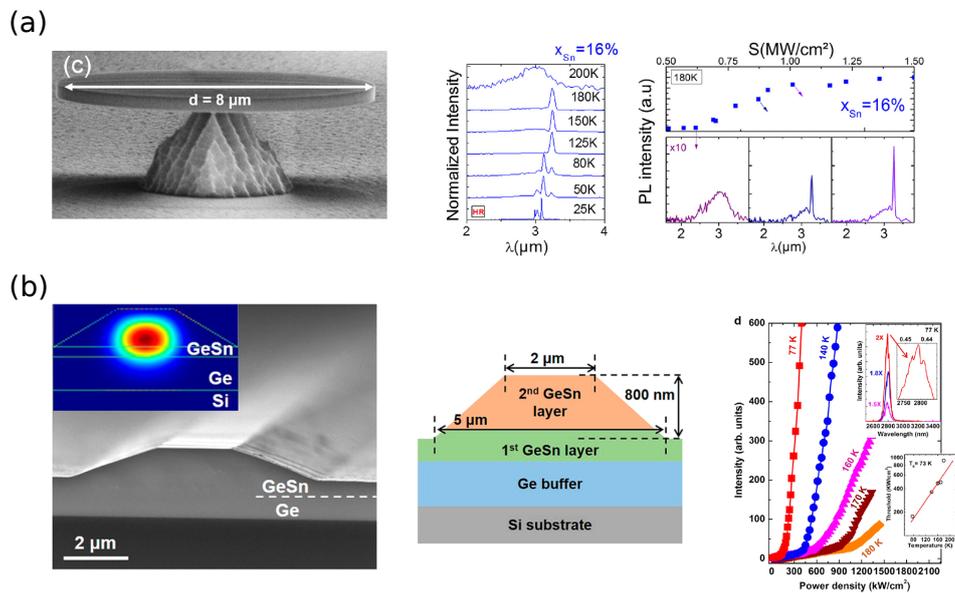


FIGURE 12 – (a) Image réalisée avec un microscope à balayage électronique d'un micro-disque de 8 μm de 16 % de Sn, spectres laser associés à différentes températures et étude en puissance à 180K [28]. (b) Structure guide fabriquée par l'université d'Arkansas et courbes de l'intensité émise en fonction de la puissance lumineuse incidente pour différentes températures [29].

L'effet laser a été également démontré au sein de notre laboratoire [28] sur des structures similaires en micro-disques mais avec une concentration d'étain plus importante de 16 %. Cet enrichissement en étain provoque une réduction du gap direct, et donc une émission laser à $3,1 \mu\text{m}$. Il a permis une augmentation de l'effet laser jusqu'à 180 K, grâce en partie à une meilleure directivité. En revanche, l'ajout d'étain tend à augmenter la densité de défauts. C'est pourquoi le seuil est plus élevé et vaut 337 kW.cm^{-2} à 25 K. L'université d'Arkansas a également confirmé l'effet laser avec une concentration en étain légèrement plus élevée de 17,5 % mais pour des structures ruban non relaxés [29]. Ainsi, la température de fonctionnement d'effet laser est similaire mais le seuil à cette température est plus élevé, 920 kW.cm^{-2} contre 625 kW.cm^{-2} pour les micro-disques relaxés. Parallèlement, plusieurs investigations sur des puits quantiques de GeSn avec des barrières de SiGeSn ont été menées dans le but de réduire des seuils à 40 kW.cm^{-2} [30]-[33].

0.4 Problématique de la thèse

Dans ce contexte, l'objectif de ma thèse est donc de mettre en tension les couches de germanium étain initialement en compression. L'intérêt de cette démarche est d'accroître la directivité du matériau et d'espérer une température de fonctionnement plus élevée et/ou un seuil d'effet laser plus bas.

Pour cela, je bénéficierai également de plaques de germanium étain à teneur en étain importante provenant du CEA-LETI. Je m'appuierai sur le savoir-faire en salle blanche et les techniques utilisées historiquement sur Ge au sein du laboratoire pour réaliser des structures de GeSn suspendues et contraintes en tension. De plus, dans le cadre d'une collaboration avec le C2N, je caractériserai des échantillons de micro-disques en GeSn contraints en tension par des couches externes de tenseurs en nitrure de silicium.

J'évaluerai ensuite cette déformation appliquée grâce à la spectroscopie Raman, une méthode de caractérisation optique sensible à la concentration en étain et à l'état de déformation de l'alliage.

La photoluminescence me permettra enfin d'observer les modifications de la structure de bande électronique du GeSn induites par cette déformation en tension. Un pompage optique impulsionnel des cavités laser me permettra d'en déduire également l'évolution des caractéristiques que sont le seuil et la température de fonctionnement laser en fonction de la déformation.

Introduction

Détermination de la déformation et modélisation des structures de bandes

Sommaire

1.1	Symétrie du cristal et axes de déformation	16
1.2	Dépendance des bords de bandes électroniques avec la concentration en étain et la déformation selon le modèle des potentiels de déformation	35
1.3	Structure de bandes et modélisation de la courbe de gain optique par la méthode de potentiels empiriques	38
1.4	Conclusion	47

Ce chapitre définit l'ensemble des outils utilisés et nécessaires à la mise en déformation du GeSn et ses conséquences sur les états électroniques. La connaissance de l'état de déformation initial de chaque couche est déterminante car c'est cet état de déformation résiduel qui va être redistribué et amplifié localement.

Dans la première partie, les propriétés cristallographiques du GeSn seront rappelées ainsi qu'un bref rappel de la mécanique des milieux continus. La caractérisation morphologique des plaques de 200 mm de GeSn via diverses techniques (RSM, EDX et PED) fixeront les hypothèses de départ sur la concentration d'étain et l'état de déformation des couches pour une modélisation par éléments finis.

Dans la deuxième et troisième partie, seront présentés les liens entre déformation et bandes électroniques en introduisant le modèle de potentiels de déformation, et un modèle de potentiels empiriques, développé par Quang Minh-Thai, ancien doctorant au laboratoire SiNaPs.

1.1 Symétrie du cristal et axes de déformation

1.1.1 Réseau direct et paramètre de maille

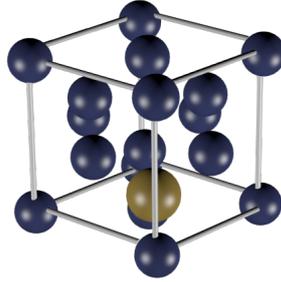


FIGURE 1.1 – Structure cristalline du GeSn 12.5 % : 1 atome d'étain (ocre) pour 7 atomes de germanium (bleu). Il s'agit d'un réseau cubique face centré avec un motif à 2 atomes (0,0,0) et (1/4, 1/4, 1/4).

La structure cristalline du germanium est une structure de type diamant. Les atomes de Sn viennent se substituer à ceux de Ge de manière aléatoire en site tétraédrique (figure 1.1). La liaison Ge-Sn est de l'ordre de 2,59 Å, d'après des mesures EXAFS ("Extended X-Ray Absorption Fine Structure") sur un échantillon de 11,3 % d'étain [34]. Pour cette concentration, des regroupements d'atomes d'étain ("cluster") ont été également observés (liaison Sn-Sn détectée).

Pour simplifier, on se placera par la suite dans l'approximation d'atomes virtuels. On considère des atomes fictifs (Ge ou Sn) dont le paramètre de maille est celui du GeSn relaxé a_{GeSn}^o . Ce dernier est déterminé à partir d'une loi de Vegard avec un coefficient de déviation quadratique β_{GeSn} [35] :

$$a_{GeSn}^o = x_{Sn}a_{Sn}^o + (1 - x_{Sn})a_{Ge}^o + \beta_{GeSn}x_{Sn}(1 - x_{Sn}) \quad (1.1)$$

Avec x_{Sn} la concentration en étain, a_{Sn}^o , a_{Ge}^o sont les paramètres de maille respectifs de l'étain pur et du germanium pur. Les paramètres utilisés ici sont rappelés en annexe (A.2).

On définit par convention les vecteurs de base formant la maille primitive¹ par :

$$\vec{r}_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} a_{GeSn}^o; \quad \vec{r}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} a_{GeSn}^o; \quad \vec{r}_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ 0 \end{pmatrix} a_{GeSn}^o$$

1. Elle ne comprend qu'un seul nœud du réseau à la différence de la maille conventionnelle présentée figure 1.1.

Les positions des 2 atomes fictifs constituant le motif d'un nœud s'écrivent respectivement :

$$\vec{r}_{at_1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} a_{GeSn}^o; \quad \vec{r}_{at_2} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix} a_{GeSn}^o$$

1.1.2 Définitions générales des tenseurs de déformations et de contraintes et simplifications pour GeSn

On appelle déformation ϵ , la variation relative de longueur entre les atomes de la maille cristalline suite à une action extérieure. Cette variation étant possible dans les trois directions de l'espace, la déformation est un tenseur symétrique d'ordre 3, définie à partir du champ de déplacement $u(x, y, z)$:

$$\epsilon = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{xz} & \epsilon_{yz} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}(\overrightarrow{grad}(u) + {}^t\overrightarrow{grad}(u))$$

Dans le cadre d'une déformation élastique de relativement faible intensité, il existe un lien linéaire entre la contrainte appliquée σ et la déformation ϵ , appelé loi de Hooke généralisée, qui s'écrit en notation de Voigt :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{xz} \\ 2\epsilon_{xy} \end{pmatrix}$$

Avec le tenseur C d'élasticité d'ordre 4. Dans ce document, les axes de contrainte seront toujours alignés selon les axes du cristal². Ce dernier se simplifie en utilisant les propriétés de symétrie pour une structure de type diamant :

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}$$

2. Dans le cas contraire, il faut effectuer une rotation du tenseur C selon $C_{ijkl} = a_{im}a_{jn}a_{kp}a_{lq}C_{mnpq}$ avec a_{ij} le cosinus directeur définissant l'angle entre le nouvel axe i et l'ancien j [36]

CHAPITRE 1. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

Ces constantes élastiques sont bien connues pour le silicium, germanium et l'étain (voir annexe A.2). Dans le cadre de l'alliage GeSn, nous utiliserons là encore une loi de Vegard :

$$C_{ij}^{GeSn} = x_{Sn} C_{ij}^{Sn} + (1 - x_{Sn}) C_{ij}^{Ge} \quad (1.2)$$

Une expérience possible pour valider cette approximation linéaire serait la mesure de coefficients élastiques par vibrométrie sur des systèmes de type cantilever pour différentes concentration d'étain.

Il est également possible d'obtenir la déformation à partir de la contrainte en utilisant la matrice de souplesse S , inverse de celle d'élasticité C dont les coefficients sont donnés par :

$$S_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2}$$

$$S_{12} = \frac{-C_{12}}{C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2}$$

$$S_{44} = \frac{1}{C_{44}}$$

Afin de mieux visualiser les axes de contrainte mis en jeu, j'ai représenté figure 1.2 les cas d'une

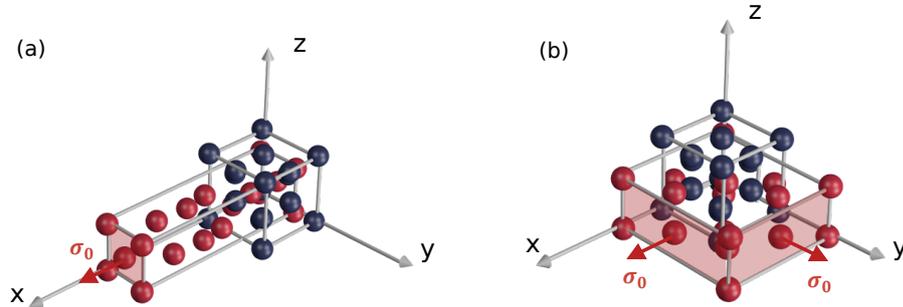


FIGURE 1.2 – Déformation de la structure après une contrainte uni-axiale appliquée selon l'axe [100] (a) et d'une contrainte bi-axiale appliquée selon le plan (001). La maille initialement cubique (en bleu) devient tétraogonale (en rouge) avec une déformation négative selon les axes perpendiculaires aux axes de contraintes appliquées. Ce phénomène est pris en compte par le coefficient de poisson $\nu = -\frac{S_{12}}{S_{11}}$.

contrainte uni-axiale selon l'axe [100] et d'une contrainte bi-axiale selon le plan (001).

Les tenseurs de contrainte s'expriment dans le repère $(O, \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$, dont les axes sont confondus avec celui du cristal, pour une contrainte uni-axiale [100] :

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

CHAPITRE 1. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

Et pour une contrainte bi-axiale selon le plan (001) :

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

A partir de ce tenseur de contrainte, il est possible d'exprimer intégralement le tenseur de déformation ϵ dans toutes les directions de l'espace en fonction d'une seule déformation longitudinale ϵ_0 définie selon l'axe de contrainte.

Cas d'une contrainte uni-axiale [100]

Pour une contrainte uni-axiale σ_0 exercée selon l'axe [100], le tenseur de déformation s'écrit :

$$\epsilon = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11}\sigma_0 \\ S_{12}\sigma_0 \\ S_{12}\sigma_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Or, la déformation longitudinale ϵ_0 étant confondue avec l'axe du cristal est valeur propre du tenseur :

$$\epsilon \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \epsilon_0 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Ainsi, la contrainte s'exprime en fonction de la déformation par :

$$\sigma_0 = \frac{\epsilon_0}{S_{11}}$$

Finalement, le tenseur dans le cas d'une contrainte uni-axiale selon [100] s'écrit comme :

$$\epsilon = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{S_{12}}{S_{11}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{S_{12}}{S_{11}} \end{pmatrix} \epsilon_0$$

Cas d'une contrainte bi-axiale (001)

Dans le cas d'une contrainte bi-axiale σ_0 selon l'axe (001), le tenseur de déformation s'exprime par :

$$\epsilon = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{12} & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_0 \\ \sigma_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (S_{11} + S_{12})\sigma_0 \\ (S_{11} + S_{12})\sigma_0 \\ 2S_{12}\sigma_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

En utilisant les vecteurs [100] et [010] propres de la déformation, on en déduit de façon redondante la relation :

$$\sigma_0 = \frac{\epsilon_0}{S_{11} + S_{12}}$$

En somme, le tenseur de déformation s'écrit :

$$\epsilon = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2\frac{S_{12}}{S_{11}+S_{12}} \end{pmatrix} \epsilon_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2\frac{C_{12}}{C_{11}} \end{pmatrix} \epsilon_0$$

Effet de la déformation sur les vecteurs de la maille directe

Sous l'action d'une contrainte, la maille se déforme. Il convient donc d'en prendre compte. Les nouveaux vecteurs de la maille déformée s'écrivent donc :

$$\vec{r}_i^{def} = (I_3 + \epsilon)\vec{r}_i$$

Comme pour le cas des déformations uni-axiale [100] et bi-axiale (001), il n'y a pas de composantes de cisaillement, donc aucun déplacement interne entre les atomes (motif) n'est possible. L'expression est identique à celles des vecteurs de base de la maille :

$$\vec{r}_{at_i}^{def} = (I_3 + \epsilon)\vec{r}_{at_i}$$

1.1.3 Plaques à disposition

Croissance hors équilibre

La croissance des couches de Ge et GeSn est réalisée par dépôt chimique en phase vapeur à pression réduite dans un bati 200 mm Epi Centura 5200 par Jean-Michel Hartmann et Rami Khazaka

CHAPITRE 1. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

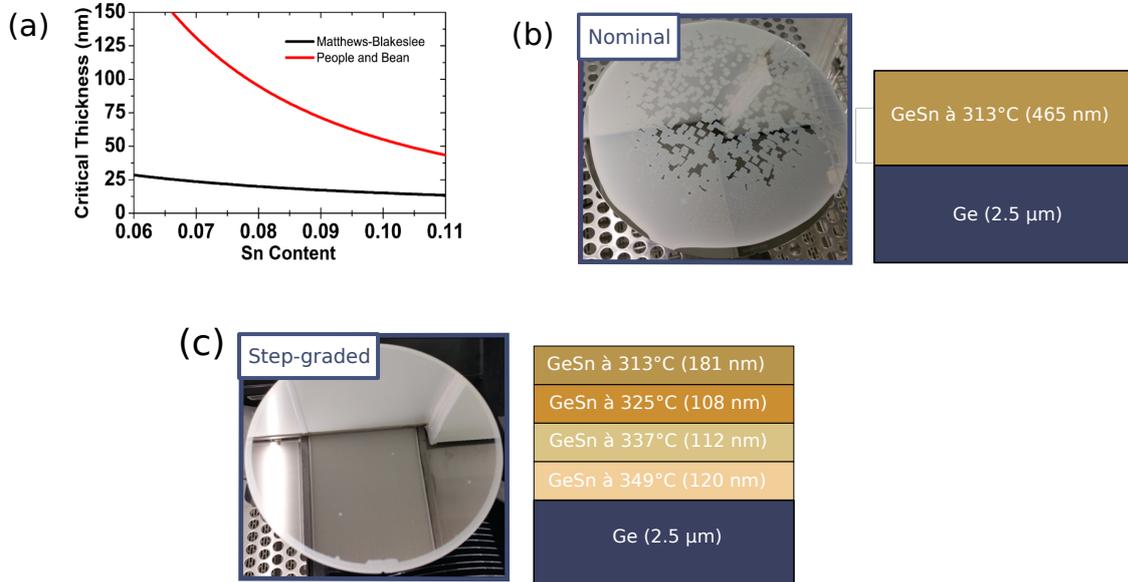


FIGURE 1.3 – (a) Évolution de l'épaisseur critique en fonction de la concentration d'étain. Image issue de [37]. Comparaison de l'état visuel de surface entre (b) une couche nominale plus ségrégée (aspect laiteux) et (c) une couche à gradient de concentration (aspect miroir) [35] et dont les concentrations cibles de surface en Sn sont similaires.

du CEA-LETI. Le substrat virtuel de Ge a été déposé à 750°C à partir de germane (GeH_4) [38]. La croissance de GeSn s'effectue ensuite à plus basse température et vitesse élevée de façon à privilégier l'aspect cinétique de réaction. Comme l'indique le diagramme de phase [39], à l'équilibre thermodynamique, il est impossible d'incorporer plus de 1,1 % d'étain et ce à une température de 390°C. Toutefois, à basse température et à vitesse de croissance élevée, il est possible de privilégier un état méta-stable, et d'augmenter la concentration en étain jusqu'à 17 %. Il faut alors utiliser des gaz à faible énergie de craquage tels que le digermane (Ge_2H_6) et du tétrachlorure d'étain ($SnCl_4$), très réactifs même à basse température.

Lorsque l'épaisseur de la couche de GeSn est inférieure à une épaisseur appelée épaisseur critique, la couche conserve le paramètre de maille du substrat tout en emmagasinant la déformation imposée par le désaccord de maille. Dans ce cas, on parle de couche pseudomorphique. L'épaisseur critique diminue avec la concentration d'étain comme indiqué figure 1.3.

Au-delà de cette épaisseur, la couche se relaxe partiellement en formant des dislocations, ségrégeant ou/et en augmentant sa rugosité de surface à cause d'une énergie élastique emmagasinée trop importante.

Afin d'obtenir une meilleure qualité cristalline pour les couches épaisses, qui plus est, à fortes concentrations, une approche dite par gradient de concentration de couche ("step-graded") est adoptée de manière à [35] :

1. concentrer les dislocations de désaccord de mailles dans les couches moins concentrées,

CHAPITRE 1. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

2. éviter la formation d'îlots d'étain dans la couche active,
3. éviter la ségrégation de l'étain en surface. Le champ de contrainte résiduelle en compression de la couche se trouve diminué et l'énergie élastique de surface emmagasinée est minimisée de façon à limiter au maximum la ségrégation notamment lorsque les couches sont trop épaisses.

Ainsi, pour réaliser cette croissance de gradient de concentration, le rapport des flux de masse des gaz précurseurs est maintenu constant avec une pression de chambre de 100 Torr. Seule la température varie de 350 °C à 313°C par étape discrète de façon à avoir une concentration de plus en plus riche en étain dans les différentes couches. Cette approche a été utilisée pour la réalisation de l'empilement 2 indiqué figure 1.4, empilement qui a permis d'atteindre des couches de 16 % moins ségrégées. (figure 1.3 (b) et (c)). Les deux autres empilements sont des couches épaisses homogènes de 480 nm. De plus, sur les empilements 1 et 2, le substrat de départ est un substrat de silicium sur isolant (SOI) réalisé par le procédé SmartCutTM. L'épaisseur de la silice enterrée (BOX) vaut ici 2 μm. Une oxydation thermique du silicium du SOI suivie d'une gravure par voie chimique a permis d'amincir l'épaisseur du silicium jusqu'à 40 nm. Cet oxyde thermique (BOX) sera utilisé comme couche sacrificielle afin de suspendre et de mettre en tension la couche active de GeSn, comme nous le verrons plus tard.

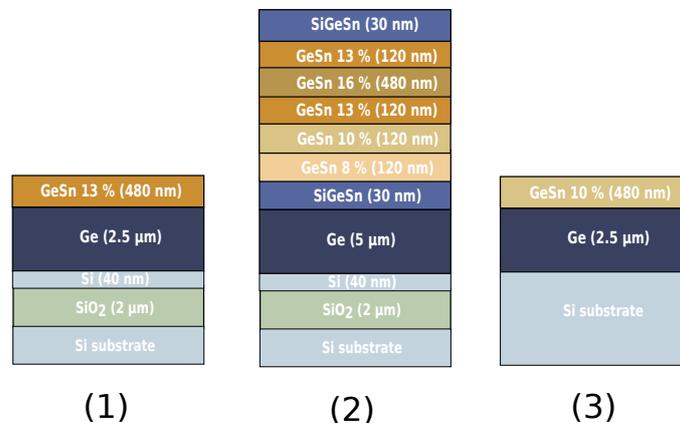


FIGURE 1.4 – Plaques de SOI avec une couche active de GeSn 13 % (1) et une couche active de GeSn 16 % (2). Empilement avec une concentration de 10 % d'étain comme couche active.(3)

Cartographie dans l'espace réciproque

Afin d'obtenir les valeurs de teneur en étain et d'état de déformation des différentes couches après croissance, on réalise une cartographie de l'espace réciproque (RSM - "Reciprocal Space

Map" en anglais) en diffraction des rayons X. La détermination de ces paramètres matériau est en effet extrêmement importante car de ces dernières dépendent les valeurs de gap dans les couches actives ainsi que l'amplitude des déformations résiduelles dans l'empilement gouvernant en partie les processus de mise en tension de nos futurs composants.

L'expérience consiste à envoyer un faisceau de rayons X sur le matériau et d'observer la figure

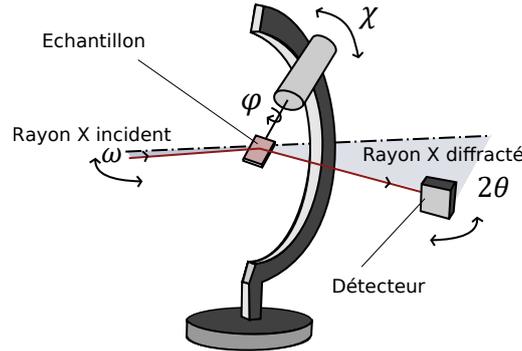


FIGURE 1.5 – Schéma d'un diffractomètre 4 cercles présentant le principe d'une cartographie de diffraction X.

de diffraction lors d'un balayage en angle $(\omega, 2\theta)$ pour une valeur d'angle χ fixée. Ce dernier permet de choisir des atomes appartenant à des plans atomiques précis et ré-émettant en phase les rayons X selon la loi de Bragg :

$$2d_{hkl} \sin(\theta_b) = n\lambda$$

avec λ la longueur d'onde du faisceau incident, d_{hkl} distance entre deux plans cristallins, n l'ordre et θ_b l'angle θ pour que la diffraction ait lieu.

Il est utile de définir les coordonnées de l'espace réciproque à partir des angles expérimentaux ω et θ par :

$$Q_x = \frac{1}{\lambda} (\cos(\omega) - \cos(2\theta - \omega))$$

$$Q_z = \frac{1}{\lambda} (\sin(\omega) - \sin(2\theta - \omega))$$

Ici, la raie utilisée pour le rayon incident correspond à la $K_{\alpha 1}$ du cuivre, d'où $\lambda_{K_{\alpha 1}}(Cu) = 1.540597\text{\AA}$. De plus, la structure des matériaux Si, Ge, GeSn est un système cubique donc la distance inter-plan vaut :

$$d_{hkl} = \frac{a_{maille}}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

On s'intéresse à la diffraction des plans (004) et (224)³. La première nous renseigne sur le paramètre de maille hors-plan a_{\perp} et la seconde sur le paramètre de maille dans le plan a_{\parallel} . Les figures de diffraction pour les différents empilements, réalisées par Patrice Gergaud au CEA-LETI, sont présentées figure 1.7. Pour la figure de diffraction (004), l'angle χ est nul et les angles ω et 2θ sont balayés respectivement sur les intervalles $[31^\circ ; 35,5^\circ]$ et $[61,9^\circ ; 70^\circ]$. Pour la figure de diffraction

3. Ces plans ont été choisis de façon à maximiser le facteur de structure et pour avoir plus de signal expérimentalement.

CHAPITRE 1. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

(224)⁴, l'angle χ vaut environ 35.26° . On balaye l'angle ω sur $[74,5^\circ ; 79,56^\circ]$ et l'angle 2θ sur $[79,9^\circ ; 89,4^\circ]$.

Pour exploiter ces cartographies, je procède de la manière suivante :

1. Le pic du substrat de silicium est pris comme référence pour compenser le décalage angulaire introduit par le porte échantillon. Pour les plaques (1) et (2) fabriquées à partir de substrats SOI, des structures similaires de référence ayant suivi exactement la même recette de croissance, ont été élaborées. Cela me permet de les exploiter, préférablement à leurs homologues sur oxyde qui posent des problèmes d'angle de torsion introduit lors du collage Smart CutTM provoquant une perte du pic de la référence du substrat de Si (voir figure 1.6). On pourrait toutefois penser à utiliser le pic associé au 40 nm de silicium comme pic de référence mais celui-ci est peu intense et n'est pas forcément totalement à l'état relaxé à la différence d'un substrat de silicium.

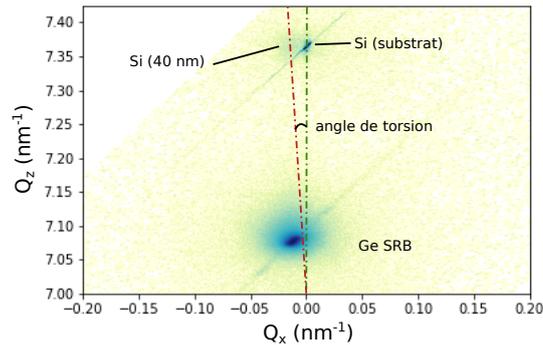


FIGURE 1.6 – Angle de torsion d'environ $0,092^\circ$ induit par le procédé de collage Smart CutTM. La tâche peu intense alignée verticalement avec le germanium correspond aux 40 nm du silicium sur SOI.

2. Une fois la figure de diffraction corrigée, on en déduit le paramètre de maille hors du plan à partir de la cartographie des plans (004) par la formule :

$$Q_z = \frac{1}{|d^\perp|} = \frac{4}{a^\perp}$$

Le paramètre de maille dans le plan se détermine en utilisant la cartographie des plans (224) par la relation :

$$Q_x = \frac{1}{|d^\parallel|} = 2 \frac{2}{\sqrt{2}a^\parallel}$$

3. En faisant l'hypothèse d'une loi de Vegard sur le coefficient de Poisson et supposant une déformation tétragonale de la maille du GeSn, il est possible de déterminer la concentration d'étain, le coefficient de Poisson et le paramètre de maille de la couche de GeSn relaxé

4. En réalité, pour des raisons pratiques, on regarde ici $(\bar{2}24)$

CHAPITRE I. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

à partir des paramètres de maille dans le plan a_{GeSn}^{\parallel} et normal au plan a_{GeSn}^{\perp} provenant des cartographies (004) et (224) en résolvant le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} a_{GeSn}^o = x_{Sn}a_{Sn}^o + (1 - x_{Sn})a_{Ge}^o + \beta_{GeSn}x_{Sn}(1 - x_{Sn}) \\ \nu_{GeSn} = x_{Sn}\nu_{Sn} + (1 - x_{Sn})\nu_{Ge} \\ a_{GeSn}^o = \frac{1 - \nu_{GeSn}}{1 + \nu_{GeSn}} a_{GeSn}^{\perp} + 2 \frac{\nu_{GeSn}}{1 + \nu_{GeSn}} a_{GeSn}^{\parallel} \end{cases}$$

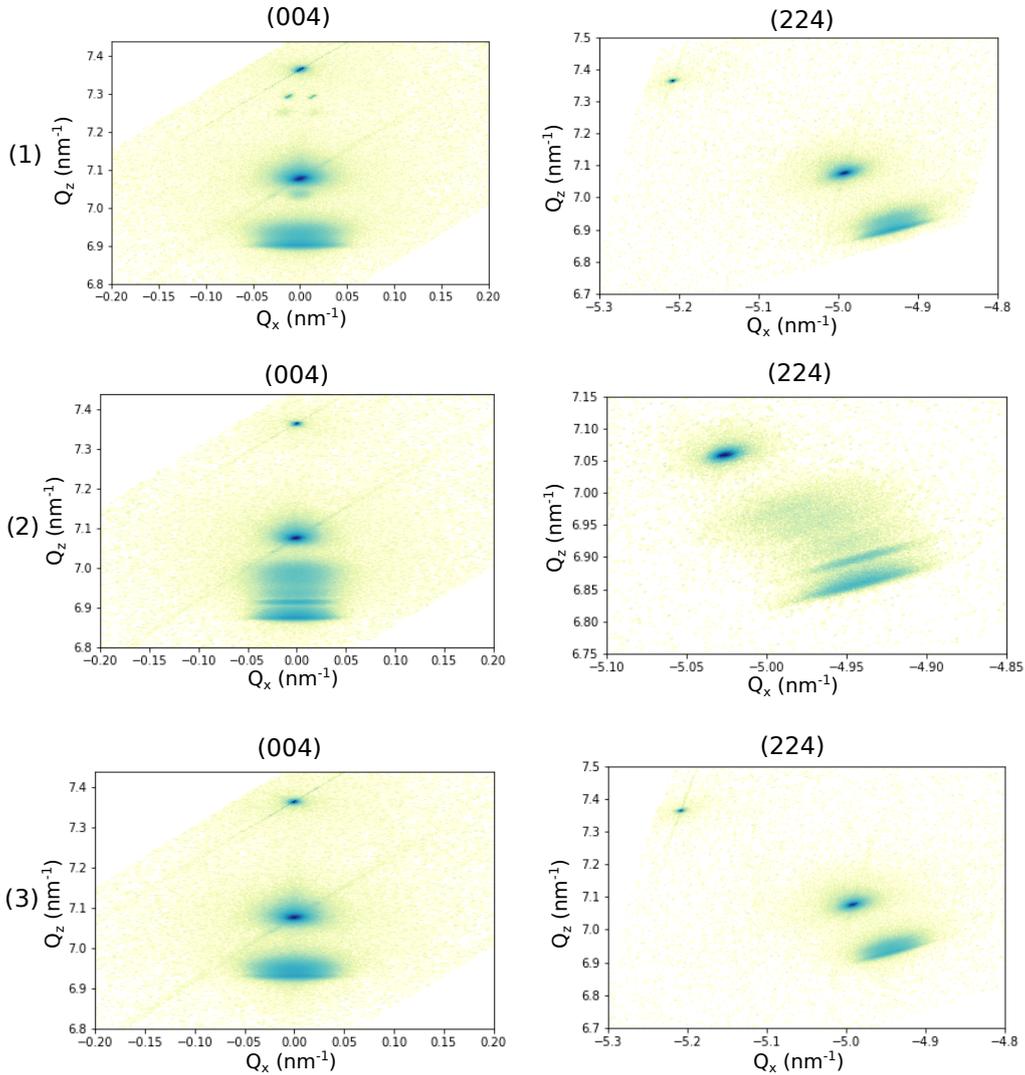


FIGURE 1.7 – Cartographie de l'espace réciproque des plans (004) et (224) pour les différents types d'empilements (1), (2) et (3).

4. On peut alors en déduire l'état de déformation et le taux de relaxation de la couche en

CHAPITRE 1. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

Empilement 1			
	Concentration mesurée en RSM $x_{Sn}(\%)$	$R(\%)$	$\epsilon(\%)$
Ge SRB%	0	103,5	0,14
GeSn 13%	12,7	68,2	-0,57
Empilement 2			
	Concentration mesurée en RSM $x_{Sn}(\%)$	$R(\%)$	$\epsilon(\%)$
Ge SRB%	0	102,9	0,11
GeSn 13%	13,4	85	-0,28
GeSn 16%	15,7	74	-0,57
Empilement 3			
	Concentration mesurée en RSM $x_{Sn}(\%)$	$R(\%)$	$\epsilon(\%)$
Ge SRB%	0	103,8	0,15
GeSn 10%	10,4	66,7	-0,44

TABLE 1.1 – Extraction des concentrations en étain et des états de déformation résiduelle pour les trois empilements via la technique de RSM.

utilisant les définitions suivantes :

$$\epsilon = \frac{a_{GeSn}^{\parallel} - a_{GeSn}^{\circ}}{a_{GeSn}^{\circ}}$$

$$R_{GeSn} = \frac{a_{GeSn}^{\parallel} - a_{GeSRB}^{\parallel}}{a_{GeSn}^{\circ} - a_{GeSRB}^{\parallel}}$$

L'ensemble des résultats obtenus pour les différents empilements est regroupé dans le tableau 1.1. L'étalement des figures de diffraction correspondant au GeSn montre qu'il existe un gradient de concentration et de déformation même pour les empilements à couche uniforme. Je me focalise ici uniquement sur les couches à plus fortes concentrations de chaque plaque car nous verrons plus tard que les recombinaisons électroniques ont lieu dans les zones de plus forte concentration d'étain.

Le substrat virtuel de germanium est effectivement en légère tension résiduelle allant de 0,11 % pour l'empilement (2) à 0,15 % pour l'empilement (3). L'état de compression des couches de GeSn augmente lorsqu'elles sont plus riches en étain, comme attendu. Toutefois, l'approche à gradient de concentration permet une relaxation partielle de l'état de contrainte pour des concentrations plus élevées par rapport aux deux empilements nominaux comme attendu.

Caractérisation par microscope à transmission d'électrons

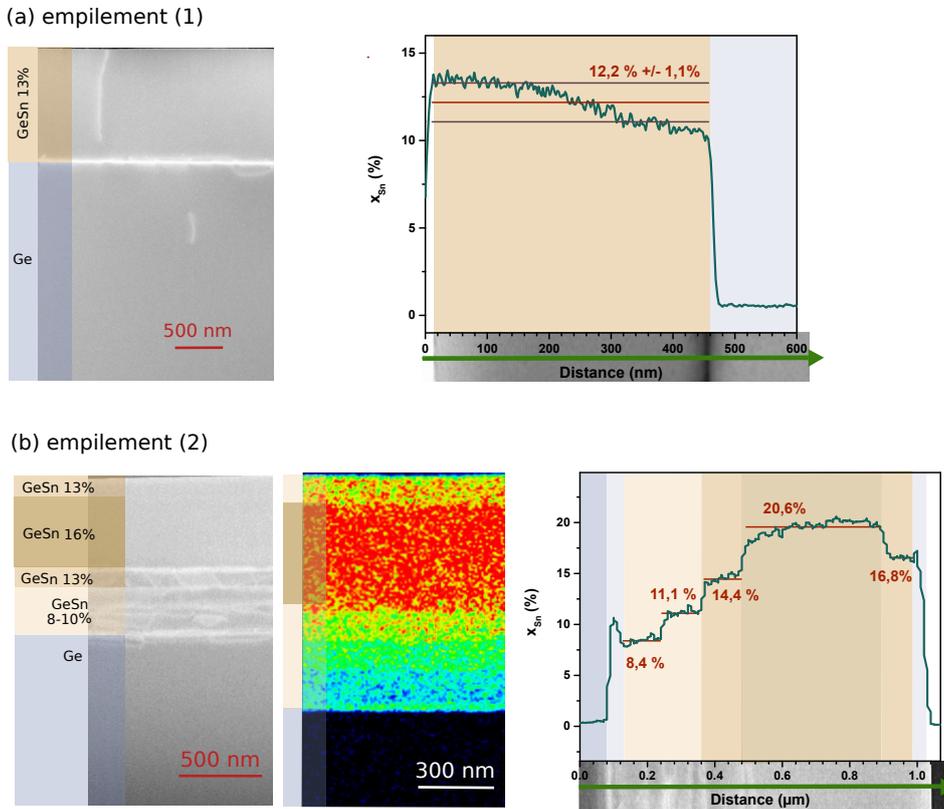


FIGURE 1.8 – Coupes d'image TEM et profil EDX de la concentration d'étain pour les empilements de (a) 13 % et (b) 16% d'étain.

Les empilements (1) et (2) ont été également caractérisés au microscope électronique en transmission (TEM). Les coupes d'échantillons présentées figure 1.8 ont été réalisées par Hugo Dansas et les mesures en champ sombre par Nicolas Bernier.

La coupe TEM du premier empilement montre que les dislocations se trouvent à l'interface Ge/GeSn par la présence de boucles de part et d'autre de l'interface. Elles permettent une relaxation partielle de la couche. Une dislocation traversante se trouve également dans la couche active de 13%. L'épaisseur de la couche de GeSn est estimée à 470 nm. La coupe TEM de l'empilement (2) indique une couche active de 16% de 415 nm. Il est également possible de voir que les dislocations sont concentrées dans les couches de plus basses concentrations en étain prouvant ainsi l'intérêt d'une approche de croissance par couches à concentration graduelle. En effet, cette technique permet de disposer de couches actives moins disloquées et donc de bien meilleures qualités se traduisant d'un point de vue optique par une augmentation du temps de vie non radiatif (SRH) des porteurs.

A partir de ces coupes, des analyses dispersives en énergie des rayons X (EDX) ont été réalisées. Le principe repose sur l'expulsion d'électrons provenant d'atomes composant l'échantillon lorsqu'un faisceau d'électrons incident interagit avec celui-ci. Cette expulsion laisse un niveau

CHAPITRE 1. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

d'énergie vacant rendant possible une desexcitation des électrons présents sur les couches électroniques périphériques vers les couches de cœur. Cette desexcitation s'accompagne d'un rayonnement X dont l'énergie est caractéristique de l'élément chimique mis en jeu.

Pour l'empilement (1), la couche n'est pas totalement homogène en concentration selon l'axe de croissance. Elle s'enrichit progressivement de 3% d'étain. Concernant le second empilement, le profil met en évidence l'existence de cinq plateaux de concentration d'étain. Les couches de 30 nm de SiGeSn sont également visibles. Toutefois, il est important de noter que la valeur de concentration en étain fournie par EDX ici reste approximative. Pour quantifier plus précisément la concentration par cette méthode, il faudrait avoir une source référence en étain dont la concentration est connue servant ainsi de mesure étalon.

Le TEM permet également une caractérisation de diffraction par précession des électrons (PED). Au lieu d'obtenir l'image réelle, la focale de la lentille intermédiaire du microscope est modifiée de façon à visualiser la figure de diffraction dans l'espace de Fourier. Afin de reconstruire l'ensemble du diffractogramme, le faisceau électronique incident est ensuite balayé autour de l'axe optique suivant un cône de demi-angle ϕ . On peut alors en déduire à partir de ce diffractogramme la position des atomes et la déformation à 0,05 % près.

Des cartographies PED, figure 1.9, ont donc été faites sur les deux empilements à partir des coupes TEM précédentes. La maille du substrat virtuel de Ge est prise comme référence pour ces cartographies. Autrement dit, il est considéré comme relaxé. Or, ce n'est pas le cas expérimentalement. Pour déterminer la déformation réelle de la couche, il faut donc la recalculer suivant la relation suivante :

$$\epsilon_{xx} = \frac{a_{GeSRB}^{\parallel}}{a_{GeSn}^0} (\epsilon_{xx}^{PED} + 1) - 1$$

avec $\epsilon_{xx}^{PED} = \frac{a_{GeSn}^{\parallel} - a_{GeSRB}^{\parallel}}{a_{GeSRB}^{\parallel}}$ et $a_{GeSRB}^{\parallel} = a_{Si}^0 + R_{GeSRB} (a_{Ge}^0 - a_{Si}^0)$. Le taux de relaxation R_{GeSRB} et la concentration d'étain sont déterminés des données RSM du tableau 1.1.

Pour les deux empilements, la déformation augmente avec la concentration en étain. L'ajout

Empilement 1				
	Concentration mesurée en RSM x_{Sn} (%)	ϵ_{xx}^{PED} (%)	ϵ_{xx} (%)	R (%)
GeSn 13%	12,7	1,5	-0,30	83
Empilement 2				
	Concentration mesurée en RSM x_{Sn} (%)	ϵ_{xx}^{PED} (%)	ϵ_{xx} (%)	R (%)
GeSn 13 % (dessous)	13,4	1,41	-0,52	72
GeSn 16%	15,7	1,61	-0,66	70
GeSn 13 % (dessus)	13,4	1,73	-0,21	89

TABLE 1.2 – Détermination des états de déformation résiduelle via la technique PED pour les deux empilements de GeSn sur SOI.

d'atomes d'étain vient compresser la maille. Face à cette compression, la maille tend à se relaxer partiellement par la présence de dislocations et en se déformant de manière tétragonale

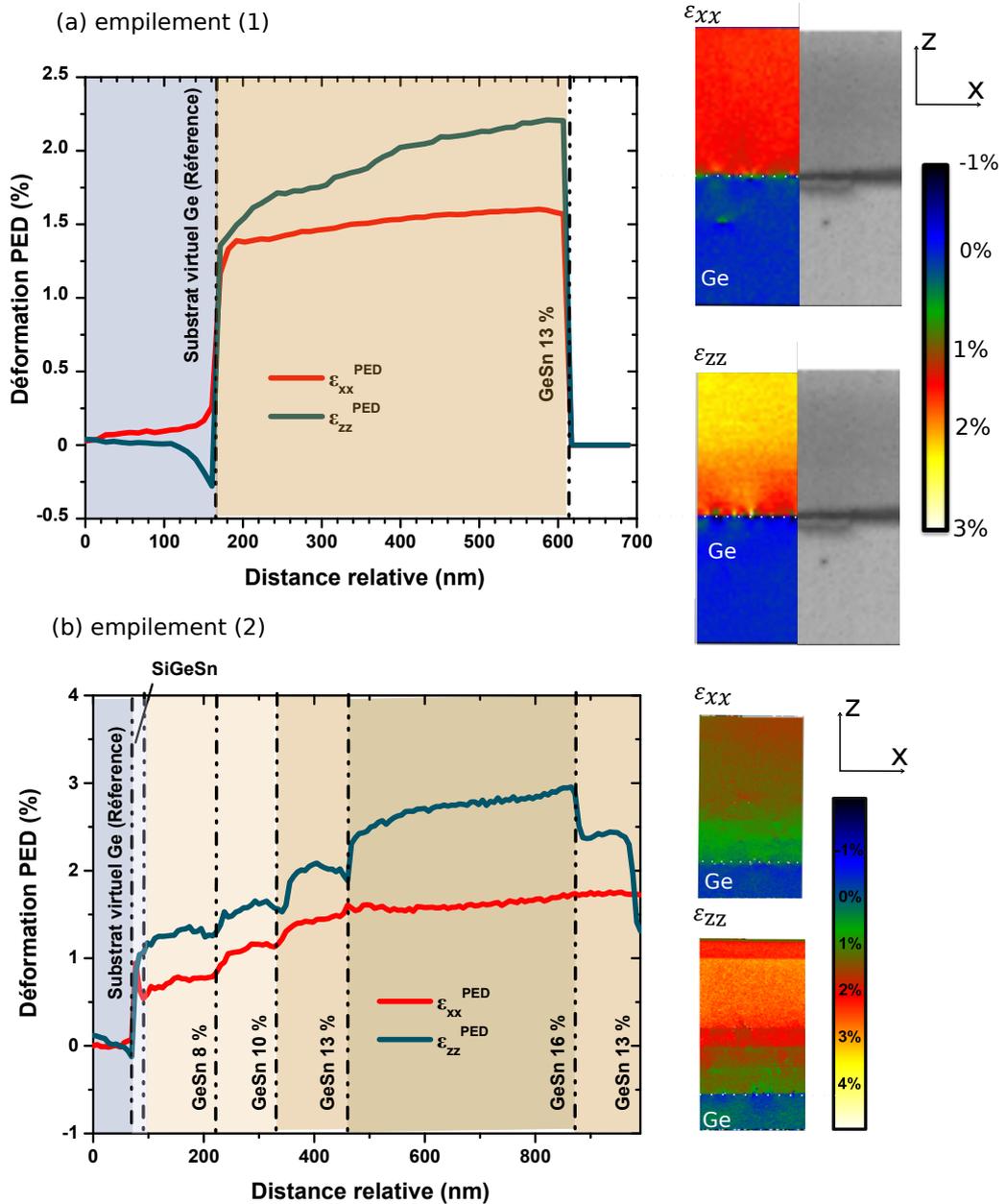


FIGURE 1.9 – Profils et cartographies de déformation déterminée à partir de la caractérisation PED pour (a) l’empilement (1) et (b) l’empilement (2).

($\epsilon_{xx} < \epsilon_{zz}$). On peut également observer que les zones disloquées à l’interface Ge/GeSn entraînent une déformation tétragonale moindre. Pour l’empilement de 13 % par exemple, ϵ_{xx} et ϵ_{zz} dans le GeSn sont égaux juste au niveau de l’interface, zone de très fortes dislocations. L’écart se crée ensuite entre les deux valeurs au fil de la croissance du matériau. Il faut cependant rester prudent sur les valeurs de la déformation hors-du-plan et les interprétations qui en découlent étant donné que la lame TEM, fine selon l’axe z , relaxe en partie selon cette direction. Elle ne re-

présente donc pas la valeur réelle de l'état de déformation pleine plaque.

De plus, les valeurs de déformation résiduelle dans le plan déterminées par PED pour l'empilement de 16 % sont en accord avec celles trouvées en RSM. En revanche, les inhomogénéités en déformation et en concentration de la couche de 13 % pour l'empilement (1) au niveau de la lecture de la RSM (tâche très étendue) créent une forte incertitude sur la détermination de la déformation résiduelle en compression.

1.1.4 Estimation de la déformation par modélisation à éléments finis

Les déformations résiduelles de chaque couche déterminées précédemment pour les différents empilements ont des valeurs relativement faibles. Cependant, l'ingénierie de structures suspendues ou l'application de couche tenseur permettent de redistribuer les contraintes et d'amplifier localement la déformation. Afin de modéliser et d'estimer cette amplification locale de la déformation grâce à ces structures, j'utiliserai le logiciel Comsol.

Géométrie et maillage

Il faut dans un premier temps définir la géométrie du dispositif. Afin d'être précis sur les dimensions et les sous-gravures, je me base à la fois sur les motifs provenant des fichiers de dessin de masque de lithographie (gds) et sur des images à microscope à balayage électronique (MEB). Je ferai toutefois l'approximation de couches homogènes en concentration pour les empilements de 10 % et 13 %. J'utilise un maillage triangulaire avec un balayage de la surface de l'échantillon jusqu'au substrat de façon à réduire le temps de calcul et gagner de la mémoire.

Modèle de déformation élastique

L'équation fondamentale de la dynamique appliquée à un système solide de volume mésoscopique V , soumis à des forces volumiques \vec{F}_v et surfaciques \vec{F}_s s'écrit simplement :

$$\int_V \vec{F}_V + \int_s \vec{F}_s = \int_V \rho \vec{a}_G$$

On se place en régime stationnaire. Les forces de surface sont celles de contraintes s'exerçant sur un élément de surface dS de normale \vec{n} , dont l'expression est $\vec{F}_s = \sigma \vec{n}$. En utilisant le théorème d'Ostrograski, on aboutit à l'équation locale suivante :

$$\vec{F}_V + \text{div}(\sigma) = \vec{0}$$

CHAPITRE 1. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

Cette dernière équation, la loi de Hooke généralisée et le fait que la déformation dérive d'un déplacement, forment un système d'équations qui détermine totalement le système et permet sa résolution par éléments finis via Comsol.

Ce logiciel [40] décompose la contrainte et la déformation en fonction de leur origine physique (initiale, externe, thermique, fluage...).

Ici, on s'intéresse uniquement à la déformation/contrainte initiale et à la contrainte d'origine thermique. On a alors selon les notations Comsol :

$$\epsilon_e = \epsilon - \epsilon_{inel}$$

avec $\epsilon_{inel} = \epsilon_{th} + \epsilon_0$

$$\sigma = \sigma_{ad} + C\epsilon_e$$

avec $\sigma_{ad} = \sigma_0$ et C la matrice d'élasticité.

Ces conventions impliquent de faire attention aux signes mais également obligent un post-traitement des données [41], détaillé dans le paragraphe 1.1.4 suivant. Il est possible de décomposer la déformation en deux composantes ; une déformation initiale résiduelle et une déformation d'origine thermique.

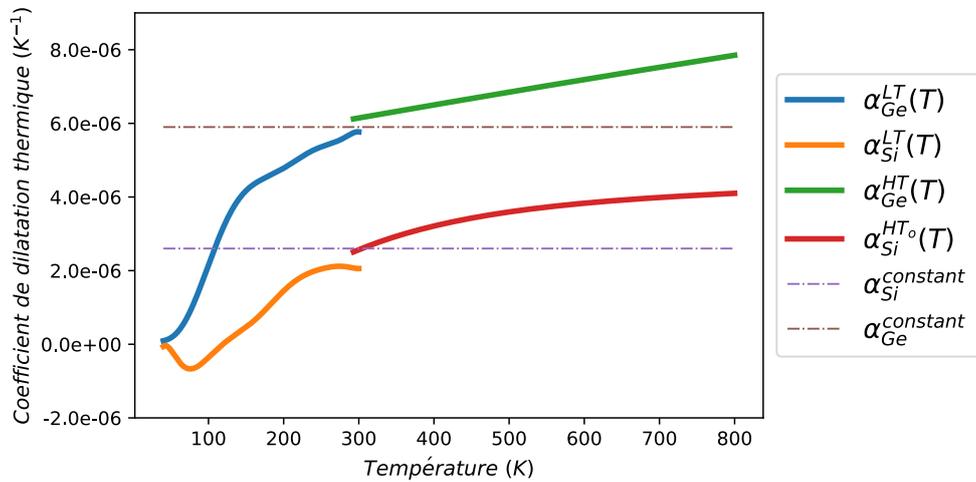


FIGURE 1.10 – Évolution des coefficients d'expansion thermique du silicium et du germanium avec la température.

- L'état de déformation résiduelle bi-axiale des différentes couches de l'empilement à température ambiante est fourni expérimentalement par la cartographie de l'espace réciproque. On modélise cet état par une déformation initiale ϵ_0 de la couche via le tenseur de déformation bi-axiale. A cause de la norme utilisée par Comsol, il faut toutefois inverser les

signes⁵.

- Lorsque la température est différente de l'ambiante, des effets de dilatation engendrent une déformation thermique. Il est possible d'utiliser l'approximation linéaire avec un coefficient de dilatation constant α défini selon comsol par :

$$\epsilon_{th} = \alpha_{mat}(T - T_{ref})$$

avec T la température de travail, T_{ref} la température de référence où le matériau est libre de contrainte thermique. Toutefois, comme on a pu le voir en introduction ce modèle est trop grossier et engendre une sous-estimation de l'état de contrainte de la couche pour deux raisons :

1. Tout d'abord, il est préférable de revenir à une définition plus générale, où le coefficient de dilatation dépend de la température :

$$\epsilon_{th}^{mat} = \int_T^{T_{ref}} \alpha^{mat}(T) dT$$

La figure 1.10 représente les différents coefficients d'expansion thermique dans le cas de :

- (a) coefficients de dilatation constants [42] :

$$\alpha_{Si}^{cst} = 2,6 \cdot 10^{-6} K^{-1}$$

$$\alpha_{Ge}^{cst} = 5,9 \cdot 10^{-6} K^{-1}$$

- (b) coefficients de dilatation définis à haute température (300 K - 800 K) dont l'expression est donnée par [43], [44] :

$$\alpha_{Ge}^{HT}(T) = 6,05 \cdot 10^{-6} + 3,60 \cdot 10^{-9}(T - 273) - 0,35 \cdot 10^{-12}(T - 273)^2 \quad (K^{-1})$$

$$\alpha_{Si}^{HT}(T) = [3,725(1 - e^{-5,88 \cdot 10^{-3}(T-124)}) + 5,548 \cdot 10^{-4}T] \times 10^{-6} \quad (K^{-1})$$

- (c) de coefficients de dilatation définis à basse température (40 K - 300 K) dont la modélisation est une interpolation polynomiale d'ordre 9 à partir de données expérimentales [45] de la forme :

$$\alpha_{mat}^{LT}(T) = \sum_{k=0}^9 a_k T^k$$

Le détail de cette dernière interpolation et la valeur des coefficients polynomiaux sont donnés en annexe A.1.

5. De manière, équivalente il est possible d'utiliser le tenseur de contrainte σ avec une contrainte initiale de la couche σ_0 en conservant les signes. Cette méthode arrive au même résultat final mais permet de conserver le sens 'physique' du signe.

CHAPITRE 1. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

Ces coefficients de dilatation pour le germanium et silicium présentent une légère discontinuité à 300 K délimitant leurs plages d'utilisation de hautes (300 K - 800 K) et basses (40 K - 300 K) températures.

- De plus, expérimentalement, le substrat de silicium est beaucoup plus épais que la couche de germanium si bien qu'il est à l'état relaxé et la couche de germanium absorbe toute la déformation :

$$\epsilon_{tot} = \int_T^{T_{ref}} [\alpha_{Ge}(T) - \alpha_{Si}(T)] dT$$

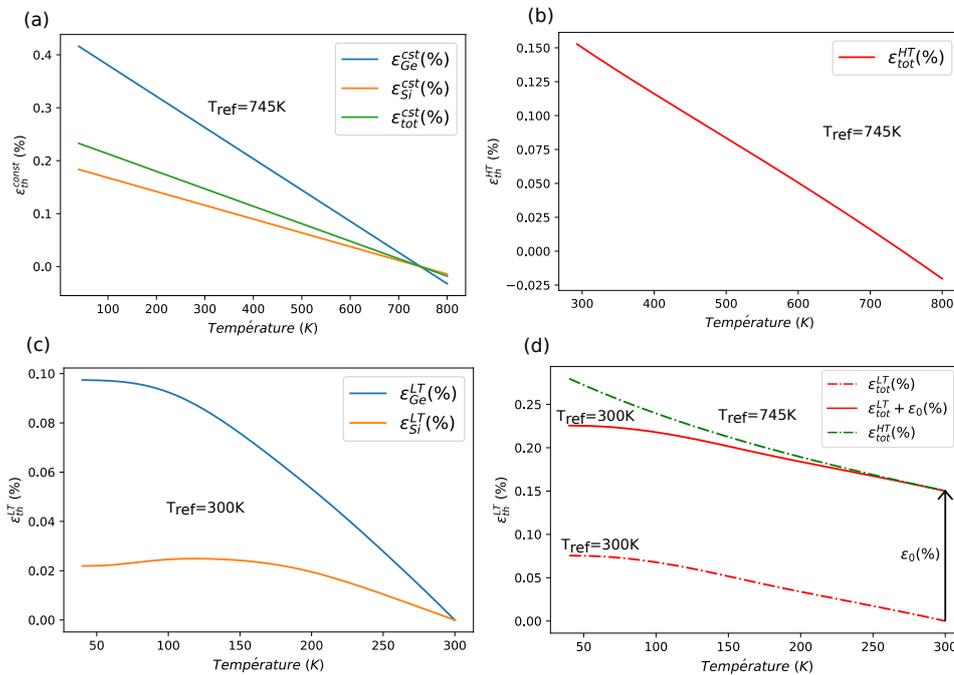


FIGURE 1.11 – Évolution de la déformation thermique de couche de germanium et du silicium, déposés sur des substrats indéformables, dans l'approximation de coefficients de dilatation (a) constants, de coefficients de dilatation (b) définis sur la plage haute température 300K-800K pour $T_{ref} = 745K$. (c) Déformation thermique à basse température pour une température de référence de 300K dans la plage 40K-300K.(d) Déformation thermique totale à basse température sans et avec une déformation initiale $\epsilon_0 = 0, 15\%$ pour une température de référence de 300K (en rouge). A titre de comparaison, est également représentée la déformation thermique en utilisant les lois de coefficients de dilatation à haute température pour une température de référence de 745 K (en vert). Les valeurs de coefficients thermiques utilisées pour toutes ces figures sont celles présentées à la figure 1.10.

J'ai représenté figure 1.11 la déformation totale induite par la différence de coefficient de dilatation entre le silicium et le germanium pour les différentes plages de température, i.e. dans le cas de coefficients de dilatation constants (a), de coefficients de dilatation définis

à haute (b) et basse température (c). Lors d'un abaissement de température, l'état de déformation totale de la couche de germanium s'amplifie en tension.

Pour une température de dépôt de $T=745\text{K}$ pour laquelle le germanium est totalement relaxé, on trouve avec les modèles exposés figure 1.11 (a) et (b) une tension résiduelle 0,15 % pour $T = 300\text{K}$, ce qui est très proche des valeurs extraites par les cartographies de l'espace réciproque.

A basse température, les déformations thermiques du silicium et du germanium, figure 1.11 (c) atteignent un plateau entre 40K et 100K. Ainsi la déformation totale, exposée figure 1.11 (d) associée plafonne pour une valeur palier de 0,225 %, créant un écart de 0.054 % par rapport à la déformation thermique définie avec les équations des coefficients de dilatation à haute température. Cet écart de 0,054% peut sembler petit mais il ne faut pas oublier qu'il s'agit d'une déformation résiduelle et lors la redistribution des contraintes, cette incertitude s'accumule localement et peut atteindre 1 % pour un facteur d'amplification de 20^6 .

Pour résumer, je décomposerai la déformation comme la somme d'une déformation initiale ϵ_0 , déterminée par cartographie de l'espace réciproque et d'une déformation thermique ϵ_{tot}^{LT} dépendant de la température, simulant plus précisément la dynamique de la déformation avec la température dans nos structures laser.

Post-traitement

Afin de s'affranchir de l'offset introduit dans Comsol par la déformation inélastique ϵ_{inel} , il est nécessaire de recalculer le tenseur de déformation ϵ directement à partir du tenseur de contrainte σ en utilisant la loi de Hooke tel que :

$$\begin{aligned}\epsilon_{xx} &= S_{11}\sigma_{xx} + S_{12}\sigma_{yy} + S_{12}\sigma_{zz} = \frac{(C_{11} + C_{12})\sigma_{xx} - C_{12}(\sigma_{yy} + \sigma_{zz})}{C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2} \\ \epsilon_{yy} &= \frac{(C_{11} + C_{12})\sigma_{yy} - C_{12}(\sigma_{xx} + \sigma_{zz})}{C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2} \\ \epsilon_{zz} &= \frac{(C_{11} + C_{12})\sigma_{zz} - C_{12}(\sigma_{yy} + \sigma_{xx})}{C_{11}^2 + C_{11}C_{12} - 2C_{12}^2} \\ \epsilon_{xy} &= \frac{S_{44}\sigma_{xy}}{2} = \frac{\sigma_{xy}}{2C_{44}}\end{aligned}$$

6. Süess et al. [41] ont défini un facteur d'amplification ("enhancement factor") qui traduit l'amplification de la déformation résiduelle de la couche de germanium par le mécanisme de redistribution de contraintes par les structures micro-ponts. On verra que pour les ponts de GeSn cette valeur semble plus faible.

$$\epsilon_{xz} = \frac{\sigma_{xz}}{2C_{44}}$$

$$\epsilon_{yz} = \frac{\sigma_{yz}}{2C_{44}}$$

Ces expressions implémentées dans Comsol permettent donc de lire directement la valeur physique de la déformation. L'état de déformation du GeSn est donc déterminé par éléments finis pour une structure et une température données. Il est maintenant intéressant d'étudier les conséquences de cet état de déformation sur les bords de bandes électroniques de l'alliage.

1.2 Dépendance des bords de bandes électroniques avec la concentration en étain et la déformation selon le modèle des potentiels de déformation

Afin de connaître les caractéristiques optiques d'émission laser, la température de fonctionnement et le seuil, il est nécessaire de connaître le gap énergétique et la courbe de gain du matériau. Or, ces paramètres dépendent de la concentration en étain et de la déformation. Dans cette section, on aborde deux approches possibles : le modèle $\vec{k} \cdot \vec{p}$ 30 bandes [46] enrichi du modèle des potentiels de déformation et le modèle de potentiels empiriques développé par Quang Minh-Thai au laboratoire SiNaPs.

1.2.1 Évolution des bords de bandes en fonction de la concentration de l'étain

Indépendamment de l'état de contrainte, l'ajout d'étain dans le germanium modifie la structure de bande comme indiqué dans l'introduction. Afin de calculer la directivité le plus précisément possible, je décide d'utiliser les équations issues d'un modèle $\vec{k} \cdot \vec{p}$ à 30 bandes développé à 300 K par Song [46]⁷. Cette dépendance s'exprime à l'état relaxé, pour les gaps en L et en Γ selon :

$$E_g^{\Gamma, Relax}(300K) = 0,814 - 3,467x_{Sn} + 2,277x_{Sn}^2$$

$$E_g^{L, Relax}(300K) = 0,670 - 1,74x_{Sn} + 2,862x_{Sn}^2$$

L'inversion en une transition directe a lieu pour une concentration de 8,2 %.

7. Le principe de la théorie $\vec{k} \cdot \vec{p}$ étant un développement limité en Γ , ce modèle 30 bandes est plus précis que celui de 8 bandes élaboré par Mathieu Bertrand, ancien doctorant de notre laboratoire. Toutefois, les coefficients de Varshni étant inconnus pour l'étain en L, il est difficile de décrire l'évolution de la transition en L à une autre température que 300K. J'utiliserai pour étalonner les potentiels pseudo-empiriques à 0 K afin de s'affranchir de cette loi de Varshni.

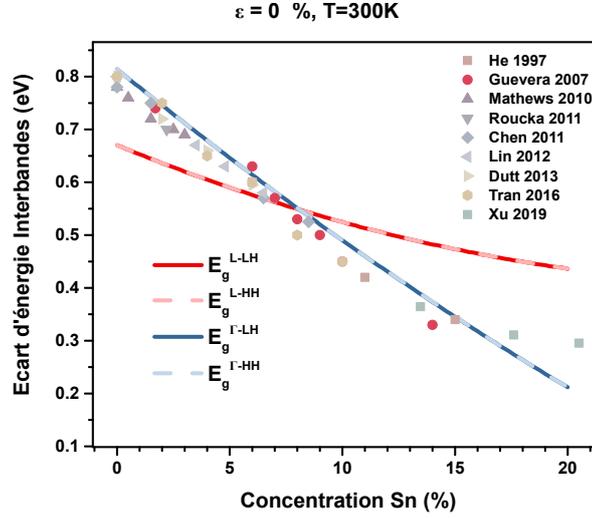


FIGURE 1.12 – Évolution des transitions interbandes en fonction de la concentration en étain pour un état relaxé de la couche à une température de 300 K. Les points sont des données expérimentales provenant des références [47]-[55]

1.2.2 Modèle des potentiels de déformation

Dans le cas d'une déformation selon les plans (001) ou directions [100], l'évolution énergétique des bords de bandes peut être décrit selon un modèle analytique énoncé par Van de Walle [56]. Ce modèle comprend un potentiel de déformation a_i (où i est noté c pour conduction ou v pour valence) prenant en compte le décalage des bandes en fonction de la déformation hydrostatique et un potentiel b , décrivant le décalage des bandes causé par une déformation en cisaillement tétragonal. Ce phénomène de tétragonalisation provoque une brisure de symétrie de la maille responsable de la levée de dégénérescence des bandes de valence de trous lourds (HH) et trous légers (LH).

La dépendance des bandes de conduction en Γ et L en fonction de la déformation est donnée par :

$$\delta E_{c\Gamma} = a_{c\Gamma} Tr(\epsilon)$$

$$\delta E_{cL} = a_{cL} Tr(\epsilon)$$

Le décalage des bandes de valences de trous lourds, trous légers et spin-orbite est modélisé par les expressions suivantes :

$$\delta E_{HH} = a_v Tr(\epsilon) - \frac{\delta E_v}{2}$$

$$\delta E_{LH} = a_v Tr(\epsilon) - \frac{\Delta_{so}}{2} + \frac{\delta E_v}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_{so}^2 + \Delta_{so} \delta E_v + \frac{9}{4} \delta E_v^2}$$

$$\delta E_{v_{so}} = a_v Tr(\epsilon) - \frac{\Delta_{so}}{2} + \frac{\delta E_v}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_{so}^2 + \Delta_{so} \delta E_v + \frac{9}{4} \delta E_v^2}$$

avec δE_v défini pour une déformation respectivement uni-axiale selon [100] et bi-axiale selon (100)

$$\delta E_v^{[100]} = 2b\left(1 - \frac{S_{12}}{S_{11}}\right)\epsilon_0$$

$$\delta E_v^{(001)} = -2b\left(2\frac{C_{12}}{C_{11}} + 1\right)\epsilon_0$$

et $\Delta_{so} = 0,284 + 0,744x_{Sn} - 0,200x_{Sn}^2$.

Les valeurs des coefficients a_c , a_v et b sont interpolées par une loi de Vegard à partir de ceux du germanium et de l'étain dont les valeurs numériques sont présentées en Annexe A.2.

D'après ces équations, pour une concentration d'étain donnée et en l'absence de déformation, les bandes de valence de trous sont bien doublement dégénérées. En revanche, dès qu'une déformation est appliquée il y a une levée de dégénérescence : dans le cas d'une tension uni-axiale selon [100], la transition fondamentale devient $\Gamma - HH$ ($\delta E_v > 0$). Dans le cas d'une tension bi-axiale, il s'agit de la transition $\Gamma - LH$ ($\delta E_v < 0$). Pour une déformation en compression ($\epsilon_0 < 0$), ces deux cas s'inversent.

1.2.3 Déformations biaxiale (001) - uniaxiale [100]

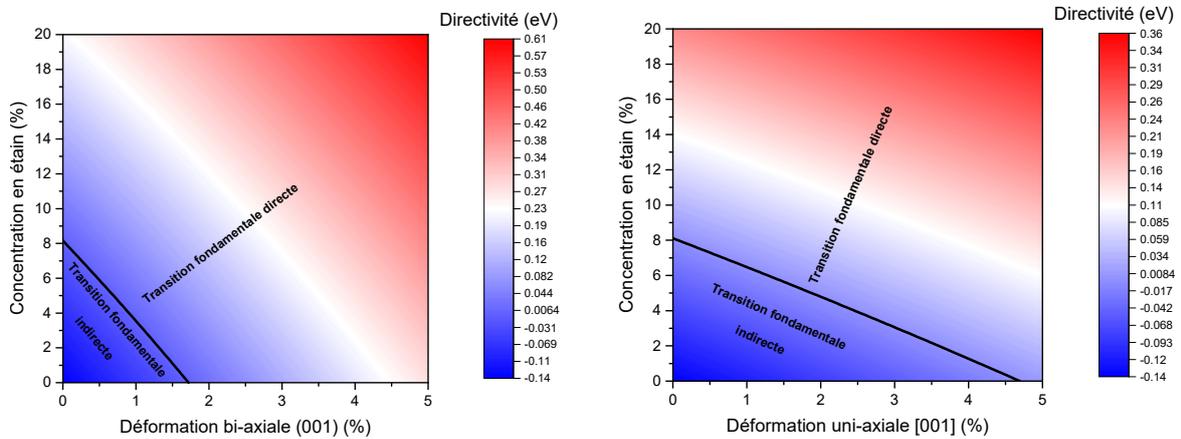


FIGURE 1.13 – Directivité du Germanium-Étain en fonction de la concentration en étain et de la déformation bi-axiale (001) et uni-axiale [100].

En combinant l'effet de la concentration d'étain et la déformation, il est possible de déterminer la directivité du matériau, $\Delta E = E_L - E_T$. J'ai représenté figure 1.13 les cas de déformation bi-axiale (001) et uni-axiale [100]. Au premier abord, le cas d'une déformation bi-axiale semble plus prometteur pour obtenir l'effet laser à température ambiante. Dans ce cas, pour une concentration d'étain donnée, il est possible d'obtenir une directivité plus importante avec une mise en tension plus faible. Ce constat laisse penser qu'il est plus avantageux expérimentalement de déformer de manière bi-axiale. En effet, la ségrégation et la rupture de la structure lors d'une

déformation trop importante sont les paramètres expérimentaux limitant. Une approche de déformation bi-axiale présente donc l'intérêt d'avoir une directivité plus importante pour un couple de concentration-déformation donné comparé à la déformation uni-axe.

Dans le cas particulier des couches à disposition, j'ai également tracé l'évolution des bords de bandes figure 1.14. La concentration d'étain pour toutes les plaques assure un gap direct $E_g^{\Gamma-LH}$ dans le cas bi-axe et $E_g^{\Gamma-HH}$ dans le cas uniaxe.

1.3 Structure de bandes et modélisation de la courbe de gain optique par la méthode de potentiels empiriques

J'utilise un modèle de potentiels empiriques développé par Quang Minh-Thai au laboratoire SiNaPS. La démarche retenue dans ce programme de calcul consiste à utiliser des gaps déterminés expérimentalement afin de trouver une fonction de modélisation des potentiels locaux et de résoudre l'équation de Schrödinger et d'en déduire toute la structure de bandes. Une fois cette dernière connue, on peut déterminer l'absorption/gain optique du matériau.

1.3.1 Présentation du modèle [57]

Structure de bandes

Afin d'obtenir les états électroniques disponibles en fonction de l'énergie E et du vecteur d'onde \vec{k} , il est nécessaire de résoudre l'équation de Schrödinger à l'état stationnaire donnée par :

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

avec H l'hamiltonien du système et ψ la fonction d'onde associée à l'énergie E .

La périodicité du cristal impose une périodicité du potentiel V_{atome} induit par l'atome et permet donc une résolution de l'équation de Schrödinger dans l'espace réciproque. On définit les vecteurs du réseau réciproque à partir du réseau direct par :

$$\vec{g}_1 = 2\pi \frac{\vec{r}_2^{def} \wedge \vec{r}_3^{def}}{V_{cell}^r}; \quad \vec{g}_2 = 2\pi \frac{\vec{r}_3^{def} \wedge \vec{r}_1^{def}}{V_{cell}^r}; \quad \vec{g}_3 = 2\pi \frac{\vec{r}_1^{def} \wedge \vec{r}_2^{def}}{V_{cell}^r};$$

La première zone de brillouin représentée figure 1.15 suffit pour déterminer les solutions de

CHAPITRE I. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

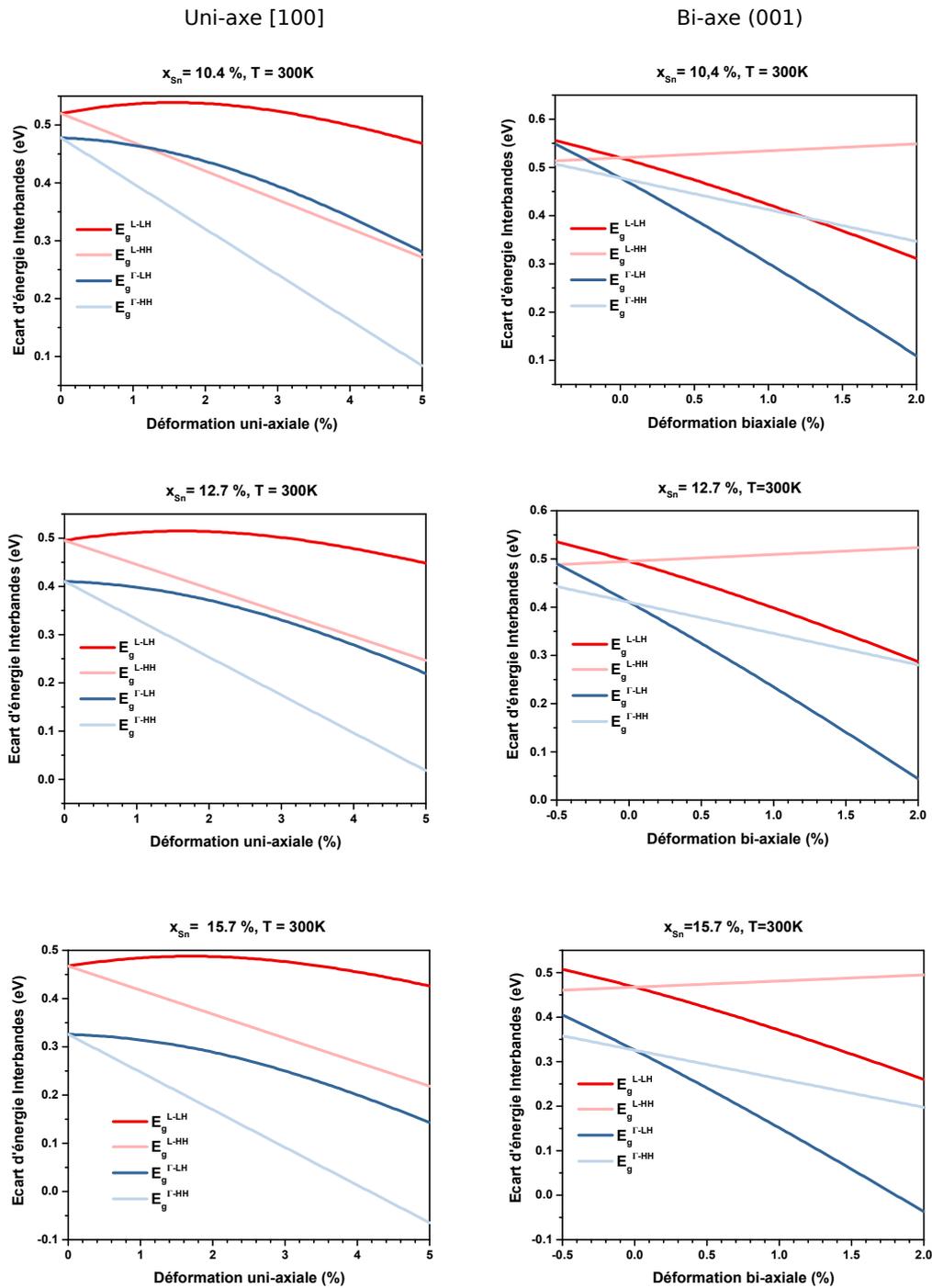


FIGURE 1.14 – Évolution des transitions interbandes en fonction de la déformation en tension dans les cas de concentration d'étain donnée pour les plaques à disposition.

l'équation de Schrödinger. Ainsi, un maillage de cette zone est réalisé selon la méthode de Monkhorst-

CHAPITRE I. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

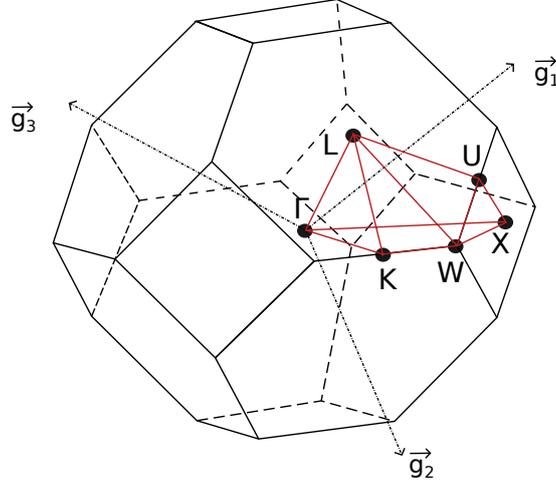


FIGURE I.15 – Première zone de Brillouin associée au réseau cubique face centrée.

Pack. Tout vecteur d'onde \vec{k} peut être construit d'après l'expression suivante :

$$\vec{k} = u_1\vec{g}_1 + u_2\vec{g}_2 + u_3\vec{g}_3$$

où $u_i = \frac{2i - N_i - 1}{2N_i}$ avec N_i nombre de points du maillage, et $i = 1, 2, \dots, N_i$.

On peut définir à partir de la génération de ces vecteurs d'onde, une base d'onde plane normée $|\phi_{\vec{k}}\rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. Dans cette base, l'hamiltonien s'écrit sous la forme :

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_{e0}}\Delta + V_{local} + V_{SO} \quad (I.3)$$

avec :

1. V_{local} est le potentiel local défini par :

$$\langle \phi_{\vec{k}_i} | V_{local} | \phi_{\vec{k}_j} \rangle = V_{TF}^{atome}(\vec{k}_i - \vec{k}_j) S(\vec{k}_i - \vec{k}_j)$$

S est le facteur de structure indiquant la position des atomes de la maille :

$$S(\vec{k}_i - \vec{k}_j) = \frac{1}{2} [e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_j)\cdot\vec{r}_{at1}^{def}} + e^{i(\vec{k}_i - \vec{k}_j)\cdot\vec{r}_{at2}^{def}}]$$

V_{TF}^{atome} est la transformée de Fourier du potentiel de l'atome considéré. Sa valeur empirique est interpolée pour toute la zone de Brillouin grâce à une fonction spline sur 9 points de la zone de Brillouin :

$$\vec{k}_{fit} = \frac{2\pi}{a_0} [0, \frac{\sqrt{3}}{1-\varepsilon}, \sqrt{3}, \frac{\sqrt{3}}{1+\varepsilon}, \frac{\sqrt{8}}{1-\varepsilon}, \sqrt{8}, \frac{\sqrt{8}}{1-\varepsilon}, \frac{\sqrt{11}}{1-\varepsilon}, \sqrt{11}, \frac{\sqrt{11}}{1+\varepsilon}, g_{max}]$$

avec $V_{TF}^{atome}(0) = 0$ et $V_{TF}^{atome}(g_{max}) = 0$ et ε indiquant une petite variation.

La valeur du pseudo-potentiel V^{atome} en chacun de ces points ainsi que μ_{SO} sont optimisés de façon à minimiser l'écart entre les valeurs des gaps calculés par EPM, notés E_{ij}

avec les valeurs de gap déterminés expérimentalement dit "gaps cibles" E_{ij}^{cible} selon une fonction quadratique résidu donnée par :

$$f_{err} = \sum_{ij} \omega_{ij} (E_{ij} - E_{ij}^{cible})$$

2. La projection dans cette base du terme cinétique de l'hamiltonien montre que son expression est purement diagonale :

$$\langle \phi_{\vec{k}_i} | \frac{-\hbar^2}{2m_{e0}} \Delta | \phi_{\vec{k}_j} \rangle = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_{e0}} \delta_{ij}$$

3. Le potentiel spin-orbite V_{SO} déterminé à partir de l'expression :

$$\langle \phi_{\vec{k}_i} | V_{SO} | \phi_{\vec{k}_j} \rangle = -\frac{2i\mu_{SO}}{\hbar\pi^2} \left(\frac{V_{cell}^r}{2} \right)^{\frac{2}{3}} S(\vec{k}_i - \vec{k}_j) B(\vec{k}_i) B(\vec{k}_j) [(\vec{k}_i \wedge \vec{k}_j)] \cdot \begin{pmatrix} \sigma_x(\text{spin}_i, \text{spin}_j) \\ \sigma_y(\text{spin}_i, \text{spin}_j) \\ \sigma_z(\text{spin}_i, \text{spin}_j) \end{pmatrix}$$

avec $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ les matrices de Pauli, $\text{spin}_i, \text{spin}_j$, valeur \uparrow ou \downarrow du spin de l'onde i et j , S le facteur de structure définit précédemment et B une fonction représentant l'intégrale de recouvrement définie par :

$$B(\vec{k}) = \frac{5 - \left(\frac{k}{\zeta_{SO}}\right)^2}{5[1 + \left(\frac{k}{\zeta_{SO}}\right)^2]^4}$$

La diagonalisation de cet hamiltonien H_0 donne accès aux énergies E_i et fonctions propres électroniques $|\psi_i\rangle$.

1.3.2 Interaction avec un photon

Les électrons dont les états sont déterminés par l'approche ci-dessus peuvent interagir avec une onde électromagnétique de vecteur potentiel \vec{A} selon l'hamiltonien H [58] :

$$H = H_0 - \frac{e}{2m_{0e}} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{e^2 A^2}{2m_{0e}} \approx H_0 - \frac{e}{m_{0e}} \vec{A} \cdot \vec{p}$$

Dans le cadre de la théorie des perturbations, la règle d'or de Fermi permet d'en déduire le coefficient d'absorption pour la transition d'un état 1 vers un état 2 :

$$\alpha_{1 \rightarrow 2}(\hbar\omega) = \frac{2\pi e^2}{n_r c \epsilon_0 m_{0e}^2 \omega V_{ZB}} \sum_{\vec{k}_1} \sum_{\vec{k}_2} [f_1(E_1) - f_2(E_2)] \langle \psi_1 | \vec{e} \cdot \vec{p} | \psi_2 \rangle \delta(E_2 - E_1 - \hbar\omega) \quad (1.4)$$

avec f_i , la distribution de Fermi-Dirac des porteurs dans la bande de conduction ou de valence selon la bande considérée, \vec{e} le vecteur de polarisation du photon, \vec{p} moment cinétique, e la charge élémentaire, ϵ_0 constante diélectrique du vide, n_r l'indice optique, c la vitesse de la lumière, V_{ZB}

volume de la zone de Brillouin.

On peut alors en déduire le gain net g_{net} comme la somme des termes dus à l'absorption inter bande entre les différentes bandes de trous HH, LH et SO (α_{IV}), entre les différentes bandes de conduction (α_{IC}) et entre les bandes de conduction et de valence (α_{VC}) :

$$g_{net} = -\alpha_{IV} - \alpha_{IC} - \alpha_{VC}$$

Dans tous les cas dans ce manuscrit, l'absorption α_{IC} est de l'ordre de 10^{-11} cm^{-1} . Elle est donc négligeable devant les absorptions intravalence et interbande. Elle ne sera donc pas plus abordée en détails.

Polarisation du mode et règles de sélection

Afin de savoir si des modes TE (champ électrique perpendiculaire à l'axe de croissance) ou TM (champ électrique parallèle à l'axe de croissance) sont autorisés, il est important de comprendre la polarisation induite par la déformation.

Nous pouvons voir dans la formule 1.4 que le gain interbande dépend du terme suivant appelé force d'oscillateur :

$$M = | \langle s | \vec{e} \cdot \vec{p} | p \rangle |^2$$

Il s'agit d'un terme de couplage entre le photon de la cavité et le cristal. En l'absence de déformation, le sommet de la bande de valence doublement dégénéré est isotrope. Autrement dit, les différentes recombinaisons possibles d'une paire électron-trou entre l'orbitale s de conduction et les différentes orbitales p_x , p_y et p_z sont équiprobables et valent $2/3$ chacune (voir figure 1.16(a)). Il en résulte un champ électrique de la lumière émis ou absorbé non polarisé.

Lors de l'application d'une déformation uni-axiale selon (100), il y a une levée de dégénérescence et la transition fondamentale s'effectue entre la bande de conduction et la bande de valence de trous lourds. Dès lors les trous mis en jeu pour la recombinaison interbande proviennent de façon égale ($1/2$) des orbitales p_y et p_z (x étant l'axe de déformation ici) mais aucun de l'orbitale p_x . (figure 1.16 (b)). Le champ est donc polarisé préférentiellement selon E_y et E_z et se propage perpendiculaire à ces axes.

Lors de l'application d'une déformation bi-axiale selon (001), la transition fondamentale s'effectue cette fois-ci entre la bande de conduction et la bande de valence de trous légers. $1/6$ des trous proviennent des orbitales de valence p_x et p_y et $2/3$ des trous sont issus de l'orbitale p_z (z étant l'axe de déformation ici). (figure 1.16 (c)). Le champ résultant est donc polarisé préférentiellement selon E_z et se propage dans la direction perpendiculaire à l'axe z.

Afin que l'explication sur les règles de sélection soit la plus claire possible, je me suis placé dans un cas simple, où les valeurs de forces d'oscillateur sont indépendantes de la déformation. Ce raisonnement peut-être encore vrai pour des faibles déformations. Cependant, dans le cas plus général, la valeur des forces d'oscillateur dépend de la déformation appliquée. Cette dépendance est bien prise en compte par la méthode des potentiels empiriques dans le calcul de la force d'oscillateur.

CHAPITRE 1. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

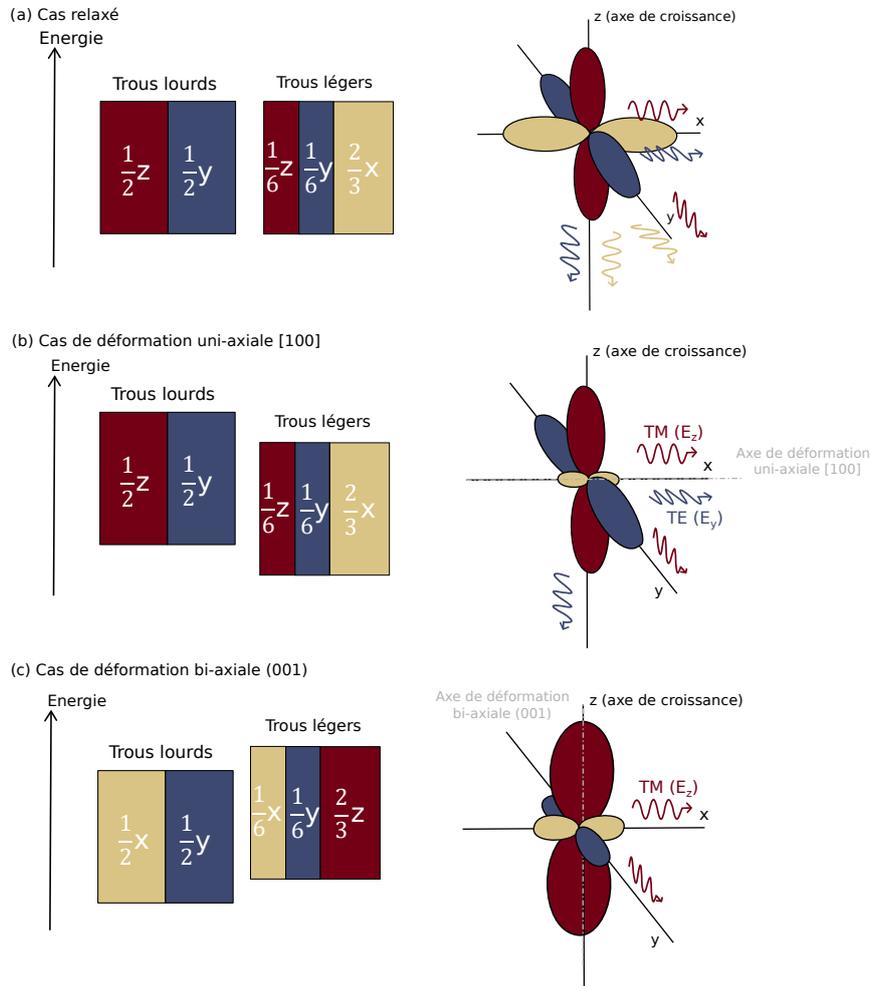


FIGURE 1.16 – Schéma explicatif de la polarisation induite par la levée de dégénérescence du sommet de la bande de valence, adapté de [8]. (a) Lumière non polarisée dans le cas relaxé. (b) Cas de déformation uni-axiale en tension. (c) Cas de déformation bi-axiale en tension.

1.3.3 En pratique

Il faut fournir une liste de gaps cibles à une température de 0 K en Γ et en L en fonction de la concentration et la déformation. Pour l'instant, cette dépendance n'est pas connue expérimentalement et la loi de Varshni pour le GeSn n'est pas encore connue en L . Donc les valeurs de gaps cibles relaxés seront pris à 0 K d'après le modèle k.p 8 bandes réalisé par Mathieu Bertrand, ancien doctorant au laboratoire. Cette dépendance en fonction de la teneur en étain des gaps Γ et L à 0 K est rappelée figure 1.17. En ce qui concerne la déformation, j'utilise les formules indiquées partie 1.2.2.

Prenons le cas d'une déformation bi-axiale d'un alliage GeSn composé de 10,4%. Son paramètre

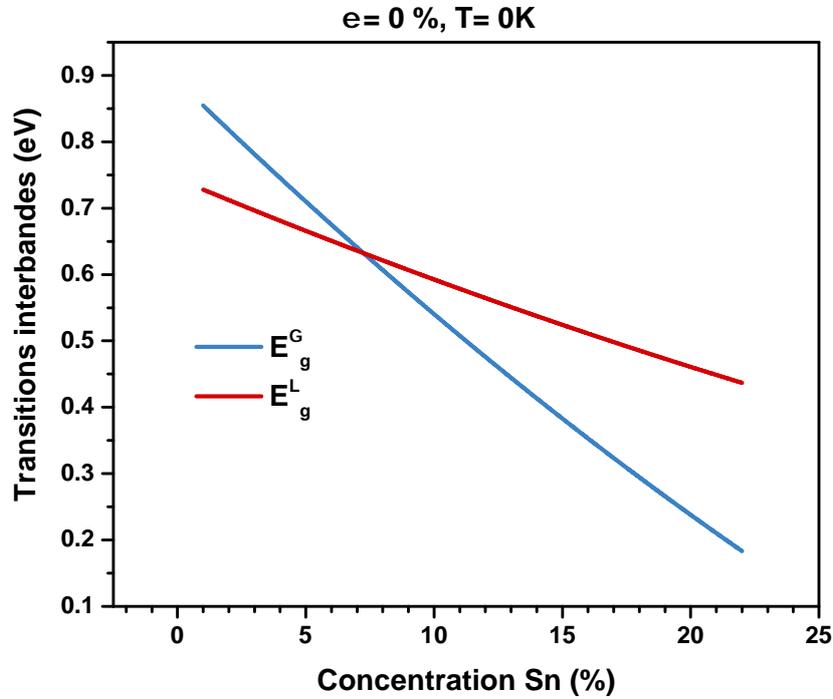


FIGURE 1.17 – Évolution des transitions L et Γ à 0 K d'après le modèle $\vec{k} \cdot \vec{p}$. 8 bandes de Mathieu Bertrand, servant de valeurs empiriques aux gaps relaxés à différentes concentration d'étain.

de maille relaxé vaut 5,748 Å. D'après la figure 1.17, on obtient la valeur des gaps énergétiques à l'état relaxé (Cas relaxé dans le tableau 1.3). Pour avoir les gaps énergétiques à 1,25 % et 2,5 % de déformation bi-axiale (Cas $\epsilon_0 = 1,25\%$ et $\epsilon_0 = 2,5\%$ dans le tableau 1.3), on utilise le modèle des potentiels de déformation donné section 1.2.2.

Pour une concentration d'étain donnée, un jeu de potentiels atomiques V^{atome} va ensuite être déterminé de façon à minimiser l'écart entre les gaps calculés à partir de ce jeu et ceux énoncés précédemment dit gaps cibles (ou empiriques)⁸. A titre d'exemple, les gaps cibles regroupés dans le tableau 1.3 sont donnés pour le jeu de potentiels pris en chaque point de \vec{k}_{fit} suivant :

$$V^{atome}(eV) = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ -0,26400031 & -0,24640940 & -0,25143952 & \\ 0,02905745 & 0,02576859 & 0,03593624 & \\ 0,03006718 & 0,03719538 & 0,02830052 & \\ & 0 & & \end{pmatrix} \quad (1.5)$$

8. L'état de déformation est pris en compte via le facteur de structure, V^{atome} dépend donc uniquement de la concentration en étain.

CHAPITRE 1. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

Cas relaxé		
Transition	Gaps Cibles	Gaps Calculés
$E_c^L(eV)$	0.5840208	0.5868700
$E_c^G(eV)$	0.5282408	0.5273400
$E_{SO}^G(eV)$	0.3542444	0.3592100
$E_{HH} - E_{LH}(eV)$	0.0000000	0.0000000
Cas $\epsilon_0 = 1,25\%$		
Transition	Gaps Cibles	Gaps Calculés
$E_c^L(eV)$	0.4652185	0.4609030
$E_c^G(eV)$	0.2996820	0.3012869
$E_{SO}^G(eV)$	0.4677863	0.4582260
$E_{HH} - E_{LH}(eV)$	0.1570244	0.1439700
Cas $\epsilon_0 = 2,5\%$		
Transition	Gaps Cibles	Gaps Calculés
$E_c^L(eV)$	0.3107982	0.3126020
$E_c^G(eV)$	0.0525785	0.0528980
$E_{SO}^G(eV)$	0.5936691	0.6019106
$E_{HH} - E_{LH}(eV)$	0.3031043	0.3102770

TABLE 1.3 – Écart entre les gaps énergétiques cibles et ceux calculés à partir du jeu de potentiels donné à l'équation 1.5.

et la valeur $\mu_{SO} = 5,123710^{-5} eV$. La fonction résidue trouvée est de l'ordre de 10^{-4} .

Une fois le potentiel local connu, la diagonalisation de l'hamiltonien H_0 dont l'expression est donnée équation 1.3 permet d'en déduire la structure de bande du matériau comme par exemple celle présentée figure 1.18 dans le cas d'un alliage GeSn avec une teneur en étain de 10,4 % pour différents états de déformations bi-axiales.

Sur cette figure, on constate que le gap du matériau est direct en Γ , même à l'état relaxé. La déformation permet d'accroître la directivité du matériau passant de 75 meV à l'état relaxé à 268 meV pour une déformation bi-axiale de 2 %. On observe aussi la levée de dégénérescence des bandes de valence en fonction de la déformation, à l'origine d'absorptions parasites comme nous le verrons au chapitre suivant. Comme pour le modèle k.p 30 bandes à 300 K présenté dans la section précédente, le décalage vers le rouge du gap du matériau en Γ augmente en fonction de la déformation appliquée.

CHAPITRE 1. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

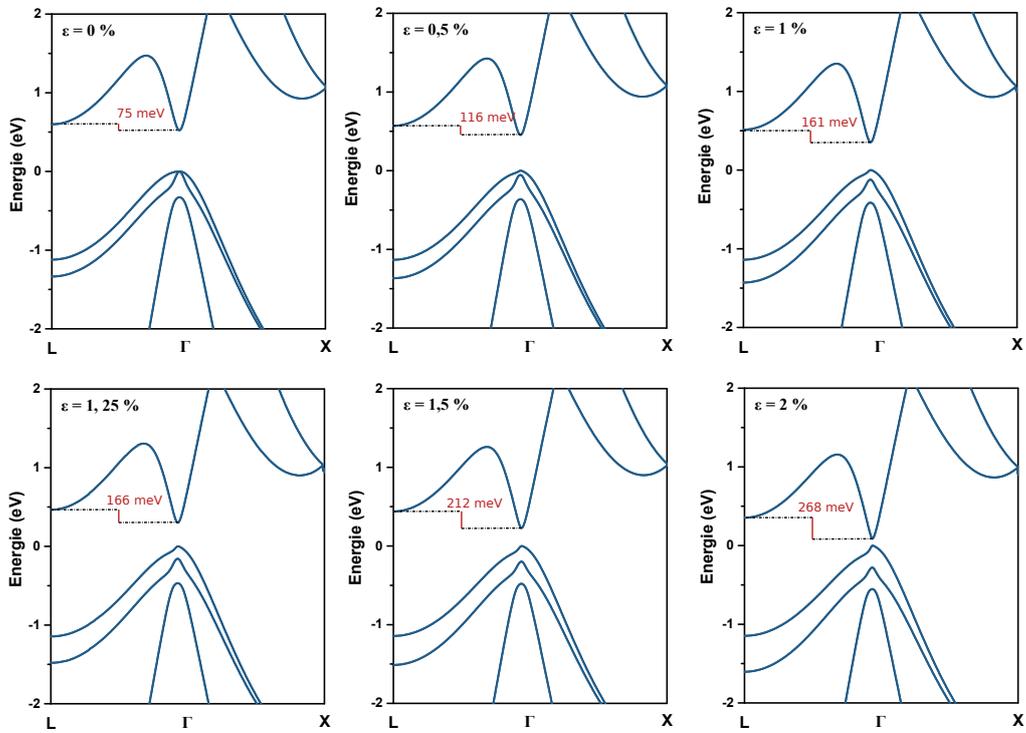


FIGURE 1.18 – Évolution de la structure de bande du GeSn 10,4 % en fonction de la déformation bi-axiale à T = 0 K.

1.4 Conclusion

Dans ce chapitre, j'ai défini les différents éléments nécessaires pour étudier l'influence de la déformation en tension de l'alliage GeSn sur la structure de bande électronique du matériau et sur ses propriétés optiques.

La caractérisation morphologique des plaques en rayons X, PED et TEM indique des couches actives de concentrations d'étain de 10,4 %, 12,7 % et 15,7 % avec un état de contrainte résiduelle en compression allant jusqu'à -0,55%. D'après les coupes TEM, la couche de 16 % issue d'une approche par couches à gradient de concentration semble avoir moins de dislocations par rapport à celle nominale de 13 %. Enfin, la déformation bi-axiale (001) en tension semble plus favorable pour augmenter la directivité du gap.

Dans le cas de ces trois empilements, à l'état relaxé, le gap énergétique du matériau est déjà à transition directe. Je vais donc chercher à déformer en tension les couches de GeSn, initialement en compression, de façon à accroître la différence énergétique entre les vallées Γ et L, appelée aussi directivité. Les porteurs électroniques seront alors mieux confinés au niveau du gap direct en Γ du matériau pour une concentration d'étain fixée. Cette recombinaison directe et radiative des porteurs va favoriser une élévation du gain du matériau et par conséquent une réduction des seuils et une élévation de la température de fonctionnement laser du dispositif. Le changement de la longueur d'onde d'émission du pic laser en fonction de la déformation appliquée est également un effet attendu.

CHAPITRE 1. DÉTERMINATION DE LA DÉFORMATION ET MODÉLISATION DES STRUCTURES DE BANDES

Etude de l'effet laser sous l'application d'une contrainte bi-axiale selon le plan (001)

Sommaire

2.1	Déformation bi-axiale via une couche tenseur de SiN	50
2.2	Membranes de GeSn suspendues déformées en tension . . .	78
2.3	Conclusion	97

Dans ce chapitre, je m'intéresse donc à la déformation bi-axiale en tension selon (001) et ses effets sur les propriétés optiques grâce aux techniques de caractérisation optique que sont la spectroscopie Raman et la photoluminescence.

Dans le cadre d'une collaboration avec le C₂N, j'étudie dans un premier temps la contrainte bi-axiale appliquée par couche tenseur de Si₃N₄ sur des micro-disques fabriqués à partir d'une couche de GeSn avec 10,4 % d'étain.

Je me focalise ensuite sur une déformation bi-axiale en tension de structures de GeSn en forme de croix induite par des bras tenseurs en germanium, structures développées au laboratoire.

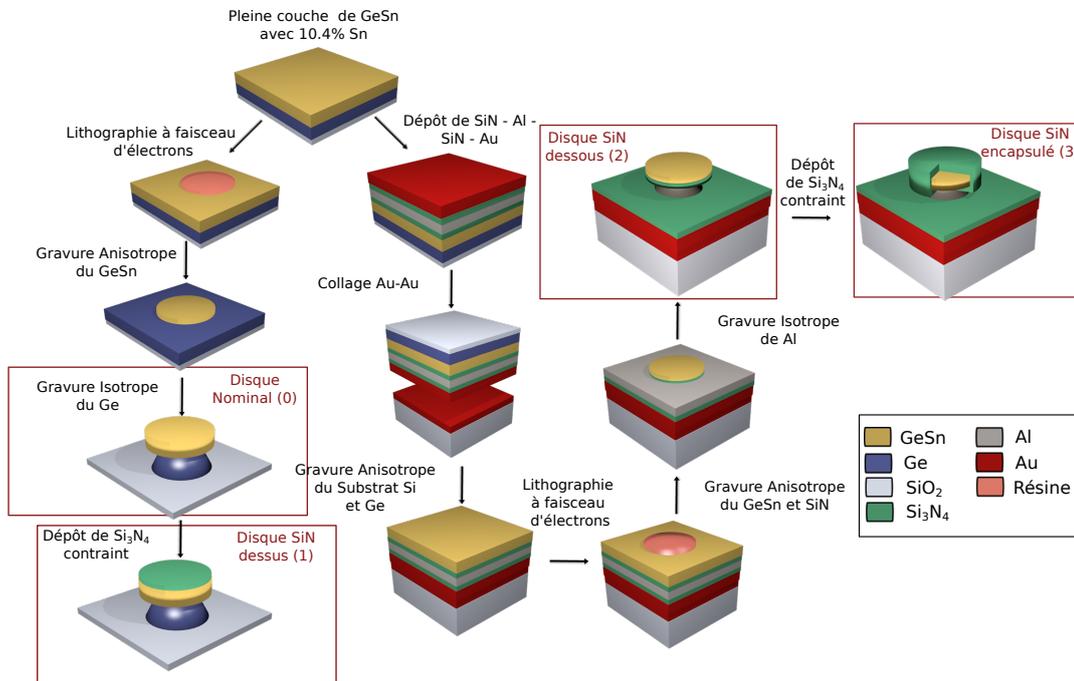


FIGURE 2.1 – Procédé de mise en tension du GeSn développé par le C2N sur la plaque de 10,4% Sn du CEA.

2.1 Déformation bi-axiale via une couche tenseur de SiN

2.1.1 Technique d'encapsulation des micro-disques

Une des stratégies pour déformer de manière bi-axiale le GeSn est de déposer une couche tenseur de Si_3N_4 sur des micro-disques. Ce procédé, illustré figure 2.1 a été développé par le C₂N sur des couches épaisses de GeSn de 480 nm provenant du CEA-LETI de 10,4 % d'étain. Trois types d'échantillons ont été réalisés :

- un échantillon noté 1 avec une couche de stresseur SiN sur le dessus.
- un échantillon noté 2 avec une couche de stresseur déposé sur l'échantillon, qui est ensuite transférée sur un autre substrat par collage Or-Or. La couche de stresseur se retrouve alors en dessous du GeSn.
- un échantillon noté 3 transféré et qui est encapsulé totalement par le matériau stresseur (dessus et dessous).

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTE BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

Le nitrure de silicium a été déposé par PECVD. La contrainte de la couche a été mesurée via la courbure d'un wafer Si 4" modélisée par formule de Stoney et vaut -1,8 GPa. Des images MEB des différentes structures en forme de disque sont également représentées figure 2.2.

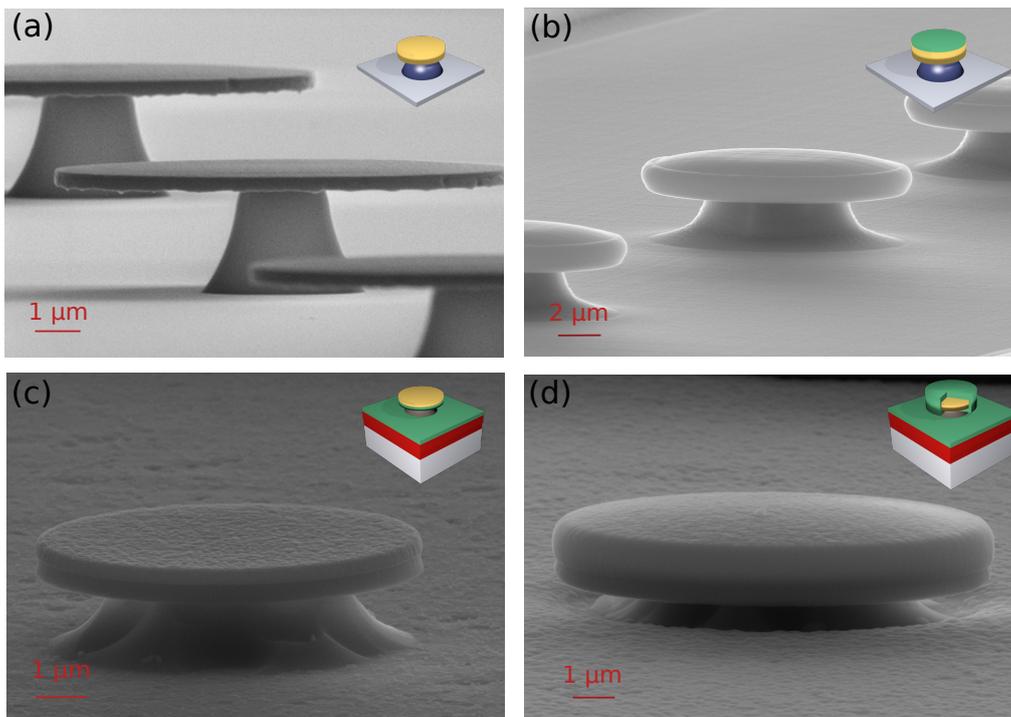


FIGURE 2.2 – Images MEB (a) d'un disque de référence sans nitrure, (b) d'un disque avec du nitrure sur le dessus, (c) d'un disque reporté par collage avec nitrure en dessous et (d) d'un disque totalement recouvert de nitrure.

2.1.2 Discussion sur l'état de contrainte de la couche de nitrure

Comme l'indiquent M. De Kersauson [59] et A. Ghrib [60], la valeur de -1,8 GPa correspond à un état de contrainte bi-axiale purement dans le plan. La liberté de déformation selon l'axe de croissance z de la couche de nitrure entraîne une relaxation totale de la contrainte selon cet axe. Afin de simuler le processus de relaxation du nitrure et de mise sous contrainte des couches microstructurées sous-jacentes, au lieu de se placer dans le cas d'une contrainte purement bi-axiale, ils ont décidé de définir un état de contrainte hydrostatique équivalent, justifié dans le cas de dépôt non planaire (guide).

Cependant, un état de contrainte hydrostatique de -4,5 GPa de la couche tenseur de SiN n'est pas équivalent à un état de contrainte purement bi-axiale de -1,8 GPa mais plutôt de - 3,15 GPa

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTE BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

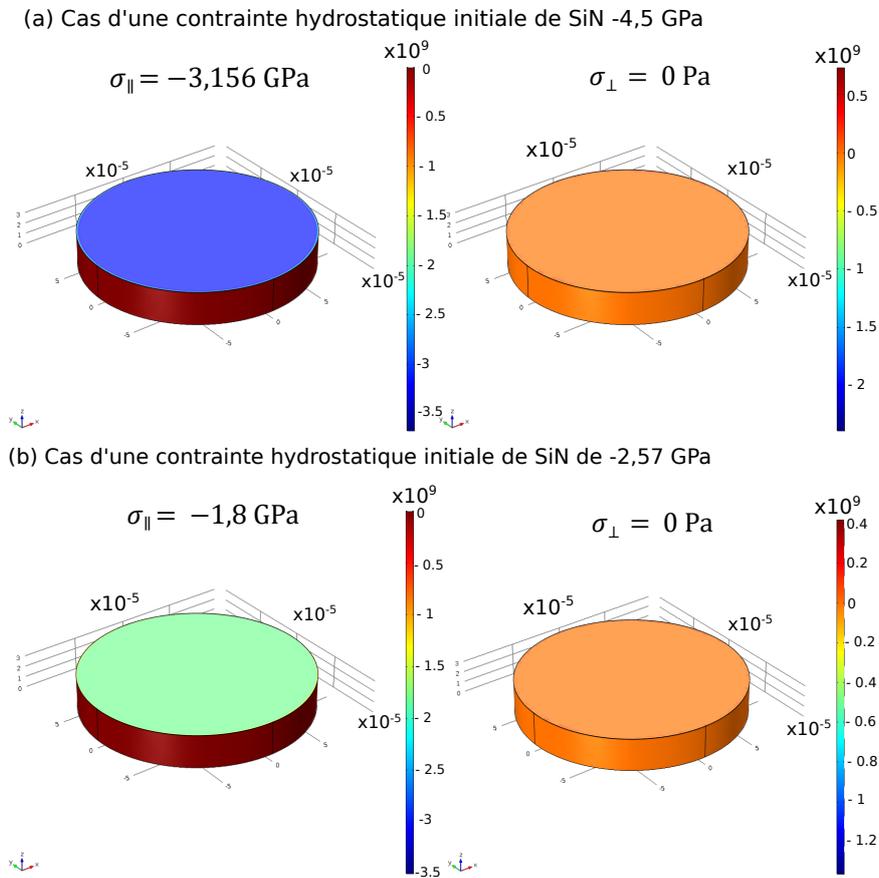


FIGURE 2.3 – Simulation d'un dépôt de 350 nm de couche tenseur de SiN ($E=100 \text{ GPa}$) sur un substrat de silicium indéformable dans le cas d'une contrainte hydrostatique équivalente de (a) - 4,5 GPa et de (b) -2,57 GPa.

(voir figure 2.3). Pour obtenir la contrainte biaxiale mesurée par la courbure du wafer de -1,8 GPa, il faudrait appliquer une contrainte équivalente hydrostatique d'environ -2,57 GPa.¹

Toutefois, il semble que l'application d'une contrainte hydrostatique initiale de -4,5 GPa de la couche tenseur de SiN semble mieux modéliser l'état de contrainte mesuré dans le germanium par spectroscopie Raman. M. De Kersauson [59] a bien constaté ce désaccord important entre la valeur de contrainte déduite par la mesure de la courbure du substrat et celle obtenue par spectroscopie Raman. Il impute cet écart à une différence de géométrie de dépôt entre un dépôt sur substrat et sur une structure de taille micrométrique.

Dans ce manuscrit, j'admettrai donc la valeur de -4,5 GPa pour l'état initial de contrainte hydrostatique de la couche de nitrure.

1. Il est à noter qu'entre la contrainte hydrostatique équivalente et la contrainte bi-axiale, on a bien un facteur constant d'environ 1,42 comme le rapporte M. De Kersauson (p.76 [59])

2.1.3 Estimation de la déformation des micro-disques contraints

Je rappelle ici quelques notions théoriques de la spectroscopie Raman. Ensuite je me focalise sur la modélisation de la contrainte dans les microdisques en fonction des résultats expérimentaux fournis par l'étude en spectroscopie Raman.

Spectroscopie Raman

La spectroscopie micro-Raman est une caractérisation optique non destructive qui permet de sonder les liaisons entre atomes. Il s'agit d'une diffusion inélastique faisant intervenir un phonon. Un champ électrique incident $\vec{E}_i = \vec{E}_0 \cos(\omega t - \vec{k}_i \cdot \vec{r})$ vient déformer le nuage électronique de la liaison et crée une polarisation induite :

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E}_i \quad (2.1)$$

La susceptibilité électronique χ est la tendance du nuage électronique à se déformer sous l'effet d'un champ électrique. Chaque vibration atomique peut donc modifier la valeur de χ . On peut noter le déplacement atomique dû à une vibration j par $\vec{u}_j = \vec{u}_0^{ij} \cos(\Omega_j t - \vec{q}_j \cdot \vec{r})$.

En négligeant les processus à plus de un phonon², χ_j soumis à un déplacement u_j peut s'exprimer par rapport à sa position d'équilibre χ_0 sous la forme suivante :

$$\chi_j = \chi_0 + \left(\frac{\partial \chi}{\partial u_j} \right)_0 u_j \quad (2.2)$$

En remplaçant dans l'expression de la polarisation, deux types de diffusion (figure 2.4 (a)) sont alors possibles par le système électronique, devenu point source secondaire :

$$\vec{P} = \underbrace{\epsilon_0 \chi_0 \vec{E}_0 \cos(\omega t - \vec{k}_i \cdot \vec{r})}_{\text{diffusion Rayleigh}} + \underbrace{\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \chi}{\partial u_j} \right)_0 u_0^{ij} \vec{E}_0 \left[\cos((\omega_i + \Omega)t - (\vec{k}_i + \vec{q}) \cdot \vec{r}) + \cos((\omega_i - \Omega)t - (\vec{k}_i - \vec{q}) \cdot \vec{r}) \right]}_{\text{diffusion Raman}} \quad (2.3)$$

La diffusion Rayleigh a lieu à la même énergie et au même vecteur d'onde que le champ excitateur incident. Inutile, elle est filtrée expérimentalement. La diffusion Raman, phénomène de

2. Les processus d'ordre supérieur ont une probabilité plus faible de se produire et donc peu visible expérimentalement surtout pour le GeSn où le niveau de signal du mode Ge-Ge est déjà faible en comparaison au Ge. Dans le cas contraire, il faudrait développer en série de Taylor χ .

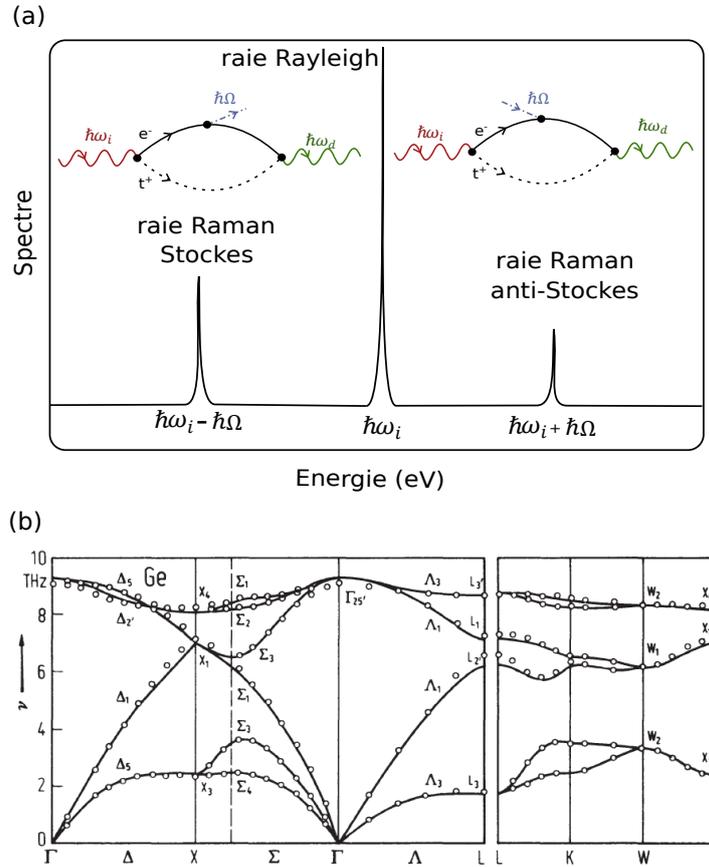


FIGURE 2.4 – (a) Spectre présentant les diffusions Rayleigh et Raman (Stockes et anti-Stockes). Des diagrammes de Feynman y sont également dessinés. (b) Diagramme de dispersion des phonons dans le germanium. Pour un vecteur d'onde du phonon $q = 0$, on obtient une fréquence d'émission à 9,02 THz [61].

second ordre, interagit avec les vibrations du cristal en respectant les lois de conservations en énergie et vecteur d'onde suivantes :

$$\begin{cases} \hbar\omega_d = \hbar\omega_i \pm \hbar\Omega & \text{Conservation de l'énergie} \\ \vec{k}_d = \vec{k}_i \pm \vec{q} & \text{Conservation du vecteur d'onde} \end{cases} \quad (2.4)$$

Afin de s'affranchir de la longueur d'onde du laser excitateur, il est utile de définir le décalage raman par rapport à la longueur d'onde du champ excitateur $\delta(cm^{-1}) = (\frac{1}{\lambda_l(nm)} - \frac{1}{\lambda_r(nm)}) \cdot 10^7$ avec λ_l, λ_r les longueurs d'onde respectives du laser et de la raie spectrale de diffusion raman.

De plus, un calcul d'ordre de grandeur dans le visible, gamme de la longueur d'excitation laser incidente, montre que le vecteur d'onde du photon ($|k| = \frac{2\pi}{\lambda}$) est considérablement plus petit que la gamme typique couverte par le vecteur d'onde du phonon ($|q| = \frac{\pi}{a}$). Donc dans le cadre de processus à un phonon, le vecteur d'onde du phonon est nul : $q = 0$. Autrement dit, les phonons mis en jeu sont ceux situés en Γ . Pour le GeSn, on s'intéresse au mode de phonon optique relatif

à la liaison $Ge - Ge$, triplement dégénéré. Il se trouve à $301,8 \text{ cm}^{-1}$ à l'état relaxé dans le cas du Ge pur, d'après le diagramme de dispersion figure 2.4 (b).

De plus, les intensités respectives de ces modes Raman dépendent de règles de sélection suivant les vecteurs de polarisation des champs incident \vec{e}_i et retrodiffusé \vec{e}_d et la pulsation propre du phonon ω_d :

$$I \propto \omega_d \|\vec{e}_d\| \underbrace{\left(\frac{\partial \chi}{\partial u_j} \right)_0}_{\text{R}} u_0^{ij} \|\vec{e}_i\|^2 \quad (2.5)$$

R est le tenseur raman et son expression dépend des classes de symétries du cristal. Loudon (1964) [62] les a répertoriés dans le cas du Si, Ge, $\alpha - Sn$ dans le système de coordonnées du cristal à l'état relaxé :

$$R_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \\ 0 & d & 0 \end{pmatrix} \quad R_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad R_z = \begin{pmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

avec d un réel non nul.

Dans notre cas, il y a une brisure de symétrie à cause de l'ajout d'atomes d'étain et l'application d'une déformation. Cependant, les composantes non nulles des trois tenseurs restent identiques, ce qui ne change pas les règles de sélection Raman. Ce détail est discuté dans l'annexe B. La configuration expérimentale adoptée ici est la rétro-diffusion selon la normale (001). Le calcul de l'équation 2.5 indique que seule l'intensité issue du tenseur R_z (LO ou $F_{2g}(z)$) est non nulle. Ce mode LO est donc le seul visible expérimentalement dans notre cas.

De plus, l'incorporation d'étain et l'état de contrainte du matériau vont modifier la configuration géométrique de la liaison Ge-Ge et donc décaler en fréquence la raie de diffusion Raman associé. Un modèle assimilant les liaisons entre atomes à des ressorts a été introduit par Ceidera et al. (1968) [63]. Lorsqu'un cristal est soumis à une déformation ϵ , l'équation fondamentale de la dynamique s'écrit :

$$m \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -K_{ii}^0 u_i + \sum_{klm} \frac{\partial K_{ik}}{\partial \epsilon_{lm}} \epsilon_{lm} u_k \quad (2.7)$$

En appliquant une transformée de Laplace et en définissant les potentiels de déformation p, q, et r en fonction des termes $\frac{\partial K_{ik}}{\partial \epsilon_{lm}}$, on aboutit au déterminant séculaire suivant en posant $\lambda = \omega^2 - \omega_0^2$:

$$\begin{vmatrix} p\epsilon_{xx} + q(\epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) - \lambda_i & 2r\epsilon_{xy} & 2r\epsilon_{xz} \\ 2r\epsilon_{xy} & p\epsilon_{yy} + q(\epsilon_{xx} + \epsilon_{zz}) - \lambda_i & 2r\epsilon_{yz} \\ 2r\epsilon_{xz} & 2r\epsilon_{yz} & p\epsilon_{zz} + q(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) - \lambda_i \end{vmatrix} \quad (2.8)$$

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTE BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

En l'absence de cisaillement, les termes non diagonaux sont nuls. Dans ce cas simplifié, le décalage s'exprime :

$$\begin{cases} \Delta\omega_1 = \omega_1 - \omega_0 \approx \frac{\lambda_1}{2\omega_0} = \frac{1}{2\omega_0} [p\epsilon_{xx} + q(\epsilon_{yy} + \epsilon_{zz})] & [100] \text{ TO} \\ \Delta\omega_2 = \omega_2 - \omega_0 \approx \frac{\lambda_2}{2\omega_0} = \frac{1}{2\omega_0} [p\epsilon_{yy} + q(\epsilon_{xx} + \epsilon_{zz})] & [010] \text{ TO} \\ \Delta\omega_3 = \omega_3 - \omega_0 \approx \frac{\lambda_3}{2\omega_0} = \frac{1}{2\omega_0} [p\epsilon_{zz} + q(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})] & [001] \text{ LO} \end{cases} \quad (2.9)$$

Dans le cas d'une rétro-diffusion (001), il n'y a donc que le décalage raman $\Delta\omega_3$ visible. L'équipement que j'utilise est un système confoncal Raman in-ViaTM équipé d'un laser à 532 nm. Ce dernier est focalisé sur l'échantillon à l'aide d'un objectif x100 et d'ouverture numérique 0,85, donnant une taille de spot de 0,7 μm sur l'échantillon³. Comme le décalage raman est sensible à l'échauffement du matériau, les spectres raman sont réalisés à une puissance 0,05 mW de façon à éviter tout décalage provenant d'un chauffage par le laser (voir l'annexe C).

Application à la déformation bi-axiale

Malheureusement, les constantes p, q, r du GeSn restent pour l'instant inconnues pour ces concentrations d'étain à la différence du cas Ge pur [64]. Toutefois, Gassenq et al. [65] ont déterminé en couplant des mesures Raman à des mesures de diffraction X, une loi empirique reliant le décalage Raman à la déformation bi-axiale $\epsilon_{||}$ dans le plan et à la concentration en étain selon l'équation suivante :

$$\Delta\omega = \omega_{GeSn} - \omega_{Ge} = -88x_{Sn} - 521\epsilon_{||} \quad (2.10)$$

Cette dépendance en étain du décalage Raman a été confirmée ultérieurement et est sensiblement la même ($\Delta\omega = \omega_{GeSn} - \omega_{Ge} = -78x_{Sn}$ [51]) pour des couches de GeSn relaxées et déposées directement silicium avec des concentrations en étain plus élevées allant jusqu'à 27 % . D'autres études en spectroscopie Raman mènent également à des dépendances similaires du décalage Raman en fonction de la concentration en étain et la déformation bi-axiale dans le cas de GeSn sur InGaAs [66] ou bien dans le cas plus général du ternaire SiGeSn [67].

État de déformation en surface

Sur les quatre types d'échantillon, j'ai pu réaliser une coupe transverse en spectroscopie Raman sur un micro-disque de 10,4 % de Sn, de diamètre 15 μm .

Pour tous les échantillons, une inhomogénéité de déformation entre le centre du disque et son extrémité de façon symétrique de part et d'autre du centre est visible, particulièrement pour les échantillons 1 et 3. Cette différence pouvant aller jusqu'à 1 %, est due au pied central qui tend à

3. La formule est donnée par la loi d'Abbe $\phi = 1,22 \frac{\lambda}{ON}$.

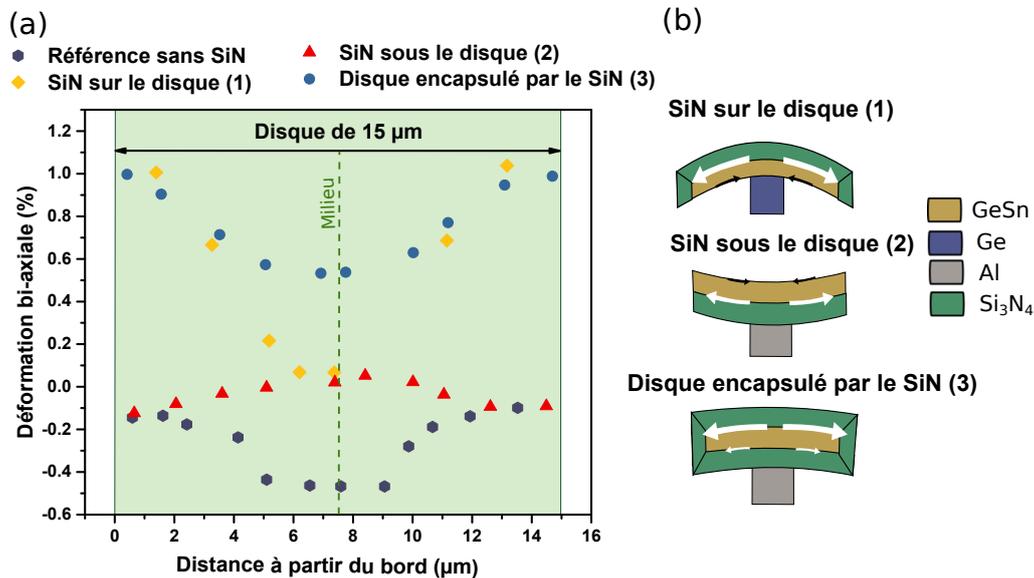


FIGURE 2.5 – (a) Coupe expérimentale en spectroscopie Raman d'un disque de 10,4 % de 15 μm sans et avec couche tenseur de Si₃N₄. (b) Schémas représentant les différents états de déformation.

retenir la matière.

Dans le cas des échantillons avec un dépôt d'une couche Si₃N₄ en compression, cette dernière tend à s'étirer, entraînant la couche de GeSn sur la périphérie du disque, l'incurvant vers le bas dans le cas de l'échantillon 1 et 3.

En revanche, lors du report, le disque se retrouve incurvé vers le haut comme en témoigne l'échantillon 2 et donc le matériau se retrouve en compression bi-axiale en surface. Pour cet échantillon, la différence de déformation entre le centre et le pourtour du disque est moindre. Deux explications sont alors possibles pour cet échantillon 2 sachant qu'en Raman l'épaisseur de matière sondée avec un laser à 532 nm n'est que de quelques dizaines de nanomètres :

1. L'action du stresser de Si₃N₄ pourrait déformer expérimentalement selon un gradient décroissant lorsqu'on s'éloigne de l'interface GeSn/ Si₃N₄ selon l'axe (001). En surface, la déformation serait donc très légère.
2. Lorsqu'il y a transfert par collage, l'ensemble {Si₃N₄ ; GeSn } relaxe partiellement, si bien que la valeur de contrainte appliquée par la couche tenseur de Si₃N₄ est fortement réduite. Cette relaxation peut s'expliquer par la présence du pied en aluminium qui offre à l'ensemble {Si₃N₄ ; GeSn } un degré de liberté en mouvement supplémentaire dans le plan.

Afin de conforter ces observations, j'ai comparé ces résultats expérimentaux à des simulations Comsol dans les cas de l'échantillon sans nitrure et avec nitrure au dessus du disque. Les deux autres cas sont plus complexes à traiter à cause de l'étape de collage, susceptible de provoquer

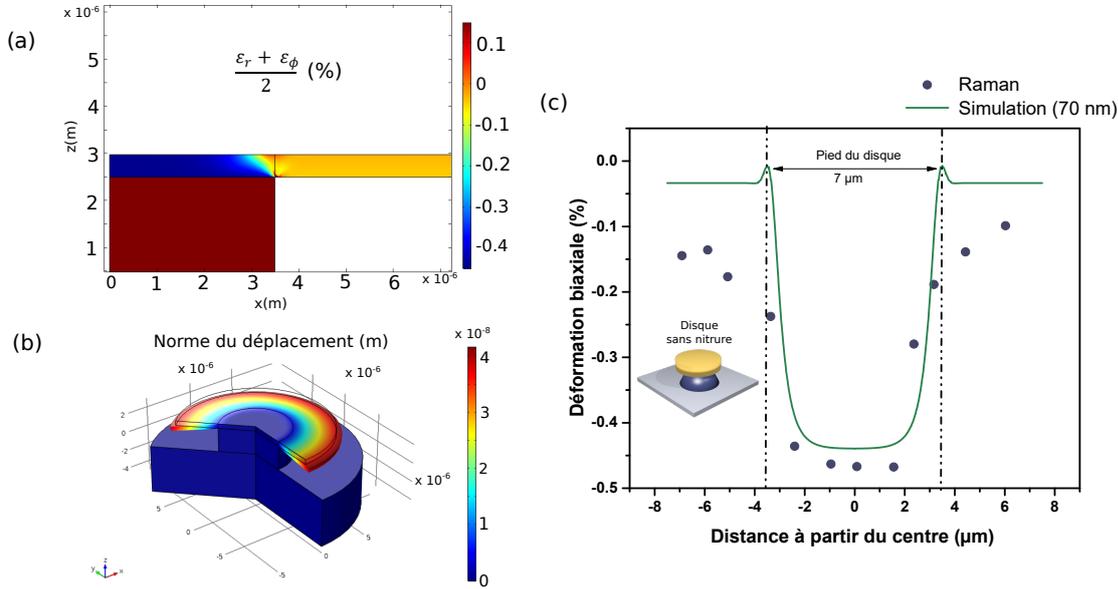


FIGURE 2.6 – (a) Profil de la déformation moyenne (b) Norme du déplacement associé avec un coefficient d'amplification de la déformée de 20 (c) Profil de la déformation par spectroscopie Raman (point) et par simulation à 70 nm de profondeur pour un disque de diamètre 15 μm sans couche tenseur.

des effets de relaxation des couches.

Les paramètres de simulations sont présentés en annexe D. La géométrie du problème avec un axe de rotation centrale suggère d'utiliser un repère cylindrique 2D. Afin d'estimer la sous gravure, je me base sur le diamètre critique pour lequel on commence à observer un effondrement du disque lorsque l'on grave une matrice de disques de différents diamètres. Les coupes radiales à partir desquelles nous avons extrait les champs de déformation ont toutes été prises à 70 nm de profondeur à partir de la surface de l'échantillon (la profondeur de pénétration en Raman étant surfacique).

Les résultats pour le disque de référence sans nitrure sont montrés figure 2.6. La sous-gravure du Ge ici est de 4 μm . En périphérie du micro-disque, elle permet une relaxation partielle de -0,11 % d'après l'expérience contre -0,05% prévue par la simulation. Au centre, d'après les mesures Raman, le pied du disque maintient l'état de compression à -0,46 % valeur très proche de celle déterminée par RSM valant -0,44 %, valeur entrée comme déformation initiale dans la simulation.

Les simulations prévoient également que le disque s'incurve légèrement vers le bas.

Pour l'échantillon avec une couche de SiN sur le dessus, le disque est également incurvé vers le bas mais la norme du déplacement indiquée figure 2.7 (a) est de l'ordre de la centaine de nanomètres contre une dizaine de nanomètre dans le cas précédent. La sous-gravure est de 3,25 μm pour cet échantillon.

Le profil de déformation d'un disque de 15 μm simulé dans le cas d'une couche de GeSn initialement contraint à -0,44 % est représenté figure 2.7 (d). Le profil expérimental semble être décalé par rapport à cette modélisation. L'origine de cet écart peut provenir de plusieurs facteurs :

- il peut se produire un processus de relaxation de la couche de GeSn induit lors du dépôt de nitrure. En effet, au centre du disque, la valeur de la déformation de la couche de GeSn n'est plus celle initialement mesurée par RSM en pleine plaque. J'ai donc aussi simulé le cas où la couche de GeSn est initialement totalement relaxée, même au niveau du pied (voir en rouge figure 2.7(e)). Dans ce cas la simulation modélise beaucoup mieux la déformation bi-axiale déterminée par spectroscopie Raman. Il est possible que la température de dépôt de Si_3N_4 (au voisinage de 300 °C) soit assez proche de la température de croissance du GeSn et donc à l'origine de cette relaxation, si elle a vraiment lieu physiquement.
- La composante de cisaillement ϵ_{rz} n'est pas nulle. La déformation n'est donc pas purement bi-axiale. Dans ce cas, la loi empirique 2.10 n'est plus valable. Il faut revenir au tenseur complet de déformation et résoudre le déterminant séculaire 2.8.

Des vues de profil des disques de 8 μm et 15 μm sont également représentées. Lorsque le pied du disque est petit, la déformation selon l'axe radial semble homogène, néanmoins elle reste inhomogène selon l'axe z . Concernant le disque de plus grand diamètre, l'état de déformation au centre reste en très forte compression, soit une contrainte dans le plan de -2,73 GPa pour la couche tenseur et une déformation de -0,38 % pour la couche de GeSn (figure 2.7 (b)). A la périphérie du disque, l'état en tension du GeSn atteint 0,7 % témoignant d'une forte inhomogénéité radiale, visible sur le profil figure 2.7 (d).

Bien qu'il s'agisse d'une méthode de caractérisation optique nous renseignant sur l'état de déformation uniquement en surface, la spectroscopie Raman a permis de mettre en évidence un gradient radial de déformation entre le centre et l'extrémité du disque lorsque ce dernier est déformé par une couche de nitrure sur le dessus et dans le même temps, de conforter les valeurs issues des simulations comsol dans le cas d'un disque sans nitrure ou avec une couche de nitrure sur le dessus. En ce qui concerne les disques reportés sur pied d'aluminium (couche de nitrure en dessous ou encapsulant entièrement le GeSn), la simulation se complique à cause de processus de relaxation entre les couches difficiles à évaluer expérimentalement.

L'étude de la photoluminescence dans la section suivante va nous permettre de compléter ces mesures de déformation en sondant toute la couche de GeSn.

2.1.4 Photoluminescence et effet laser observé

Dans cette sous-section, je présente le banc expérimental de caractérisation optique de photoluminescence, les courbes de gain et l'estimation en énergie de la transition directe à basse température. Enfin, je compare l'estimation de la déformation faite précédemment à la photoluminescence et l'effet laser.

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTE BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

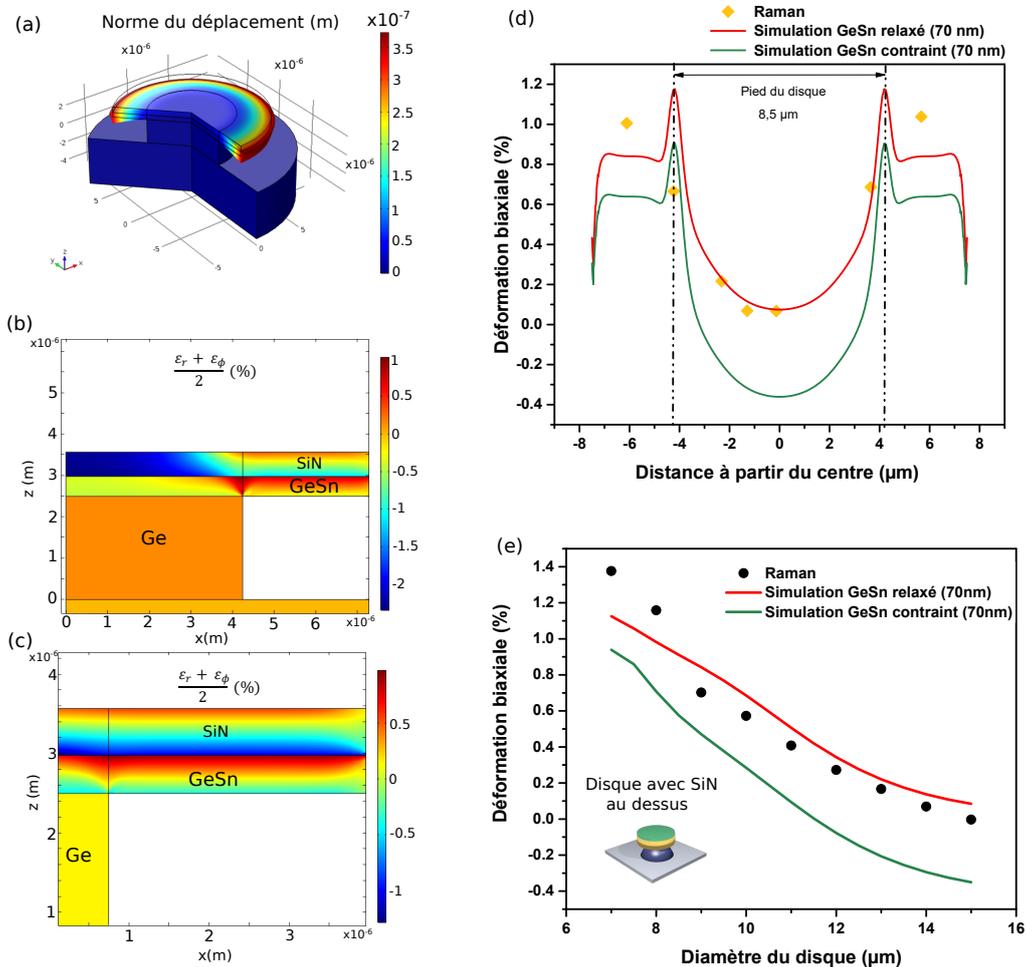


FIGURE 2.7 – Disque de 480 nm d'épaisseur avec 590 nm de nitrure sur le dessus. (a) Norme du déplacement avec un coefficient d'amplification de la déformée de 2 pour un disque de 15 μm . Vue transversale de la déformation moyenne pour un disque de (b) 15 μm et (c) 8 μm de diamètre dans le cas de GeSn contraint. Le pied a un diamètre de 7,5 μm .(d) Profil de la déformation par spectroscopie Raman (point) et par simulation à 70 nm de profondeur pour du GeSn contraint et du GeSn relaxé pour un disque de diamètre 15 μm . (e) Évolution de la déformation au centre du disque en fonction du diamètre.

Banc de photoluminescence

Afin d'observer expérimentalement les recombinaisons électrons-trous radiatives issues des transitions inter-bandes directes dans le germanium en tension, un banc de photoluminescence a été mis en place initialement par Kévin Guillo, Nicolas Pauc et Vincent Calvo. Ce banc repose sur la spectroscopie par transformée de Fourier, avantageuse en terme de rapport signal sur bruit dans la gamme moyen-infrarouge. Deux lasers sont à disposition un laser YAG (Grenat d'Yttrium

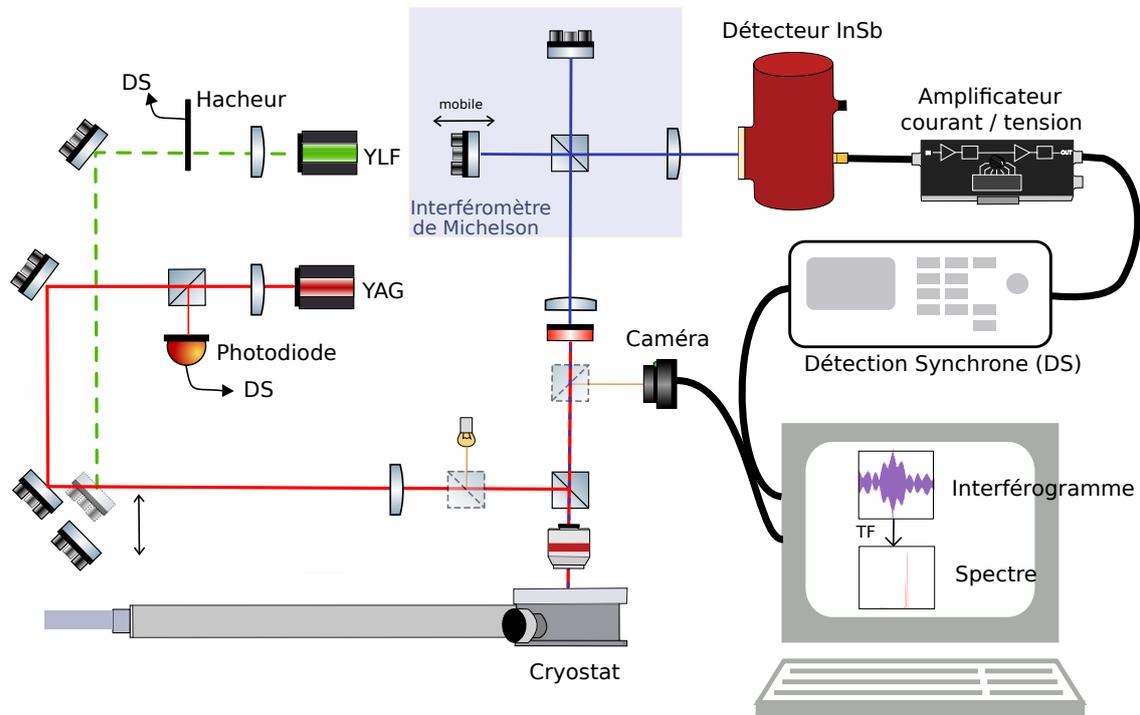


FIGURE 2.8 – Schéma représentant le banc optique de photoluminescence.

et d'Aluminium) à 1064 nm impulsionnel à 50 kHz, avec une durée de pulse de 0,6 ns et un laser YLF (Fluore d'Yttrium et de Lithium) à 1047 nm. Après avoir traversé un jeu de lentilles, le faisceau laser est ensuite focalisé sur l'échantillon via un objectif Cassegrain x 13,8. L'échantillon est refroidi via un cryostat muni d'une fenêtre en ZnSe. Le signal émis est ensuite collecté par rétro-diffusion et envoyé vers un interféromètre Michelson pas à pas. Ce dernier, composé de deux miroirs dont un mobile et d'une séparatrice, permet de faire interférer le signal avec lui-même. Afin d'enregistrer l'interférogramme, l'intensité du signal interféré est ensuite mesurée pour différentes différences de marche sur un détecteur InSb refroidi, sensible sur l'intervalle $[2 \mu\text{m}, 5,5 \mu\text{m}]$. Le courant est amplifié à l'aide d'un amplificateur courant-tension jusqu'à une détection synchrone. Le spectre final est ensuite obtenu par transformée de Fourier de l'interférogramme.

Estimation du gap et courbes de gain

Afin de pouvoir confronter les états de déformation des micro-disques évalués dans la section précédente à leur longueur d'onde d'émission sous pompage optique, il est nécessaire de connaître la dépendance des transitions énergétiques en fonction de la déformation bi-axiale appliquée dans le cas de micro-disque de GeSn 10,4 %. L'évolution énergétique des transitions électroniques en fonction de la déformation présentée au chapitre 1 est valable pour une température de 300K. Or, en raison des vibrations du réseau atomique et des interactions phonon -

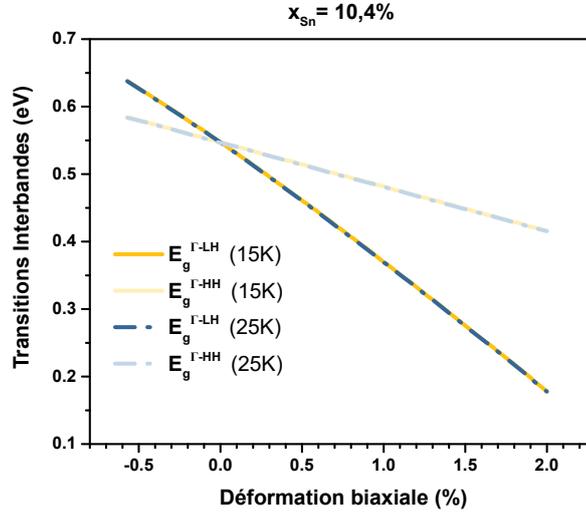


FIGURE 2.9 – Évolution des bords de bandes de transitions directes à 15K et 25K.

porteur libre, le gap diminue quand la température augmente, ce qui est donné au travers de la loi de Varshni [68] :

$$E_g^{GeSn}(T) = E_g^0 - \frac{\alpha_{GeSn}T^2}{\beta_{GeSn} + T} \quad (2.11)$$

Comme les coefficients de Varshni α_{GeSn} et β_{GeSn} en L ne sont pas connus pour Sn, je me limite au calcul du gap direct en utilisant une loi de Vegard en Ge et Sn [69]. Le gap énergétique à 300 K a été déterminé dans la section 1.2.3, la formule (2.11) peut se ré-écrire de la manière suivante :

$$E_g^{GeSn}(T) = E_g^{GeSn}(300K) - \frac{\alpha_{GeSn}T^2}{\beta_{GeSn} + T} + \frac{300^2\alpha_{GeSn}}{\beta_{GeSn} + 300} \quad (2.12)$$

L'évolution de ces transitions représentée figure 2.9 pour des températures de 15 K et de 25 K montre que la variation du gap entre ces transitions due à la loi de Varshni est négligeable entre ces deux températures. Ces deux températures correspondent aux températures pour lesquelles la majorité des spectres en photoluminescence a été réalisée.

Les caractéristiques laser (seuil et température de fonctionnement) dépendent du gain du matériau. Il convient donc de connaître l'évolution du gain théorique en fonction de la déformation. La figure 2.10 représente l'évolution du maximum de gain matériau du GeSn avec 10,4 % d'étain en fonction de la température pour différents états de déformation et d'injections de porteurs, calculée dans le cadre de la théorie des potentiels empiriques et présentée en partie 1.3.1 sans la contribution de l'absorption par porteurs libres⁴. Il est d'abord important de noter que pour une injection donnée, le gain augmente en général, pour les déformations croissantes. Ceci permet d'obtenir un gain de 6770 cm^{-1} à température ambiante pour une déformation bi-axiale de 2 % pour 10,4 % d'étain alors que pour l'état relaxé le gain s'annule pour une température d'environ 220 K. Bien sûr, d'après la partie précédente nous atteignons une déformation de l'ordre de 1 %

4. Cette absorption sera abordée plus tard.

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTE BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

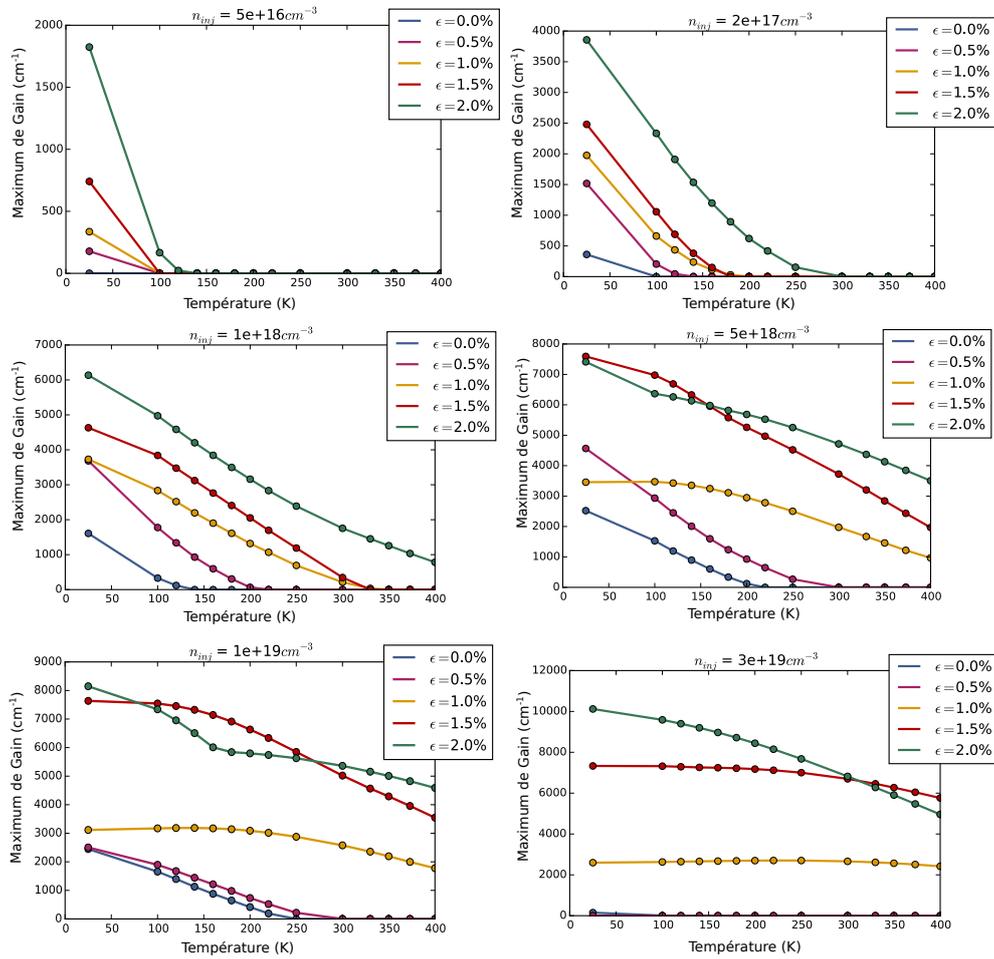


FIGURE 2.10 – Évolution du maximum de la courbe de gain en fonction de la température pour différents états de déformation bi-axiale (de 0 à 2 %) et d'injection de porteurs (de $5.10^{16} cm^{-3}$ à $3.10^{19} cm^{-3}$) pour une concentration de 10,4 % .

pour les micro-disques dans le cas le plus favorable. Cette valeur de déformation en tension nous laisserait espérer que l'effet laser soit visible au delà de 300 K avec un gain matériau à $3000 cm^{-1}$ pour une injection de porteurs de $10^{19} cm^{-3}$. Cela représenterait donc pour cette structure déformée à 2 % un gain température d'au moins 100 K par rapport à l'homologue relaxé.

On peut également espérer une réduction du seuil grâce à la déformation bi-axiale qui a tendance augmenter le gain pour des faibles niveau d'injection de porteurs.

Par ailleurs, il est important de noter que :

1. La zone de gain s'élargit en énergie lorsque le matériau est de plus en plus déformé. La déformation vient modifier la courbure de bande au voisinage de Γ . La masse effective avec la déformation diminue contribuant à un étalement des états disponibles sur une plus grande plage d'énergie.

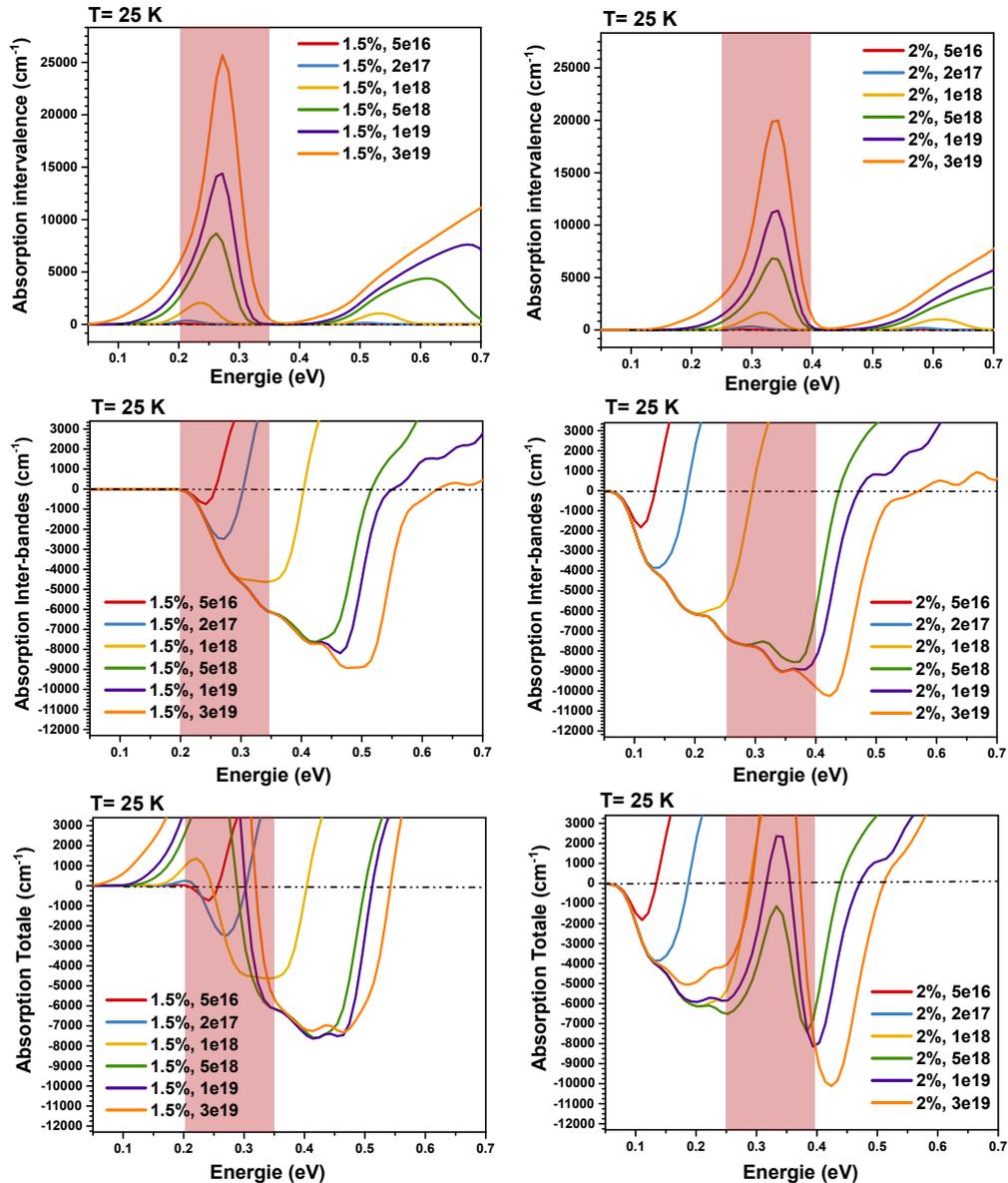


FIGURE 2.11 – Mise en évidence de l'influence de l'absorption entre bandes de valence LH et HH sur le gain net pour du GeSn 10,4 %. La zone rouge montre la gamme en énergie où l'absorption est particulièrement importante.

- La déformation entraîne une levée de dégénérescence des bandes de valence en Γ et va rendre possible des absorptions parasites entre bandes de valence appelé absorption intervalences (IVBA). Plus la déformation est importante, plus l'écart en énergie entre ces bandes de valence l'est également. Autrement dit, une absorption IVBA a lieu de plus en plus haut en énergie lorsque la déformation augmente. C'est typiquement ce que l'on observe lorsque l'on compare les cas d'une déformation de 1,5 % et 2 % (figure 2.11). Les maxi-

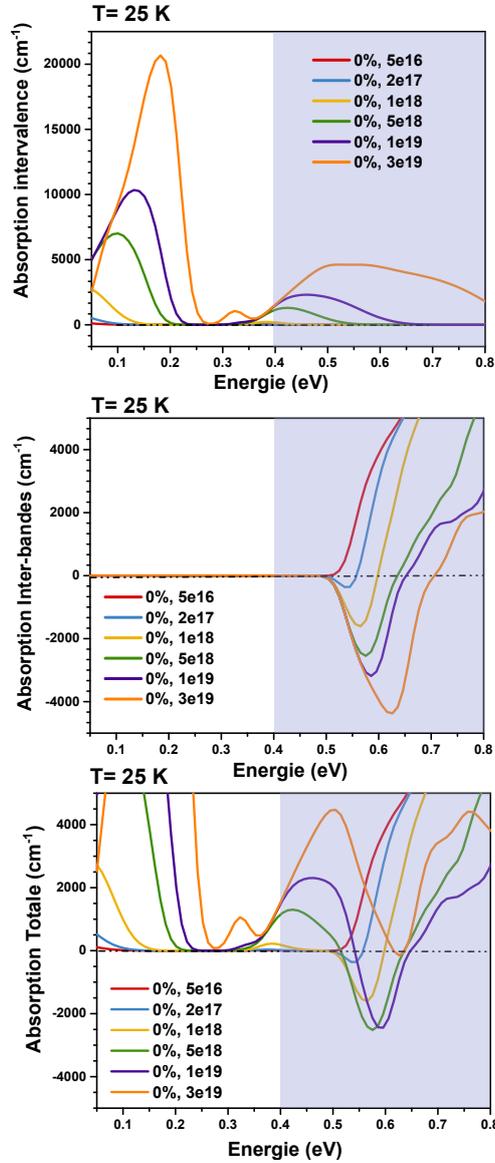


FIGURE 2.12 – Mise en évidence de l'influence de l'absorption entre bandes de valence (LH,HH) et SO sur le gain net pour du GeSn 10,4 %. La zone bleue indique la zone où cette absorption est efficace.

mums de l'absorption IVBA se situent respectivement à 0,2721 eV et 0,3431 eV pour un injection de $3.10^{16} \text{ cm}^{-3}$. De plus, cette absorption peut venir tuer le gain sur une certaine plage d'énergie. Dans le cas de fortes déformations bi-axiales égales à 2 %, la zone de gain se trouve diminuée en intensité sur une plage d'énergie (voir l'apparition d'un creux 2.11 pour $\epsilon_{bi} = 2\%$) si bien que pour une injection de $5.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ à 25 K le maximum de gain devient plus important pour un matériau déformé à 1,5 %.

3. à fort pompage le gain disparaît dans les cas de $\epsilon = 0\%$ et $\epsilon = 0,5\%$ et ce même à basse température. Ceci est attribué à l'absorption entre bandes de valences (LH,HH) et SO, se situant à haute énergie comme l'indique la figure 2.12.

Résultats expérimentaux de photoluminescence

Les spectres de photoluminescence du GeSn 10,4 % pleine couche avec et sans nitrure figure 2.13 (a) sont réalisés sous pompage continu à 1047 nm avec un spot de 12,5 μm . Le cas d'un disque de 15 μm est également représenté. Les pleines couches avec et sans nitrure, où le GeSn 10,4% n'est pas sous-gravé et donc contraint à -0,44 % d'après les données RSM énoncées 1.1.3, émettent à la même énergie. Le maximum d'émission est à 0,549 eV. Ceci montre que pour ces deux configurations, l'état de déformation est similaire et que c'est bien la sous-gravure qui va déclencher le transfert de la contrainte de la couche de SiN vers la couche de GeSn. L'émission de la couche avec SiN est beaucoup plus importante par rapport à la couche sans SiN alors que le pompage est moindre. Ceci peut provenir d'une passivation de la surface de GeSn ou un effet d'interférences induit par la couche de SiN exaltant le niveau du signal reçu. Toutefois, le modèle $\vec{k}\cdot\vec{p}$ prévoit un gap plus grand à 0,576 eV pour du GeSn 10.4% contraint à 0,44% .

Pour un disque sans nitrure de 15 μm , malgré le peu de signal, le pic à 0,534 eV est décalé par rapport à la pleine couche de 42 meV, témoignant de la relaxation due à la sous-gravure. Cependant, le modèle $\vec{k}\cdot\vec{p}$ surestime là encore la position du gap de 0,01 eV par rapport au maximum de photoluminescence.

De plus, on aurait pu s'attendre à observer un double pic puisque d'après la spectroscopie Raman, il y a deux états de déformations résiduelles selon le diamètre du disque et que le faisceau pompe les deux zones : le centre contraint et la périphérie relaxée. On peut supposer que cela provient d'une grande longueur de diffusion des porteurs, permettant aux porteurs générés au centre du disque dans des zones à plus grand gap de diffuser vers les zones périphériques à plus petit gap, ou encore que l'état en compression a une directivité moindre et donc émet très peu de photons.

La figure 2.13 (b) montre des spectres pour différents diamètres de disques avec une couche tenseur de SiN sur le dessus pour du GeSn 10,4 %. L'ensemble des spectres présente un décalage important par rapport à l'empilement initial recouvert de SiN non sous-gravé, attestant d'une mise en tension très nette du nitrure sur la couche de GeSn. On observe cependant un décalage de seulement 36 meV entre les disques 7 et 15 μm de diamètre (figure 2.13 (d)) alors que ce décalage est de 219 meV entre la couche non libérée et le disque de 15 μm contraint. L'évolution de la position du maximum d'émission en photoluminescence en fonction du rayon du disque est nettement différente avec celle des gaps estimés à partir de la déformation au centre (Raman et Simulation). Cette différence est d'autant plus marquée que le diamètre du disque est important. La valeur des gaps déterminés à partir de la spectroscopie Raman varie de 0,55 eV à 0,30 eV lorsque le diamètre passe de 15 μm à 7 μm . Ceci peut s'expliquer par le gradient de déformation radiale dans le disque (figure 2.13 (c)). Ceci montre que le signal de Photoluminescence provient

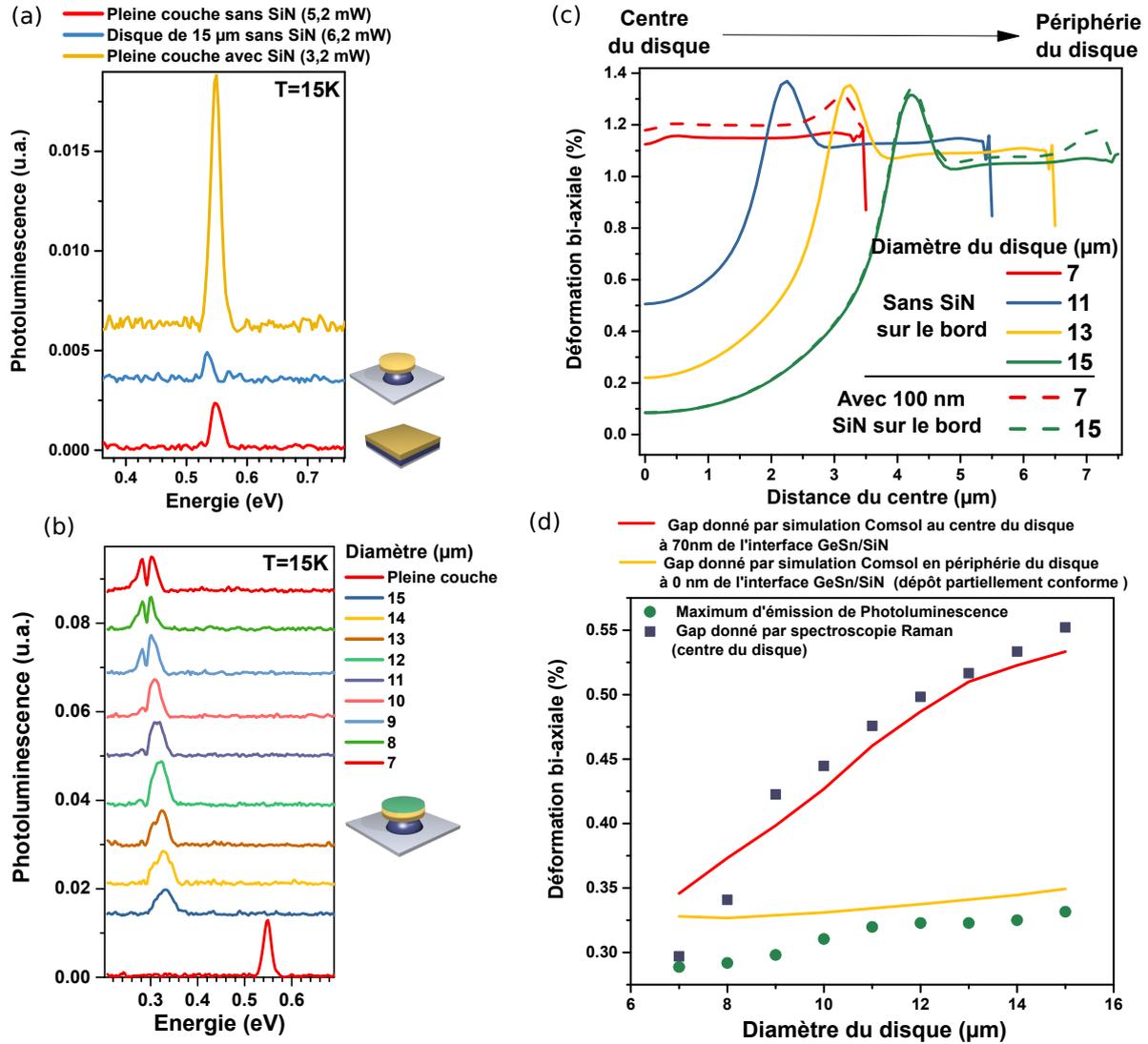


FIGURE 2.13 – (a) Spectres références de photoluminescence pour du GeSn 10,4 % sous pompage continu à 15 K dans le cas de pleines couches et dans le cas d'un disque sans nitrure de 15 µm de diamètre. (b) Spectres sous pompage continu pour différents diamètres de disque recouvert de nitrure à 15K. (c) Profil de déformation pour différents diamètres dans le cas d'une contrainte hydrostatique de -4,5 GPa et d'une couche de GeSn relaxé. (d) Comparaison entre la position du maximum d'émission en photoluminescence et le gap estimé par la spectroscopie Raman et d'après la simulation dans le cas d'une contrainte hydrostatique de -4,5 GPa et d'une couche de GeSn relaxé. Il est à noter qu'à l'interface entre le GeSn et le SiN (0 nm), il s'agit de la partie la plus déformée de tout le disque donc le cas le plus favorable du décalage du gap vers les basses énergies.

bien des bords relaxés du disque uniquement.

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTE BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

Il est à noter que le dépôt de SiN est partiellement conforme. Une couche d'une centaine de nanomètres peut ainsi se déposer sur le bord du disque. Comme l'indiquent les résultats en pointillés sur la figure 2.13 (c), pour une couche de 100 nm, le disque de 7 μm est modérément plus déformé passant de 1,15 % à 1,21 % de déformation bi-axiale. Dans le cas du disque de 15 μm , le centre étant loin du bord du disque, son état de déformation reste inchangé quelle que soit la conformité du dépôt. En revanche on peut observer à proximité du bord un rebond de la valeur de la déformation en tension.

J'ai donc également déterminé le gap fondamental en prenant la valeur de la déformation en périphérie du disque avec un dépôt partiellement conforme, (valeur moyenne de la partie sous-gravée du disque à l'interface SiN/GeSn), soit le cas où la déformation est la plus élevée. Le gap estimé à partir de la valeur de la déformation en périphérie est beaucoup plus proche du maximum d'émission observé expérimentalement en photoluminescence que le gap déterminé par la déformation prise au centre. La déformation au centre d'après les simulations est très dépendante de la taille passant de 0,1 % à 1,1 % lorsque le diamètre décroît de 15 μm à 7 μm (figure 2.13 (c)), ce qui est moins le cas pour la périphérie du disque. C'est pourquoi on observe un décalage moins important de la raie de photoluminescence provenant des recombinaisons en bordure que le décalage du gap évalué en Raman au milieu du disque.

Toutefois, un léger écart subsiste entre la simulation en périphérie et le maximum de photoluminescence. L'origine de l'erreur entre la valeur expérimentale et la valeur simulée peut provenir de :

- la valeur empirique de contrainte hydrostatique équivalente pour la couche tenseur de nitrure de silicium de -4,5 GPa. Elle a été choisie initialement pour le germanium de façon à modéliser les résultats expérimentaux ;
- le manque de précision sur les valeurs des différents potentiels de déformation de Van de Walle ou encore la méconnaissance des coefficients α et β de la loi de Varshni pour le GeSn (dans le cas du disque de référence sans nitrure, il y a déjà un écart entre le gap théorique issu du modèle $\vec{k} \cdot \vec{p}$ et la photoluminescence observée) ;
- la précision du modèle $\vec{k} \cdot \vec{p}$ à 30 bandes à 300 K, donnant l'évolution énergétique des transitions directes en fonction de la concentration d'étain. L'interpolation quadratique du modèle donné par Song et al. [46] semble trop grossière.

L'effet laser n'a pas été obtenu pour ce type de configuration, pour n'importe quel diamètre de disque, que ce soit sous pompage impulsif ou continu.

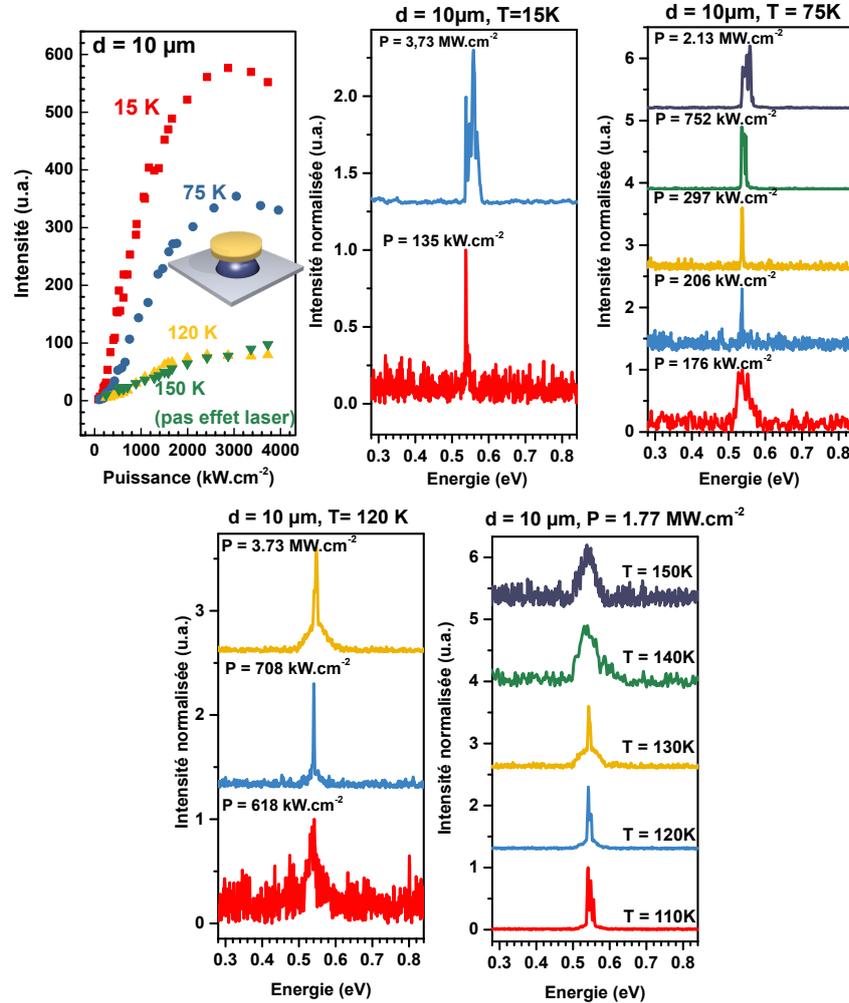


FIGURE 2.14 – Spectres et courbe d'intensité en fonction de la densité de puissance pour un disque de GeSn 10,4 % de 10 μm sans nitrure.

En revanche pour le disque de référence sans nitrure, l'effet laser est clairement observable à 0,538 eV (voir figure 2.14). Les seuils à 15 K et 75 K sont respectivement de 135 et 206 kW.cm^{-2} . La température limite de l'effet laser semble comprise entre 130 K et 140 K. Le manque d'homogénéité de la déformation du disque de GeSn 10,4 % imposé par la couche nitrure du dessus (voir figure 2.15 (a)) a donc provoqué la disparition de l'effet laser par rapport au disque de référence. D'après l'évolution énergétique des bords de bande, les porteurs sont essentiellement confinés en surface. En surface le gap est direct vaut 0,35 eV alors qu'en profondeur il devient indirect avec une valeur de 0,572 eV. Cela crée un confinement des porteurs trous et électrons photo-générés dans les 200 premiers nanomètres en surface du disque comme l'indique la figure 2.15, en faisant l'hypothèse que le système est à l'équilibre thermodynamique (temps de diffusion infini). Le profil du mode fondamental à 3,54 μm a également été représenté. On peut observer ainsi que le recouvrement entre le mode et la nappe de porteurs n'est pas optimal, diminuant le gain modal

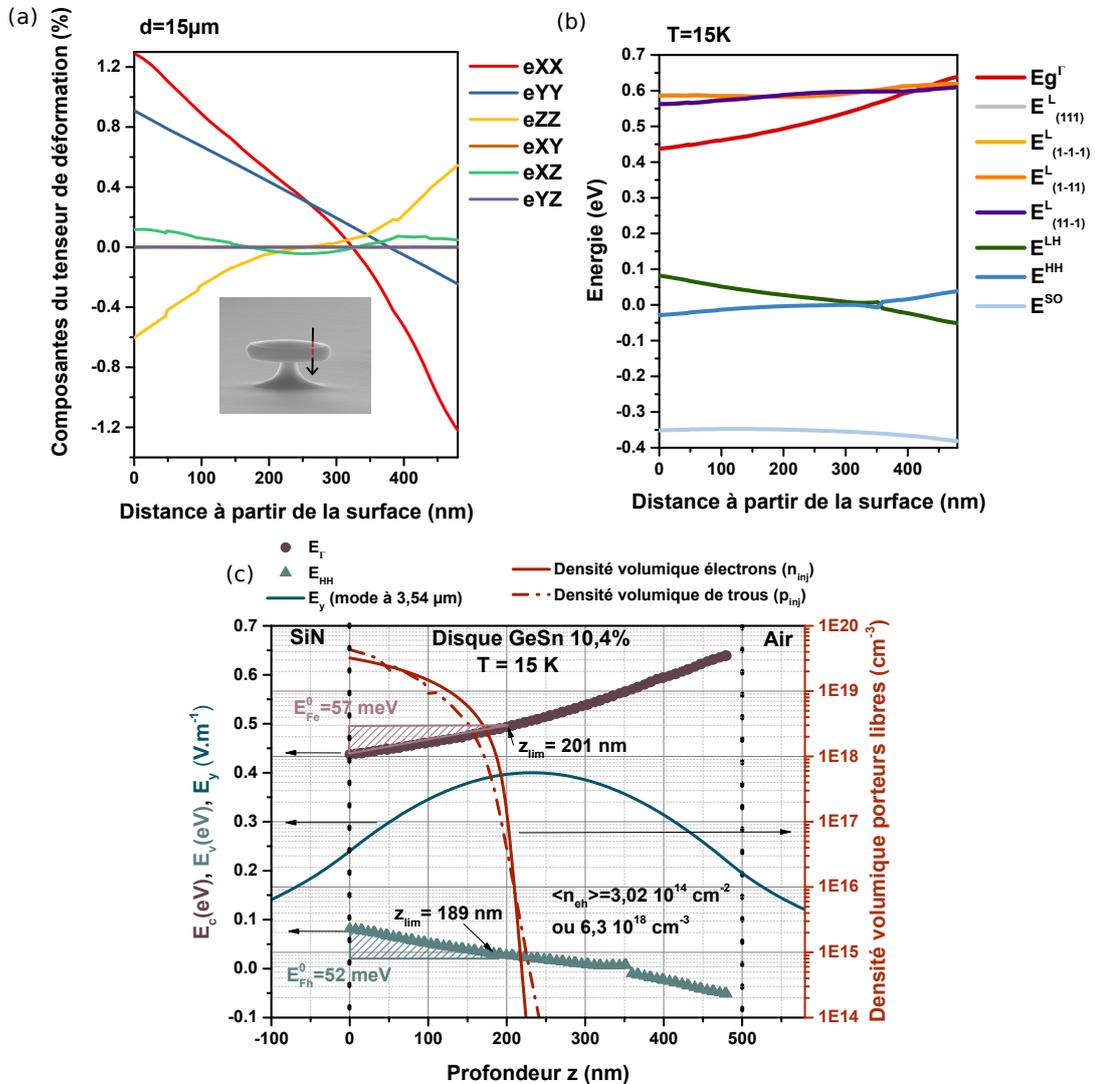


FIGURE 2.15 – (a) Évolution des composantes du tenseur de déformation à 200 nm du bord d'un disque de 15 μm recouvert de SiN selon l'axe z en partant de la surface de l'échantillon). La déformation résiduelle initiale du GeSn est nulle.(b) Évolution associée à la déformation des bords de bandes d'énergie selon l'axe z . (c) Répartition spatiale des porteurs photo-générés pour une puissance de $100\text{ kW}\cdot\text{cm}^{-2}$ à 15 K, selon z dans la couche de GeSn 10,4 % à cause de la courbure de bandes induite par la déformation de la couche tenseur de nitrure en surface.

en comparaison à celui qu'il serait pour une structure déformée symétriquement.

L'émission de photoluminescence pour un disque de GeSn de 10,4 % de 10 μm avec une couche tenseur de SiN par le dessous se trouve à 0,517 eV (figure 2.16). Celle-ci est donc décalée vers les hautes énergies de 206 meV par rapport à celle de son homologue avec nitrure sur le dessus, soutenant l'hypothèse d'un effet de relaxation de la couche tenseur lors du collage du métal par

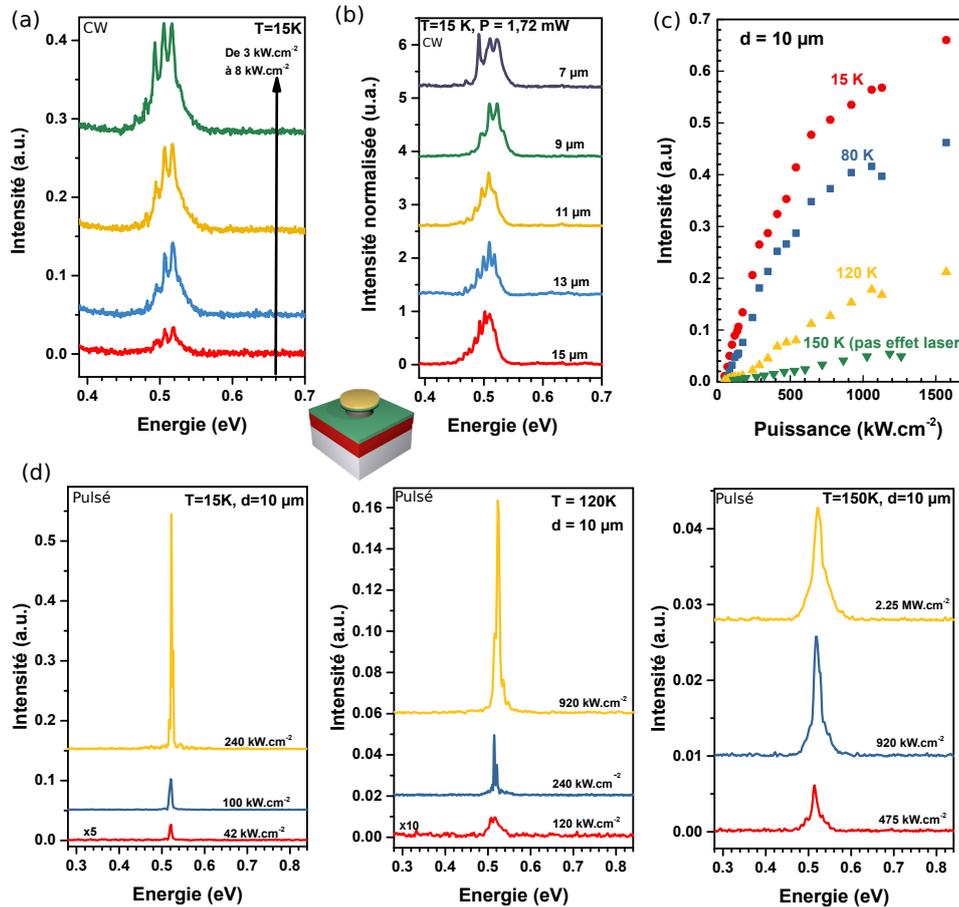


FIGURE 2.16 – (a) Spectres en pompage continu d'un disque de $10 \mu\text{m}$ avec une couche de SiN en dessous. (b) Photoluminescence en fonction du diamètre à 15 K. (c) Courbes d'intensité en fonction de la puissance laser incidente dont les spectres associés à 15 K, 120 K, 150 K sont présentés en (d).

thermo-compression. De plus, le pic de photoluminescence est maintenant constant en fonction du diamètre indiquant là encore une relaxation partielle de la couche tenseur.

Cependant, la couche de GeSn reste en légère tension, avec une déformation estimée autour de 0,17 % dans l'ensemble de la couche d'après la position du maximum de photoluminescence. De plus, d'après les mesures Raman, la surface supérieure est également en légère compression de 0 à -0,12 % partant du centre vers la périphérie. Les gradients de déformation radiale et selon l'axe z sont donc moindres que pour les structures disques précédentes, avec du SiN au dessus. Ce gain en homogénéité dans la couche active de GeSn permet d'observer l'effet laser pour ces structures sous pompage impulsif.

La raie laser pour des structures avec une couche de SiN par le dessous, présenté figure 2.16, se situe à 0,522eV à 15 K, soit un décalage en énergie de 16 meV par rapport au disque de référence, si l'on néglige l'effet de la température entre 15 K et 25 K sur la variation du gap. De plus,

le seuil semble plus bas, inférieur à 42 kW.cm^{-2} , devenant inférieur au seuil de sensibilité de notre banc optique. Ce seuil plus bas que celui de la référence, s'explique par la gravure de l'interface Ge-GeSn, zone dense en dislocations et donc zone de centres de recombinaisons non radiatives. Ce constat est donc similaire aux disques contraints de 5,9 % publié récemment [70] utilisant ce même procédé. Les défauts d'interface ont été enlevés grâce à un procédé identique de transfert de la couche active suivi d'une gravure profonde gravant le substrat de croissance d'origine et l'interface Ge/GeSn. L'effet laser a alors été obtenu sous pompage optique continu sur ces disques. Néanmoins, dans notre cas la température limite de fonctionnement de l'effet laser reste du même ordre de grandeur que la structure référence, avoisinant 130 K. Aucune corrélation ne peut donc être déduite entre la température de fonctionnement de l'effet laser et la déformation appliquée pour ce type de disque.

La pleine plaque composée de la tri- couche SiN-GeSn-SiN émet à 0,499 eV (voir figure 2.17) et

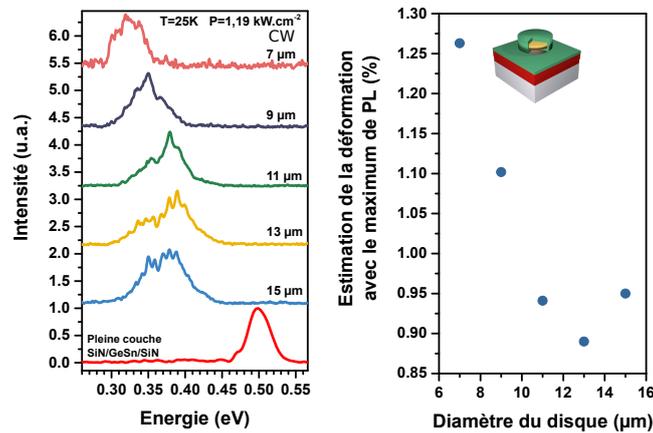


FIGURE 2.17 – Photoluminescence sous pompage continu et estimation de la déformation pour différents diamètres de disques de GeSn 10,4 % encapsulés par la couche tenseur des deux cotés. L'estimation reste approximative car le gap se trouve à plus basse énergie que le maximum d'émission. L'absorption du CO_2 à $4,2 \mu\text{m}$ ($0,295 \text{ eV}$) est visible sur le disque de $7 \mu\text{m}$.

indique que la couche de GeSn est maintenant initialement en légère tension et présente un décalage d'émission de 35 meV vers le rouge par rapport à un disque relaxé (figure 2.13 (a)). Comme pour le disque avec une couche tenseur sur le dessus, un déplacement vers les basses énergies est observé en fonction du diamètre du disque mais de façon plus mesurée allant jusqu'à 0,319 eV pour un disque de $7 \mu\text{m}$ de diamètre. Ce maximum d'émission correspond à une déformation de l'ordre de 1,27 %. Les disques de plus grand diamètre montrent une émission plus large de la photoluminescence, voire deux contributions. Ceci résulte d'un gradient de déformation radiale plus important pour les disques supérieurs à $9 \mu\text{m}$. Pour le disque de $15 \mu\text{m}$, on retrouve une déformation d'environ 1 %, correspondant à la partie périphérique du disque.

L'effet laser est obtenu à 0,441 eV (figure 2.18). Ce pic laser, contrairement à la photoluminescence, reste inchangé en énergie peu importe le diamètre du disque. Ceci traduit que le maximum de la courbe de gain ne diffère pas en fonction du diamètre. De plus, l'effet laser a lieu en péri-

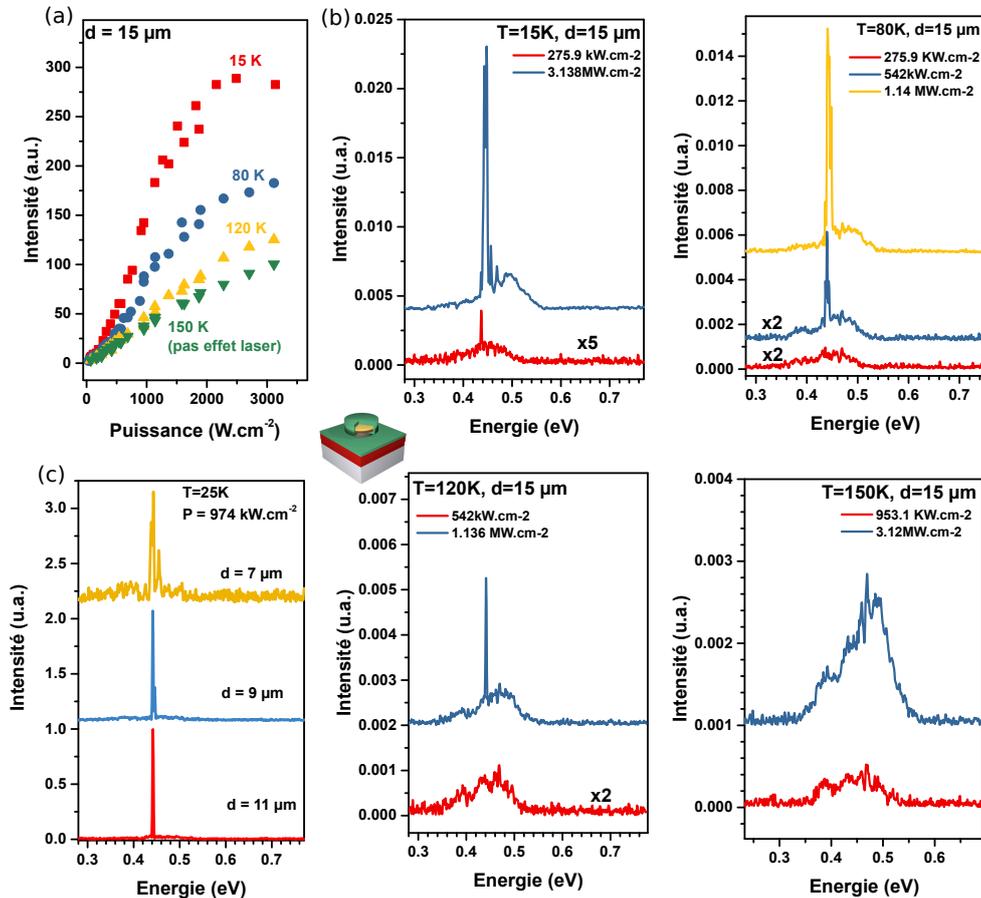


FIGURE 2.18 – (a) Courbes d'intensité - puissances pour différentes températures et (b) spectres laser associés pour un disque de GeSn 10,4 % de 15 μm complètement encapsulé.

phérie du disque selon des modes de galerie, zone dont la déformation varie peu avec le rayon contrairement au centre du disque. Ce pic laser est en plus accompagné d'une émission importante à plus haute énergie à 0,5 eV. Cette contribution, non visible sur les échantillons précédents, peut provenir à la fois de l'inhomogénéité selon z apportée par la couche de SiN du dessus mais aussi par le fait que le disque ici a un diamètre plus important que dans les cas précédents et donc une inhomogénéité radiale plus conséquente. Enfin, l'effet laser disparaît entre 120 K et 150 K montrant qu'il n'y a pas d'effet d'amélioration net des performances grâce à la déformation.

2.1.5 Discussion sur le désaccord entre effet laser observé et le gain théorique

Les courbes théoriques de gain prévoient que le GeSn à une concentration d'étain de 10,4 % et déformé à 1 % lase à plus haute température que celui relaxé contrairement à ce qui a été mesuré

expérimentalement où la température limite est de l'ordre de 130 K - 150 K pour les trois configurations. Cette différence avec l'expérience peut provenir de plusieurs facteurs (qui peuvent se combiner entre eux) :

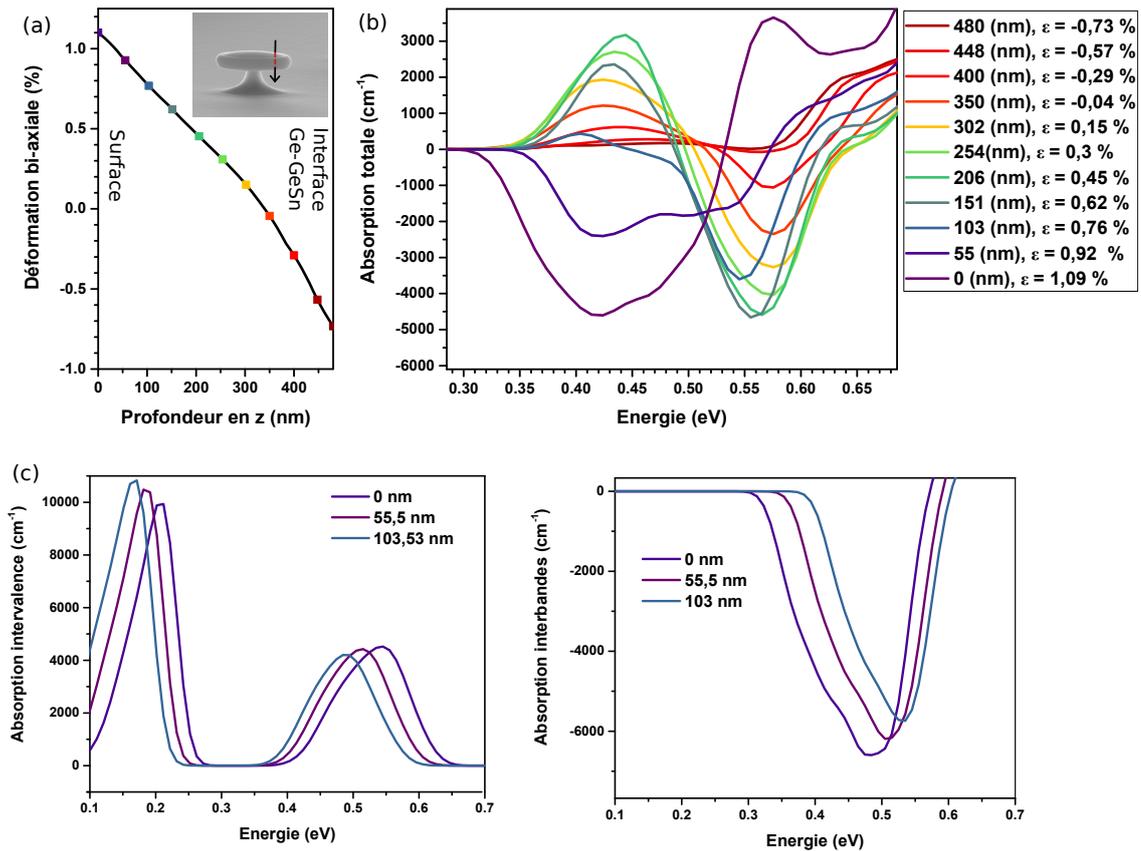


FIGURE 2.19 – (a) Évolution de la déformation en fonction de la profondeur z du disque avec une couche tenseur de nitrure sur le dessus. (b) Absorption totale obtenue pour différents états de déformation correspondant à une profondeur donnée pour une densité de porteurs injectés de $n_{inj} = 5.10^{18} cm^{-3}$ à 15 K. (c) Absorption inter-valences et inter-bandes correspondantes dans les cas d'une profondeur de 0 nm, 55,5 nm et 103,53 nm.

1. l'importance d'une déformation homogène au sein de la couche active. Nous avons pu voir expérimentalement que dans le cas d'un disque avec du nitrure sur le dessus, la déformation dans la couche est très inhomogène et les porteurs restent confinés en surface. Il n'y a pas d'effet laser visible. De plus, dans le cas d'un disque totalement encapsulé par du nitrure, le spectre de photoluminescence s'élargit montrant là encore que la déformation du matériau n'est sans doute pas parfaitement homogène.

Cela me permet d'introduire le concept important de gain modal. Le gain calculé dans ce manuscrit considère que le matériau est homogène en concentration d'étain et en déformation sur toute la cavité. Or, ce n'est généralement pas le cas, on définit alors le gain

modal qui prend en considération le recouvrement spatial entre le gain intrinsèque du matériau et le champ électrique du mode selon l'expression suivante :

$$g_m = \frac{\iiint_V E^*(x, y, z)g(x, y, z)E(x, y, z)dV}{\iiint_V |E(x, y, z)|^2dV}$$

Une déformation inhomogène dans la cavité peut entraîner des variations locales du gain du matériau g et donc une détérioration du gain modal de la cavité par rapport une déformation homogène dans la cavité.

Revenons au cas du disque avec un tenseur de nitrure en surface, cas d'une forte déformation inhomogène selon z . Pour simplifier, je fais l'approximation d'une contrainte bi-axiale pure ($\epsilon_{//} = \frac{\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}}{2}$ et $\epsilon_{\perp} = -\nu\epsilon_{//}$). A l'aide de comsol, j'ai extrait l'état de déformation tous les 50 nm environ, en partant de la surface en contact avec le matériau tenseur ($\epsilon_{//} = 1,09\%$) vers le bas du disque ($\epsilon_{//} = -0,7\%$). J'ai calculé ensuite le gain associé pour chacun des états de déformation obtenus. Les résultats sont présentés figure 2.19. On constate que les parties inférieures du disque ne présentent pas de gain à cause de l'état de compression. Le maximum de la courbe de gain varie en énergie de 0,424 eV en surface à 0,575 eV à 400 nm de profondeur. Cette observation rend compte d'un mauvais gain modal et ce dernier pourrait être la cause d'absence d'effet laser sous pompage impulsionnel avec des disques de nitrure sur le dessus. Au passage, la valeur maximale du gain net se retrouve limitée, voire réduite par l'absorption intervalence ayant lieu sur la même plage d'énergie que l'absorption interbandes pour les deux états les plus déformés (0 nm et 55,5 nm).

2. le modèle de gain ne prend pas en compte l'absorption par porteurs libres ("Free carrier absorption" en anglais) dont l'expression a été déterminé par Liu et al. pour le Ge [71] :

$$\alpha_{FCA} = 3,4 \cdot 10^{-25} n \lambda^{2,25} + 3,2 \cdot 10^{25} p \lambda^{2,43} \quad (2.13)$$

Dans notre cas, on suppose qu'il n'y pas de dopage et comme il s'agit d'un pompage optique $n = p = n_{inj}$. La dépendance en énergie de cette absorption a été représentée figure 2.20 (a) et a été ajoutée au gain précédent dans le cas d'une injection à 10^{19} cm^{-3} figure (b). Le gain résultant est toujours positif à température ambiante pour des structures déformées à plus de 1%. Il est intéressant de remarquer que pour une structure déformée à 2%, le gain s'effondre vers 0,4 eV lorsque la température croît (voir figure 2.20(c)). A cause de l'absorption intervalence, le maximum se retrouve à 0,2 eV à la différence d'un matériau déformé à 1,5% qui a son maximum de gain à 0,4 eV à 180 K.

3. Le pompage par effet laser peut produire de la chaleur notamment à fort pompage, si bien que la température du matériau n'est pas à l'équilibre thermique avec celle du cryostat.
4. L'activation de défauts en volume à plus haute température peut diminuer le temps de vie non radiative. Ce taux de recombinaisons reste difficile à évaluer tant la qualité de la couche a une variabilité selon l'épitaxie et la concentration d'étain. Cependant, elle a été évaluée expérimentalement sur du GeSn de concentration 12,5% à une valeur de 170 ps à

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTE BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

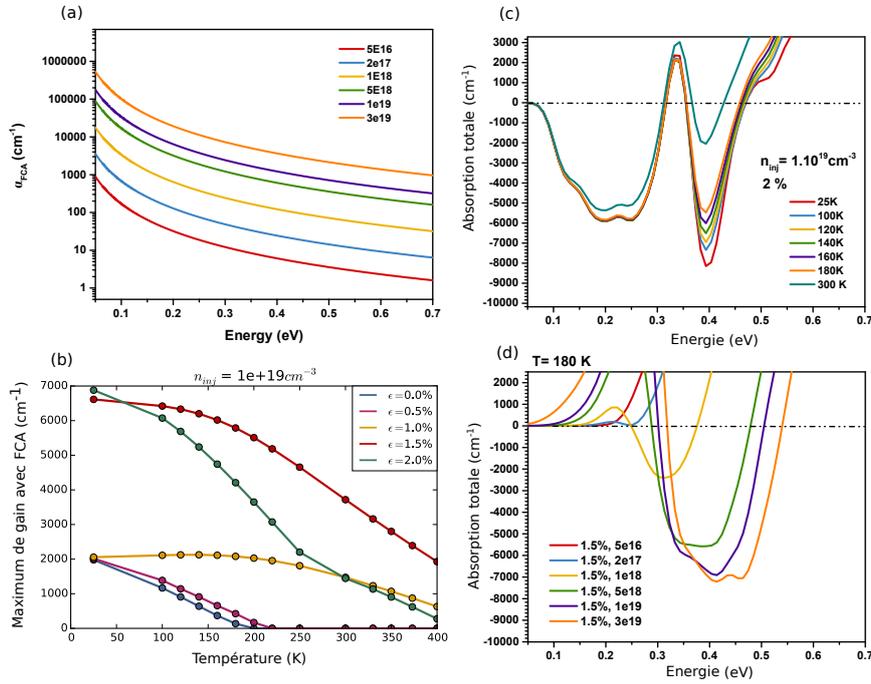


FIGURE 2.20 – (a) Absorption par porteurs libres en fonction de l'énergie pour différents niveaux d'injection (b)Évolution du maximum de gain avec la température en ajoutant la contribution par porteurs libres (c) Décalage du maximum de gain(sans FCA) dans le cas d'une déformation de 2 % vers les hautes énergies à cause des absorptions IVBA comparé à (d) une déformation de 1,5 % dont le maximum reste plus haut que 0.3 eV pour une injection de 10^{19} cm^{-3} .

25K [72]. Une étude de l'évolution de ce temps de vie non radiatif en fonction de la température est nécessaire pour comprendre si la présence de défauts en volume est décisive dans notre cas pour la température de fonctionnement laser.

5. L'effet Auger est également à l'origine de recombinaisons non radiatives. Il a été évalué expérimentalement pour le germanium avec un coefficient Auger $C_{Auger} = 5 \cdot 10^{-31} \text{ cm}^6 \cdot \text{s}^{-1}$ [72]. Même si le mécanisme Auger est principalement dépendant de la densité de porteurs, l'expression de la durée de vie associée peut être plus complexe dans le cas du GeSn. En effet la durée de vie Auger pour un électron à l'équilibre thermodynamique dans le cas de petits gaps comme HgCdTe, ou InAsSb [73] varie de façon exponentielle avec la température et l'énergie du gap selon l'expression suivante :

$$\tau_{Auger}^n = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{(4\pi\epsilon)}{e^4 m_c} \left(\frac{E_g}{k_b T} \right)^{5/2} \exp\left(\frac{E_g}{k_b T} (1 + 2\mu) \right) \quad (2.14)$$

avec $\mu = \frac{m_c}{m_v}$

6. les pertes intrinsèques de photons (diffusion et miroirs) lors de la propagation du mode

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTE BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

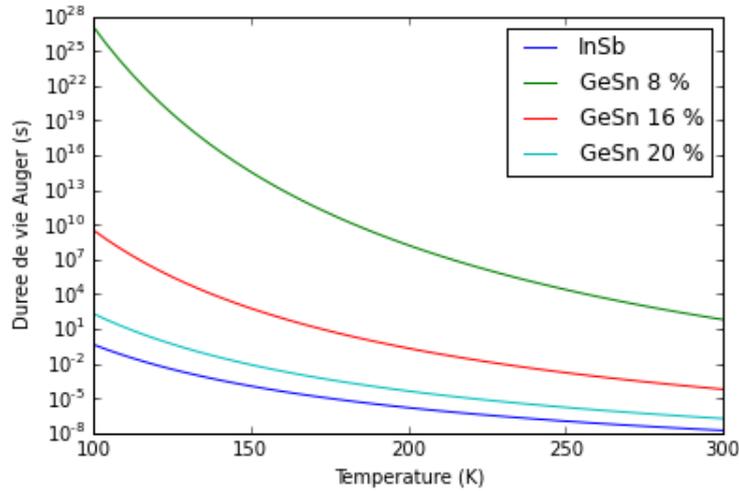


FIGURE 2.21 – Variation de la durée de vie Auger en fonction de la température pour du GeSn relaxé avec différentes concentrations d'étain et pour l'InSb à l'équilibre thermodynamique dans le cas d'un semi-conducteur intrinsèque. La variation du gap en fonction de la température est négligée.

optique dans la cavité laser

$$\tau_c = \frac{1}{\frac{n_{opt}}{c} [\alpha_p + \frac{1}{2L} \ln(\frac{1}{R^2})]} = \frac{Q_{cav}}{\omega}$$

avec Q le facteur de qualité de la cavité. Il est possible de voir sur l'image MEB présentée figure 2.22 que les disques reportés présentent une rugosité de surface assez importante provoquant une possible augmentation du terme de pertes α_p .

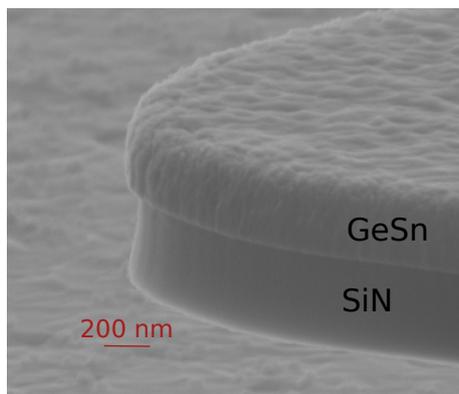


FIGURE 2.22 – Image MEB d'un bord du disque retourné par collage. La couche de GeSn semble très rugueuse en surface.

2.2 Membranes de GeSn suspendues déformées en tension

Nous avons vu qu'il était possible de déformer de manière bi-axiale des micro-disques de GeSn de 10,4 % par une couche externe de nitrure en compression de l'ordre de 1 % sans toutefois constater un effet réel sur les performances laser.

Un autre moyen de déformer de manière bi-axiale selon (001) le GeSn est de fabriquer des membranes de GeSn en forme de croix suspendues et contraintes par quatre bras tenseurs de Ge à chaque extrémité. Ce procédé de mise en déformation à l'avantage de ne pas nécessiter des étapes de report ou collage de couches, et a déjà été employé au sein de mon laboratoire sur Ge .

Dans un premier temps, cette section présentera ce procédé de mise en déformation, le principe de la cavité à miroir de type coin de cube, la différence avec celui utilisé sur Germanium, ainsi que les étapes de fabrications des dispositifs.

Comme précédemment, la déformation bi-axiale sera mesurée en spectroscopie Raman et estimée via Comsol. La photoluminescence et l'effet laser seront également étudiés.

2.2.1 Position du problème

La technique de mise en déformation par des membranes suspendues en germanium, rappelée en introduction, consiste à utiliser l'état de déformation résiduelle en tension du germanium. Aux extrémités d'une constriction se trouvent des zones de réservoir de tension. Lors de la sous-gravure, ces zones libres de relaxer vont donc se contracter et mettre en tension la constriction centrale (figure 2.23 (a)).

Que ce soit pour les membranes de type croix ou pont (chapitre suivant), il n'est pas possible d'employer directement cette méthode sur GeSn. En effet, l'état de déformation résiduelle du GeSn est différent, il est en compression. En le sous-gravant, ce dernier va s'expandre et compresser la zone de constriction, provoquant un flambage de la structure (figure 2.23 (b)).

L'idée, présentée figure 2.23 (c), est donc de tirer profit du substrat virtuel de germanium en

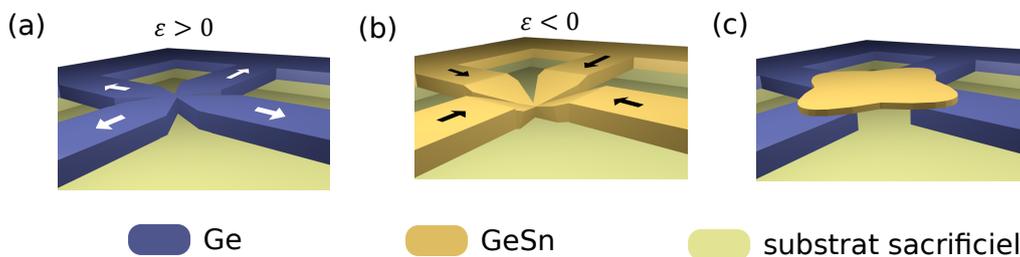


FIGURE 2.23 – Cas de sous-gravure d'une membrane dans le cas d'un matériau (a) en tension résiduelle (Ge), (b) en compression (GeSn). (c) Solution permettant de mettre en tension le germanium initialement en compression en utilisant la couche de Ge.

tension résiduelle en l'utilisant comme bras tenseur de la zone centrale à gain en GeSn.

2.2.2 Cavité optique

Afin d'obtenir l'effet laser, il est nécessaire d'avoir une boucle de rétroaction assurée par les miroirs de la cavité. Des miroirs de Bragg ont l'avantage de présenter une réflectivité importante mais sur une gamme de longueurs d'onde très faible. Or, ici en fonction de la déformation appliquée, le gap du matériau et par conséquent la zone de gain se décalent fortement en énergie si bien qu'il est impossible de connaître précisément à quelle longueur d'onde vont se propager les modes. Le risque est donc que les miroirs de Bragg soient mal conçus. Le recours à des miroirs dit à coins de cube ("cornercubes") initialement introduit par C. Bonzon [74], permet de surmonter ce problème.

Approche géométrique

Les miroirs à coins de cube reposent sur le principe de la réflexion totale d'un rayon incident lorsque celui-ci arrive à l'interface GeSn/air au-delà d'un certain angle limite $\theta_{lim} = \arcsin(\frac{n_{air}}{n_{GeSn}})$ d'après la deuxième loi de Snell-Descartes. Pour que cette condition soit toujours remplie, le coin de cube est construit à partir de deux miroirs paraboliques, en regard avec une même focale (cf fig. 2.24), coïncidant spatialement en un même point. Tout rayon lumineux incident passant par F est alors totalement réfléchi. Dans le cas d'une structure en forme de croix, les 4 coins de cubes sont placés de manière confocale sans guide (à la différence d'une structure uni-axiale, partie 3.1, où le pont mis en tension fait également office de guide).

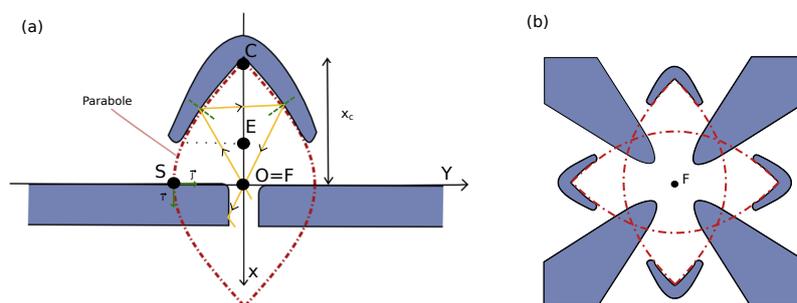


FIGURE 2.24 – (a) Schéma de principe d'un miroir en coin de cube. La courbure imposée par les deux miroirs paraboliques face à face est tracé en rouge pointillé. Le sommet est notée S et la focale E. Un rayon incident passant par F (jaune) est totalement réfléchi. (b) Cavité confocale à cornercube employée dans le cas de structures croix. La focale F des 4 miroirs coïncide au centre avec la zone à gain en tension

2.2.3 Réalisation des structures

La réalisation de structures suspendues (ponts ou croix) nécessite un substrat Ge/SOI. L'oxyde est alors utilisé comme couche sacrificielle afin de suspendre la structure et de la déformer. On utilisera les empilements (1) et (2) de couches actives 12,7% et 15,7%. La première étape consiste

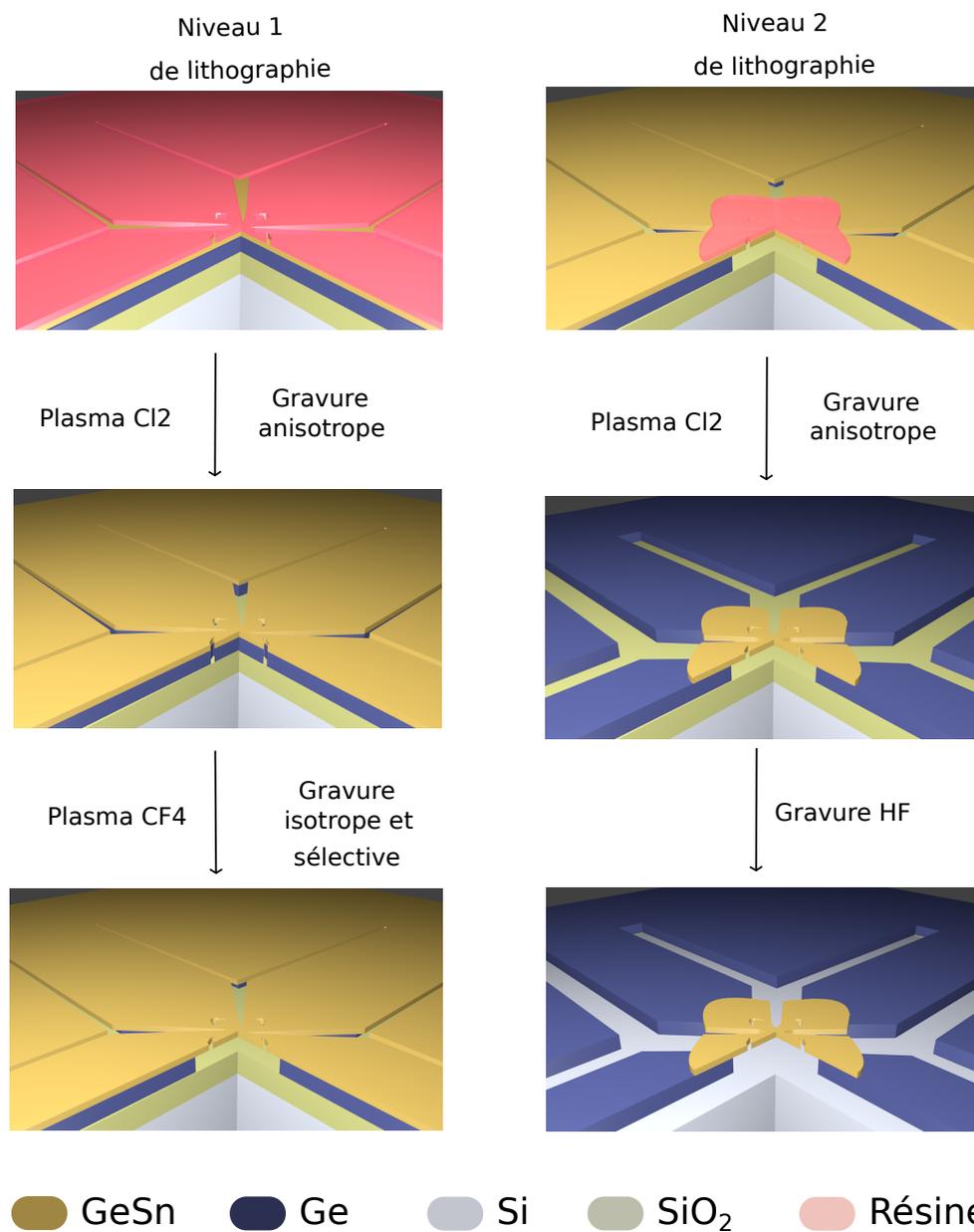


FIGURE 2.25 – Procédé de réalisations de structures suspendues (vue en coupe inclinée).

à graver les tranchées de la membrane jusqu'à l'oxyde. Le motif de ce premier niveau est réalisé

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTE BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

en lithographie à faisceau d'électrons en utilisant une résine positive, la ZEP 520. Pour la réalisation de la gravure, j'utilise le bâti de gravure Oxford Plasmalab 100, permettant de combiner un plasma radio-fréquence et un plasma à couplage inductif. Les tranchées à graver étant profondes, l'étape de gravure se réalise en deux temps :

- une gravure anisotrope jusqu'à l'interface GeSn/Ge. Pour cela, j'utilise une recette de gravure plasma développée par Nicolas Pauc, à base de Cl_2 , N_2 et O_2 . Elle permet d'avoir un profil vertical peu rugueux (figure 2.26 (a)),
- Une gravure plasma isotrope à base de CF_4 , O_2 qui grave sélectivement le germanium par rapport au germanium-étain (figure 2.26 (b)). Cette sélectivité est possible grâce à la formation d'un oxyde SnO_xF_y [75]. Le dessous de la cavité optique est entièrement gravé. Cette gravure permet à la fois de concentrer les porteurs photogénérés dans la couche de GeSn et procure un meilleur confinement optique du mode en augmentant le contraste d'indice optique

Le second niveau consiste à graver le GeSn sur les bras tenseurs de façon à ne conserver que le germanium en tension résiduelle. Le motif est cette fois-ci fait avec de la MaN-2410, une résine négative. Enfin la dernière étape consiste à libérer les bras tenseurs de germanium en sous-gravant à l'acide fluorhydrique par voie humide puis terminer la gravure par phase vapeur (Primaxx Monarch 3).

Dans le cas des croix, les deux niveaux de lithographie sont présentés figure 2.27. Ce design

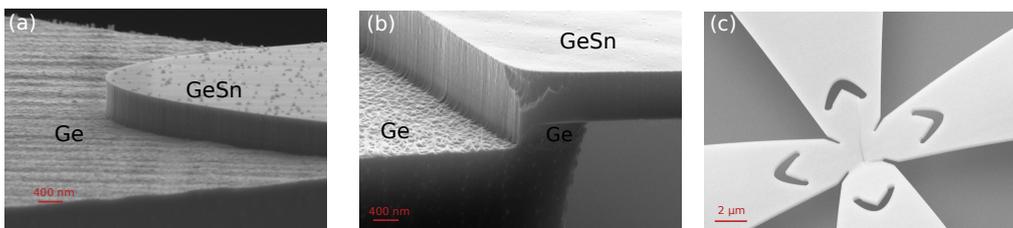


FIGURE 2.26 – Images MEB montrant (a) le profil de gravure suite à la gravure anisotrope et (b) la sélectivité entre le Ge et le GeSn après la gravure isotrope pour des structures fabriquées à partir de l'empilement 15,7 %. (c) Croix cassée lors de la sous-gravure du germanium à cause d'une partie centrale libérée trop étendue.

présente l'avantage d'avoir une largeur de bras à sous-graver constante peu importe la longueur L de ce bras et donc de libérer les croix toutes en même temps. La modulation de la longueur de bras tenseur L permet de modifier la tension au sein de la zone à gain. Une structure de référence a également été réalisée, supposée dans un état relaxé.

Cependant, ce motif n'est pas optimisé pour appliquer une déformation importante comparé aux designs de croix développés sur germanium [20]. En effet, la partie à sous-graver lors de la première étape dans ce dernier cas était trop importante et a entraîné la rupture par compression de la zone centrale (figure 2.26 (c)). Comme en témoigne la figure 2.28, la sous-gravure du

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTE BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

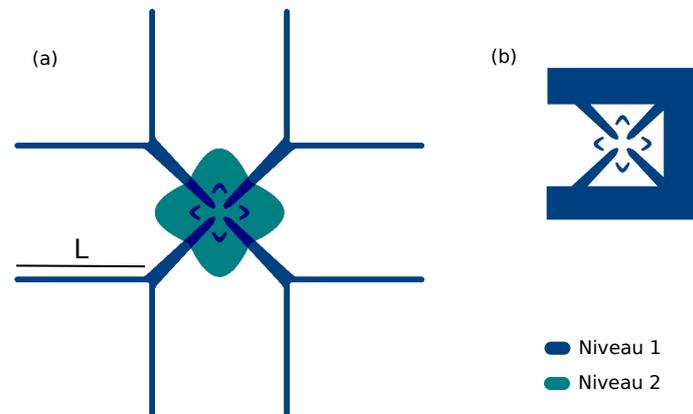


FIGURE 2.27 – Motifs utilisés pour les deux niveaux de lithographie à faisceau d'électrons pour (a) une membrane en croix contrainte par des bras de longueurs L et (b) une membrane relaxée de référence.

germanium provoque un flambage de la structure à cause de l'état de compression du GeSn.

Après avoir gravé la couche de SiO_2 , le germanium est libre de mettre en tension la membrane en tirant à chaque extrémité par les quatre bras tenseurs. L'effet de flambage n'est alors plus visible.

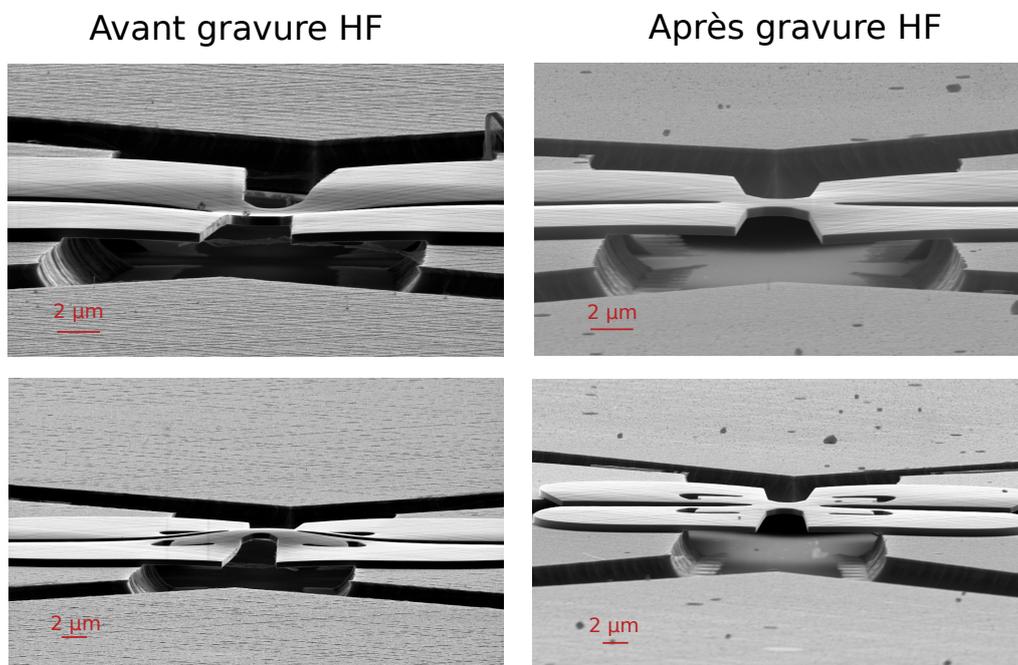


FIGURE 2.28 – Mise en tension des croix de 12,7 % de Sn avec et sans miroirs à coins de cube avant et après gravure à l'acide fluorhydrique.

2.2.4 Membranes avec 12,7 % d'étain

Mesure de la déformation

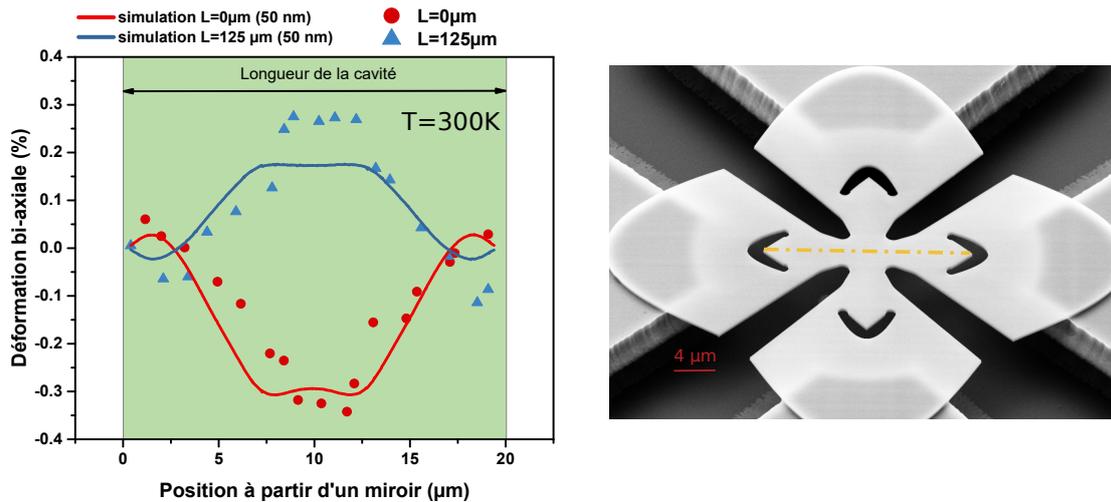


FIGURE 2.29 – Profils de la déformation bi-axiale dans le cas de membranes de 12,7 % d'étain, pour $L=0 \mu\text{m}$ et $L=125 \mu\text{m}$ et déterminés à partir de la spectroscopie Raman. Les profils simulés ont été extraits à 50 nm de profondeur à partir de la surface de l'échantillon.

Comme pour les disques, j'ai effectué en spectroscopie Raman, deux profils de la cavité (miroir à miroir) de croix pour des longueurs de bras extrêmes $L=0 \mu\text{m}$ et $L=125 \mu\text{m}$ dans le cas de GeSn avec 12,7 % d'étain. Le décalage Raman donne accès à la déformation dans le plan en utilisant la loi empirique (2.10) estimant la déformation dans le plan. Ces résultats expérimentaux ont été superposés aux simulations Comsol dont les paramètres géométriques sont rassemblés dans le tableau présenté en annexe D. Pour des bras de longueur nulle, la zone centrale se trouve encore en compression à -0,3 % alors que des bras plus long ont permis d'inverser l'état de contrainte et d'être en tension bi-axiale à 0,3 %. La zone centrale est certes homogène mais seulement sur une zone de $5 \mu\text{m}$, assez petite par rapport à l'ensemble de la cavité de $20 \mu\text{m}$. De plus la simulation suit les profils obtenus en Raman avec une inversion de la contrainte à chaque extrémité, à proximité des miroirs. Elle semble néanmoins sous-estimer la déformation de la membrane avec une longueur de bras de $125 \mu\text{m}$. La figure 2.30 présente la variation de déformation bi-axiale au centre de la croix pour différentes longueurs de bras. Plus le bras tenseur est long, plus la déformation est importante. Malheureusement, la simulation FEM tend à sous-estimer la déformation comparée à celle mesurée en Raman pour les longueurs de bras les plus importantes. Dans tous les cas, la structure n'est pas optimisée ici et ne permet pas de déformer autant que sur les croix en germanium pur.

Contrairement aux disques, cette valeur de déformation est dépendante de la température. En effet, la température va modifier la dilatation des bras tenseurs de germanium principalement.

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTE BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

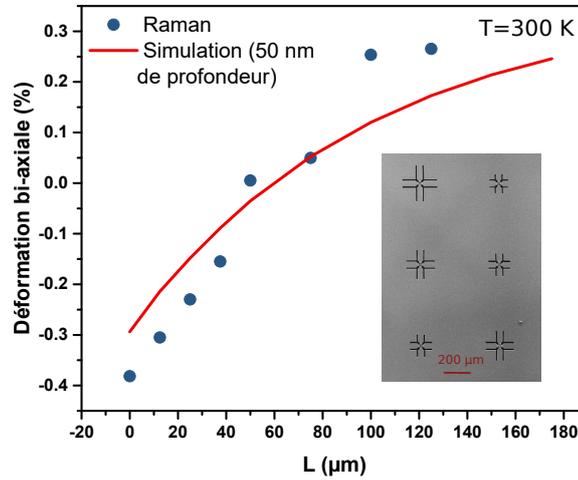


FIGURE 2.30 – Étude de la déformation bi-axiale mesurée en Raman et simulée via Comsol au centre de la croix en fonction de la longueur de bras dans le cas de GeSn 12,7 % d'étain.

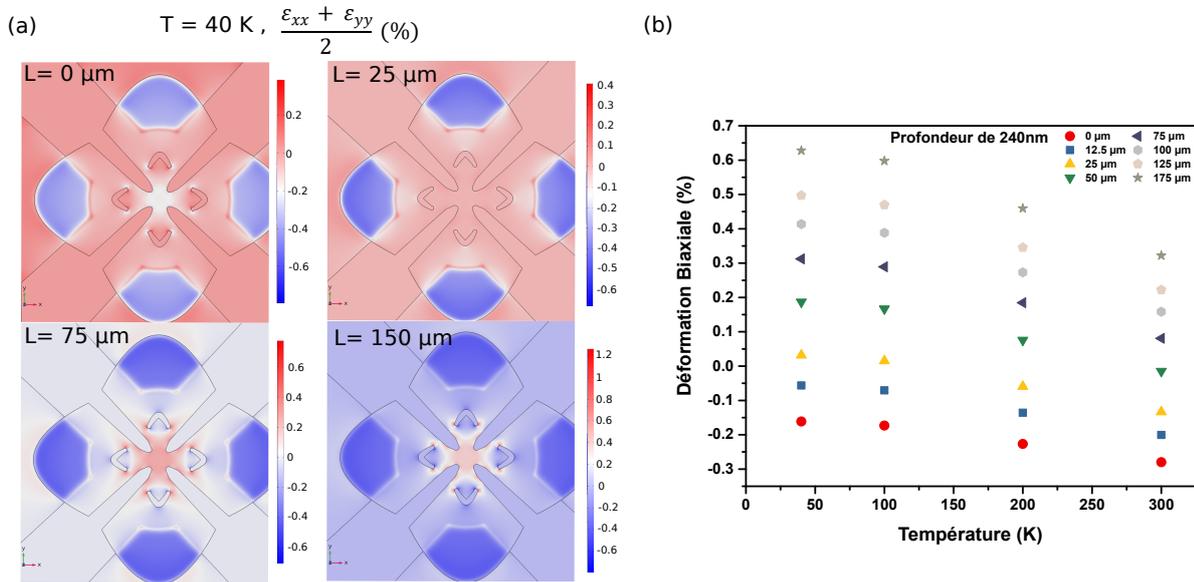


FIGURE 2.31 – (a) Image 2D (surface) d'une simulation de la déformation d'une croix à 40 K pour des longueurs de bras de 0, 25, 75, 125 μm . (b) Variation de la déformation au centre de la croix à 240 nm de profondeur (milieu de la couche de GeSn) en fonction de la température

J'ajoute donc à la déformation initiale ϵ_0 (RSM) comme indiqué dans le chapitre 1, une déformation ϵ_{tot}^{LT} à la couche de germanium, dépendante de la température. Je peux alors estimer pour

chaque température la déformation au niveau de la croix de GeSn⁵. La déformation thermique de cette dernière est supposée ici négligeable devant celle du germanium.

Les résultats obtenus sont présentés 2.31. On peut voir que la croix avec une longueur de bras $L = 0 \mu\text{m}$ est encore en compression à $-0,16\%$ alors que la croix avec une longueur de bras de $150 \mu\text{m}$ a une valeur estimée à $0,5\%$. Lors du refroidissement en température, la contraction des bras de germanium par rapport au substrat de silicium permet un gain de déformation de $+0,17\%$ et $+0,32\%$ pour des bras de longueurs respectives $0 \mu\text{m}$ et $150 \mu\text{m}$. Le gain de déformation dans le second cas est naturellement plus élevé à cause d'un "réservoir d'atomes" de Ge plus conséquent permettant une contraction plus efficace.

Transitions et courbes de gain

Comme pour les disques, il est possible d'obtenir la variation des gaps directs à 25 K pour du GeSn 12,7 % déformé bi-axialement à partir des potentiels de déformations et en prenant en compte la loi de Varshni (figure 2.32).

Les maxima de chaque courbe de gain en fonction de la température sont également repré-

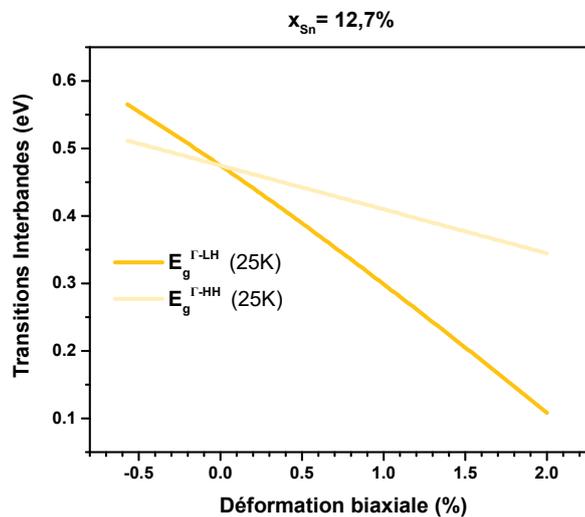


FIGURE 2.32 – Evolution du Gap à 25 K pour du GeSn 12.7 % d'étain en fonction de la déformation bi-axiale.

sentés figure 2.33 pour différents états de déformations bi-axiales et d'injection. L'évolution du maximum est dans l'ensemble très similaire à celui des disques de 10,4 % avec une valeur de gain

5. La dépendance du décalage Raman en fonction de la température pour le GeSn à l'état relaxé n'est pas connue et ne permet donc pas une étude directe du changement de la déformation induite par la dilatation des bras de Ge.

légèrement plus élevée. Le maximum de gain devient de plus en plus important avec la déformation. Toutefois, on observe là encore l'influence de l'absorption inter-valences, en particulier pour une injection de $n_{inj} = 10^{18} \text{cm}^{-3}$ à 250 K entre les déformations de 1 % et 1,5 % (voir annexe E). Un pompage plus élevé permet d'inverser cette situation en étalant la courbe de gain vers les hautes énergies et permet de s'éloigner de la zone d'absorption LH-HH. De plus, le maximum de gain à 1 %, pour $n_{inj} = 10^{19} \text{cm}^{-3}$, est nettement supérieur comparé à celui dans le cas de GeSn 10,4 % dans le cas d'une déformation bi-axiale similaire. En effet, l'ajout d'étain réduit le gap du matériau et donc translate la courbe de gain à plus basse énergie si bien qu'elle se retrouve en partie en dehors la zone d'absorption HH-SO. En revanche, les niveaux de transitions pour des déformations de 0 % et 0,5 %, sont toujours dans cette gamme d'énergie pour ce niveau d'injection, ce qui limite fortement le maximum de la courbe de gain.

Caractérisation optique de ces structures

Afin de savoir si ce type de cavité confocale permet d'observer l'effet laser indépendamment de la déformation, des croix suspendues sans bras tenseurs ont été caractérisées optiquement dans un premier temps dont l'image MEB est représenté figure 2.34 (c). Sur cette dernière, la limite de sous-gravure du GeSn en contraste plus clair par rapport au reste de la couche, indique que la structure est totalement relaxée. L'effet laser est visible avec un seuil de 700kW.cm^{-2} et à une énergie de 0,488eV à 25K. Cette valeur énergétique du pic laser est supérieure de 12 meV par rapport à la valeur théorique du gap énergétique attendue⁶. L'effet laser disparaît vers 110 K avec un seuil important de 1.21MW.cm^{-2} à 105K. A titre de comparaison, l'effet laser disparaît à 130 K sur des micro-disques fabriqués à partir d'une couche de concentration d'étain similaire[28]. De plus, les seuils élevés de ces croix alors qu'il s'agit encore de températures relativement basses en comparaison à la littérature peuvent s'expliquer par des pertes optiques importantes dues à la géométrie de la cavité, cavité non optimisée ici.

Dans le cas de croix contraintes à base de GeSn 12,7 %, deux spectres sous pompage impulsif à 25 K pour une longueur de bras $0 \mu\text{m}$ et $125 \mu\text{m}$ sont illustrés 2.35 (a). Pour la croix avec $L = 0 \mu\text{m}$, l'émission laser se situe dans la même gamme d'énergie que la structure relaxée. Pour cette structure, la déformation bi-axiale en compression évaluée en Raman de 0,3 % à température ambiante semble donc être proche d'un état relaxé à 25 K puisque la longueur d'onde d'émission est semblable à celle de la structure relaxée. Ce phénomène provient de la rétractation des bras de germanium qui tend à réduire l'écart de déformation à seulement -0,16 % avec la structure relaxée au lieu de -0,3 %, d'après la simulation à 40 K montrée figure 2.31⁷

Toutefois, dans le cas des croix avec $L=0\mu\text{m}$, l'émission est fortement multimode. Ceci peut

6. Il est important de garder à l'esprit que le gap se situe en général à plus basse énergie du pic laser associé qui lui se situe proche du maximum de la courbe de gain, ce qui accroît ici encore plus l'écart entre l'expérience et la théorie.

7. On peut supposer que la valeur de la déformation reste inchangée à 25 K au vue du plateau observé pour les coefficients de dilatation pour des températures inférieures à environ 60 K (voir 1.II (c))

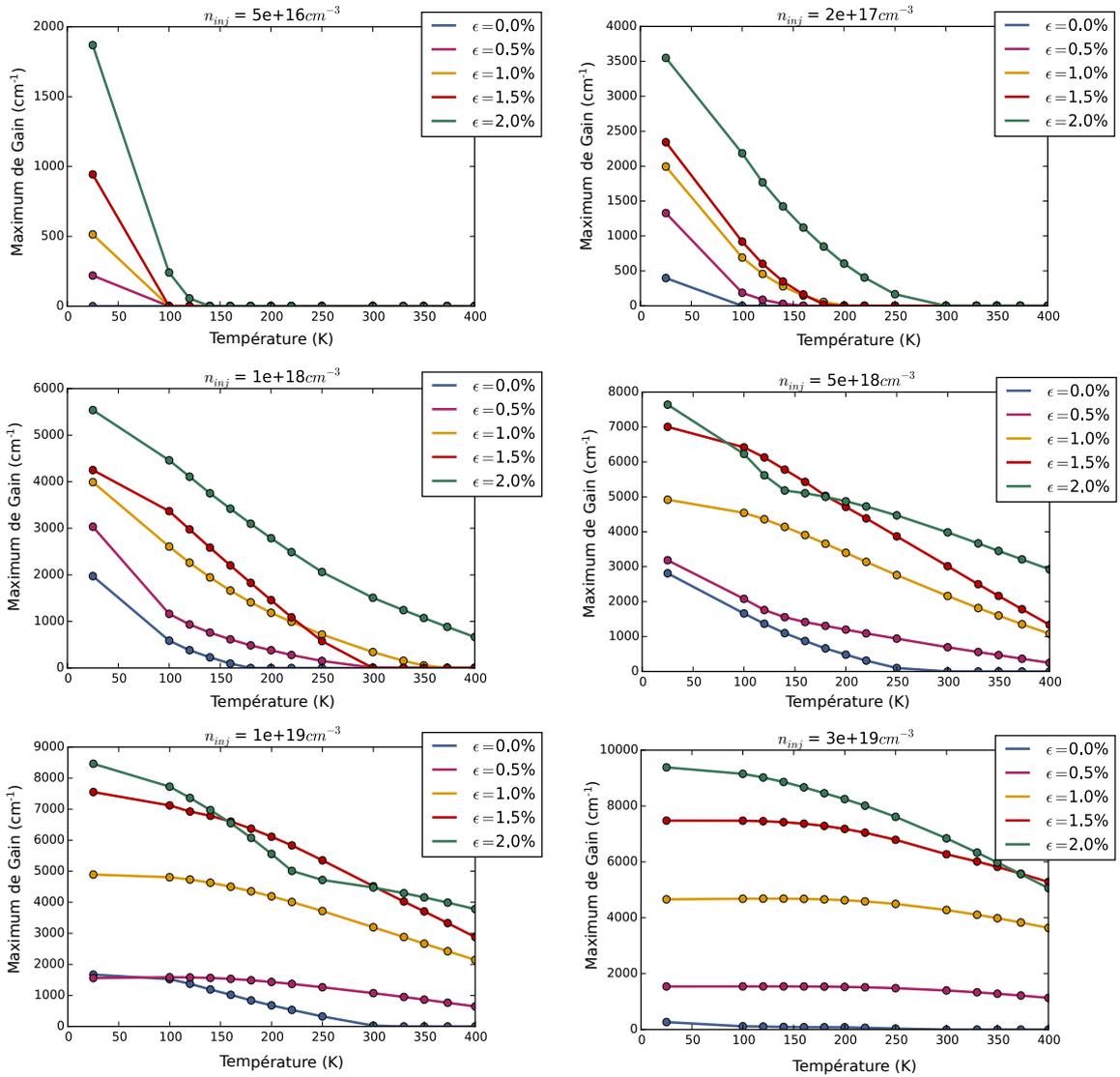


FIGURE 2.33 – Évolution du maximum de la courbe de gain en fonction de la température pour différents états de déformations bi-axiales (de 0% à 2 %) et d'injection de porteurs pour du GeSn 12,7 %.

s'expliquer soit par un pompage optique incident plus élevé, qui a tendance à élargir la zone de gain possible mais aussi par la présence d'une inhomogénéité spatiale en déformation bi-axiale au sein de la cavité. Grâce à l'important signal détecté, un spectre haute résolution⁸ à 915 kW.cm⁻² a pu également être réalisé dans ce cas. La résolution de 1 cm⁻¹ permet ici de mieux distinguer les pics laser. Comme la puissance incidente de pompage optique est comparable avec

8. Ce spectre a été obtenu par notre FTIR commercial en mode "fast scan". Le déplacement des miroirs est continu avec une plus grande amplitude ce qui permet une meilleure résolution de 1 cm⁻¹ (au lieu de 12 cm⁻¹ pour notre step-scan fait maison) et une réalisation du spectre plus rapide mais ceci au prix d'un rapport signal sur bruit moins favorable.

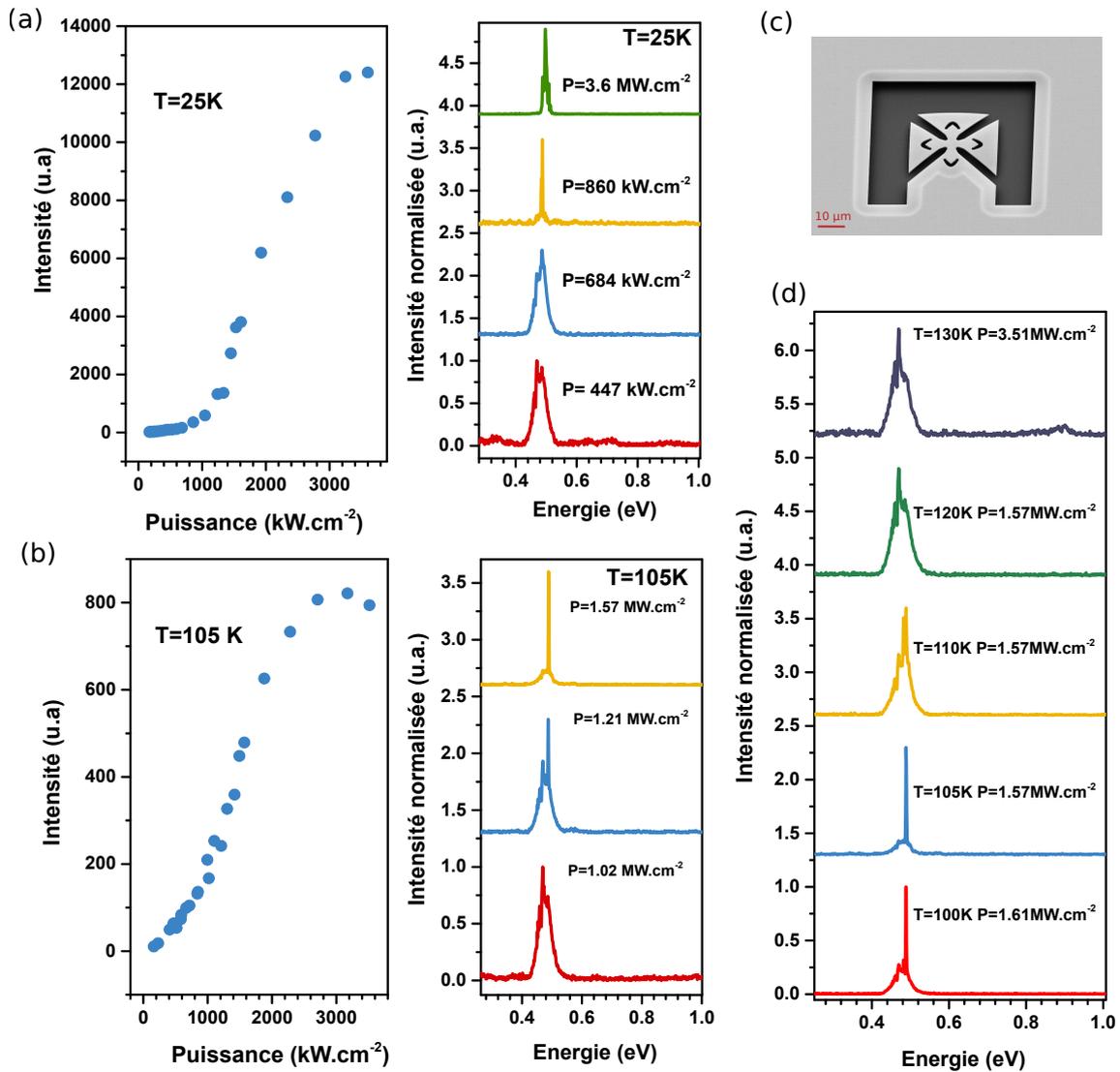


FIGURE 2.34 – Membrane suspendue relaxée de 12,7 %- Courbes intensité - puissance et spectres laser associés à (a) 25 K et (b) 105 K. (c) Image MEB de la structure. (d) Évolution du pic laser en fonction de la température.

le spectre de la structure relaxée présenté figure 2.34 (a), il est possible de confirmer que le caractère multi-mode provient plutôt d'un gradient de déformation bi-axiale au sein de la cavité venant élargir la zone de gain.

Dans le cas d'une membrane avec $L = 125 \mu\text{m}$, l'inhomogénéité spatiale en tension cette fois-ci est beaucoup plus importante. Aucun effet laser n'est visible mais une large contribution à basse énergie allant de 0,415 eV à 0,318 eV indique la mise en tension de la cavité. La simulation de déformation (figure 2.31 (b)) prédit à 40 K 0,5 % de déformation pour la zone la plus déformée. Le

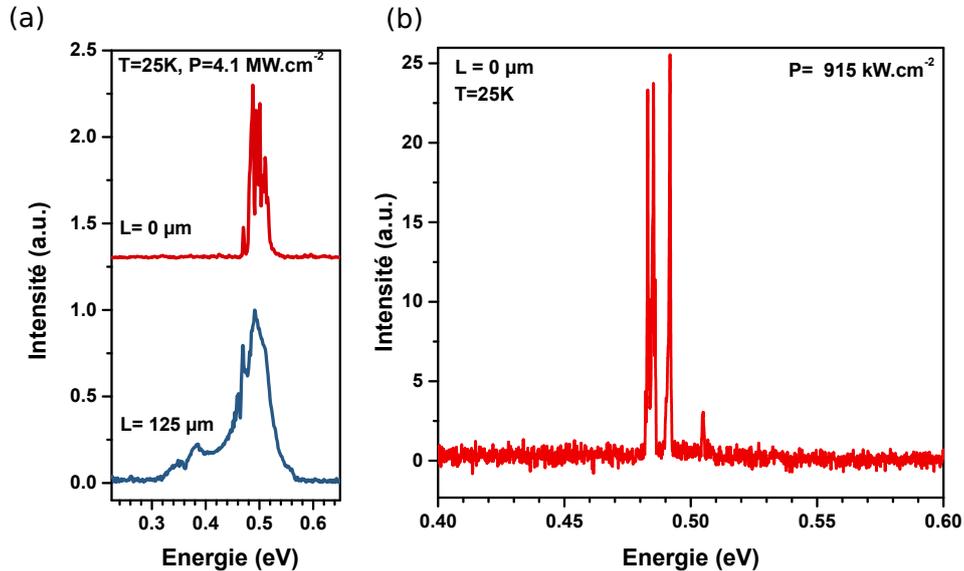


FIGURE 2.35 – Spectres à 25 K obtenus sous pompage impulsionnel avec (a) le FTIR "step scan" pour $L=0 \mu\text{m}$ et $L=125 \mu\text{m}$ ayant une résolution de $1,6 \text{ meV}$ (12 cm^{-1}) et (b) le FTIR "fast scan" pour $L=0 \mu\text{m}$ ayant une résolution de $0,124 \text{ meV}$ (1 cm^{-1}).

gap serait alors à une énergie de $0,38 \text{ eV}$. Cette estimation est beaucoup plus haut en énergie que la queue de photoluminescence à $0,318 \text{ eV}$ constatée expérimentalement. Cet écart provient en partie de la sous-estimation de la déformation bi-axiale simulée à 300 K de $0,1 \%$ par rapport à la valeur Raman. Enfin, aucun effet laser n'est observable dans le cas déformé en tension, le gain du matériau ne permet donc pas de compenser les pertes d'inhomogénéité spatiale en déformation induite par la structure.

2.2.5 Membranes avec 15,7% d'étain

Des croix avec exactement le même design ont été réalisées à partir de GeSn 15,7%. L'épaisseur couche de GeSn est doublée pour ce type d'empilement par rapport au cas précédent, et vaut $1,02 \mu\text{m}$. Cependant, l'épaisseur du substrat virtuel de Ge a également été multipliée par deux. Ainsi, comme le grandissement est homothétique, l'état de déformation au centre de la croix peut être considéré pour une longueur de bras donnée, comme identique par rapport aux structures de 12,7% en première approximation⁹.

9. Il est à noter toutefois que la tension résiduelle de la couche de Ge est $0,11 \%$ pour cette empilement contre $0,14 \%$, ce qui rend cette approximation discutable.

Amélioration de la valeur de gain

La figure 2.36 montre les maxima de gain dans des cas de déformation proches de ceux qui ont été obtenus expérimentalement.

L'incorporation d'étain permet une augmentation du maximum de gain. L'absorption inter-

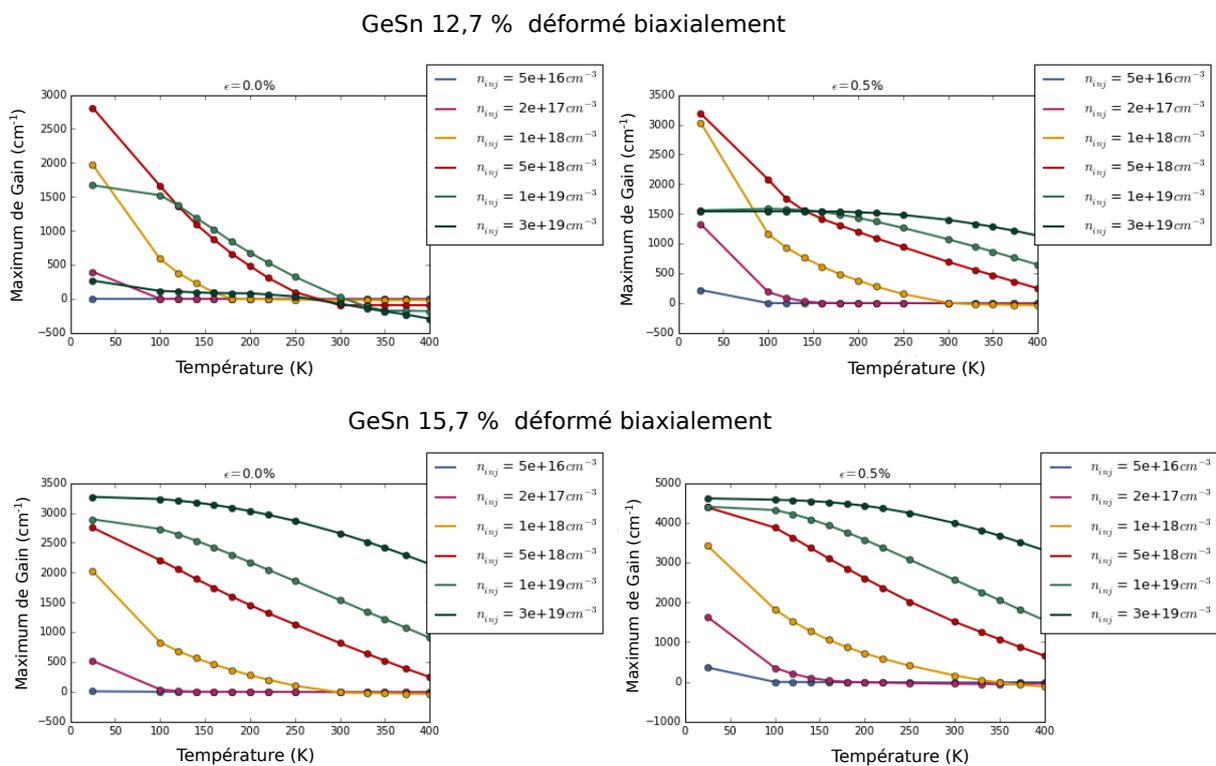


FIGURE 2.36 – Comparaison du maximum de gain entre la couche active avec 12,7 % d'étain et celle avec 15.7 % sans prendre en compte l'absorption par porteurs libres.

valence LH-SO se situe à plus haute énergie que la zone de gain dans le cas de 15,7 % : le gain ne s'effondre plus à fortes injections. De plus, la valeur du maximum de gain est beaucoup plus importante à haute température. Par exemple, pour une injection de $n_{inj} = 10^{19} cm^{-3}$, à 250 K, la valeur du maximum est presque triplée passant de $1263 (323) cm^{-1}$ à $3072 (1856) cm^{-1}$ pour un matériau déformé à 0,5 % (relaxé) lorsque la concentration d'étain passe de 12,7 % à 15,7 %. Pour une concentration d'étain fixée à 15,7 %, ce modèle prévoit en outre une élévation de la température pour laquelle le gain s'annule d'environ 50 K, quand l'état de contrainte augmente de 0,5 %.

J'ai également montré figure 2.37 l'évolution du gap en fonction de la température pour 25 K, 100 K et 200 K afin d'évaluer grossièrement la déformation à partir de la position du pic laser dans la partie suivante.

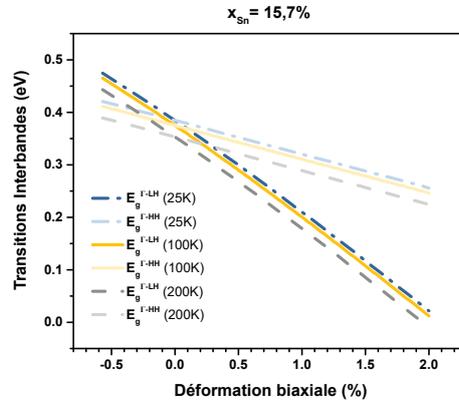


FIGURE 2.37 – Évolution du gap en fonction de la déformation bi-axiale entre 25 K, 100 K et 200 K dans le cas d'une couche de GeSn 15,7 %.

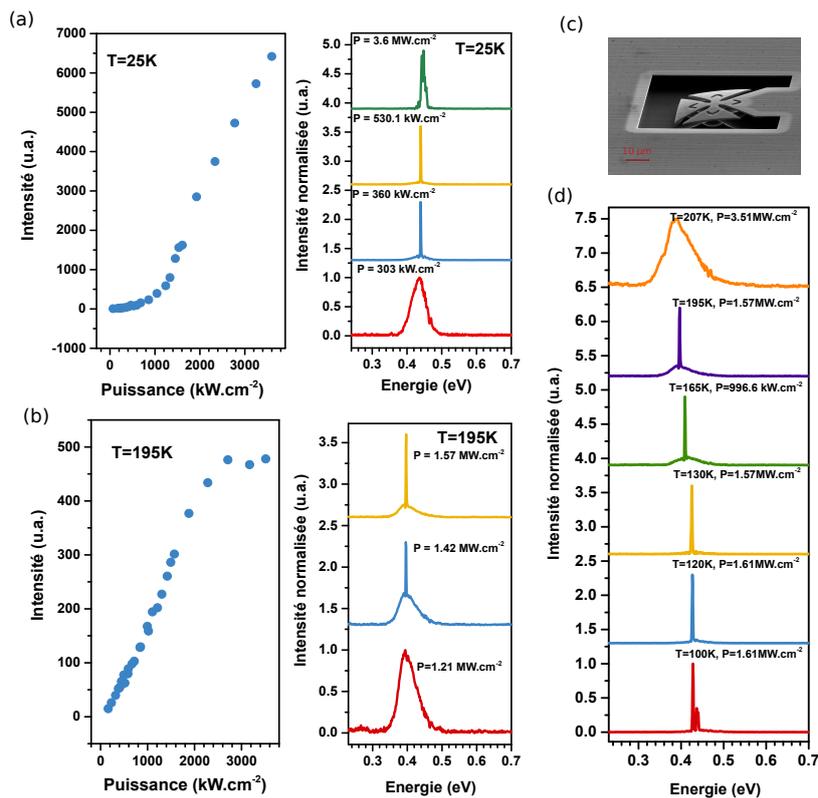


FIGURE 2.38 – Membrane suspendue relaxée de 15,7 % - Courbes intensité - puissance et spectres laser associés à (a) 25 K et (b) 195 K. (c) Image MEB de la structure. (d) Évolution du pic laser en fonction de la température.

Étude de l'effet laser

Une structure de référence relaxée a été fabriquée et caractérisée optiquement sous pompage impulsionnel figure 2.38. Le seuil à 25 K pour cette structure relaxée en GeSn 15,7% vaut 360

$kW.cm^{-2}$, soit une diminution par deux du seuil par rapport à la membrane relaxée, similaire de 12,7 % d'étain. La cavité étant similaire, les pertes optiques de la cavité sont relativement du même ordre de grandeur. Nous avons vu au chapitre 1, que l'approche par gradient de concentration permettait de concentrer les dislocations principalement dans les couches inférieures, préservant la couche optiquement active et donc réduisant les seuils. De plus, le gain optique théorique est plus important dans le cas d'une couche de 15,7 %.

La température de disparition de l'effet laser est elle aussi améliorée de 90 K et atteint 195 K avec un seuil néanmoins élevé de $1,42 MW.cm^{-2}$. L'empilement (2) est une hétérostructure avec des couches de 13 % de part et d'autres de la couche active, synthétisées dans le but de confiner les porteurs dans la couche de plus forte teneur. Enfin, le maximum de gain du GeSn 15,7 % est plus élevé que celui de 13 %, d'autant plus lorsque la température est importante. Tous ces facteurs permettent donc d'accroître les performances lasers indépendamment de la déformation.

L'émission laser à 25 K a lieu à 0,439 eV. L'ajout d'étain a donc décalé le gap direct, à plus basse énergie, de 48 meV. La valeur théorique attendue pour un gap relaxé à 15,7 % est 0,385 eV à 25 K.

Des structures avec différentes tailles de bras tenseurs ont été élaborées à partir de l'empilement de 15,7 %. Une image MEB est exposée figure 2.39 (a). Les structures avec des longueurs de bras de 0 μm , 37,5 μm , 50 μm , et 75 μm ont été analysées sous pompage impulsionnel. Plus le bras est long, plus la déformation est importante au centre de la cavité. Plus la déformation appliquée est conséquente, plus l'émission laser se déplace vers les basses énergies en accord avec le décalage énergétique du gap.

Pour les mêmes raisons que la structure relaxée de 15,7 % d'étain (meilleure qualité cristalline de l'empilement et gain plus considérable induit par l'ajout d'étain), l'effet laser est observable sur toutes les structures même les plus déformées à la différence des croix avec une teneur d'étain de 12,7 %.

A 25 K, l'énergie d'émission est de 0,434 eV et 0,334 eV, pour respectivement des bras de longueurs 0 μm et 75 μm . D'après la figure 2.37 ceci correspond à une déformation d'au-moins 0,3 % pour le cas le plus déformé¹⁰. Il est à remarquer que la structure avec $L=0 \mu m$ de taille de bras a une énergie d'émission proche de celle de la structure à l'état relaxé, l'écart entre les deux structures n'est que de 5 meV. Bien qu'il soit du même ordre de grandeur, le seuil de la structure avec $L=0 \mu m$ de $556 kW.cm^{-2}$ est légèrement supérieur ou égal à celui de la structure relaxée de $360 kW.cm^{-2}$ à 25 K. L'inhomogénéité de la déformation bi-axiale le long de la cavité semble donc augmenter le seuil.

A forte injection, soit une puissance surfacique incidente de pompage supérieure à $2 MW.cm^{-2}$, d'autres modes lasers apparaissent à plus haute énergie. Certaines différences sont toutefois notables entre les membranes. Ces modes se situent à espacements réguliers de 13 meV (3 THZ) dans le cas de structures où $L = 37,5 \mu m$ et $75 \mu m$, correspondant à une longueur de cavité fabry-pérot équivalente de $l_{cav}=12,5 \mu m$. Cette valeur est en accord avec la longueur de cavité de 20 μm (miroir à miroir) du dispositif.

Dans le cas d'une croix de longueur de bras de 75 μm , on observe également un saut de mode

10. Si l'on considère le décalage de 54 meV observé entre le pic laser de la structure relaxée et son émission théorique, la structure avec $L = 75 \mu m$ aurait un gap avoisinant 0,28 eV et une déformation plus proche de 0,6 %, ce qui est en partie confirmé par le spectre sous le seuil (coté basse énergie) de ce dispositif.

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTE BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

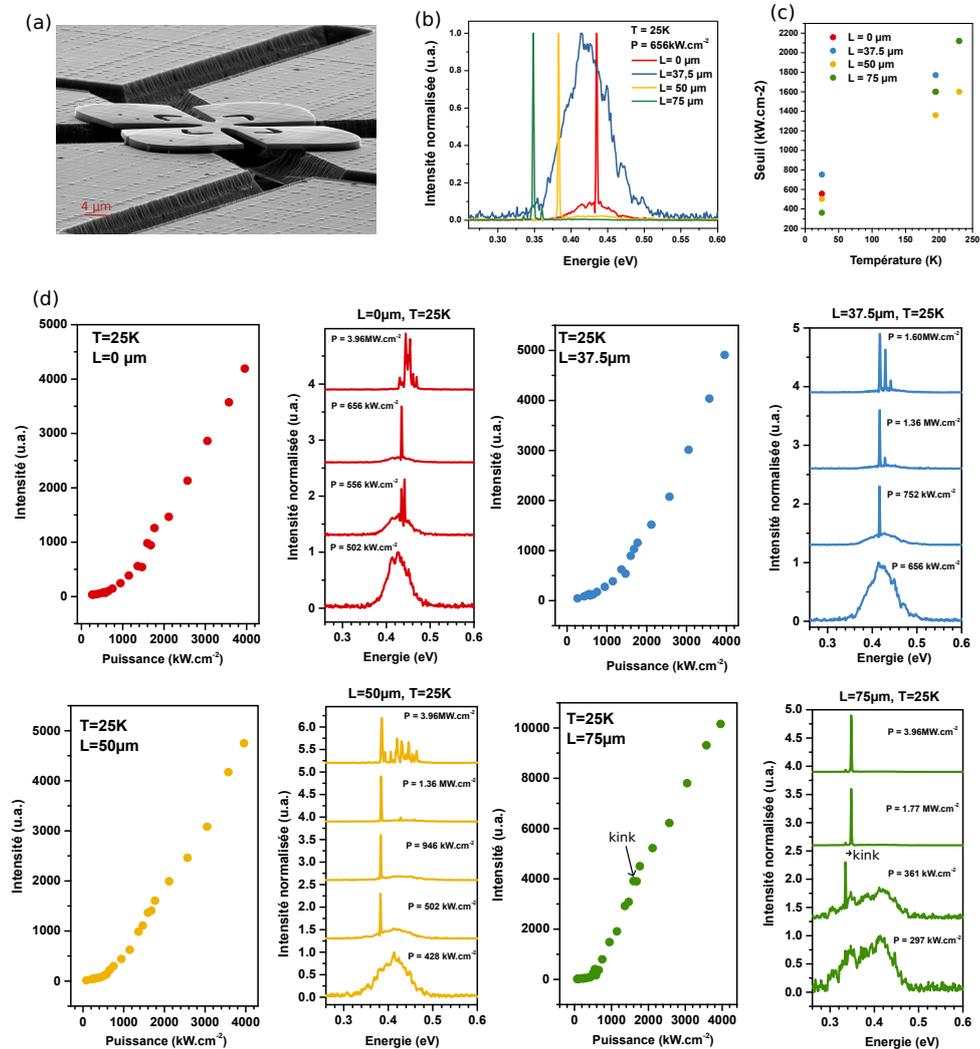


FIGURE 2.39 – Membrane suspendue de 15,7 % - (a) Image MEB de la structure. (b) Décalage de l'émission en énergie en fonction de la longueur de bras tenseur à 25 K. (c) Évolution du seuil en fonction de la température pour différentes longueurs de bras. (d) Courbes intensité - puissance et spectres associés pour différentes longueurs de bras à 25 K.

("kink" en anglais figure 2.39 (d)), phénomène connu pour d'autres structures lasers InGaAsP [76]. Ce saut est aussi visible sur la courbe intensité-puissance par une légère non linéarité. Cette rupture de pente se produit au voisinage d'une puissance surfacique de $1,6 \text{ MW.cm}^{-2}$. Ceci s'explique théoriquement par le décalage, et l'étalement de la courbe de gain vers les plus hautes énergies venant sélectionner un autre mode préférentiellement à celui de plus basse énergie.

Une étude en température a également été menée. Les courbes intensité-puissance sont représentées figure 2.40. Des spectres associés ont été réalisés figures 2.41 et en annexe F. Les seuils sont à hautes températures du même ordre de grandeur que celui de la structure relaxée, 1,5

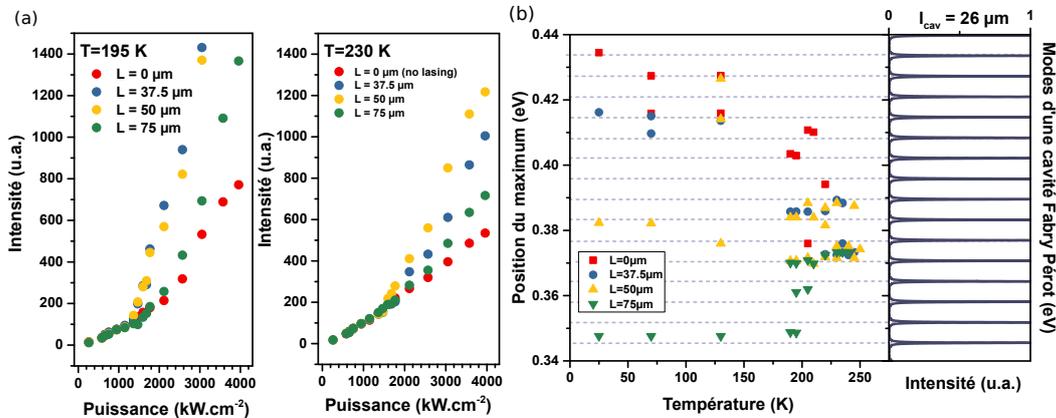


FIGURE 2.40 – (a) Courbes Intensité- puissance optique incidente à 195 K et 230 K. (b) Comparaison entre la positions énergétiques expérimentales des maximum (mode laser) pour différentes températures et différentes longueurs de bras et les modes analytiques d'une cavité Fabry-Pérot.

MW.cm⁻². La rupture de pente entre les deux régimes est peu marquée à cause de l'importance de l'émission spontanée en zones périphériques de la cavité par rapport à l'émission laser détectée.

L'intervalle spectral libre (ISL) déterminé expérimentalement avec l'étude en température est deux fois plus faible que celui trouvé précédemment à 25 K et vaut 6,25 meV (1,51 THz). Cette valeur d'intermodes correspond à une longueur de cavité Fabry-Pérot de 26,5 μm. Il est à noter que la compétition de modes ou un important décalage de la courbe de gain ont peut-être empêché l'expression de tous les modes vicinaux de la cavité, faussant dans le même temps la mesure de l'ISL dans le cas précédent à 25 K. Un modèle analytique simple de cavité Fabry-Pérot à miroirs parallèles dont l'équation est rappelée en annexe G, avec la longueur de la cavité effective de $l_{cav}=26,5 \mu m$ a également été représenté figure 2.40. L'imprécision sur l'indice effectif, et plus généralement de l'indice du matériau en fonction de la température peut décaler légèrement les résonances de la cavité. C'est pourquoi dans certains cas, il existe un décalage en énergie entre le pic laser et le mode calculé à partir de la formule d'une cavité Fabry-Pérot.

L'évolution de l'effet laser sur les deux structures les moins déformées est similaire à celle de la structure relaxée et semble suivre la variation typique du gap en température imposée par la loi de Varshni, se caractérisant par un décalage vers les basses énergies avec une élévation de la température. L'effet laser commence à disparaître à 210 K pour être totalement effectif à 220 K pour la membrane avec $L=0 \mu m$. Pour une croix de bras tenseurs de 50 μm de long, le pic laser reste relativement constant en énergie. La compensation de la loi de Varshni provient de la perte de déformation de la zone de gain induite par la dilatation des bras de germanium en température. Dans le cas $L=75 \mu m$, le pic laser se déplace vers les hautes énergies. L'effet laser disparaît au voisinage de 245 K (plus ou moins 5 K) pour les trois structures les plus déformées. Elles émettent dans la même gamme d'énergie, entre 0,37 et 0,39 eV, montrant que l'écart de déformation n'est pas assez net pour conclure sur une élévation de la température limite de fonctionnement laser

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTES BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

grâce à la déformation entre ces trois structures. Toutefois, un gain en température de 25 K est visible entre ces structures et celle avec un bras de $L=0 \mu\text{m}$.

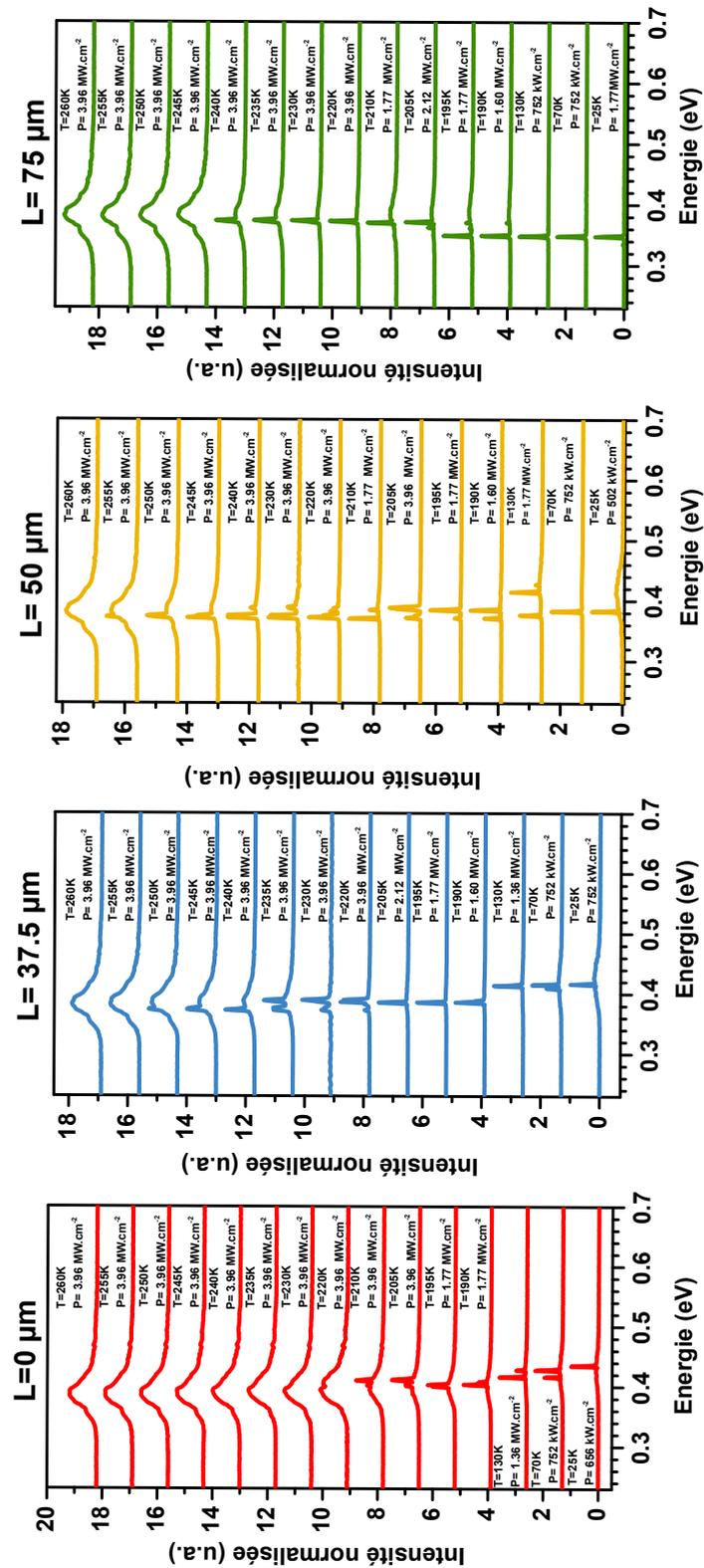


FIGURE 2.41 – Évolution en fonction de la température de l'effet laser pour des longueurs de bras de 0; 37,5; 50; 75 μm pour des croix de GeSn 15.7 %.

2.3 Conclusion

Dans ce chapitre, des disques de GeSn avec une concentration de 10,4 % ont été mis en déformation avec une couche de tenseur de nitrure.

Ce procédé a permis d'atteindre une déformation bi-axiale en surface de l'ordre de 0,9 % pour un disque encapsulé par le nitrure, d'après la spectroscopie Raman. Des coupes radiales en spectroscopie Raman ont également montré que la déformation est inhomogène, notamment dans le cas d'un disque avec une couche tenseur uniquement sur le dessus. Ce constat est également confirmé par des simulations comsol. Toutefois, les disques avec un petit diamètre (7 μm par exemple) semblent plus homogènes en surface et plus déformés.

L'effet laser a été observé sous pompage optique impulsif jusqu'à une température de 120 K pour toutes les structures à l'exception du disque avec la couche de nitrure sur le dessus.

Une approche de déformation bi-axiale par redistribution des déformations résiduelles a également été mise en œuvre et a permis de moduler l'état de déformation localement au centre d'une structure en forme de croix grâce à différentes longueurs de bras tenseur en Ge. La déformation maximale mesurée à 300 K a été obtenue pour une longueur de bras tenseur de 125 μm et vaut 0,3 %. Les simulations de déformation sous-estiment légèrement cet état de déformation, sans doute à cause de l'incertitude sur l'état de déformation résiduelle du substrat virtuel de germanium. La relaxation de cette déformation résiduelle en tension est en effet responsable de l'amplification locale de la déformation du GeSn au centre de la croix. Lors d'un refroidissement, la contraction des bras de germanium provoque une élévation de la déformation par rapport à la température ambiante.

Une cavité laser témoin à l'état relaxé a été réalisée montrant que le gain du matériau est supérieur aux pertes optiques pour les couches de 12,7 % et 15,7 %. Toutefois, lorsque cette même cavité est déformée en tension, l'effet laser sous pompage optique impulsif n'a pas lieu pour une couche de 12,7 % en étain. Dans ces conditions, une contribution de la photoluminescence vers les basses énergies est néanmoins visible témoignant de l'état de déformation en tension du matériau. En revanche, l'effet laser observé sur les croix fabriquées à partir de la couche de GeSn de 15,7 % d'étain indique que le gain intrinsèque du matériau, plus élevé dans ce cas car plus riche en étain, compense les pertes induites par les inhomogénéités locales de déformation au sein la cavité.

Ce chapitre a permis de constater quelques points communs entre ces deux types de structure laser :

- l'importance d'une déformation homogène au sein du milieu à gain qu'il s'agisse de disques contraints par couche tenseur ou de croix déformées par la redistribution de contrainte. Cette condition est nécessaire pour avoir du gain modal et donc observer l'effet laser, sans quoi, le seuil peut devenir conséquent ou même l'effet laser disparaître totalement comme sur les disques contraints par le dessus ou encore pour les croix de 12,7 % déformées
- l'absorption inter-valence peut diminuer considérablement le gain net sur une gamme énergétique

CHAPITRE 2. ETUDE DE L'EFFET LASER SOUS L'APPLICATION D'UNE CONTRAINTE BI-AXIALE SELON LE PLAN (001)

- l'absorption par porteurs libres devient de plus en plus importante lorsque le gap du matériau se réduit et atténue fortement le gain du matériau
- lorsque l'effet laser a lieu, l'émission laser se décale vers les basses énergies sous l'effet de la déformation comme prévu par les simulations de la méthode des potentiels empiriques. La zone à gain soumise à une déformation en tension se décale donc en énergie, témoignant d'une accordabilité possible en longueur d'onde en fonction de la déformation appliquée.

Tous ces facteurs sont à prendre en considération, lorsqu'on veut déformer le matériau en tension bi-axialement de manière efficace et observer une éventuelle amélioration des performances laser.

Déformation uni-axiale selon l'axe [100] induite par des structures micro-ponts

Sommaire

3.1	Micro-ponts relaxés témoins	100
3.2	Fabrication de ponts suspendus	103
3.3	Couche de 13 % : Loi empirique Raman uni-axiale et lien avec la température de l'effet laser	103
3.4	Couche de 16 % : Effet laser à 273 K	124
3.5	Conclusion	136

Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser à la déformation uni-axiale. Cette déformation est possible en utilisant la même approche que les membranes bi-axiales avec des bras tenseurs de germanium, initialement en tension résiduelle. La structure employée ici est une micro-poutre orienté à 45° selon les plans de clivage naturels (110) afin de s'aligner et déformer sur l'axe [100]. Nous allons donc estimer la déformation uni-axiale appliquée par spectroscopie Raman, en mesurer l'effet sur les bords de bandes et les performances laser en pompant les cavités optiquement.

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

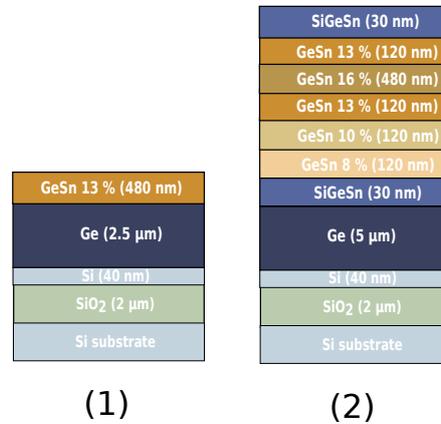


FIGURE 3.1 – Configuration des empilements pour une couche active (1) de 12,7 % et (2) de 15,7 %.

3.1 Micro-ponts relaxés témoins

Comme pour les croix, des structures de types ponts relaxés ont été élaborées à partir des empilements de 12,7 % et 15,7 % de façon à avoir des échantillons témoins. Les empilements respectifs ont été rappelés figure 3.1. Le design et les images MEB des dispositifs se trouvent figure 3.2.

La cavité a l'avantage contrairement aux croix, d'avoir la partie à gain en forme de guide. Ceci



FIGURE 3.2 – (a) Motif utilisé pour la réalisation des micro-ponts de référence à l'état relaxé de 12,7 % et 15,7 %.

permet de confiner le mode optique tout en pouvant appliquer une déformation plus homogène et importante. La rétro-action est assurée par les miroirs en coins cubes de part et d'autre du pont et dont le principe est présenté dans la section 2.2.2. Leur caractérisation optique est montrée figure 3.3.

L'émission laser est naturellement quasi-inchangée en énergie par rapport aux croix suspendues relaxées avec une émission respective à 0,490 eV ou, à 0,439 eV pour les empilements de 12,7 % et 15,7 %. Ainsi, on peut supposer que le maximum de gain est identique entre les croix et les ponts étant donné que la déformation et la concentration d'étain restent inchangées. Pourtant, le seuil est plus faible dans les cas des micro-poutres. La présence du pont permet de mieux guider les modes se propageant dans la cavité pour ces structures.

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

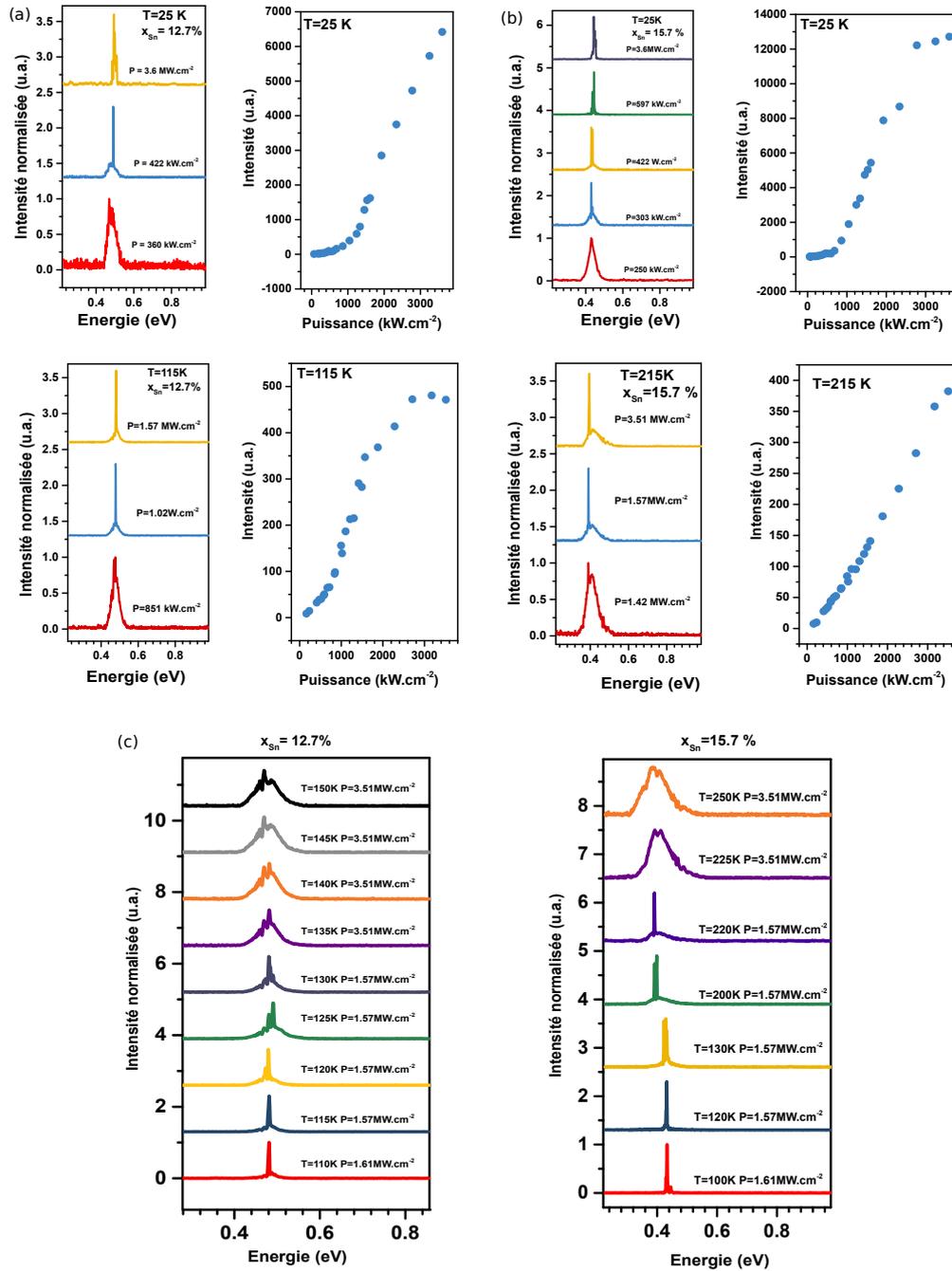


FIGURE 3.3 – Courbes Intensité puissance et leurs spectres associés dans le cas (a) d'une concentration de 12,7 % à 25 K et à 115 K, (b) d'une concentration de 15,7 % à 25 K et à 215 K sur des ponts relaxés. Spectres en fonction de la température pour des micro-poutres de 12,7 % et 15,7 %.

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

Comparaison entre les structures				
	Croix 12,7 %	Ponts 12,7 %	Croix 15,7 %	Ponts 15,7 %
Emission laser (eV)	0,488	0,490	0,439	0,439
Seuil à 25K ($kW.cm^{-2}$)	700	422	360	303
Température limite (K)	105	115	195	215

TABLE 3.1 – Tableau regroupant les caractéristiques laser pour les différentes structures relaxées.

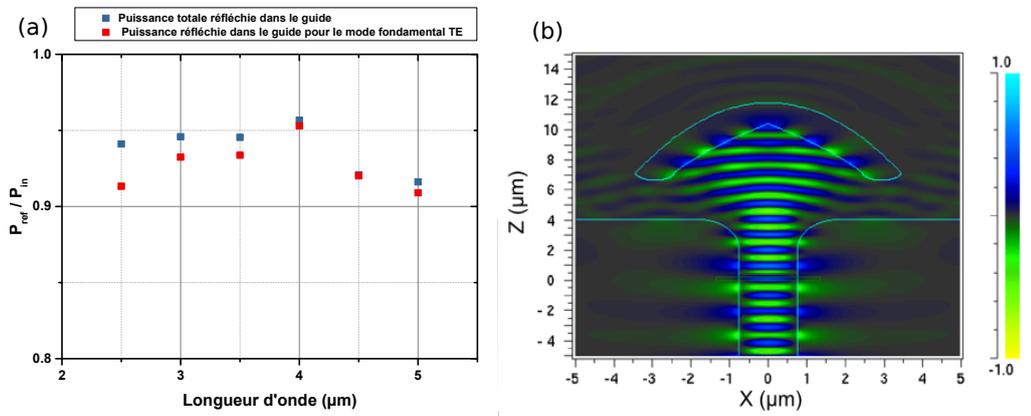


FIGURE 3.4 – Simulation FDTD via le logiciel RSOFT. (a) Puissance réfléchie mesurée par rapport à la puissance incidente. (b) Composante H_z montrant la propagation du mode TE dans la cavité au voisinage du miroir.

Des simulations FDTD ont également été réalisées par Vincent Reboud du LETI à partir du logiciel commercial RSOFT. Un mode TE fondamental et monochromatique est propagé depuis le centre du pont puis réfléchi au niveau des miroirs en coin de cube. La puissance réfléchie est ensuite mesurée en fonction du temps grâce à un détecteur placé de façon transverse par rapport au guide, puis comparée à la puissance incidente émise une fois la convergence atteinte. La réflectivité modale est supérieure à 0,9 sur une large de longueur d'onde allant de 2,5 μm à 5 μm (voir figure 3.4). Pour une longueur d'onde de 4 μm , la réflectivité modale atteint 95 %. Le facteur de confinement pour le mode fondamental TE vaut 0,9816 et 0,9324 respectivement pour des longueurs d'onde de 2,5 μm et 5 μm dans le guide.

Nous avons vu dans le chapitre 1, que la polarisation TM de la lumière induite par la déformation uni-axiale est également possible. Les dimensions du guide permettent à cette polarisation TM de se propager dans le guide, mais à 4 μm la réflectivité modale du miroir est moins élevée que celle du mode TE et vaut 89,6 %.

3.2 Fabrication de ponts suspendus

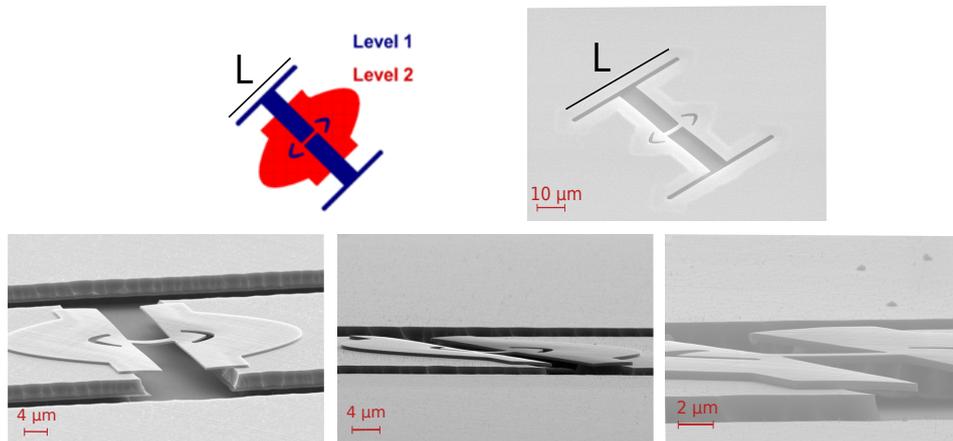


FIGURE 3.5 – Images MEB montrant la mise en tension du pont au cours de la gravure HF. Images (de gauche à droite) prises à 2 min 20s, 12 min 30s et en fin de gravure HF.

Les étapes d'élaboration des micro-poutres sont exactement les mêmes que les croix présentées 2.2.3. Les bras tenseurs de germanium libérés par la sous-gravure de la couche sacrificielle d'oxyde sont à la base de la mise en tension comme le montre la succession d'images MEB prises à différents intervalles de sous-gravure (figure 3.5). A l'instar des croix, le pont est initialement en compression. La sous-gravure du germanium est l'origine de cette compression entraînant le flambage de la structure de façon similaire à une poutre maintenue par deux points fixes à chaque extrémité subissant une charge.

3.3 Couche de 13% : Loi empirique Raman uni-axiale et lien avec la température de l'effet laser

3.3.1 Simulation de la déformation via COMSOL

Les paramètres géométriques rentrés dans COMSOL sont établis à partir des images MEB afin d'approcher au mieux la structure et d'estimer la déformation (figure 3.6). L'ensemble de ces paramètres est regroupé dans le tableau situé en annexe D.

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

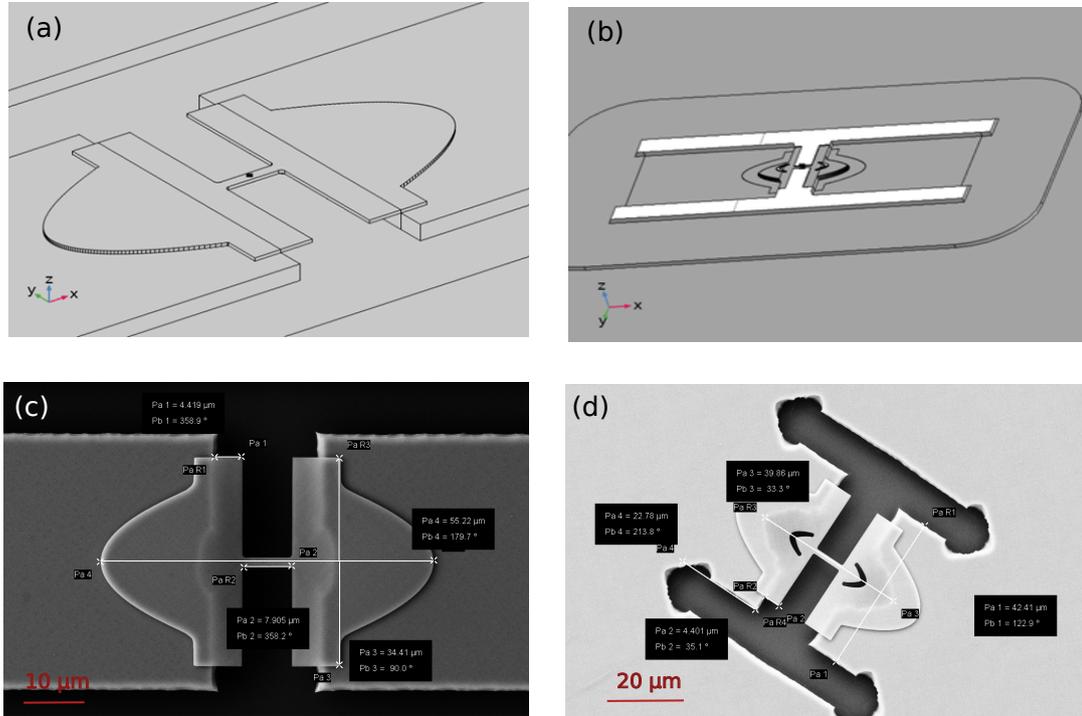


FIGURE 3.6 – Géométries rentrées dans Comsol pour des ponts sans (a) et avec (b) miroirs et les images MEB respectivement associés (c) et (d). (b) est une vue du dessous où le substrat de Si a été temporairement enlevé pour une meilleure visibilité des différentes couches sous-gravées.

Évolution de la déformation en fonction de la sous-gravure de Ge et de la longueur de bras

Comme indiqué section 3.2, le flambage du pont a lieu lors de la première étape de sous-gravure du Ge, résultant de la mise en compression de la poutre induite par la relaxation de la compression résiduelle du GeSn sous-gravé.

Les simulations présentées figure 3.7 reproduisent cette étape 1, lorsque le germanium est gravé. Plus cette sous-gravure est significative, plus l'état de déformation se trouve en compression au centre du pont suivant une loi linéaire¹ :

$$\epsilon_{xx}(\%) = -0,09946 u_{Ge}(\mu m) - 0,73757$$

Pour une sous-gravure de Ge de 4,4 μm , sous-gravure qui est mesurée expérimentalement dans le cas de notre échantillon, également visible sur l'image MEB figure 3.6 (d), la déformation vaut -1,18 %. Il est également essentiel de vérifier que les déformations des couches de Ge et GeSn

1. Cette relation n'est pas valable pour une longueur de sous-gravure inférieure à la largeur du pont soit $u_{Ge} < 0,75 \mu m$; le pont central n'est pas libéré du substrat virtuel de Ge.

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

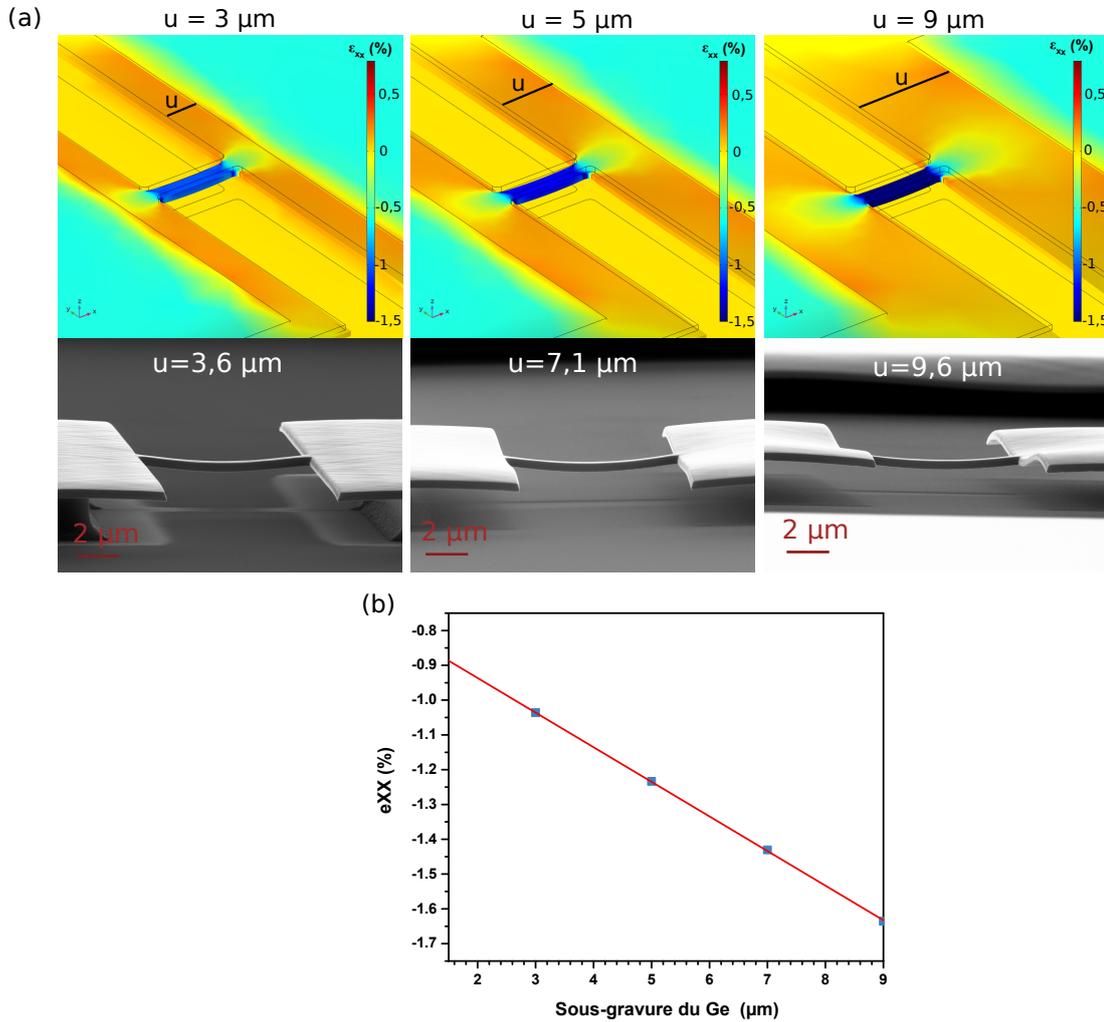


FIGURE 3.7 – (a) Cartographie de la déformation uni-axiale dans le pont pour différentes longueurs de sous-gravure Ge et images MEB associées pour des gravures du Ge similaires. (b) Évolution linéaire de la déformation uniaxiale au niveau du centre du pont en fonction de la sous-gravure du Ge.

loin de la sous-gravure sont bien les valeurs de déformation résiduelle initialement mesurées par RSM dans le chapitre 1, soit respectivement 0,14 % et -0,57 %. Cet état de compression au niveau du pont est ensuite inversé par libération des bras tenseurs de germanium, comme on peut le voir sur la figure 3.8. Le centre du pont pour une longueur de bras de 50 μm est encore en compression de -0,48% alors que pour $L=300\mu\text{m}$ l'état de déformation atteint une valeur de 0,68 % en tension à température ambiante. L'évolution des déformations ϵ_{xx} , ϵ_{yy} , ϵ_{zz} au centre du pont en fonction de la longueur de bras est aussi décrite sur la même figure. Le coefficient de Poisson prévu par la loi de Vegard $\nu_{GeSn}(12,7\%) = 0,273$ est ainsi bien retrouvé entre les composantes tel que $\epsilon_{xx} = -\nu_{GeSn}\epsilon_{yy}$.

Il est important de noter que la déformation du pont, lorsque commence la gravure de la couche

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

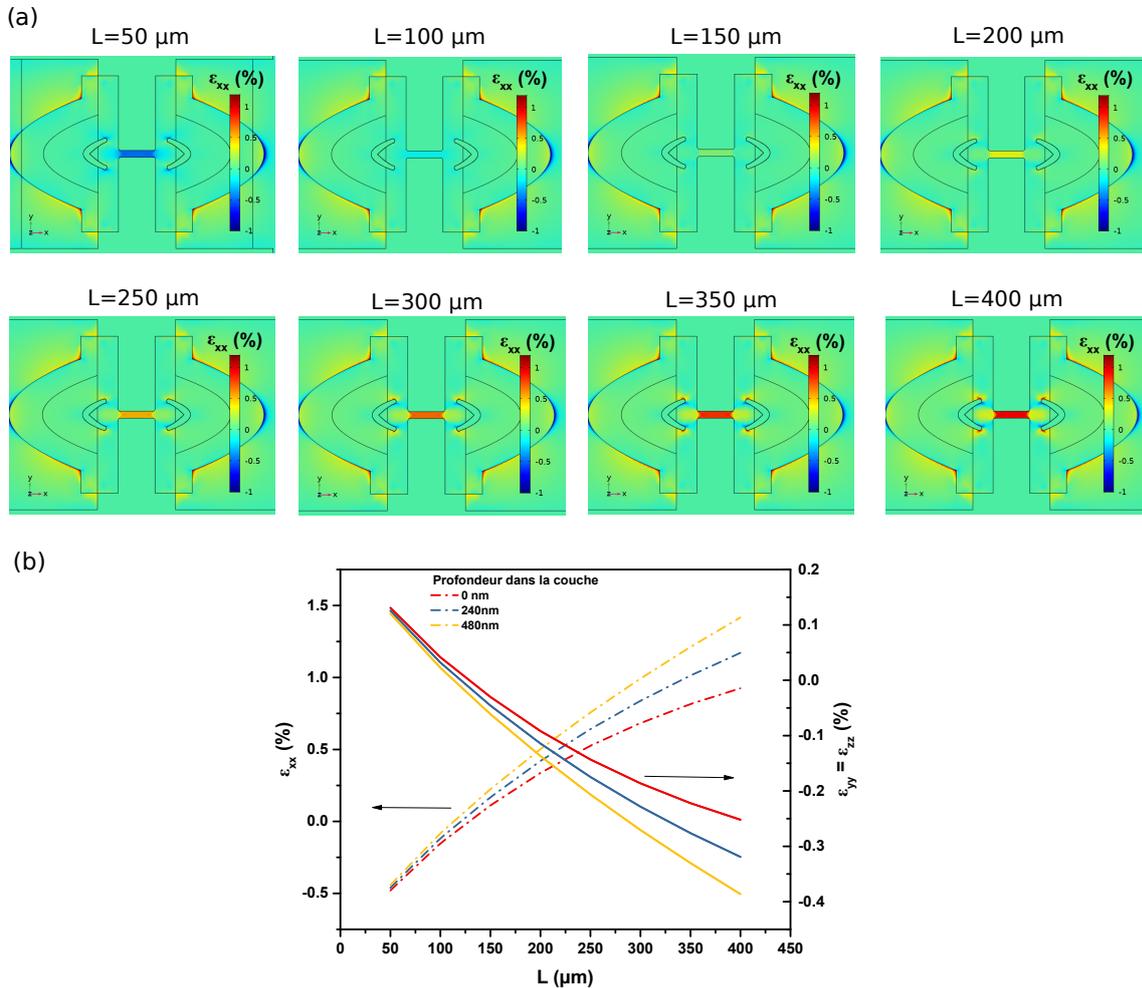


FIGURE 3.8 – (a) Cartographie et (b) valeurs au centre du pont de la déformation uni-axiale en fonction de la taille des bras pour un pont de 12,7% Sn.

de silice, n'est pas nulle et se trouve en forte compression, contrairement au cas de la libération des micro-poutres de GeOI (Germanium On Insulator) qui eux se trouvent même en légère tension initialement [18]. Il en résulte donc un "retard" dans la mise en tension uni-axiale par rapport au cas du GeOI.

Dépendance de la déformation en fonction de la température

Les simulations prenant en compte la dilatation des bras de germanium avec la température vont permettre d'évaluer l'état de déformation de la cavité laser lors de l'étude de l'effet laser à plus basses températures. De façon analogue aux croix, l'étirement de bras lors du refroidissement en température provoque une contrainte thermique en tension supplémentaire (voir fig

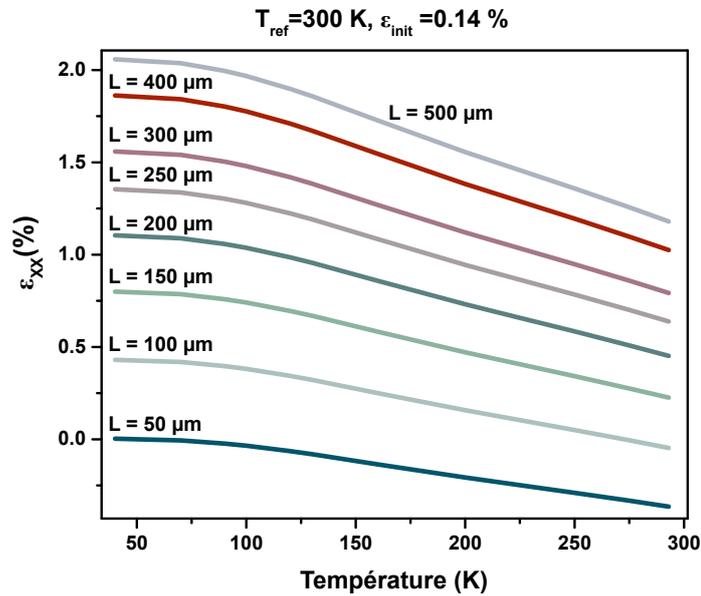


FIGURE 3.9 – Évolution de la déformation au centre d'un pont de 12,7% Sn en fonction de la température pour différentes longueurs de bras tenseurs.

3.10) sur la constriction centrale passant de 0,64 % à 1,35 % lors d'un refroidissement de 293 K à 40 K dans le cas d'un pont de longueur de bras de 250 μm . Les cartographies en déformation de l'ensemble du pont exposées pour le cas $L=50 \mu\text{m}$ montrent clairement le passage de l'état initialement en compression à température ambiante à un état en très légère tension de $3.10^{-3} \%$ pour $T=40 \text{ K}$. La déformation est homogène le long du guide de 8 μm mais un gradient de déformation apparaît dans le reste de la cavité. La partie de GeSn encore ancrée dans le germanium a une déformation voisine de celle initiale de la pleine couche de GeSn de -0,57% à la différence de la partie sous-gravée et en dehors de la constriction qui elle est partiellement relaxée, en accord donc avec le résultat simulé pour l'étape de sous-gravure du germanium lors du premier niveau de lithographie, avant la gravure de la silice.

3.3.2 Correspondance décalage Raman et déformation absolue.

Diffraction micro-Laue

La loi de correspondance entre la déformation uni-axiale et le décalage spectral Raman n'est pas connue pour le GeSn. La mesure de déformation par rayons X est généralement la méthode employée pour avoir accès au paramètre de maille du cristal et par conséquent l'état de déformation.

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

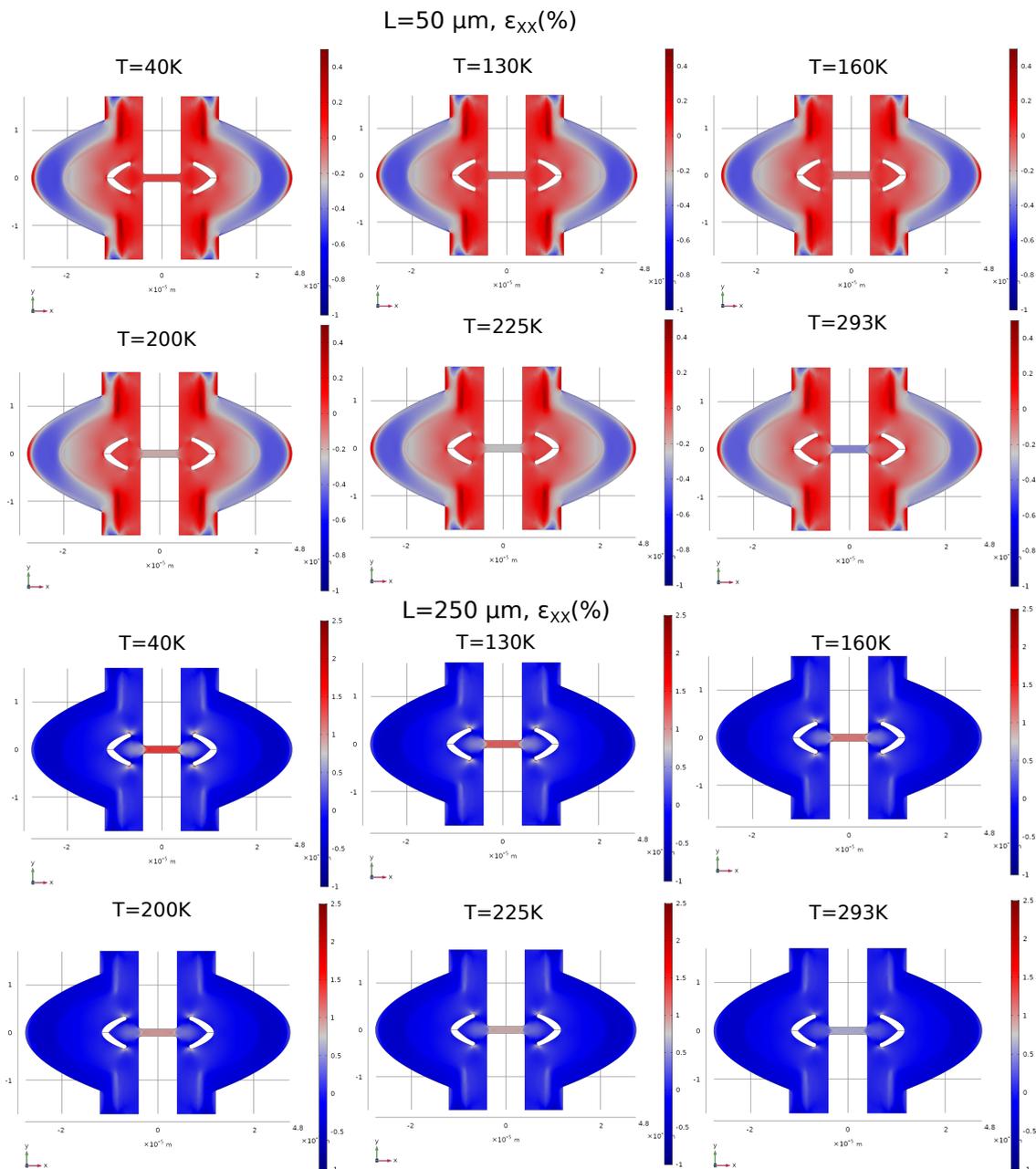


FIGURE 3.10 – Cartographie spatiale d'un pont de 12,7% Sn en fonction de la température pour $L= 50\mu\text{m}$ et $L=250\mu\text{m}$.

Elle est néanmoins délicate dans le cas de micro-structures et la focalisation du faisceau de rayon X nécessite d'utiliser une ligne de lumière synchrotron. La diffraction micro-Laue va permettre de mesurer la déformation au centre du pont pour différentes longueurs de bras en appliquant la même démarche que celle qui a été précédemment effectuée sur des ponts de Ge [77]. Réalisée par Samuel Tardif sur la ligne BM 32 de l'ESRF sur des ponts de 12,7 %, l'expérience

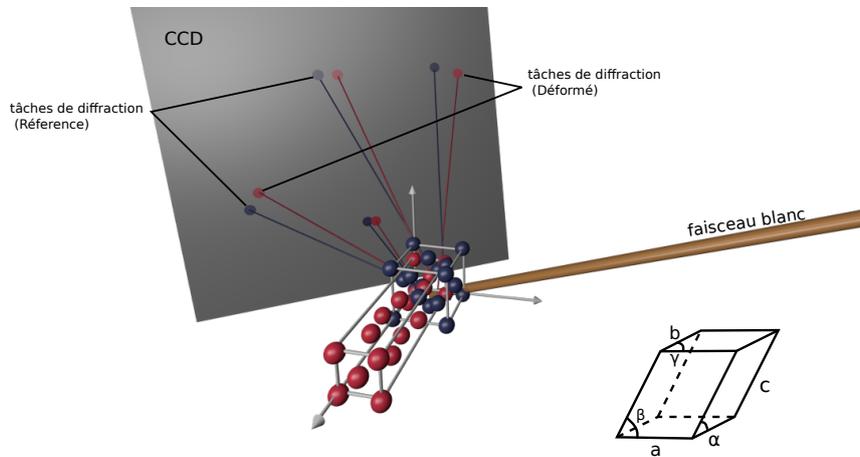


FIGURE 3.11 – Schéma explicatif de l'expérience de micro-laue. Le cristal non déformé servant de référence est présenté en bleu tandis que celui déformé uniaxialement est représenté en rouge. Le faisceau incident polychromatique est diffracté différemment selon les paramètres du cristal $\frac{b}{a}$, $\frac{b}{c}$, α , β , γ . La figure de diffraction est récupérée grâce à une caméra CCD.

consiste à focaliser un faisceau X blanc (polychromatique) sur l'échantillon et d'observer la figure de diffraction Laue sur un détecteur 2D comme l'indique le schéma explicatif figure 3.11. L'indexation de ce diagramme de Laue donne accès au rapport de longueurs des paramètres de mailles $\frac{b}{a}$, $\frac{b}{c}$ et aux angles du cristal α , β , γ . Afin de s'affranchir de la direction du faisceau X incident, de l'orientation de l'échantillon et du détecteur, un étalonnage est effectué à partir d'un cristal de référence non déformé. Ici un wafer de germanium sert de référence. De plus, la technique de micro-Laue est insensible à la composante de déformation hydrostatique et ne donne donc qu'accès au tenseur déviatorique de la déformation ϵ_d défini selon :

$$\epsilon^d = \epsilon - \frac{1}{3}Tr(\epsilon)$$

Il est possible d'obtenir la composante hydrostatique de la déformation mais il est nécessaire d'effectuer des mesures complémentaires par l'analyse de l'énergie des photons pour une tâche de Laue donnée. Pour remonter à cette information, on place une lame diamant en amont de l'échantillon. Cette lame utilisée en transmission joue le rôle de monochromateur, filtrant les énergies du faisceau polychromatique incident en fonction de son orientation. Chaque tâche de diffraction disparaît pour une certaine orientation de la lame. La correspondance entre la valeur de l'énergie éteinte et l'angle de la lame est déterminée en calibrant préalablement les extinctions énergétiques sur un cristal connu pour chaque valeur d'angle de la lame.

Les résultats sont présentés figure 3.12. La figure de diffraction Laue est également exposée. La difficulté de l'exploitation de la figure de diffraction réside dans l'élargissement des tâches de diffraction à cause d'un gradient de concentration ou/et d'un gradient de déformation. La tendance est la même que celle observée pour la simulation Comsol. Deux régimes sont visibles; dans un premier temps la déformation semble linéaire avec la longueur de bras tenseur, puis

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

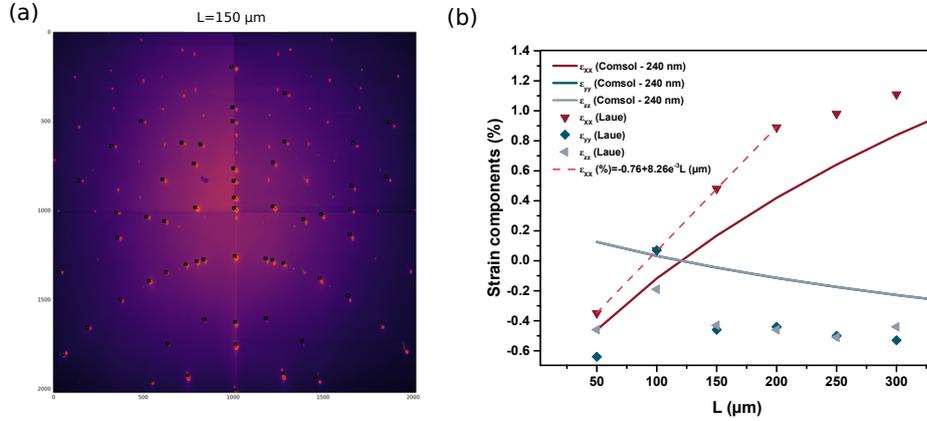


FIGURE 3.12 – (a) Figure de diffraction micro-Laue pour le pont $L = 150 \mu\text{m}$. (b) Déformations $\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy}, \epsilon_{zz}$ en fonction de la longueur de bras.

pour des longueurs supérieures à $200 \mu\text{m}$ une rupture de pente apparaît traduisant un effet de saturation. Cette saturation peut être attribuée à une déformation plastique. Le pont le moins déformé est encore en compression avec une déformation ϵ_{xx} à $-0,35 \%$. Ces composantes ϵ_{yy} et ϵ_{zz} sont en compression alors qu'une contrainte uni-axiale en compression suivant un axe devrait générer une expansion selon les axes transverses (ϵ_{yy} et ϵ_{zz} positifs). Il existe donc un écart à une déformation purement uni-axiale. La déformation maximale est atteinte pour le pont de $L = 300 \mu\text{m}$ avec une déformation valant $1,11 \%$ à température ambiante. Une extrapolation linéaire à partir des données obtenues en micro-Laue est effectuée pour les ponts les moins déformés. Pour une longueur de bras nulle, le pont serait en compression à $-0,76 \%$. Cette ordonnée à l'origine, plus importante que la déformation mesurée via RSM, résulte de la mise en compression du centre de la cavité par la sous-gravure du Ge. Toutefois, la déformation simulée par Comsol pour une sous-gravure de $4,4 \mu\text{m}$, section 3.3.1 est plus élevée et indiquait une valeur de déformation uni-axiale de $-1,18 \%$.

Mesure expérimentale de la déformation uni-axiale par spectroscopie Raman

Parallèlement ces ponts ont été caractérisés optiquement en spectroscopie Raman dans les mêmes conditions que celles énoncées dans le chapitre 2 pour éviter un décalage dû à la température. Les spectres sont représentés figure 3.13. Le décalage Raman de la diffusion Ge-Ge augmente en valeur absolue par rapport au pic de référence en germanium dans un premier temps jusqu'à une longueur de bras de $300 \mu\text{m}$. Au-delà, un phénomène de saturation est visible à l'image des mesures micro-Laue. D'ailleurs tous ces ponts ont cassé et n'ont pu être caractérisés sous pompage optique. Pour une couche totalement relaxée de GeSn, la dépendance en Sn provoque un décalage du pic Raman de $\Delta\omega = -88x_{Sn} = -11,17 \text{cm}^{-1}$ pour $x_{Sn} = 12,7\%$. On peut donc déjà

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

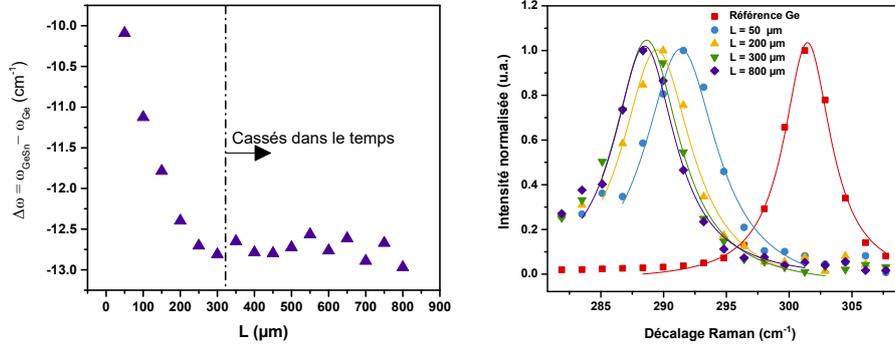


FIGURE 3.13 – Évolution du décalage Raman par rapport à la référence de Ge en fonction de la longueur de bras tenseur (à gauche) et spectres Raman associés (à droite).

conclure de manière qualitative que le pont avec une longueur de bras de $50 \mu\text{m}$ est toujours en compression, toujours en accord avec les résultats obtenus dans les parties précédentes. Les coefficients de déformation Raman p et q reliant décalage Raman et déformation ne sont pas connus pour des concentrations supérieures à 3 % de Sn [78]. Cependant, on peut émettre en première approximation que ceux-ci sont indépendants de la concentration en étain². Cette hypothèse nous permet alors de relier la valeur simulée par Comsol partie 3.3.1 au décalage Raman par la relation énoncée partie 2.1.3 et rappelée ici par :

$$\Delta\omega_3 = \omega_3 - \omega_0 \approx \frac{\lambda_3}{2\omega_0} = \frac{1}{2\omega_0} [p\epsilon_{zz} + q(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy})] \quad (3.1)$$

avec $p = -1,37e5 \text{ cm}^{-2}$ et $q = -1,83e5 \text{ cm}^{-2}$ $\omega_0 = 290.2 \text{ cm}^{-1}$. La tendance globale est respectée même si la simulation tend à sous-estimer la valeur de déformation à l'exception du pont avec les longueurs de bras les plus petites. Cet écart peut provenir :

1. d'une dépendance en étain des valeurs des potentiels p et q pour les plus hautes concentrations, venant infirmer l'hypothèse de départ
2. d'une incertitude de mesure du tenseur de déformation résiduelle de la couche de GeSn. Les tâches de diffractions sont assez étendues en particulier celles du GeSn à cause du désordre d'alliage provoqué par un gradient de concentration et déformation au cours de la croissance du matériau et ne permettent pas de le connaître avec plus précisions.
3. d'une incertitude de mesure du tenseur de déformation résiduelle de la couche de germanium. Les simulations sont basées sur les déformations résiduelles des couches déterminées par RSM. Or, une variation de 0,01 % dans la valeur de ces déformations initiales entraîne une variation d'environ 0,1 % sur la déformation simulée au centre du pont³

2. Ces coefficients sont constants avec la concentration en étain sur la gamme de 0 à 3 %. Cependant, des expériences complémentaires avec une teneur en étain plus importante sont nécessaires de façon à valider ou infirmer l'hypothèse faite ici.

3. On a donc un facteur d'amplification ("enhancement factor") induit par la forme de la structure d'environ 10. Sur des ponts fabriqués en germanium ce facteur de forme peut monter jusqu'à 24.

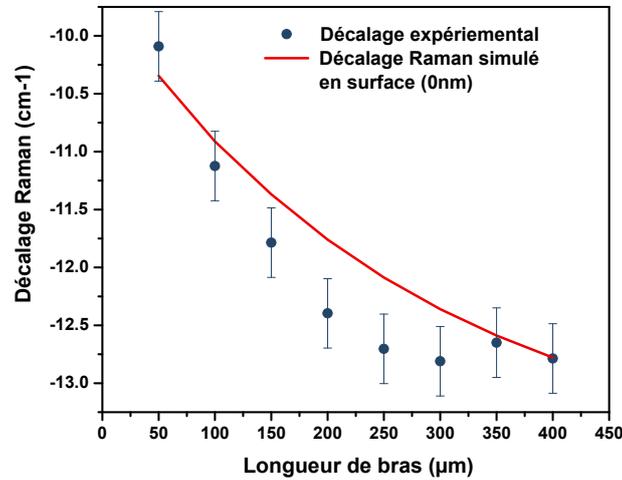


FIGURE 3.14 – Comparaison entre le décalage Raman expérimental et celui estimé à partir des potentiels de déformations raman p,q et des déformations extraites des simulations FEM.

Afin d'illustrer ces propos, j'ai représenté figure 3.15 (b) une coupe transversale au milieu du pont de GeSn de la composante ϵ_{xx} pour une valeur de tension résiduelle initiale de $\epsilon_0^{Ge} = 0,16\%$ au lieu de $\epsilon_0^{Ge} = 0,14\%$ (celle obtenue expérimentalement). D'après cette même simulation, il est à noter également qu'il y a un gradient de déformation ϵ_{xx} selon z dans le pont allant de 0,8 % en surface à 1,25 % à l'interface Ge-GeSn. Le flambage de la structure lors de la première étape de fabrication ainsi que le fait que les bras tenseurs de Ge ne soient pas dans le même plan que la constriction de GeSn sont probablement à l'origine de ce gradient.

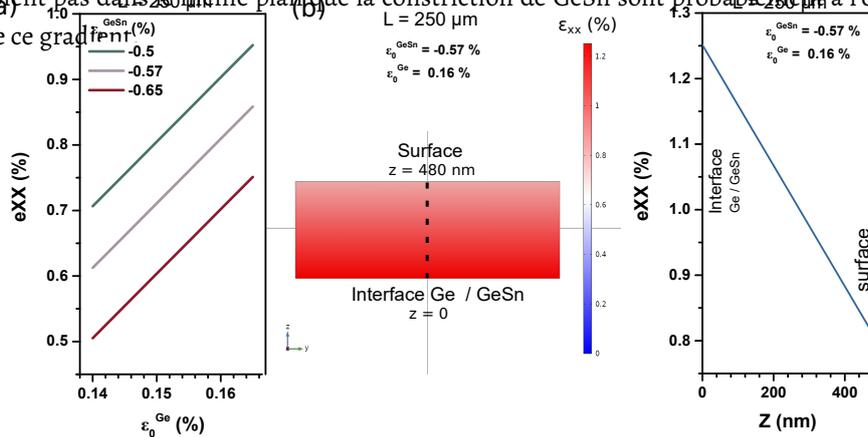


FIGURE 3.15 – (a) Évolution de la déformation uni-axiale au centre du pont en surface en fonction des déformations résiduelles de Ge et GeSn pour $L = 250 \mu\text{m}$. (b) Coupe transversale d'un pont avec une longueur de bras de $L = 250 \mu\text{m}$.

Loi Raman - Déformation

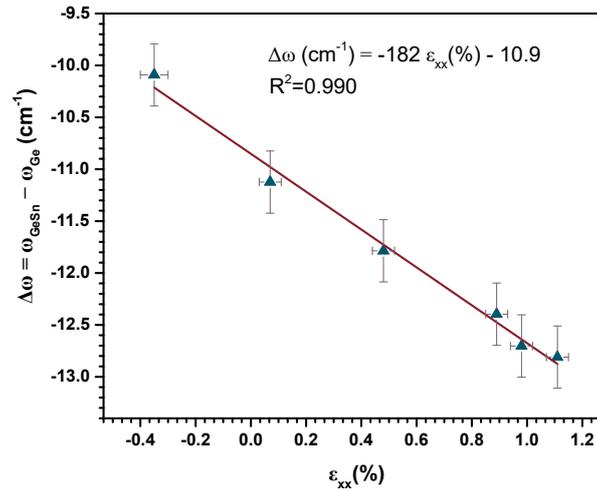


FIGURE 3.16 – Dépendance entre le décalage Raman et la déformation uni-axiale déterminée par micro-laue.

En supposant que la déformation soit purement uni-axiale selon [100], le décalage Raman (3.1) s'écrit selon :

$$\Delta\omega_3 = \frac{1}{2\omega_0} [(p + q) \frac{S_{12}}{S_{11}} + q] \epsilon_{xx} = k \epsilon_{xx} (\%) \quad (3.2)$$

avec k une constante déterminée par les constantes élastiques du matériau et les potentiels de déformation Raman. La synthèse des données Raman figure 3.13 et micro-Laue 3.12 permettent d'en déduire la constante k via une modélisation linéaire. La figure 3.16 (a) présente la dépendance entre déformation uni-axiale et décalage Raman. L'ordonnée à l'origine de la droite correspond au décalage dû à la concentration en étain de 12,7 %, à $0,27 \text{ cm}^{-1}$ de la valeur attendue, soit un écart relatif de 2,4%. Il y a un facteur de 2,86 entre le coefficient k de déformation bi-axiale et celui obtenu ici en uni-axiale. A titre de comparaison sur Ge pur, ce ratio est de également de $2,8^4$, traduisant une cohérence dans les valeurs trouvées. Si l'on suppose les coefficients p, q indépendants de la concentration en étain et les coefficients de souplesse $S_{11} = 7.49e^{-3} \text{ GPa}^{-1}$ et $S_{12} = -2.048e^{-3} \text{ GPa}^{-1}$ déterminés par loi de Vegard, on devrait obtenir une valeur pour k de $-158 \text{ cm}^{-1}/\%$ au lieu de $-182 \text{ cm}^{-1}/\%$ expérimentalement. Cet écart montre que :

- soit la loi de Vegard sur les coefficients de souplesse S_{ij} est trop éloignée des valeurs réelles,
- soit les coefficients p, q, r sont dépendant de la concentration en étain,
- la déformation n'est pas purement uni-axiale dans notre cas, il est nécessaire de résoudre l'ensemble des valeurs propres du déterminant séculaire (2.8) énoncé partie 2.1.3 avec les trois potentiels de déformation p, q, r et la connaissance parfaite du tenseur de déformation mesuré en micro-Laue, termes de cisaillement compris.

4. Pour Ge, les lois sont : $\Delta\omega_{uni-axe}(\text{cm}^{-1}) = 1.51\epsilon_{uni-axe}(\%)$ et $\Delta\omega_{bi-axe}(\text{cm}^{-1}) = 4.24\epsilon_{bi-axe}(\%)$

Application à la coupe longitudinale Raman d'un pont

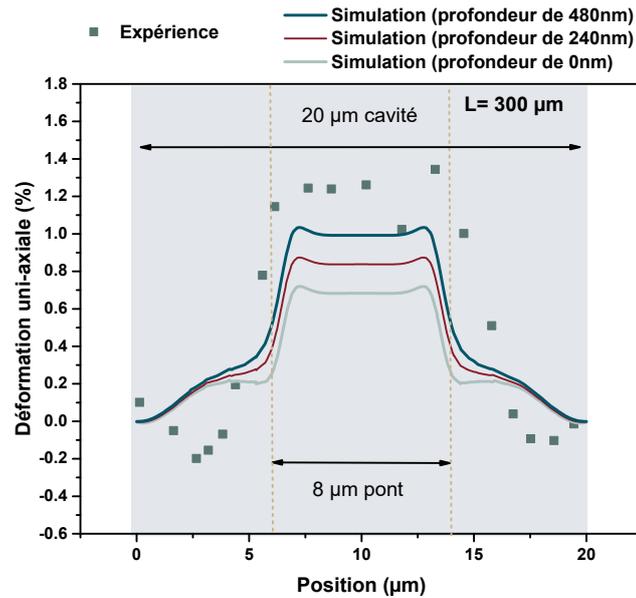


FIGURE 3.17 – Coupe longitudinale Raman de la cavité pour un pont de GeSn 12,7 % de longueur de bras de 300 μm et simulation comsol à 0 nm (surface).

J'ai réalisé figure 3.17 une coupe longitudinale Raman d'un pont avec une longueur de bras de $L=300 \mu\text{m}$ en balayant le faisceau laser le long de la cavité. La conversion du décalage Raman en déformation uni-axiale est effectuée grâce à la relation précédemment trouvée figure 3.16. La déformation mesurée est homogène sur tout le pont de $8 \mu\text{m}$ et vaut en moyenne en tension 1,2 %. De part et d'autre, un fort gradient de déformation se produit, probablement à cause de la présence des miroirs et on observe même un état en compression pouvant atteindre -0,3 % dans ces zones. On peut également se demander si la déformation est purement uni-axiale en dehors du pont du fait de sa géométrie. Les miroirs peuvent induire localement des contraintes de cisaillement. De plus, comme on l'a vu sur les croix, la simulation a tendance à sous-estimer la valeur de la déformation à cause de l'incertitude sur la déformation résiduelle pleine plaque, mesurée en RSM.

Cet écart semble également être mis en exergue par une légère sur-estimation de la déformation mesurée par diffraction micro-Laue. Les rayons X sondent l'ensemble de la couche alors que la spectroscopie Raman uniquement la surface, qui d'après les simulations présentées figure 3.8 est la zone la moins déformée. C'est pourquoi j'ai représenté des lignes de coupes à différentes profondeurs dans la couche de GeSn (en surface, au milieu et à l'interface Ge-GeSn).

3.3.3 Évolution de la Température limite de l'effet laser sous l'action de la contrainte uni-axiale [100]

Gain théorique dans le cas d'une déformation uni-axiale

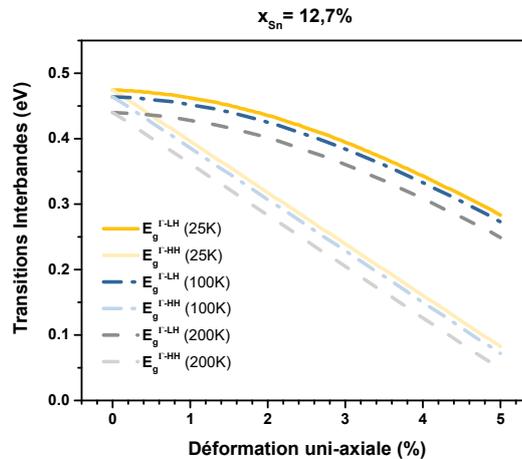


FIGURE 3.18 – Évolution des transitions directes avec la température en prenant en compte la loi de Varshni pour du GeSn 12,7 %.

La dépendance du gap énergétique en fonction de la déformation est indiquée figure 3.18 pour les températures de 25 K, 100 K, 200 K en prenant en considération la loi de Varshni. Les courbes de gain pour différents niveaux d'injections sont également tracées figure 3.19. Comme pour une déformation bi-axiale, l'absorption entre les bandes de valences HH et SO vient réduire une partie du gain net pour des déformations relativement faibles à basse température (voir figure 3.20). Toutefois, le décalage en énergie pour une déformation donnée du milieu à gain étant plus faible pour une déformation de type uni-axiale que bi-axiale, il faut déformer plus, jusqu'à au moins 1 % pour sortir de la gamme d'énergie où se trouve l'absorption parasite (au voisinage de 0,4 eV pour une déformation de 1 %). A forte déformation, soit à 1,5 % et à 2 %, le gap énergétique se décale vers des énergies inférieures à 0,36 eV, zone d'énergie où l'absorption par porteurs libres devient de plus en plus efficace. Dès lors la température pour laquelle le gain s'annule, cesse d'augmenter. Dans le cas d'une injection $n_{inj} = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ cette température passe de 160 K pour un état relaxé à 300 K pour des déformations de 1,5 et 2 %. Pour ces deux états de déformation, la température de fonctionnement est donc la même et n'augmente plus. L'absorption par porteurs libres est dépendante de la longueur d'onde d'émission mais également de la densité de porteurs (équation (2.13)). Il n'est donc pas surprenant que le gain net soit également très atténué par l'absorption par porteurs libres dans le cas d'injections très élevées de porteurs de $3 \cdot 10^{-19} \text{ cm}^{-3}$ et tombe à 700 cm^{-1} à 25 K pour une déformation de 2 %.

D'après la figure 3.15, montrant l'inhomogénéité en z de la déformation au niveau un pont

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

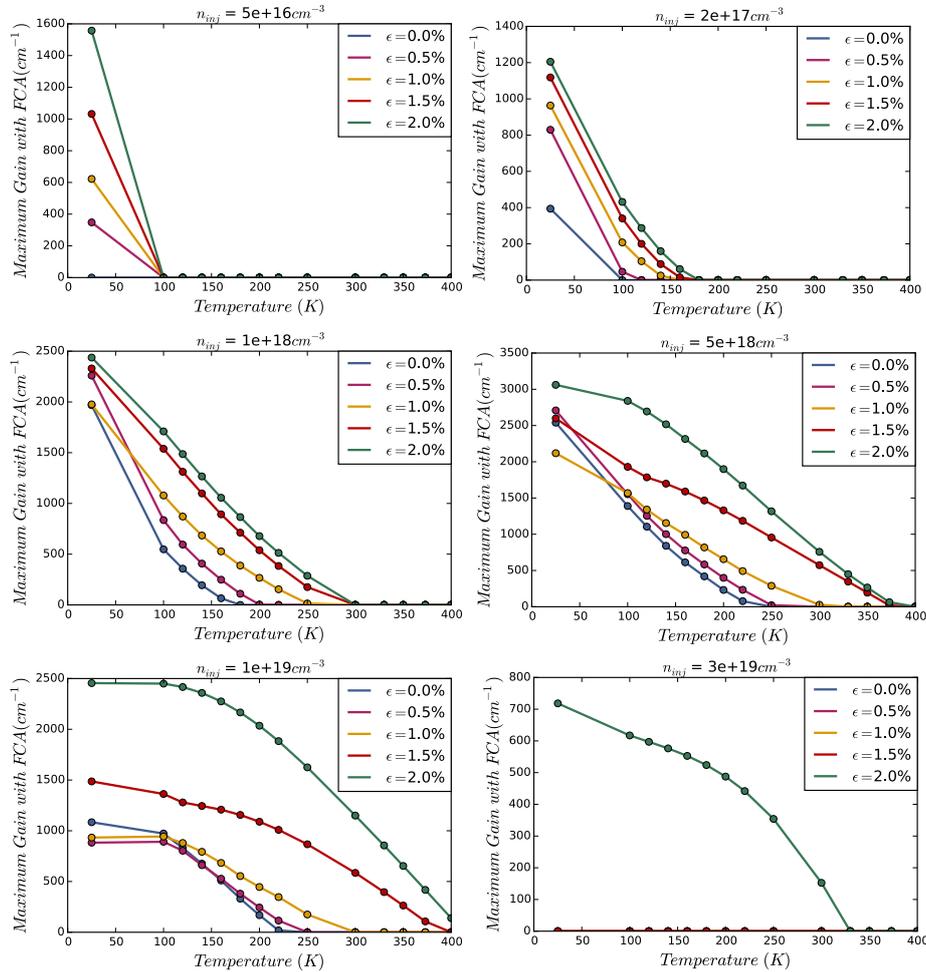


FIGURE 3.19 – Évolution du maximum de gain en fonction de la température pour différents niveaux d'injection dans le cas d'une déformation uni-axiale du GeSn 12,7 %. Ces courbes de gain prennent en compte l'absorption par porteurs libres.

de GeSn on peut se demander légitimement si cette déformation ne va pas détériorer l'effet laser, voire rendre impossible l'émission stimulée comme précédemment observé sur les disques contraints avec du nitrure sur le dessus. En regardant le changement des bords de bandes induit par la déformation extraite grâce à comsol en fonction de la profondeur z , la répartition spatiale des porteurs a été représentée figure 3.21 (a). A la différence du disque contraint par le nitrure sur le dessus, la répartition des électrons a lieu dans toute la couche de GeSn et celle des trous s'étend sur les 361 nm en partant de l'interface Ge/GeSn. La courbe de gain a également été calculée pour différentes profondeurs z du pont (voir figure 3.21 (b)). La valeur du gain varie moins que dans le cas des disques contraints par le dessus, et elle est beaucoup plus homogène dans l'espace. On s'attend donc à un gain modal plus favorable pour l'effet laser.

Nous avons considéré ici que la concentration d'étain était homogène sur toute la couche de 480 nm à 12,7 % alors qu'expérimentalement ce n'est pas le cas. La surface est effectivement plus

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

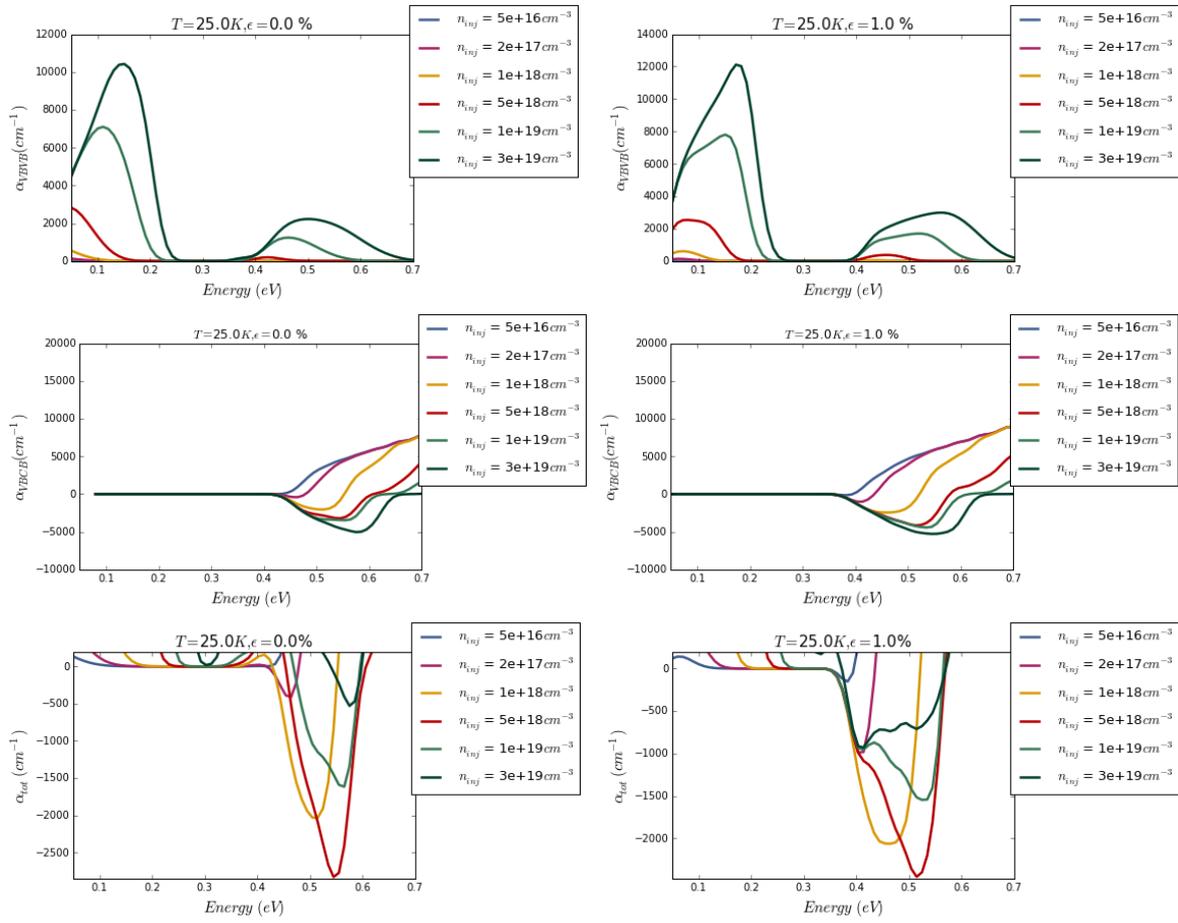


FIGURE 3.20 – Comparaison des absorptions inter-valences, entre bandes de conduction et bandes de valence et gain net entre du GeSn relaxé et celui déformé à 1 % pour une température de 25 K.

riche en étain mais moins contrainte. Cet inhomogénéité de contrainte sur les bords de bandes est donc sûrement en partie compensée par l'enrichissement d'étain.

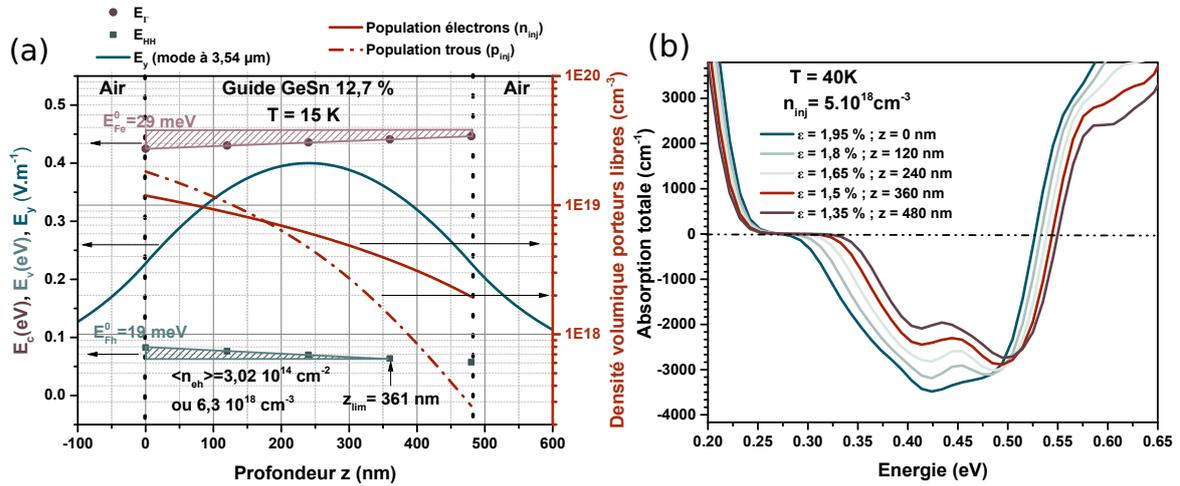


FIGURE 3.21 – (a) Répartition des porteurs au centre du pont de longueur de bras de 250 μm selon la profondeur z de la couche de GeSn de 12,7 % pour une température de 40 K sous pompage optique impulsif du YAG. (b) Courbes de gain en fonction de l'énergie à divers niveaux de profondeur en z au centre pont.

Photoluminescence et spectres laser

La photoluminescence des ponts avec miroirs de 12,7 % d'étain déformés de manière uni-axiale et sous pompage continu à 25 K est montrée figure 3.22. Deux contributions sont visibles :

- une partie fixe à 0,47 eV correspondant à la photoluminescence des ancrages en GeSn sous-gravés et non déformés de part et d'autre du pont. Son émission est indépendante de la longueur de bras tenseur.
- une partie qui se décale vers les basses énergies au fur et à mesure que la longueur L augmente. Cette émission provient du centre du pont de plus en plus déformé, passant de 0,443 eV à 0,272 eV lorsque la longueur de bras augmente de 50 μm à 300 μm .

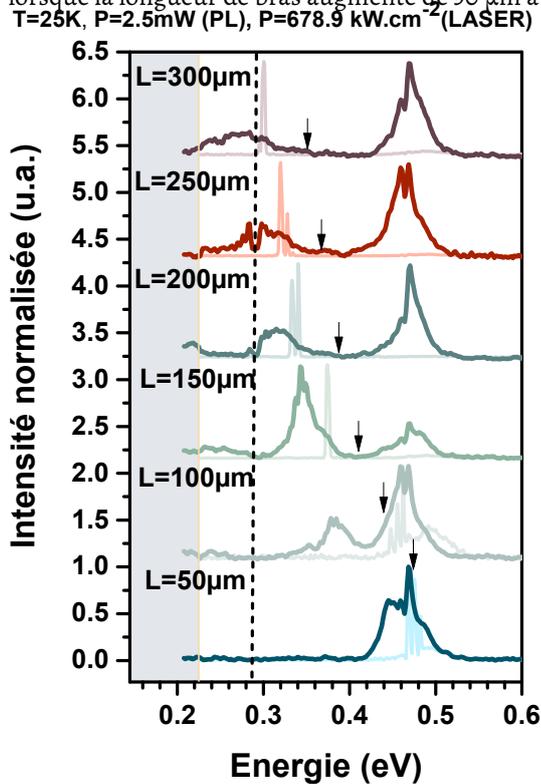


FIGURE 3.22 – Spectres laser pour différentes longueurs de bras à différentes températures. Les flèches indiquent les gaps d'énergie attendus à partir de la simulation Comsol et du modèle $\vec{k}\cdot\vec{p}$ 30 bandes [46].

J'ai également superposé l'effet laser associé pour chaque pont. A chaque fois, l'effet laser se trouve plus haut en énergie que la photoluminescence à environ 30 meV du maximum de photoluminescence.

Le cas du pont de longueur 100 μm se différencie avec un écart de 80 meV. Cette différence peut s'expliquer notamment grâce à l'absorption HH-SO comme indiqué précédemment figure 3.20 dans le cas d'une déformation d'environ 1 %. L'effet laser semble défavorable expérimentalement sur la gamme spectrale allant de 0,4 à 0,447 eV correspondant bien à la même gamme d'énergie

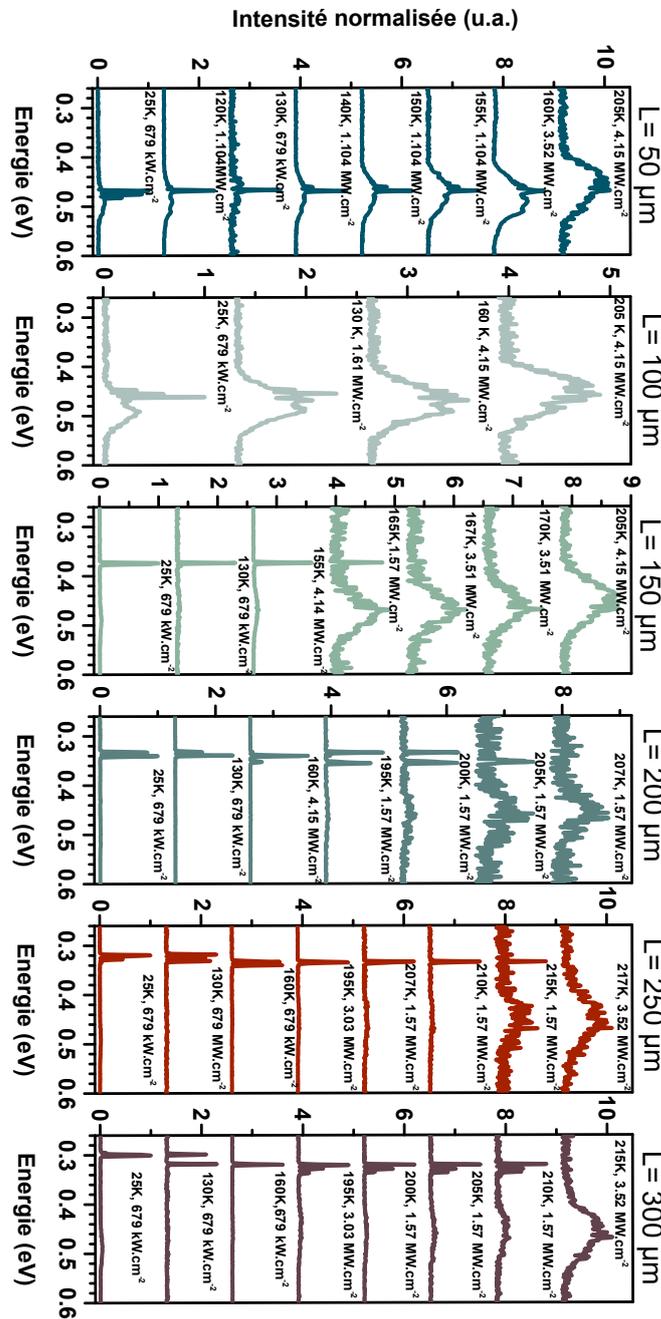


FIGURE 3.23 – Spectres laser pour différentes longueurs de bras à différentes températures dans le cas de micro-ponts de 12,7 %.

observée sur la courbe d'absorption inter-bandes de valences théorique. Les flèches représentent les gaps d'énergie théoriques issus de la simulation de déformation FEM et du modèle k.p 30 bandes se trouvant figure 3.18. Comme pour les disques ou les croix, ces valeurs de gaps sont là

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

encore sur-estimées par rapport aux maximums de photoluminescence d'en moyenne 64,3 meV.

Une étude en température a également été menée pour chaque pont. Des spectres sur différents types de bras allant de 50 à 300 μm sont présentés figure 3.23. L'absorption de l'eau présente dans l'atmosphère s'étend de 0,442 eV à 0,496 eV (2,5 μm à 2,8 μm), pouvant éventuellement parasiter l'intensité reçue sur le détecteur des ponts de 50 μm et 100 μm .

La tendance globale montre que la température de disparition de l'effet laser augmente avec la longueur de bras. La longueur d'onde de l'effet laser étant au premier ordre l'image de l'état de déformation, il est intéressant de tracer la température limite de fonctionnement du laser en fonction de la longueur d'onde de son pic. On peut observer, à l'exception du pont de 100 μm , que plus la longueur d'onde augmente, plus l'effet laser est visible à haute température. La température passe donc de 120 K pour une structure relaxée à 215 K pour la structure avec des bras de 250 μm . Ces structures ont exactement les mêmes miroirs, ont été réalisées sur une même puce et ont donc subi les mêmes procédés de fabrication. Seul le paramètre géométrique L correspondant à la longueur des bras tenseurs de Ge varie. La déformation uni-axiale au niveau du pont est donc la seule grandeur qui diffère d'une structure à une autre provoquant un changement du gain et de la longueur d'onde au sein de la cavité. Le cas du pont de 100 μm diffère là encore. L'effet laser

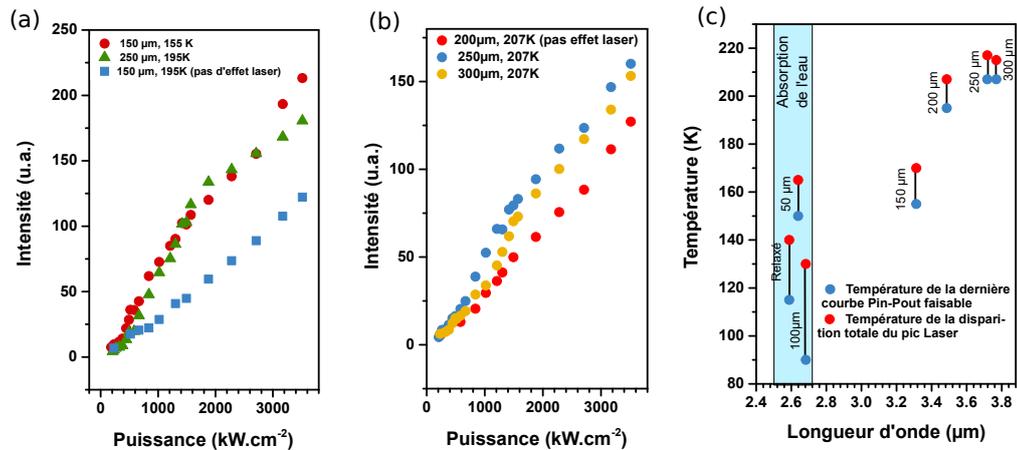


FIGURE 3.24 – Courbes intensité-puissance à (a) 195K et à (b) 207K pour des cavités laser avec différentes longueurs de bras. (c) Évolution de la température de l'effet laser en fonction de la longueur d'onde d'émission pour des structures ponts de 12,7 %.

disparaît de façon précoce entre 90 K et 130 K. Cette différence avec les autres ponts peut provenir de l'absorption de l'eau ou de l'absorption entre bandes de valence sachant que la plage énergétique du gap de ce pont due à la déformation calculée par Comsol (0 à 0,5 %) est propice à ce type de perte. A contrario, la structure de 150 μm a une déformation au niveau du pont d'environ 0,54 % à 170 K. La valeur du gain devrait donc également être impactée par l'absorption inter-valences. Or, expérimentalement, la température de disparition de l'effet laser est plus élevée (167 K) que celle du pont de 100 μm . Le maximum de gain serait donc plus important dans le cas d'une structure avec $L=150 \mu\text{m}$ que dans celui d'une structure avec $L=100 \mu\text{m}$. Ce résultat expérimental va donc à l'encontre des simulations présentées figure 3.19 montrant que le maximum de gain est

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

fortement réduit notamment à basses températures.

De plus, un phénomène de saturation est visible sur les deux structures les plus déformées. L'absorption par porteurs libres peut être responsable de cette limitation. Ce type d'absorption devient plus important lorsque la longueur d'onde augmente (d'après l'équation 2.13, issue du modèle de Liu). Or, lorsque l'on déforme le matériau, la courbe de gain se décale vers les hautes longueurs. D'après la figure 3.19, le maximum de gain arrête d'augmenter en fonction de la déformation. Une autre raison possible est la saturation de la déformation appliquée en fonction de la longueur de bras observé en spectroscopie Raman et en micro-Laue.

Des courbes intensité-puissance en fonction de la puissance de pompage de la cavité sont également exposées figure 3.24. Alors que la cavité avec des bras de $L=150 \mu\text{m}$ ne lase plus à 195 K, une cavité similaire mais plus déformée avec des bras de $250 \mu\text{m}$ montre clairement trois régimes différents avec un effet de saturation à $1,88 \text{ MW.cm}^{-3}$. Dans ce dernier cas, le seuil est estimé à $445,4 \text{ kW.cm}^{-3}$. A 207 K, l'effet laser n'est plus visible pour une cavité avec une longueur de bras de $200 \mu\text{m}$. L'intensité de l'émission spontanée à 0,456 eV des ancras de GeSn devenant importante par rapport au pic laser au delà de 207 K, les différences d'intensités sont moins marquées entre les différents régimes.

En utilisant les simulations de déformation en température via comsol de la figure 3.10, il est possible d'en déduire la déformation effective de chaque pont lors de la disparition de l'effet laser (figure 3.25 (a)). La longueur d'onde d'émission du pont relaxé permet de mettre en évidence la sous-estimation de la déformation extraite par la simulation. Or cette erreur semble déjà présente pour les valeurs de déformation pour l'ensemble des ponts à température ambiante. Ainsi, j'ai également représenté la température de fonctionnement laser en fonction de la déformation obtenue avec la correction apportée par l'écart entre la simulation et la mesure micro-Laue. Malheureusement, un écart subsiste encore.

D'après la figure 3.19, il est possible d'estimer la température où le gain s'annule en fonction de la déformation (voir figure 3.25(b)). Pour les faibles densités de porteurs de $2.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et $1.10^{18} \text{ cm}^{-3}$, les calculs EPM prévoient une élévation de la température de fonctionnement laser de respectivement 80 K et 120K, soit légèrement plus élevée que l'augmentation de 70 K, observée expérimentalement. Un effet de saturation de la température de fonctionnement laser est visible pour les plus fortes déformations comme pour l'expérience. En revanche, pour les fortes injections soit une densité de porteurs supérieure à $5.10^{18} \text{ cm}^{-3}$, le modèle conjecture une plage de fonctionnement en température bien plus étendue avec la déformation, et allant au delà de la température ambiante pour les plus fortes déformations. L'expérience n'indiquant qu'un gain de "seulement" 70 K pour une mise en déformation de 1,4%, avec une température limite laser d'environ 210 K, nous pouvons supposer que les recombinaisons non radiatives jouent un rôle prépondérant aux hautes températures. En effet, pour un pompage donné, des taux de recombinaison non radiatifs importants de type SRH ou Auger réduisent mécaniquement la densité de porteurs disponibles pour générer du gain, rendant difficilement accessibles les conditions de très forte injection nécessaires en théorie pour atteindre l'oscillation laser aux très hautes températures et déformations. Le fort pompage nécessaire pour contrer ces pertes électroniques génère très probablement en parallèle une élévation de la température de l'échantillon, qui en retour abaisse le gain réel par rapport à celui espéré à la température du cryostat.

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

L'augmentation de la température avec la déformation ne permet pas d'atteindre la température ambiante ici. Or, au sein de notre laboratoire, l'effet laser a été obtenu à 230 K sur des structures non déformées de disques et composées d'un empilement de couches de GeSn de 8 % - 10 % - 13 % - 16 % - 13 % [79]. L'idée est donc d'appliquer la même stratégie à cet empilement dans l'espoir d'observer l'effet laser à plus haute température.

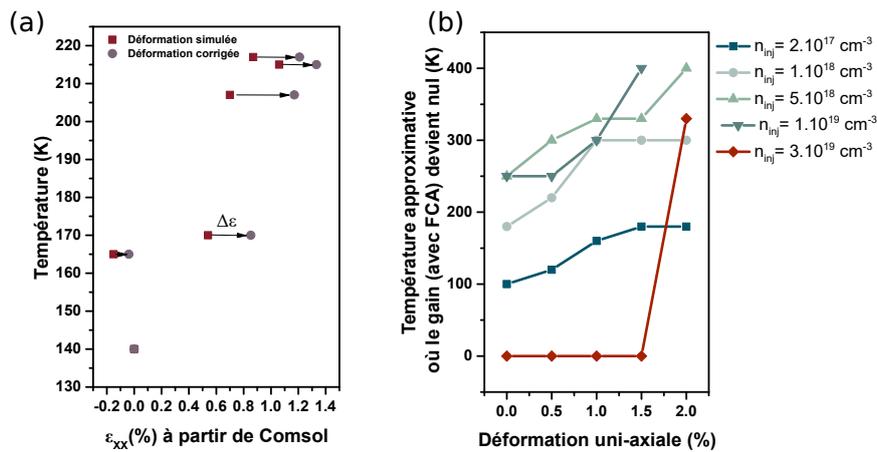


FIGURE 3.25 – (a) Température de fonctionnement laser en fonction de la déformation uni-axiale. $\Delta\epsilon$ représente la correction sur la déformation à température ambiante entre la simulation et les mesures micro-Laue. (b) Température où le gain du matériau (comportant l'absorption FCA) devient nul.

3.4 Couche de 16 % : Effet laser à 273 K

3.4.1 Photoluminescence

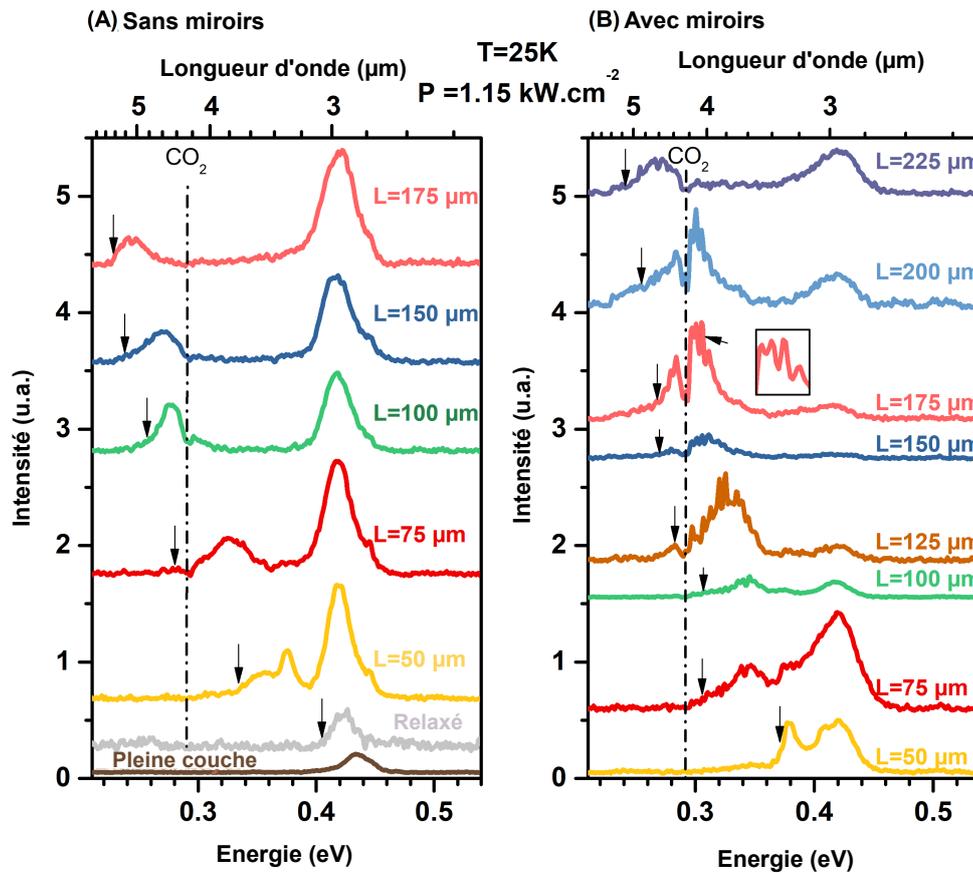


FIGURE 3.26 – Photoluminescence à 25 K des ponts de 15,7 % sans (a) et (b) avec miroirs pour une puissance incidente de $1,15 \text{ kW.cm}^{-2}$. Les flèches pointent la valeur expérimentale du gap prise pour estimer la déformation figure 3.27.

Les micro-ponts avec et sans miroirs ont été caractérisés sous pompage continu avec un laser à 1047 nm à 25 K avec une puissance laser de $1,15 \text{ kW.cm}^{-2}$. Les observations visibles figure 3.26 sont relativement similaires aux structures de 12,7%. Une partie de l'émission est fixe à 0,42 eV peu importe la longueur de bras, et correspond à la partie relaxée située au niveau des ancrages de part et d'autre du pont. Un spectre sur un pont cassé considéré comme relaxé a son maximum d'émission à la même énergie, à la différence de l'émission de la pleine couche légèrement décalée vers les hautes énergies à cause de la compression résiduelle de la couche (figure 3.26). La

seconde contribution se décale vers les basses énergies lorsque la longueur de bras augmente, de façon analogue à ce qui était observé partie précédente. La concentration en étain étant plus importante, le maximum de photoluminescence se décale au-delà de l'absorption du CO_2 (4,2 μm), jusqu'à 5 μm pour une structure sans miroirs avec une longueur de bras de 175 μm . L'ajout de miroirs réduit la tension appliquée au sein du pont. Il faut donc des bras plus importants pour arriver à déformer de manière équivalente des ponts avec miroirs. De plus, la présence de miroirs entraîne une modulation de la photoluminescence montrant l'apparition de modes d'oscillations longitudinaux au sein de la cavité. Enfin, un gradient de déformation entre les miroirs et le pont provoquent un étalement énergétique de la photoluminescence par rapport aux structures sans miroirs.

La couche active de 16 % de cet empilement est recouverte ici d'une couche de 30 nm de SiGeSn et d'une couche de 13 % de 120 nm constituant les couches barrières supérieures. Ces dernières ne permettent donc pas de déterminer la déformation via la spectroscopie Raman dans la couche de 15,7 %. Néanmoins, il est possible d'estimer la déformation à partir du décalage en énergie de la photoluminescence en utilisant les formules de décalage de bandes calculées dans le cadre de la théorie de Van de Walle énoncée partie 1.2.2. L'énergie de renormalisation du gap n'étant pas connue précisément, on choisit arbitrairement de pointer le gap énergétique à 20 % du maximum de photoluminescence, coté basse énergie et de mesurer les décalages de raie par rapport au matériau relaxé à partir de ce repère. Ces valeurs énergétiques sont représentées par des flèches sur la figure 3.26. La figure 3.27 représente donc la correspondance entre le décalage en photoluminescence et la déformation uni-axiale dans la structure. La déformation atteinte semble d'après ce modèle plus importante que sur les ponts de 13 % à longueurs de bras équivalente, bien que le ratio entre l'épaisseur du pont et l'épaisseur du substrat virtuel de Ge ait été conservé entre les deux empilements (480 nm / 2,5 μm contre 1020 nm / 5 μm). La déformation limite obtenue est de 2,2 %, largement moindre par rapport au 6 % possible sur Ge [23], grâce à une meilleure qualité cristalline.

3.4.2 Effet Laser

Accordabilité à 25K

Pour 2 % de déformation et une température de 25 K, le maximum de gain est estimé à 4957 cm^{-1} pour une injection de porteurs de $5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ d'après la figure 3.28 (a). Les cavités laser ont été également caractérisés optiquement à 25 K sous pompage d'un oscillateur paramétrique optique (OPO) réglé à une longueur d'onde de 2,65 μm avec un taux de répétition de 82 MHz et une durée de pulse de 0,1 ns. L'OPO a l'avantage d'être à une longueur d'onde plus proche du gap du GeSn que le laser YAG et ainsi pomper la cavité plus en résonance, limitant les processus de relaxation thermique liés aux phonons [80]. L'effet laser est visible sur toutes les cavités comme le montre la figure 3.28 (b), permettant une accordabilité en longueur d'onde de 1,5 μm pour une

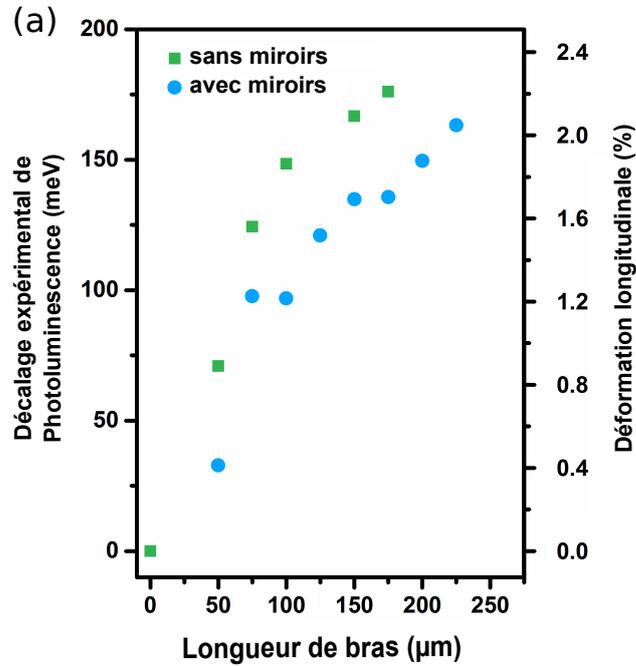


FIGURE 3.27 – Décalage énergétique de la photoluminescence extraite à partir des spectres de la figure 3.26 et estimation de la déformation en fonction de la longueur de bras.

concentration d'étain donnée, ici de 15,7%. Cette accordabilité s'étend de 3,1 μm à 4,6 μm. La cavité étant multimodale et la courbe de gain théorique large, plusieurs modes s'expriment et dont certains se retrouvent dans plusieurs cavités comme celui à 4,2 μm présent dans les structures de longueurs de bras L de 175, 200, 225, 250 μm. L'intervalle spectral libre mesuré entre les modes est de 6,25 meV (soit 1,51 THz).

Les caractéristiques laser montrant l'intensité émise en fonction de la puissance de pompe incidente sont également représentées dans le cas de ponts avec différentes longueurs de bras figure 3.29. Le pont ayant le seuil le plus bas est le dispositif avec une longueur de bras de 150 μm. Le rapport cyclique plus élevé avec le laser OPO que le laser YAG permet d'avoir un meilleur rapport signal sur bruit et donc d'identifier un seuil précisément à 9 kW.cm^{-2} . L'intensité reçue varie sur une plage dynamique de 4 décades. Les autres ponts possèdent des seuils assez similaires entre 9 et 12 kW.cm^{-2} , montrant ainsi que la déformation n'a pas d'effet net sur le seuil pour ces échantillons. Pour des faibles injections (figure 3.28 (a)), le maximum de gain semble peu dépendant de la déformation appliquée avoisinant les 2500 cm^{-1} , ce qui pourrait expliquer en partie la faible variation du seuil avec la déformation.

Ces seuils restent néanmoins relativement faibles pour ce niveau assez élevé de concentration en étain. Les effets laser récemment publiés en pompage continu [70] et électrique ont été obtenu sur des concentrations inférieures à 8%. Or, l'apparition de défauts dans la couche active semble être corrélée avec son enrichissement en étain. Ces seuils faibles sont donc en partie attribués par

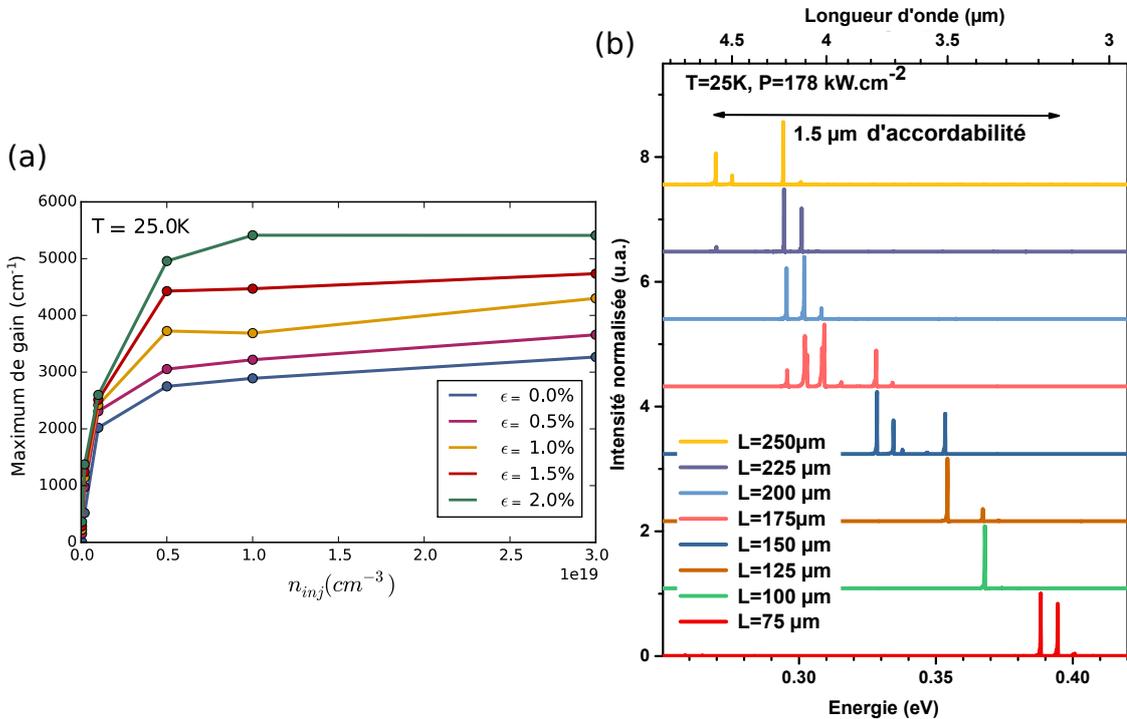


FIGURE 3.28 – (a) Maximum de gain (sans FCA) en fonction de la déformation pour du GeSn de teneur de 15,7% à 25 K pour des déformations allant jusqu'à 2%. (b) Spectres à 25 K pour une puissance incidente de $178\text{ kW}\cdot\text{cm}^{-2}$ à $2,65\text{ }\mu\text{m}$ sur des cavités avec différentes longueurs de bras tenseurs.

l'approche par gradients de concentration, localisant les dislocations aux interfaces inférieures de l'empilement.

Étude de la courbe intensité puissance à 130K

Une caractérisation optique à 130 K sur la structure avec $L=150\text{ }\mu\text{m}$ avec temps d'intégration plus important permet d'observer la compétition des modes (figure 3.30). Sous le seuil de $46\text{ kW}\cdot\text{cm}^{-2}$, de nombreux modes sont présents, l'intensité collectée est faible. Dès lors que le seuil est atteint seulement deux modes subsistent, phénomène connu sous le nom de compétition de modes. La longueur d'onde s'est légèrement déplacée avec la température de $3,7\text{ }\mu\text{m}$ (25K) à $3,6\text{ }\mu\text{m}$ (130K) témoignant d'un léger changement d'état de contrainte dans le pont imposé par le coefficient de dilatation thermique des bras de Ge. On peut également en déduire une valeur du facteur d'émission spontanée C_{sp} en mesurant le rapport des tangentes à la courbe représentée en gris figure 3.30 (b) à la puissance de seuil. Ce facteur vaut environ 0,03, il est assez important par rapport à la littérature. Cette valeur élevée peut s'expliquer par la configuration de notre

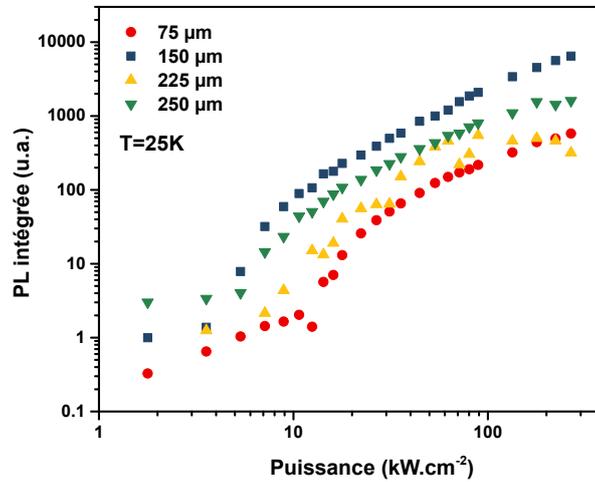


FIGURE 3.29 – Courbes intensité - puissance incidente pour un pompage OPO à 2,65 μm sur des cavités de 15,7 % avec différentes longueurs de bras tenseurs.

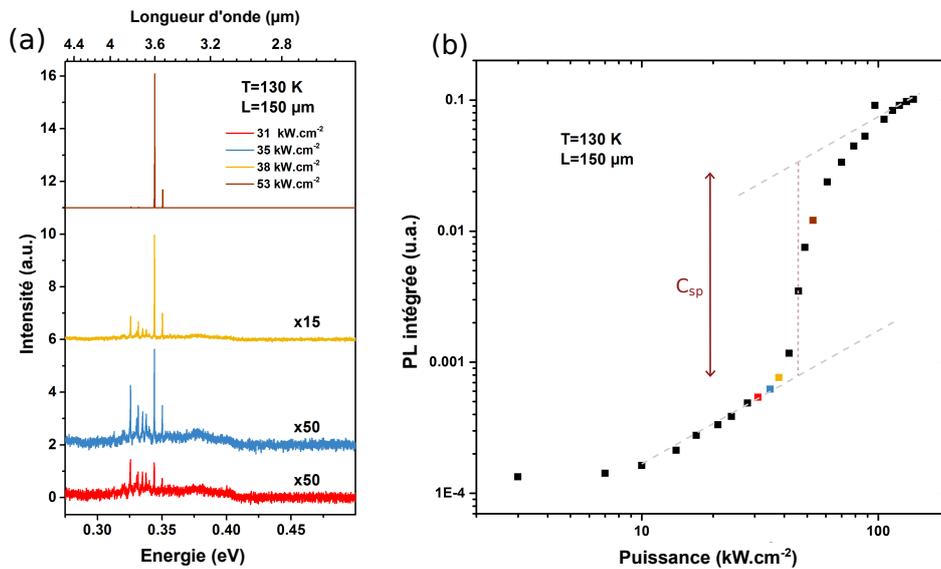


FIGURE 3.30 – (a) Spectres montrant la compétition de modes à 130 K sur une cavité de longueur de bras de 150 μm pour plusieurs puissances de pompe avec un laser OPO à 2,65 μm . (b) Courbe intensité - puissance optique incidente associée indiquant un seuil à 46 kW.cm^{-2} . Les carrés de couleur correspondent aux spectres présentés en (a).

collection hors du plan. Le design de la cavité fait que l'émission stimulée a lieu préférentiellement dans le plan de l'échantillon. Or, le cryostat utilisé ici nous permet seulement de collecter l'émission normale à ce plan. Nous ne collectons donc qu'une partie de l'émission stimulée, celle

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

diffusée par les miroirs hors du plan. L'émission spontanée est en revanche elle, anisotrope. Cette différence entraîne donc à une sur-élévation du facteur d'émission spontanée C_{sp} .

Le rapport signal sur bruit nous permet également ici de faire une étude détaillée de la courbe intensité puissance.

Les équations couplées régissant la dynamique du laser entre la densité de porteurs n et celle de photon s sont définies par :

$$\begin{cases} \frac{dn}{dt} = \frac{J_{ph}}{q(d_2-d_1)} - \frac{n}{\tau_{nr}} - R_{spont} - \frac{c}{n_{opt}} \gamma_{gain} s \\ \frac{ds}{dt} = \frac{c}{n_{opt}} \gamma_{gain} \Gamma_{conf} s - \frac{s}{\tau_c} + C_{sp} R_{spont} \end{cases} \quad (3.3)$$

Pour simplifier, on se place en régime stationnaire.

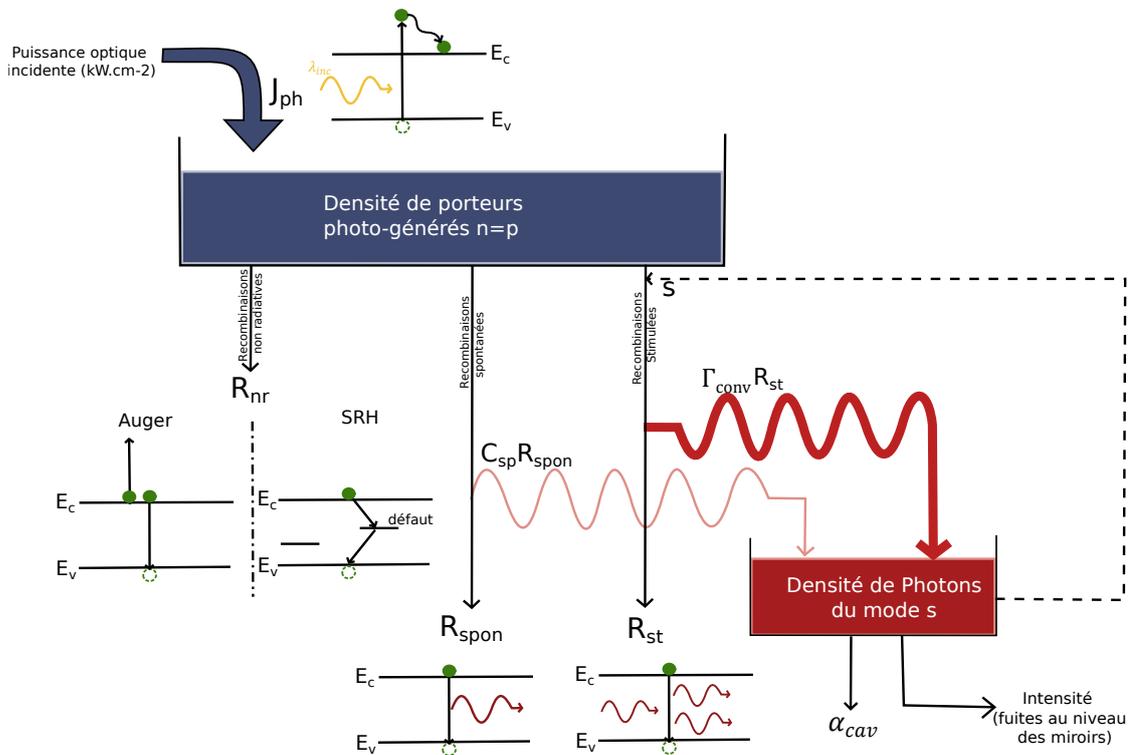


FIGURE 3.31 – Schéma explicatif des équations laser couplées. Figure adaptée de [81].

Le pompage optique incident génère des porteurs dans l'épaisseur de la zone active du semi-conducteur d'épaisseur $d_2 - d_1$, selon le flux de photons incidents Φ_{inc} absorbé suivant la loi de Beer-Lambert :

$$G_{e-t} = \Phi_{inc} (e^{-\alpha_{GeSn} 2650nm d_1} - e^{-\alpha_{GeSn} 2650nm d_2}) \quad (3.4)$$

$$= \frac{\lambda_{inc}}{hc} P_{inc}^s (e^{-\alpha_{GeSn} 2650nm d_1} - e^{-\alpha_{GeSn} 2650nm d_2}) \quad (3.5)$$

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

avec G_{e-t} le taux de génération de paires électron-trou, $\alpha_{GeSn}^{2650nm} = 1050, 2cm^{-1}$, le coefficient d'absorption du GeSn à la longueur d'onde incidente $\lambda_{inc} = 2, 65\mu m$. La densité de photo-courant est alors donnée par :

$$J_{ph} = qG_{e-t} = q \frac{\lambda_{inc}}{hc} P_{inc}^s (e^{-\alpha_{GeSn}^{2650nm} d_1} - e^{-\alpha_{GeSn}^{2650nm} d_2}) \quad (3.6)$$

Ces porteurs photo-générés peuvent se recombiner ensuite selon plusieurs processus :

- de façon radiative et spontanée en Γ à travers le coefficient R_{spont} dont l'expression est la suivante :

$$R_{spont} = B_{rad}(n_{\Gamma}p - n_i^2) \quad (3.7)$$

où B_{rad} est le coefficient de recombinaison bimoléculaire et vaut $10^{-10}cm^3.s^{-1}$, n_{Γ} la densité d'électrons en Γ , p la densité de trous et n_i la densité de porteurs intrinsèques. Il est à noter que dans notre cas la densité de porteurs intrinsèques est négligeable devant la densité de trous et d'électrons photo-générés $p = n \gg n_i$.

- de façon non-radiative avec une constante de temps de vie non radiative τ_{nr} prenant en compte les recombinaisons Auger et les recombinaisons de défauts profonds (recombinaisons Shockley-Read-Hall (SRH))

$$\frac{1}{\tau_{nr}} = \frac{1}{\tau_{Auger}} + \frac{1}{\tau_{SRH}} = C_{Auger}(np - n_i^2) + A_{nr} \quad (3.8)$$

avec τ_{Auger} durée de vie Auger associée au coefficient Auger $C_{Auger} = 5.10^{-31}cm^6.s^{-1}$ et de la densité de porteurs n , et τ_{SRH} durée de vie SRH relative au coefficient A_{nr} .

- de façon radiative et stimulée via le dernier terme reliant le gain γ_{gain} , la densité de photon s , la vitesse de groupe $v_g = \frac{c}{n_{opt}}$

$$R_{st} = \frac{c}{n_{opt}} \gamma_{gain} s \quad (3.9)$$

Concernant la seconde équation réagissant l'évolution de la densité de photons dans le milieu, le nombre de photons relatifs au mode n de facteur de confinement Γ_{conf} augmente à l'aide de l'émission stimulée $\Gamma_{conf} R_{st}$ et par moindre mesure l'émission spontanée $C_{sp} R_{spont}$.

On peut également observer des mécanismes de pertes de photons (pertes au niveau des miroirs, diffusion, à cause de la rugosité ...) via la durée de vie du photon dans la cavité τ_c :

$$\tau_c = \frac{Q}{\omega} = \frac{1}{v_g \alpha_{cav}} \quad (3.10)$$

5. Cette valeur est issue de résultats d'ellipsométrie réalisée en interne du CEA.

6. Dans ce cas, il faut remarquer qu'ici, nous avons fait une hypothèse simplificatrice au niveau du gain modal en supposant uniforme la valeur du gain matériau sur toute la cavité et en négligeant les contributions d'absorption du matériau en dehors du pont central. Dans ce cas, on a bien : $g_m = \Gamma_{conf} \gamma_{gain}$ avec Γ_{conf} le facteur de confinement du mode guidé dans le pont.

Un schéma explicatif et récapitulatif est représenté figure 3.31.

D'après la figure 3.26, la déformation pour ce pont de longueur de bras de 150 μm est estimée

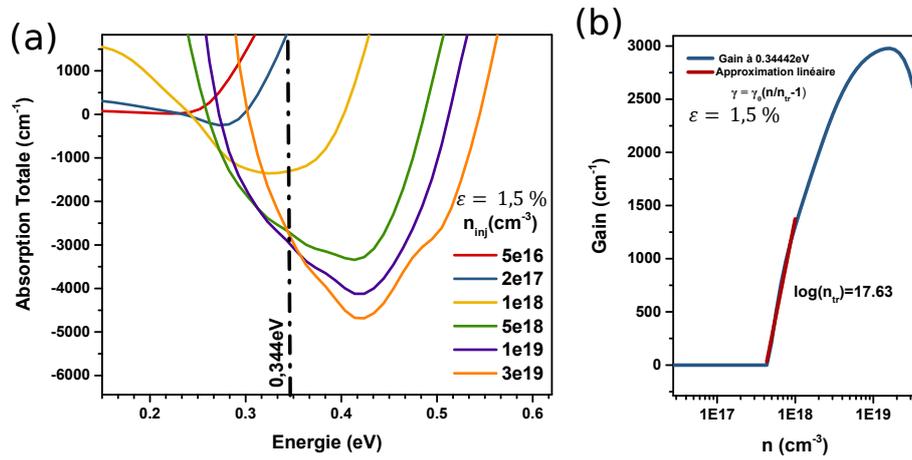


FIGURE 3.32 – (a) Gain (sans FCA) à 130K en fonction de l'énergie pour différentes densités de porteurs dans le cas de GeSn déformé à 1,5 % avec une concentration en étain de 15,7 % (b) Gain à 130K (sans FCA) en fonction de la densité de porteurs injectés à une énergie de 0,344eV dans le cas de GeSn déformé à 1,5 % avec une concentration en étain de 15,7 %.

entre 1 % et 2 % à 130 K. Expérimentalement, le pic laser se trouve à 0,344 eV (3,6 μm). J'ai donc déterminé la courbe de gain fixée à une énergie de 0,344eV (celle du mode observé) en fonction du nombre de porteurs injectés à cette énergie pour du GeSn déformé dans les conditions 1, 1,5 et 2 % avec une teneur en étain de 15,7 %. Le cas présenté figure 3.32 est celui d'une déformation de 1,5 %. On peut constater qu'à faible injection le gain évolue de manière linéaire, et on peut estimer la densité de porteurs à la transparence par l'équation :

$$\gamma_{gain} = \gamma_0 \left(\frac{n}{n_{tr}} - 1 \right) \quad (3.11)$$

Dans notre cas, pour une déformation de 1,5 %, on obtient donc une densité de porteurs à la transparence $n_{tr} = 4,26 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. J'ai également représenté grâce au programme de Quang Minh-Thai, les courbes intensité-puissance pour différents cas de figures en faisant varier 3.33 (a) la valeur du coefficient d'émission spontanée C_{sp} , (b) la durée de vie SRH τ_{SRH} , (c) la valeur du facteur de qualité Q, (d) les différents états de déformation. Le coefficient d'émission spontanée n'intervient pas sur le seuil mais la plage dynamique de l'effet laser essentiellement. Il en va pratiquement de même pour le facteur Q où le seuil passe de 225 kW.cm^{-2} avec Q=300 à 203 kW.cm^{-2} avec Q=3000. En revanche, la durée de vie non radiative SRH permet de réduire le seuil à 19 kW.cm^{-2} lorsque celle-ci vaut 2 ns, valeur typique dans le cas des matériaux III-V. Cette durée de vie SRH dans le GeSn est beaucoup plus faible de l'ordre de 170 ps (86 à 217 ps d'après la littérature [26], [82]). La réduction du seuil est ainsi liée au premier ordre à la durée de vie SRH, et donc passe par une réduction des défauts en volume. J'en arrive aux mêmes conclusions que

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

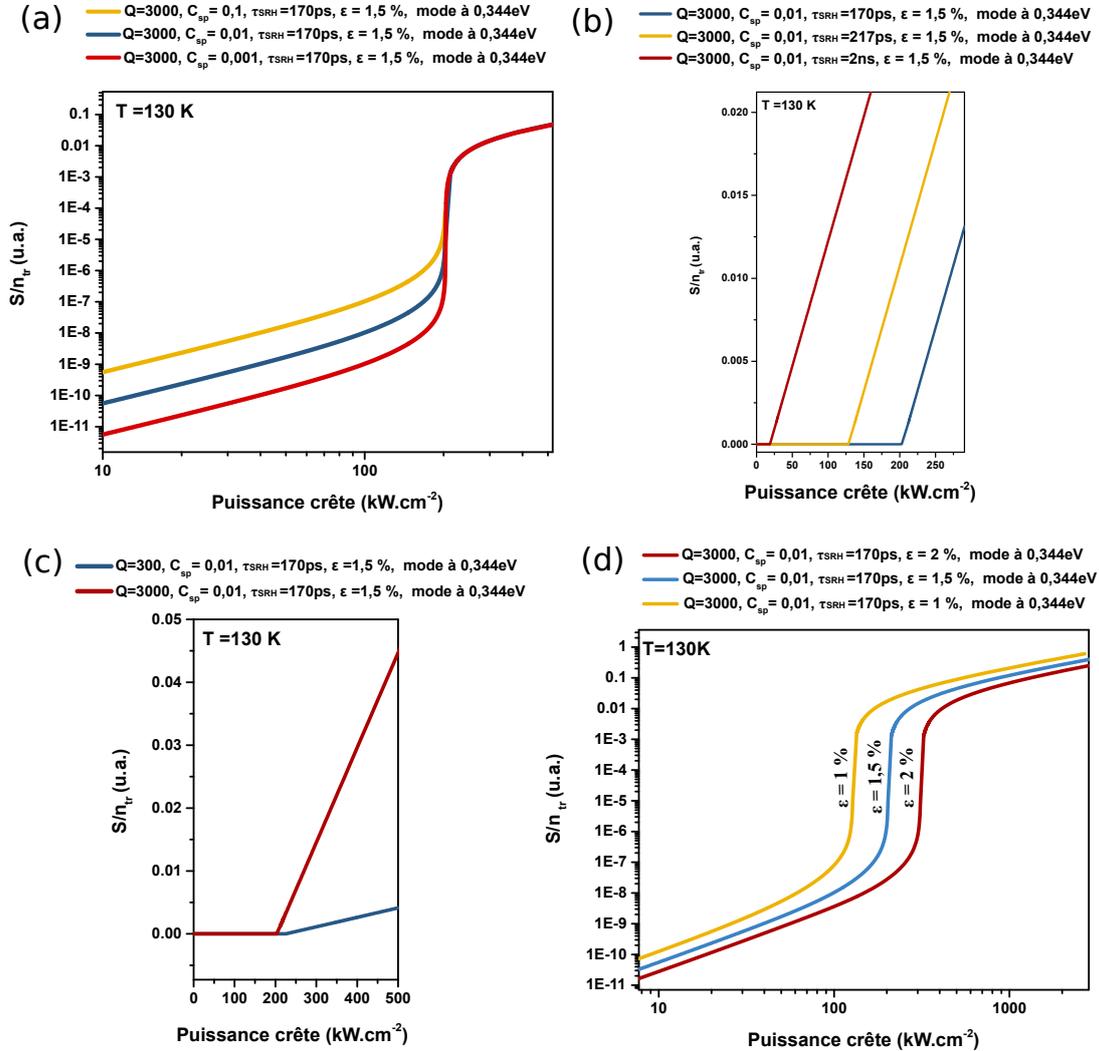


FIGURE 3.33 – Courbes intensité puissance pour (a) différents coefficients de compétition stimulée-spontanée, (b) différentes durée de vie SRH, (c) différents facteurs de qualité et (d) différentes déformations.

celles de Quang Thai-Minh [83]. De plus, le pompage optique en continu [70] ainsi que le pompage électrique [84] ont été obtenus récemment sur des couches de faible concentration d'étain (5,4 % et 11 % respectivement), et donc avec une meilleure qualité cristalline. Ces résultats expérimentaux viennent donc corroborer cette remarque sur la durée de vie non radiative.

Le cas présenté figure 3.33 (d) indique la courbe intensité-puissance pour 1 %, 1,5 % et 2 % pour le mode expérimental situé en énergie à 0,344 eV avec un temps de vie SRH de 170 ps. Pour ce mode fixé en énergie, le seuil semble a priori peu évoluer avec la déformation et est proche de 200 kW.cm^{-2} , soit un ordre de grandeur de plus que le seuil de 46 kW.cm^{-2} , ce qui est obtenu expérimentalement. Cette différence entre la théorie et l'expérience montre surtout la nécessité

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

de connaître précisément la déformation expérimentale à 130 K ainsi que la dépendance du gap en fonction de la déformation (potentiel de déformation de Van de Walle) et en fonction de la température (loi de Varshni). Ces paramètres peuvent décaler la courbe de gain en énergie et modifier "artificiellement" le seuil correspondant au mode se trouvant à 0,344 eV.

Afin d'illustrer ces propos, j'ai représenté les courbes intensité-puissance pour une déforma-

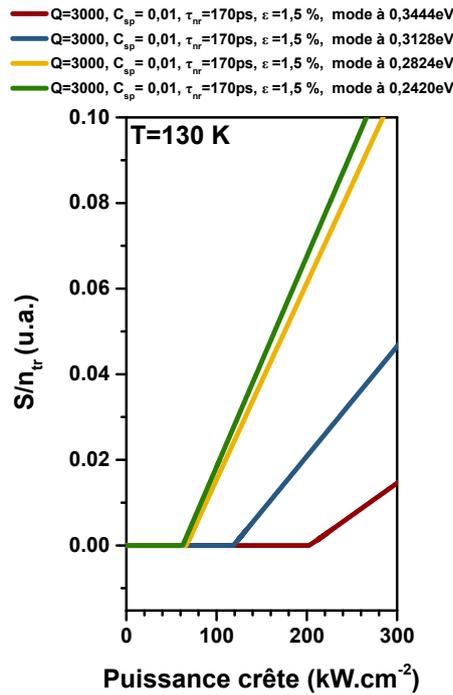


FIGURE 3.34 – Courbes intensité puissance pour (a) différentes déformations, (b) différentes durée de vie SRH, (c) différents coefficients de compétition stimulée-spontanée et (d) différents facteur de qualité.

tion fixée à 1,5 % pour des modes fictifs se trouvant à plus basses énergies que 0,3444 eV, soit 0,3128 eV ; 0,2824 eV et 0,242 eV. Si on considère un mode à 0,242 eV, le seuil serait beaucoup plus faible dans cette configuration et vaudrait seulement 62 kW.cm⁻². Ces incertitudes ne permettent donc pas de conclure clairement sur l'effet de la déformation au niveau du seuil. Il ne faut pas oublier aussi que nous avons à faire à une hétérostructure expérimentalement et non une couche unique de 480 nm de GeSn avec une concentration de 15,7 %. Cette hétérostructure permet un meilleur confinement spatial des porteurs grâce aux barrières de 13 %.

Sous le seuil, l'affinement de la raie laser en fonction de la puissance incidente est montré figure 3.35. En modélisant par une lorentzienne le pic d'émission, on peut alors mesurer la valeur du facteur Q défini par :

$$Q = \frac{\lambda_0}{\Delta\lambda} = \omega\tau_c \quad (3.12)$$

avec λ_0 , $\Delta\lambda$ la longueur d'onde de résonance du mode et la largeur à mi-hauteur respectivement, ω la pulsation et τ_c le temps de vie du photon dans la cavité. L'augmentation du facteur de qualité

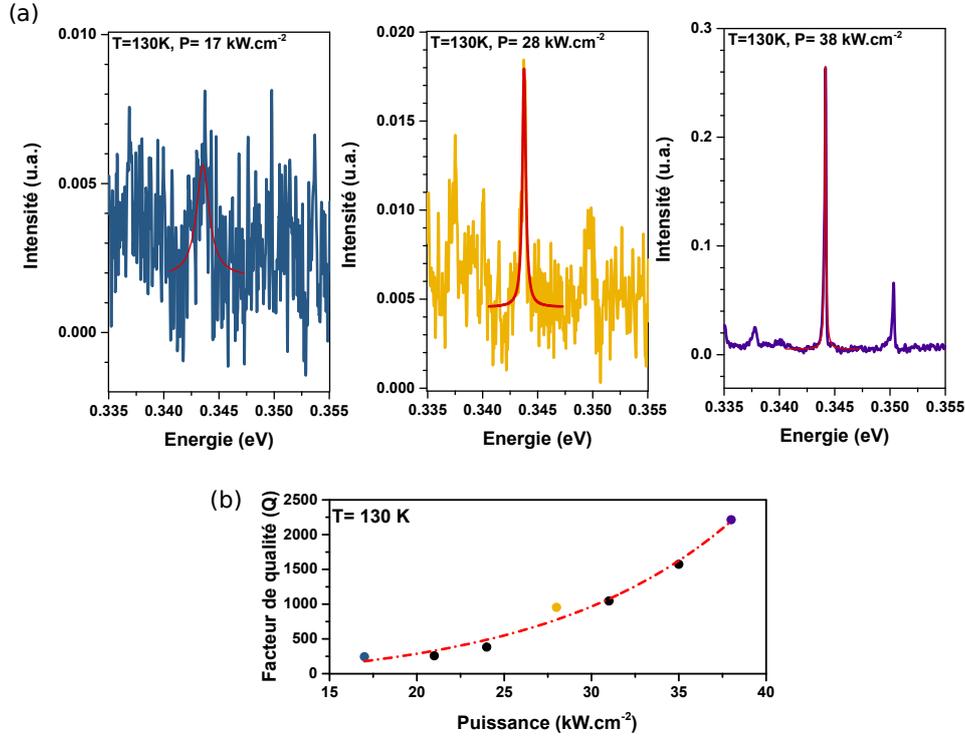


FIGURE 3.35 – (a) Spectres laser à différentes puissance de pompage optique et (b) facteur de qualité associé montrant un affinement de la raie laser.

montre que le temps de vie du photon τ_c augmente dans la cavité lorsque la puissance incidente augmente. Autrement dit, on se rapproche du seuil de transparence du matériau. On atteint un facteur Q de 2214 proche du seuil, valeur du même ordre de grandeur que celles qui ont été obtenues sur des cavités à coin de cube similaires totalement transparente (Q = 2200 [72], Q=2500 [23]). En supposant que les pertes optique de la cavité proviennent essentiellement des miroirs, on en déduit un coefficient de réflexion effectif R_{eff} des miroirs pour une longueur de cavité de 26 μm :

$$R_{eff} = \frac{1}{\sqrt{\exp(2L\alpha_m)}} = 0,979$$

Cette valeur expérimentale est un peu plus élevée que la réflectivité modale de 0,94 calculée par FDTD figure 3.4.

Effet laser à haute température

A 230 K, l'effet laser disparaît avec le laser OPO. Le rapport cyclique est de $8,3 \cdot 10^{-3}$, soit 300 fois plus élevé que celui du laser YAG ($3,3 \cdot 10^{-5}$). La puissance optique incidente pour atteindre le seuil, assez importante à cette température, vient chauffer l'échantillon. Augmenter la puissance

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

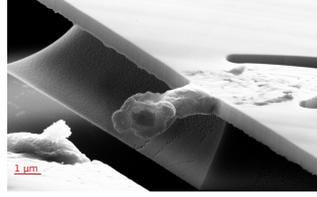


FIGURE 3.36 – Image MEB d'un pont ayant été détruit à cause d'une mauvaise dissipation thermique.

optique de pompage provoque donc une élévation locale de la température de la structure, et donc tue le gain. Sous fort pompage avec l'OPO, la température est tellement importante qu'avec une mauvaise dissipation thermique, le pont est détruit de manière irréversible (figure 3.36).

En revanche, ce problème d'échauffement est évité avec le laser YAG et il permet d'observer l'effet laser pour tous les ponts à 260 K. L'écart entre les pics énergétiques laser pour les différents ponts est largement moindre qu'à 25 K et vaut seulement 281 nm. Cette réduction est le résultat d'une déformation moindre à cette température à cause de la dilatation des bras de germanium. Ce phénomène a été simulé dans la section précédente sur les ponts de 13 %.

Enfin la température maximale d'effet laser de 273 K est obtenue pour le pont de longueur de bras $L = 75 \mu\text{m}$, pour une émission à $3,3 \mu\text{m}$ (figure 3.37). Ce pont n'est pourtant pas le pont le plus déformé et le seuil est important valant 2 MW.cm^{-2} . A la différence des ponts de 13 %, aucune corrélation n'est observée entre la déformation appliquée et la température limite laser.

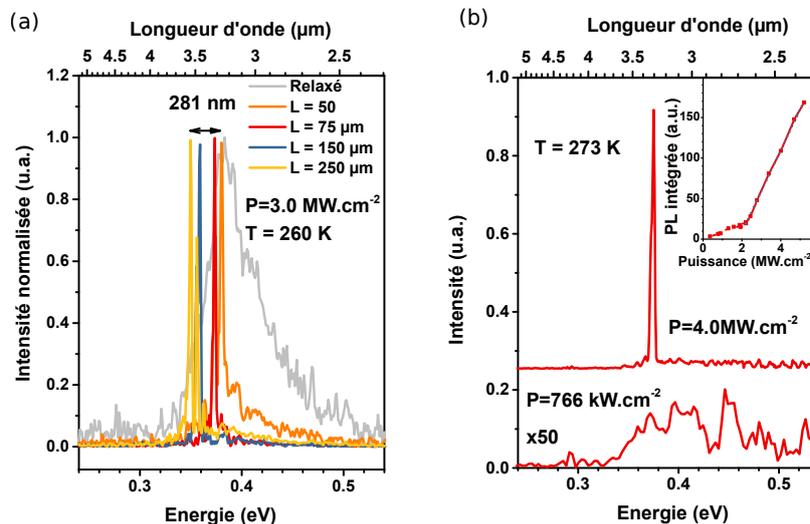


FIGURE 3.37 – (a) Spectres laser à 260 K pour des structures de 15.7 % d'étain avec des longueurs de bras tenseurs variables . (b) Spectres sous le seuil et au dessus du seuil pour la température maximale d'effet laser obtenue dans le cas d'une micro-poutre de longueur de bras $L=75 \mu\text{m}$. L'encadré indique la courbe intensité puissance incidente montrant les deux régimes associés.

aucune corrélation n'est observée entre la déformation appliquée et la température limite laser.

CHAPITRE 3. DÉFORMATION UNI-AXIALE SELON L'AXE [100] INDUITE PAR DES STRUCTURES MICRO-PONTS

Les raisons possibles à l'origine de cette constatation sont :

- la directivité du GeSn 16 % est plus importante que celle du GeSn 13 %, déformer devient alors inutile.
- la faible déformation en tension appliquée à cette température comparé aux ponts de 13 %. Les effets de cette déformation restent sûrement limités sur la courbe de gain.
- l'activation thermique de défauts dans le milieu à gain réduisant fortement le temps de vie
- l'échauffement thermique de la cavité induit par le seuil élevé à atteindre.
- l'apparition d'absorption par porteurs libres limitant la température de fonctionnement d'effet laser pour les structures les plus déformées
- l'effet Auger à haute température, sous fort pompage

3.5 Conclusion

Ce chapitre a montré la possibilité de mettre en déformation l'alliage GeSn de manière uni-axiale selon l'axe [001] sur des couches homogènes de 12,7 % d'étain et un empilement dont la couche active est de 15,7 % d'étain.

Les micro-ponts de 12,7 % d'étain, étant fabriqués à partir d'une couche relativement homogène en étain, ont permis une estimation de la déformation appliquée. Une déformation uni-axiale de 1,1 % a été mesurée en micro-Laue, et comparé aux décalages Raman et simulations comsol. Une augmentation de la température de fonctionnement de l'effet laser en fonction de la déformation a été démontrée.

Afin d'atteindre des températures plus importantes, cette approche de déformation a été envisagée pour un empilement plus riche en étain, avec des barrières de SiGeSn. L'effet laser a été obtenu à 273 K. Pour ces structures, une grande accordabilité allant jusqu'à 4.6 μm a été observée à 25 K ainsi qu'un seuil relativement faible de 10 $\text{kW}\cdot\text{cm}^{-2}$. Une étude détaillée de la courbe laser intensité-puissance a également été réalisée à 130K pour la structure avec $L=150 \mu\text{m}$.

Conclusion et Perspectives

Dans le cadre de cette thèse, j'ai pu élaborer des micro-structures en forme de croix et de micro-ponts à partir des procédés de lithographie de micro-électroniques en salle blanche dans le but de déformer respectivement de manière bi-axiale et uni-axiale le GeSn. Au sein d'une collaboration avec le C2N, j'ai également pu avoir à disposition des échantillons avec des disques de GeSn contraints en tension par des couches tenseurs de nitrures.

Les mesures issues de spectroscopie Raman m'ont permis d'estimer expérimentalement et en surface l'état de déformation du GeSn. La mesure de la déformation des micro-disques par couche tenseur a indiqué une valeur d'environ 0,8 % en moyenne dans le cas d'un disque de 15 μm totalement encapsulé par une couche de nitrure tenseur. Dans le cas de structure en forme de croix, la déformation est moindre de l'ordre de 0,3 % à température ambiante pour des bras tenseur de 125 μm . Dans le cas d'une déformation uni-axiale, des mesures micro-Laue ont montré une déformation pouvant aller jusqu'à 1,1 % à température ambiante. En couplant ces valeurs de déformation obtenues sur les micro-ponts par diffraction X à l'ESRF aux mesures de spectroscopie Raman, nous avons aussi pu en déduire une loi empirique uni-axiale reliant l'état de déformation et le décalage Raman pour une déformation uni-axiale selon [100].

J'ai également estimé la déformation grâce à des simulations comsol connaissant le design (via des images MEB) et les états de déformations résiduelles des différentes couches (RSM). En utilisant le modèle de Quang Minh-Thai, j'ai aussi évalué le gain du matériau.

Enfin, la photoluminescence et l'effet laser m'ont permis de sonder le changement des états électroniques du matériau induit par la déformation appliquée. La déformation bi-axiale du GeSn selon l'axe (001) a démontré l'importance de déformer de façon homogène le milieu à gain pour observer l'effet laser. En présence d'un gradient de déformation, le gain modal se détériore et l'effet laser se dégrade comme pour le cas de croix en augmentant les seuils, voire disparaît pour des croix de 12,7 %. Même constat pour les micro-disques recouverts de couche tenseur de SiN où le gradient de déformation verticale est tellement important que les disques ne lasent plus alors que la déformation avoisine les 1 %. Dans les cas des ponts de GeSn, la déformation est plus

Conclusion et Perspectives

homogène que les structures bi-axiales. Cela permet d'élever la température de fonctionnement de l'effet laser pour du GeSn jusqu'à 215 K avec 12,7 % de concentration grâce à un meilleur confinement des porteurs en Γ en augmentant la directivité du matériau. Ce constat n'a pas été visible pour du GeSn plus riche à 15,7 %, indiquant la possibilité que d'autres effets limitant l'effet laser interviennent comme l'effet Auger par exemple.

Bien que la déformation n'a pas montré des effets notoires sur les seuils des dispositifs laser, nous avons montré une accordabilité de la longueur d'onde d'émission en fonction de la déformation. Une accordabilité record à 25 K a été démontrée sur une plage de $1,5 \mu\text{m}$ dans le cas des micro-poutres. Le régime d'émission laser atteint une température record de 273 K pour l'alliage GeSn.

Pour conclure, l'idée de déformer des couches de GeSn à l'instar des couches de pur Ge est plus complexe qu'il n'y paraît. La compression résiduelle de GeSn lors de la croissance complique le problème. L'homogénéité de la déformation à travers l'ensemble de la couche de GeSn reste un défi afin d'obtenir le gain modal le plus favorable possible.

Perspectives à court terme

Nous avons pu voir au cours de ce manuscrit que des écarts importants existent entre l'expérience (Photoluminescence, laser et Raman) et la théorie (EPM et FEM). La connaissance exacte des gaps énergétiques en Γ et L est décisive pour une compréhension plus complète de l'alliage GeSn soumis à une déformation en tension. Une expérience de photocourant serait donc bien-

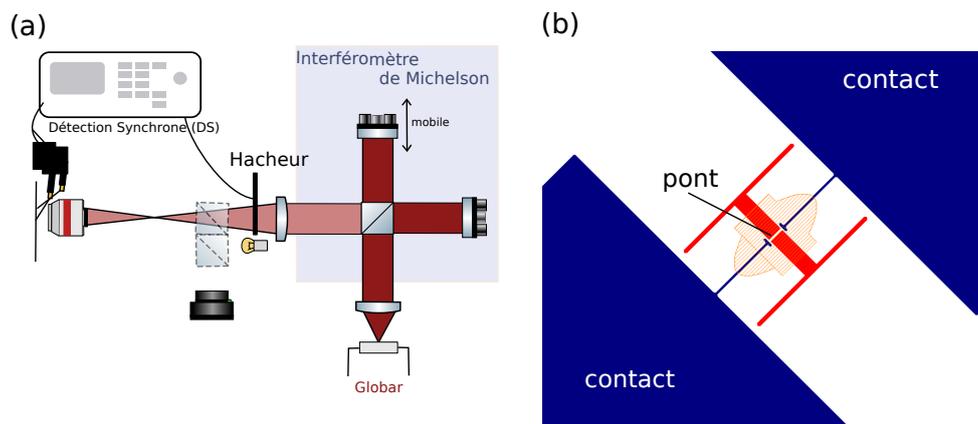


FIGURE 3.38 – (a) Schéma représentatif d'une expérience de photocourant permettant d'en déduire le gap énergétique du matériau. (b) Structure pont avec prise de contacts pour les micro-pointes.

venue en collectant des porteurs photogénérés à partir de contacts métalliques de part et d'autre

Conclusion et Perspectives

du pont comme indiqué figure 3.38. Cette expérience donne accès à l'absorption du matériau α , elle-même reliée à la valeur du gap direct proche du seuil d'absorption par :

$$\alpha = K \sqrt{E - E_g}$$

avec K une constante de proportionnalité, E_g la valeur du gap direct.

Une autre étude intéressante à mener serait la détermination des coefficients de déformation Raman p et q pour le GeSn. Pour cela, il faudrait se placer en configuration d'inclinaison (011). Dès lors les règles de sélection montrent que les trois modes TO1, TO2 et LO sont alors Raman actifs. Comme les deux modes TO₁ et LO ont un décalage Raman différent selon la déformation uni-axiale [100] appliquée, et connaissant la valeur de cette déformation par micro-Laue, il est possible à partir des deux décalages Raman et le jeu de deux équations présenté 2.9 d'en déduire p et q .

Pour voir plus loin

Afin d'envisager un prototype industriel dans un futur proche, il est nécessaire d'obtenir l'effet laser à température ambiante électriquement pompé dans le but d'être intégré directement sur puce. Plusieurs leviers d'action sont alors possibles.

Au niveau de l'épithaxie, une meilleure qualité cristalline de la couche active de GeSn avec peu d'étain (inférieure à 9 %) a permis de démontrer l'effet laser optiquement pompé en continu [70], puis pomper électriquement à basse température [84]. L'effet laser disparaît cependant très rapidement avec la température et n'est plus visible au delà de la centaine de kelvins. Ainsi pour obtenir l'effet laser électriquement pompé à plus haute température, il est impératif de réduire les dislocations dans la couche active dans le but d'augmenter le temps de vie non radiatif pour les couches de GeSn plus concentrées en étain. Ceci peut s'effectuer en utilisant un substrat de croissance plus adapté que le germanium, ou par l'utilisation de GeSnOI avec éventuellement une reprise de croissance sur ce dernier. Sur un substrat cubique face centré avec un plus grand paramètre que le GeSn, on pourrait également envisager de faire croître directement le GeSn en tension résiduelle, et le déformer de manière analogue à ce qui a été fait sur Ge ces dernières années. Enfin, la température de l'effet laser augmente avec l'incorporation d'étain. On peut donc essayer de mettre une teneur d'étain plus importante en abaissant la température de croissance, afin d'observer s'il y a une concentration d'étain optimale pour la température de fonctionnement laser.

Une autre voie à développer est celle du dopage. Il est important de contrôler précisément le dopage n , notamment. L'instabilité thermique du GeSn rend difficile le dopage ex-situ par l'implantation suivie de techniques de recuit usuelles pour l'instant. L'effet laser par pompage électrique a montré qu'il était possible de doper in-situ le GeSn mais cela reste encore un défi. Une

Conclusion et Perspectives

caractérisation du dopage via la mesure de capacités MOS est également primordiale pour en déduire les profils de dopage dans les jonctions. La connaissance du travail de sortie du matériau et son affinité électronique sont également des éléments clés afin de réaliser une hétéro-structure optimale pour le confinement des porteurs, dans le but d'abaisser les seuils et d'augmenter la température de fonctionnement, comme ce qui a été fait historiquement sur les matériaux III-V.

Des résultats récents à partir de nanofils formés d'un cœur en GaAs et d'une coquille de germanium hexagonal ou d'alliages SiGe hexagonaux semblent prometteurs avec un gap direct [85]. Pourquoi ne pas imaginer des nanofils similaires à base de GeSn avec très peu d'étain pour conserver une bonne qualité cristalline mais en augmentant la directivité du matériau à l'aide de la structure hexagonale de la maille.

Contributions scientifiques

Q. M. Thai, J. Chrétien, M. Bertrand, L. Casiez, A. Chelnokov, V. Reboud, N. Pauc, and V. Calvo, *GeSn Optical gain and lasing characteristics modelling*, Phys. Rev. B (2020), 102,15, 155203

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.155203>

A. Elbaz, R. Arefin, E. Sakat, B. Wang, E. Herth, G. Patriarche, A. Foti, R. Ossikovski, S. Sauvage, X. Checoury, K. Pantzas, I. Sagnes, J. Chrétien, L. Casiez, M. Bertrand, V. Calvo, N. Pauc, A. Chelnokov, P. Boucaud, F. Boeuf, V. Reboud, J.-M. Hartmann, M. El Kurdi, *Reduced lasing thresholds in GeSn microdisk cavities with defect management of the optically active region*, ACS Photonics (2020), 7, 10, 2713–2722

<https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.0c00708>

J. Chrétien, N. Pauc, F. Armand Pilon, M. Bertrand, Q. M. Thai, L. Casiez, N. Bernier, H. Dansas, P. Gergaud, E. Delamadeleine, R. Khazaka, H. Sigg, J. Faist, A. Chelnokov, V. Reboud, J.-M. Hartmann, and V. Calvo, *GeSn Lasers Covering a Wide Wavelength Range Thanks to Uniaxial Tensile Strain*, ACS Photonics (2019), 6, 10, 2462–2469

<https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.9b00712>

M. Bertrand, Q. M. Thai, J. Chrétien, N. Pauc, J. Aubin, L. Milord, A. Gassenq, J.-M. Hartmann, A. Chelnokov, V. Calvo, V. Reboud, *Experimental Calibration of Sn-Related Varshni Parameters for High Sn Content GeSn Layers*, Annalen der Physik (2019)

<https://doi.org/10.1002/andp.201800396>

Q. M. Thai, N. Pauc, J. Aubin, M. Bertrand, J. Chrétien, A. Chelnokov, J.-M. Hartmann, V. Reboud, and V. Calvo, *2D hexagonal photonic crystal GeSn laser with 16% Sn content*, Appl. Phys. Lett. (2018) 113, 051104

<https://doi.org/10.1063/1.5036739>

Q. M. Thai, N. Pauc, J. Aubin, M. Bertrand, J. Chrétien, V. Delaye, A. Chelnokov, J.-M. Hartmann, V. Reboud, and V. Calvo, *GeSn heterostructure micro-disk laser operating at 230 K*, Optics Express (2018) Vol. 26, Issue 25, pp. 32500-32508

<https://doi.org/10.1364/OE.26.032500>

Conférences

J. Chrétien, N. Pauc, Q. M. Thai, F. Armand Pilon, L. Casiez, M. Frauenrath, R. Khazaka, D. Rouchon, J. Faist, H. Sigg, A. Chelnokov, V. Reboud, S. Tardif, J.-M. Hartmann, V. Calvo, *Correlation Between Strain and Maximum Lasing Temperature in GeSn Microbridges*, IEEE Photonics Conference (IPC)(2020)

J. Chrétien, N. Pauc, F. Armand Pilon, M. Bertrand, Q. M. Thai, L. Casiez, N. Bernier, H. Dansas, P. Gergaud, E. Delamadeleine, R. Khazaka, H. Sigg, J. Faist, A. Chelnokov, V. Reboud, J.-M. Hartmann, and V. Calvo, *GeSn Lasers with Uniaxial Tensile Strain in the Gain Medium*, IEEE 16th International Conference on Group IV Photonics (GFP)(2019), présentation orale

J. Chrétien, N. Pauc, F. Armand Pilon, M. Bertrand, Q. M. Thai, L. Casiez, N. Bernier, H. Dansas, P. Gergaud, E. Delamadeleine, R. Khazaka, H. Sigg, J. Faist, A. Chelnokov, V. Reboud, J.-M. Hartmann, and V. Calvo, *Uniaxial tensile strain in GeSn microbridges tunable laser sources*, E-MRS Spring Meeting, (2018), présentation orale

J. Chrétien, A. Elbaz, N. Pauc, K. Pantzas, E. Herth, I. Sagnes, G. Patriarches, M. Bertrand, Q. M. Thai, A. Chelnokov, V. Reboud, J.-M. Hartmann, M. El Kurdi, V. Calvo, *GeSn microdisk encapsulated by SiN stressor for laser applications*, E-MRS Spring Meeting, (2018), Poster

Grandeurs relatives aux matériaux

A.1 Coefficients de dilatation du silicium et germanium

Pour une température comprise entre 40K et 300K [45], le coefficient de dilatation thermique est modélisé à partir de données expérimentales en utilisant une série polynomiale à 10 termes :

$$\alpha_{mat}^{LT}(T) = \sum_{k=0}^9 a_k T^k$$

Les coefficients polynomiaux dans le cas du silicium et du germanium résultant de cette modélisation sont donnés dans le tableau A.1.

ANNEXE A. GRANDEURS RELATIVES AUX MATÉRIAUX

Coefficients polynomiaux		
a_i	Si	Ge
a_0	-3.04326×10^{-5}	-6.63961×10^{-10}
a_1	2.47307×10^{-6}	-1.10414×10^{-8}
a_2	-8.10816×10^{-8}	1.64012×10^{-9}
a_3	1.41263×10^{-9}	-7.46178×10^{-11}
a_4	-1.46649×10^{-11}	1.58409×10^{-12}
a_5	9.54066×10^{-14}	-1.6784×10^{-14}
a_6	-3.92759×10^{-16}	9.78647×10^{-17}
a_7	9.93953×10^{-19}	-3.2157×10^{-19}
a_8	-1.41172×10^{-21}	5.60036×10^{-22}
a_9	8.61723×10^{-25}	-4.02877×10^{-25}

TABLE A.1 – Coefficients polynomiaux dans le cas de Si et Ge.

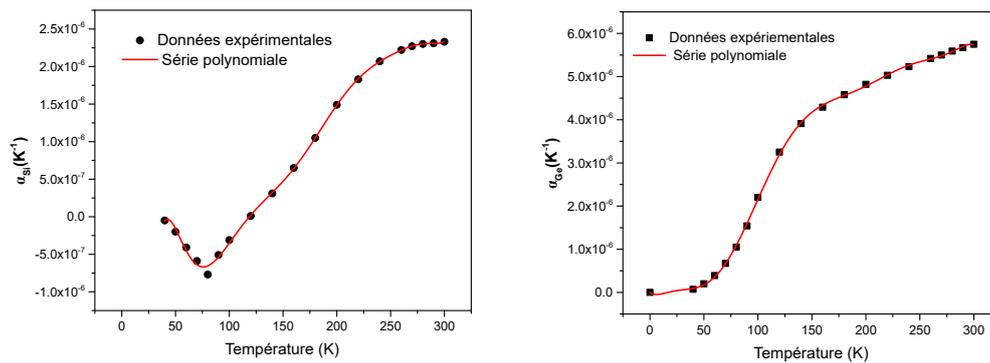


FIGURE A.1 – Modélisation des coefficients d'expansion thermique du silicium (gauche) et germanium (droite) par une série polynomiale de 10 termes pour une température comprise entre 40K et 300K. Les coefficients sont reportés dans le tableau A.1.

A.2 Constantes Matériaux

Paramètres de maille et bowing	
a_{Si}^o	5.43105
a_{Ge}^o	5.65756
a_{Sn}^o	6.489
β_{GeSn}	0.041

Coefficients élastiques (Pa)			
Matériau	Si	Ge	Sn
C_{11}	165.64	12.9e10	69e9
C_{12}	63.94	48e9	29e9
C_{44}	79.51	67.7e9	3.84e10

Potentiels de déformation de Van Der Walle (eV)		
Matériau	Ge	Sn
$a_{c\gamma}$	-8.24	-6.0
a_{cL}	-1.54	-2.14
a_v	1.24	1.58
b_v	-2.9	-2.7

ANNEXE A. GRANDEURS RELATIVES AUX MATÉRIAUX

Tenseurs Raman

B.1 Table de Caractères et fonctions de base [86]

Chaque cristal formé à partir d'un réseau de bravais et d'un motif appartient à un groupe d'espace en fonction des opérations de symétries existantes entre les atomes. Ces groupes d'espace renferment l'ensemble des opérations de symétries générales à l'origine de propriétés physiques macroscopiques (phonons, optique, magnétisme...), dont les fonctions représentatives sont invariantes par symétrie. Par exemple, le groupe d'espace du Ge, Si ou diamant pur est le groupe $Fd\bar{3}m$ (notation de Hermann-Mauguin) appartenant au groupe d'espace O_h (notation Schönflies).

L'ensemble des opérations de symétrie constitue donc un groupe dont une des représentations possibles est notée Γ . L'idée de la théorie des groupes ici est d'utiliser une représentation plus simple de ce groupe, en associant à chaque élément du groupe de symétrie Γ un élément d'un autre groupe (souvent une matrice) de son choix. Chaque élément du nouveau groupe doit cependant obéir à la même table de multiplication que le groupe de départ Γ . Dans ce cas, on obtient une autre représentation du groupe de symétrie Γ' . Il n'y a donc pas unicité de la représentation. Cependant, il est possible de réduire toute représentation Γ_R en une somme directe de représentations irréductibles Γ_{IR} :

$$\Gamma_R = \oplus_{i=1}^m n_{IR} \Gamma_{IR}^i \quad (\text{B.1})$$

avec n un entier représentant le nombre de fois la représentation irréductible et m le nombre de classe de symétrie totale.

ANNEXE B. TENSEURS RAMAN

	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$	fonctions de bases
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
A_{2g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1	
E_g	2	-1	0	0	+2	+2	0	-1	+2	0	$2z^2 - x^2 - y^2, x^2 - y^2$
T_{1g}	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1	R_x, R_y, R_z
T_{2g}	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1	(xz, yz, xy)
A_{2u}	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	
E_u	2	-1	0	0	+2	-2	0	1	2	0	
T_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1	(x, y, z)
T_{2u}	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1	

TABLE B.1 – Table de caractère pour un groupe ponctuel O_h .

Ces représentations irréductibles sont regroupées pour chaque groupe ponctuel dans la première colonne d'une table de caractères comme celle du groupe ponctuel O_h présentée figure B.1. La notation de ces représentations irréductibles est donnée par les symboles de Mulliken [87] décrits dans la table B.1. L'ensemble des opérations de symétrie du groupe y sont également inscrites sur la première ligne de cette table suivant les notations de Schönflies rappelées dans la table B.1. L'intersection donne la valeur de la trace de la représentation irréductible de l'opération de symé-

Notation	Sens associé
A	symétrique par rapport à l'axe principal (dégénéré 1 fois)
B	antisymétrique par rapport à l'axe principal (dégénéré 1 fois)
E	Représentation doublement dégénéré
T	Représentation triplement dégénéré
indice g	symétrique par rapport au centre d'inversion i
indice u	antisymétrique par rapport au centre d'inversion i
indice '	symétrique par rapport au plan horizontal σ_h
indice ''	antisymétrique par rapport au plan horizontal σ_h
indice 1,2	Rajouter quand l'espace géométrique ne peut présenter ses propriétés (orbitales)

TABLE B.2 – Notation des représentations selon Mulliken.

trie choisie. Enfin les deux dernières colonnes donnent les fonctions de base de la représentation irréductible se trouvant sur la même ligne. Les composantes non nulles du tenseur Raman qui est un tenseur symétrique de rang 2, suivent les mêmes propriétés de symétrie que les fonctions de base quadratiques ($x^2, y^2, xy \dots$). Autrement dit, un mode normal de phonon sera "Raman actifs" s'il possède une représentation irréductible avec des fonctions de base quadratique.

ANNEXE B. TENSEURS RAMAN

Notation	Transformation associée
E	Identité
i	Centre d'inversion
C_n^m	Rotation d'angle $\frac{2\pi m}{n}$
σ_v	Plan de symétrie vertical incluant l'axe principal de symétrie
σ_h	Plan de symétrie horizontal perpendiculaire à l'axe principal de symétrie
σ_d	Plan vertical bissecteur de deux axes C2 orienté perpendiculaire à l'axe principal de symétrie
S_n	Anti-rotation d'ordre n

TABLE B.3 – Notation des opérations de symétrie selon Schönflies.

B.2 Détermination des modes normaux Raman actifs

Il faut déterminer dans un premier temps la représentation irréductible des modes de vibrations Γ_{vib} du cristal, ici celle du Ge. Pour cela, on utilise la formule suivante :

$$\Gamma_{vib} = \Gamma_{inv} \otimes \Gamma_{vec}$$

avec Γ_{inv} la représentation réductible décrivant les atomes invariants du cristal par opérations de symétrie et Γ_{vec} la représentation d'un vecteur (x,y,z). On obtient Γ_{vec} en sommant les lignes des représentations irréductibles composés des fonctions de base (x,y,z). Dans notre cas, grâce à la table B.1, on a donc :

$$\Gamma_{vec} = T_{1u}$$

La représentation Γ_{inv} est déterminée en regardant les atomes du cristal invariants par les symétries de la table de caractère. Pour le cristal de type diamant, l'identité E, les rotations $8C_3$, $3C_2$, l'anti-rotation S_6 et la symétrie axiale σ_d laissent les 2 atomes de la maille invariants. (Table B.2) Cette tâche est assez fastidieuse. La représentation Γ_{inv} est réductible. Afin de la décompo-

	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
Γ_{inv}	2	2	0	0	2	0	2	0	0	2

ser en une somme de représentations irréductibles données dans la table de caractères (équation B.1), on utilise le théorème d'orthogonalité suivant : $n_i = \frac{1}{g} \sum_k g_k \chi_{IR}^k \chi_{inv}$ avec k représentant la kième classe, g_k le nombre d'opérations associées à la classe k et g l'ordre du groupe (48 ici), χ_{IR}^k et χ_{inv} les traces respectives des représentations irréductibles Γ_{IR} et des atomes invariants Γ_{inv} . Dans notre cas, on a alors :

$$n(A_{1g}) = \frac{1}{48} (1 \times 1 \times 2 + 8 \times 1 \times 2 + 6 \times 1 \times 0 + 6 \times 1 \times 0 + 3 \times 1 \times 2 + 1 \times 1 \times 0 + 6 \times 1 \times 2 + 8 \times 1 \times 0 + 3 \times 1 \times 0 + 6 \times 1 \times 2) = 1$$

ANNEXE B. TENSEURS RAMAN

En effectuant la même démarche pour toute les transformations irréductible de la table, on obtient finalement :

$$\Gamma_{inv} = A_{1g} + A_{2u}$$

Le produit tensoriel s'effectue en multipliant les lignes des représentations irréductibles constituant le produit. On reconnait alors $A_{1g} \otimes T_{1u} = T_{1u}$ et $A_{2u} \otimes T_{1u} = T_{2g}$. Les modes de

	E	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	i	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2u}	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
T_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
$A_{1g} \otimes T_{1u}$	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
$A_{2u} \otimes T_{1u}$	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1

vibrations normaux sont les modes vibrants selon les opérations symétries des représentations irréductibles :

$$\Gamma_{vib} = T_{2g} + T_{1u}$$

Le seul mode normal visible en Raman est le mode triplement dégénéré T_{2g} avec comme composantes non nulles du tenseur les composantes xz, yz, xy . On a bien :

$$R_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \\ 0 & d & 0 \end{pmatrix} \quad R_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad R_z = \begin{pmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

Une autre appellation utile pour interpréter les résultats de décalage Raman en configuration de rétro-diffusion selon la surface (001) du cristal est la notation TO_1, TO_2 et LO correspondant aux modes de phonons polarisés dans les directions [100], [010] et [001]. Ces modes sont donc relatifs aux tenseurs Raman respectif R_x, R_y, R_z dans le cas d'une étude en rétro-diffusion (001).

B.3 Influence de la déformation et de la concentration sur le tenseur Raman

Il est important de noter qu'il y a une perte de symétrie du cristal lors de l'ajout d'étain (changement du motif avec une structure s'approchant de la structure ZnS) et lors de la déformation (changement du réseau de Bravais). Dans le cas d'une déformation quelconque, le nouveau tenseur peut s'écrire comme une combinaison linéaire à partir des vecteurs propres de l'équation séculaire 2.8 et des tenseurs Raman d'un cristal non déformé selon la relation [88] :

$$R'_k = \sum_{i=1}^3 R_i(u_k)_i$$

ANNEXE B. TENSEURS RAMAN

avec u_k le vecteur propre de l'équation séculaire associé à la valeur propre λ_k . Dans les cas des déformations uni-axiale [100] et bi-axiale (001), il n'y a pas de contraintes de cisaillement. Les vecteurs propres associés à $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ sont respectivement (100), (010), (001). Un rapide calcul montre que les tenseurs Raman sont inchangés dans ces deux cas.

Dans le cas d'ajout d'étain (dans le cas extrême à 50 %), la structure a pour groupe ponctuel T_d et les modes sont décrits par la représentation irréductible T_2 qui est triplement dégénéré et Raman actif. Il n'y pas de levée de dégénérescence dans ce cas et les tenseurs sont identiques à ceux énoncés dans la section précédente. Le désordre d'alliage peut néanmoins élargir le pic Raman correspondant.

B.4 Rétro-diffusion selon (011)

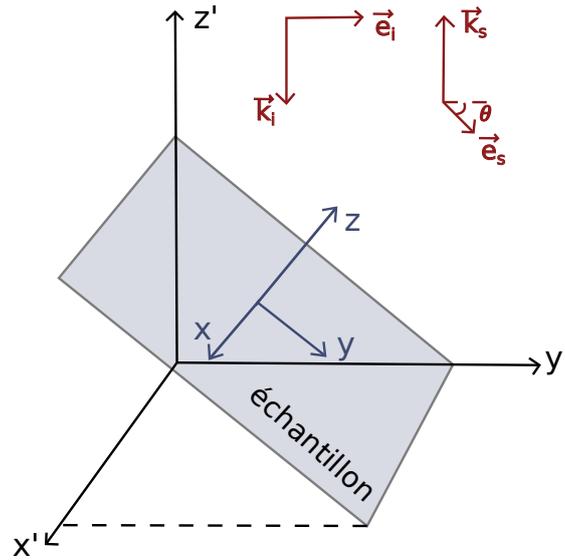


FIGURE B.1 – (Schéma Représentatif de la configuration Raman (011)). Le repère (O,x,y,z) est lié à l'échantillon dans lequel est défini le tenseur Raman. (O,x',y',z') est le repère du laboratoire, les vecteurs d'onde incident et diffusé sont selon l'axe z'.

La configuration de Rétro-diffusion Raman selon (001) ne permet de voir qu'un seul mode sur les trois. Afin d'observer tous les modes provenant de la levée de dégénérescence lors de l'application d'une déformation uni-axiale, il est nécessaire de passer à la rétro-diffusion (011) (figure B.1). L'intensité de chaque mode est alors donnée par :

$$\|\vec{e}_i^T R_x \vec{e}_s\|^2 = \left\| \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \theta \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \cos \theta \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \cos \theta \end{pmatrix} \right\|^2 \propto \frac{d^2}{2} \sin^2 \theta$$

ANNEXE B. TENSEURS RAMAN

$$\|\vec{e}_i R_y \vec{e}_s\|^2 = \left\| \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \theta \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \cos \theta \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \cos \theta \end{pmatrix} \right\|^2 \propto \frac{d^2}{2} \sin^2 \theta$$

$$\|\vec{e}_i R_z \vec{e}_s\|^2 = \left\| \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \\ 0 & d & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \theta \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \cos \theta \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \cos \theta \end{pmatrix} \right\|^2 \propto d^2 \cos^2 \theta$$

En utilisant un jeu de deux polariseurs, on peut éteindre préférentiellement le dernier mode par rapport aux deux autres ($\theta = \frac{\pi}{2}$).

Température et mesures raman

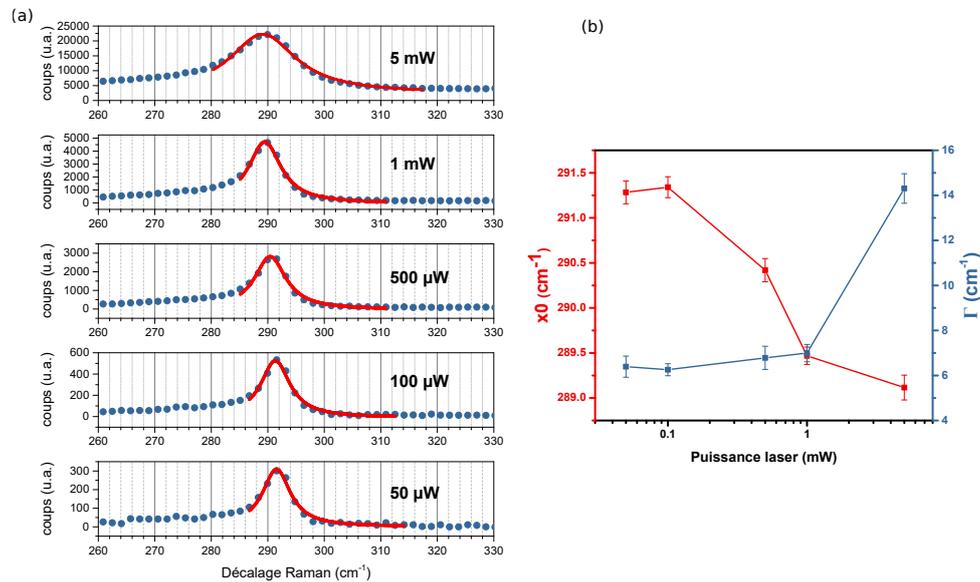


FIGURE C.1 – (a) Spectres raman à différentes puissances de laser et (b) modélisation lorentzienne du pic donnant le centre x_0 et la largeur à mi-hauteur Γ du pic.

La figure C.1 présente les spectres raman réalisés pour différentes puissances du laser excitateur à 532 nm sur un pont suspendu. Une modélisation lorentzienne du pic a été effectuée. A puissance trop importante, le laser chauffe l'échantillon se traduisant par à la fois un décalage du pic raman (distance Ge - Ge) et un élargissement du pic (désordre). On se placera donc à une puissance à 50 μW de façon à éviter tout décalage raman dû à la température.

ANNEXE C. TEMPÉRATURE ET MESURES RAMAN

Paramètres de simulations

Micro-disques contraints par couche de SiN		
Empilement	1	2
$h_{\text{pied}}(\mu\text{m})$	2,5(<i>Ge</i>)	2,5(<i>Ge</i>)
$h_{\text{GeSn}}(\text{nm})$	480	480
$h_{\text{SiN}}^{\text{dessus}}(\text{nm})$		590
$r_{\text{SiN}}^{\text{bord}}(\text{nm})$		100
$r_{\text{disque}}(\mu\text{m})$	7,5	3,5/7,5
$r_{\text{pied}}(\mu\text{m})$	3,5	4,25
$\epsilon_0^{\text{GeSn}}(\%)$	-0,44	0/ -0,44
$\sigma_0^{\text{SiN}}(\text{GPa})$		-4,5
$\epsilon_0^{\text{Ge}}(\%)$	0,15	0,15
$E^{\text{SiN}}(\text{GPa})$	100	100
ν_{SiN}	0,23	0,23
Encastrement	<i>Substrat, Ge</i>	<i>Substrat, Ge</i>

TABLE D.1 – Rassemblement des paramètres géométriques utilisés pour les simulations comsol dans le cas des disques contraints par nitrure.

ANNEXE D. PARAMÈTRES DE SIMULATIONS

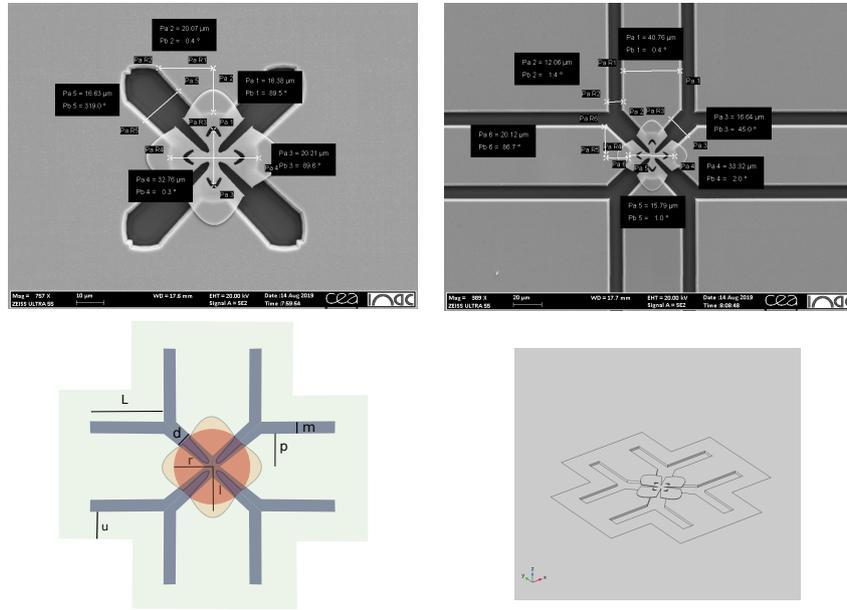


FIGURE D.1 – Définition des différents paramètres géométriques à partir des images MEB.

Croix en GeSn contraintes	
(μm)	0 à 150
$d(\mu m)$	16
$h_{Ge}(\mu m)$	2, 5
$h_{GeSn}(nm)$	480
$h_{Si}(m)$	10^{-4}
$h_{SiO_2}(\mu m)$	2
$l(\mu m)$	33
$m(\mu m)$	$\frac{d}{\sqrt{2}}$
$r(\mu m)$	16, 5
$u(\mu m)$	22
$w_{Si}(\mu m)$	1200
Encastrement	Substrat et toute couche non sous-gravée par l'oxyde
$\epsilon_0^{Ge}(\%)$	0, 14
$\epsilon_0^{GeSn}(\%)$	-0, 57

TABLE D.2 – Rassemblement des paramètres géométriques utilisés pour les simulations comsol dans le cas des croix.

ANNEXE D. PARAMÈTRES DE SIMULATIONS

Ponts en GeSn contraints	
$L(\mu m)$	0 à 500
$d(\mu m)$	8
$h_{Ge}(\mu m)$	2,5
$h_{GeSn}(nm)$	480
$h_{Si}(m)$	10^{-4}
$h_{SiO_2}(\mu m)$	2
$e(\mu m)$	1,5
$rF1(\mu m)$	0,5
$u_{Ge}(\mu m)$	4,4
$u_{SiO_2}(\mu m)$	40
$w_{Si}(\mu m)$	1200
Encastrement	Substrat et toute couche non sous-gravée par l'oxyde
$\epsilon_0^{Ge}(\%)$	0,14
$\epsilon_0^{GeSn}(\%)$	-0,57

TABLE D.3 – Rassemblement des paramètres géométriques utilisés pour les simulations consol dans le cas des ponts.

ANNEXE D. PARAMÈTRES DE SIMULATIONS

Détails des courbes de gain

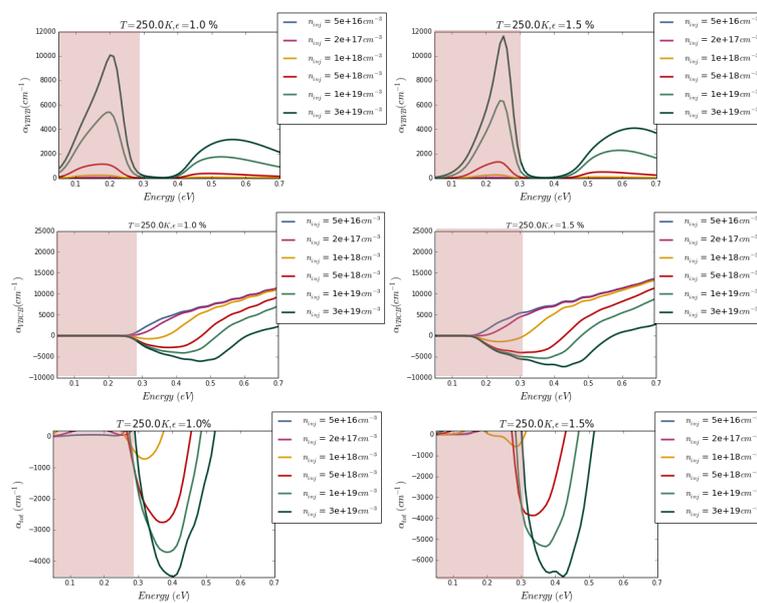


FIGURE E.1 – Cas du GeSn 12,7 % déformé de manière biaxiale à 1 % et 1,5 % à T=250K. On peut voir que pour une injection de 10^{18}cm^{-3} , la courbe de gain de déformation de 1,5 % est défavorable par rapport à celle de 1% à cause de l'absorption LH-HH.

ANNEXE E. DÉTAILS DES COURBES DE GAIN

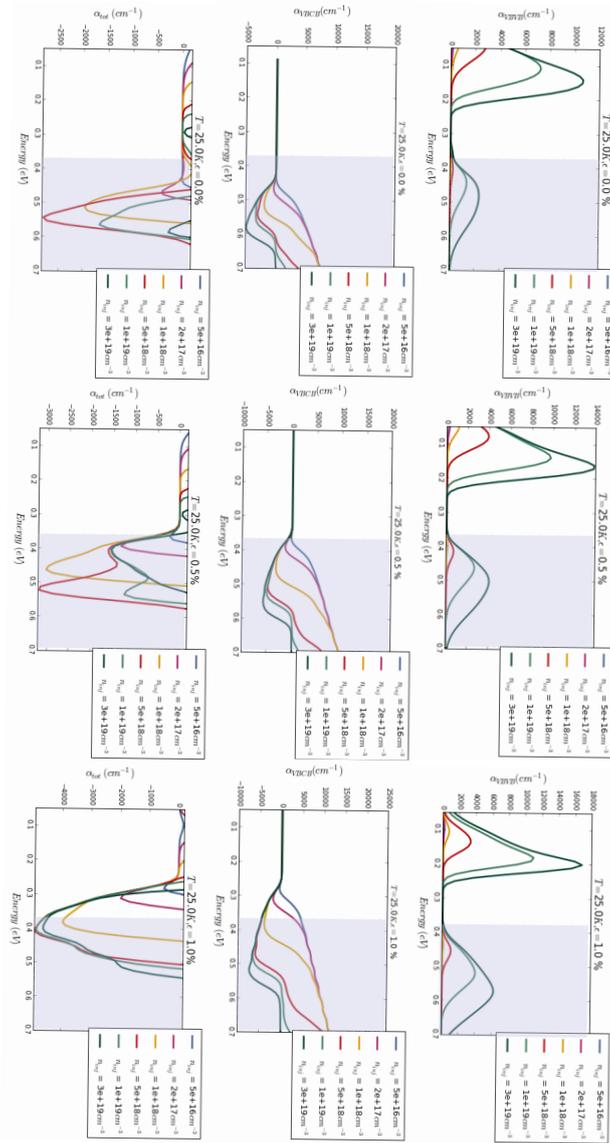


FIGURE E.2 – Cas du GeSn 12,7 % déformé de manière biaxiale à 0%, 0,5 % et 1 % à $T=25\text{K}$. On peut voir que dans le cas des fortes injections, le gain gagné par la mise en déformation à 0,5 % est annihilé à cause de l'absorption LH-SO.

Spectres complémentaires pour l'étude des croix de 15,7 %

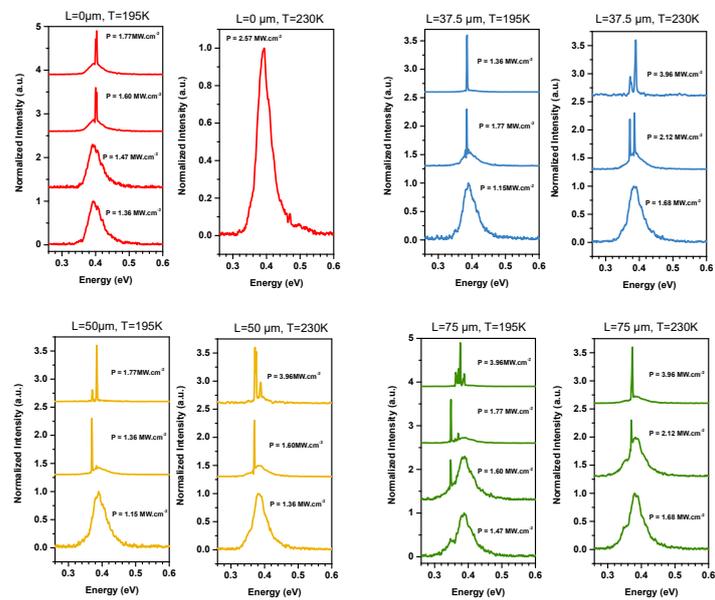


FIGURE E.1 – Compléments de spectres pour les croix de 15,7 % à 195 K et 230 K pour les quatre longueurs de bras 0 μm, 37,5 μm, 50 μm, 75 μm.

ANNEXE F. SPECTRES COMPLÉMENTAIRES POUR L'ÉTUDE DES CROIX DE 15,7 %

Modes de cavités Fabry-Pérot

Les modes d'une cavité Fabry-Pérot sont régis par l'équation suivante :

$$I = \frac{I_{max}}{1 + C \sin^2\left(\frac{\Phi}{2}\right)}$$

avec $C = \frac{4R}{(1-R)^2}$ et $\Phi = 2k_{vec}n_{eff}l_{cav}$.

Dans ces formules, R représente le coefficient de réflexion du miroir et vaut 0,9. k_{vec} est le vecteur d'onde, n_{eff} l'indice effectif du GeSn, 3,8 et l_{cav} la longueur de la cavité. L'intervalle spectral libre (ISL) est relié à la longueur de la cavité par la formule suivante :

$$\Delta\nu_{ISL} = \frac{c}{2n_{eff}l_{cav}} \tag{G.1}$$

Connaissant l'ISL, on peut donc en déduire une longueur de cavité effective.

ANNEXE G. MODES DE CAVITÉS FABRY-PÉROT

Bibliographie

- [1] J. BARDEEN et W. H. BRATTAIN, « The Transistor, A Semi-Conductor Triode, » *Physical Review*, t. 74, n° 2, p. 230-231, 15 juil. 1948. DOI : 10 . 1103/PhysRev . 74 . 230. adresse : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.74.230> (visité le 01/02/2020) (cf. p. 3).
- [2] W. SHOCKLEY, « A Unipolar "Field-Effect" Transistor, » *Proceedings of the IRE*, t. 40, n° 11, p. 1365-1376, nov. 1952, ISSN : 2162-6634. DOI : 10 . 1109 / JRPROC . 1952 . 273964 (cf. p. 3).
- [3] M. M. ATALLA, « Junction formation by thermal oxidation of semiconductive material, » brev. amér. 2953486A, 20 sept. 1960. adresse : <https://patents.google.com/patent/US2953486A/en> (visité le 09/02/2020) (cf. p. 3).
- [4] G. MOORE, « Cramming more components onto integrated circuits, » *Proceedings of the IEEE*, t. 86, n° 1, p. 82-85, jan. 1998, ISSN : 0018-9219, 1558-2256. DOI : 10 . 1109 / JPROC . 1998 . 658762. adresse : <http://ieeexplore.ieee.org/document/658762/> (visité le 09/02/2020) (cf. p. 4).
- [5] INTEL. (). Moore's Law 40th Anniversary, adresse : https://www.intel.com/pressroom/kits/events/moores_law_40th/index.htm?iid=tech_mooreslaw+body_presskit (visité le 09/02/2020) (cf. p. 4).
- [6] R. SOREF, « Mid-infrared photonics in silicon and germanium, » *Nature Photonics*, t. 4, n° 8, p. 495-497, août 2010, Number : 8 Publisher : Nature Publishing Group, ISSN : 1749-4893. DOI : 10 . 1038/nphoton . 2010 . 171. adresse : <https://www.nature.com/articles/nphoton.2010.171> (visité le 19/10/2020) (cf. p. 5).

BIBLIOGRAPHIE

- [7] C. BOZTUG, J. R. SÁNCHEZ-PÉREZ, F. F. SUDRADJAT, R. B. JACOBSON, D. M. PASKIEWICZ, M. G. LAGALLY et R. PAIELLA, « Tensilely strained germanium nanomembranes as infrared optical gain media, » *Small*, t. 9, n° 4, p. 622-630, 2013, ISSN : 1613-6829. DOI : 10.1002/smll.201201090. adresse : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/smll.201201090> (visité le 11/02/2020) (cf. p. 6).
- [8] T. EALES, « Influence of electronic band structure on the efficiency of mid-infrared photonic devices., » doctoral, University of Surrey, 28 juin 2019. adresse : <http://epubs.surrey.ac.uk/851957/> (visité le 11/02/2020) (cf. p. 6, 43).
- [9] J. GREIL, A. LUGSTEIN, C. ZEINER, G. STRASSER et E. BERTAGNOLLI, « Tuning the electro-optical properties of germanium nanowires by tensile strain, » *Nano Letters*, t. 12, n° 12, p. 6230-6234, 12 déc. 2012, ISSN : 1530-6984, 1530-6992. DOI : 10.1021/nl303288g. adresse : <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/nl303288g> (visité le 11/02/2020) (cf. p. 6).
- [10] A. GHRIB, M. de KERSAUSON, M. EL KURDI, R. JAKOMIN, G. BEAUDOIN, S. SAUVAGE, G. FISHMAN, G. NDONG, M. CHAIGNEAU, R. OSSIKOVSKI, I. SAGNES et P. BOUCAUD, « Control of tensile strain in germanium waveguides through silicon nitride layers, » *Applied Physics Letters*, t. 100, n° 20, p. 201104, 14 mai 2012, ISSN : 0003-6951. DOI : 10.1063/1.4718525. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4718525> (visité le 12/02/2020) (cf. p. 6, 7).
- [11] A. GHRIB, M. E. KURDI, M. PROST, S. SAUVAGE, X. CHECOURY, G. BEAUDOIN, M. CHAIGNEAU, R. OSSIKOVSKI, I. SAGNES et P. BOUCAUD, « All-Around SiN Stressor for High and Homogeneous Tensile Strain in Germanium Microdisk Cavities, » *Advanced Optical Materials*, t. 3, n° 3, p. 353-358, 2015, ISSN : 2195-1071. DOI : 10.1002/adom.201400369. adresse : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adom.201400369> (visité le 11/02/2020) (cf. p. 7).
- [12] J. R. JAIN, A. HRYCIW, T. M. BAER, D. A. B. MILLER, M. L. BRONGERSMA et R. T. HOWE, « A micromachining-based technology for enhancing germanium light emission via tensile strain, » *Nature Photonics*, t. 6, n° 6, p. 398-405, juin 2012, ISSN : 1749-4885, 1749-4893. DOI : 10.1038/nphoton.2012.111. adresse : <http://www.nature.com/articles/nphoton.2012.111> (visité le 21/11/2018) (cf. p. 7).
- [13] A. ELBAZ, M. EL KURDI, A. AASSIME, S. SAUVAGE, X. CHECOURY, I. SAGNES, C. BAUDOT, F. BOEUF et P. BOUCAUD, « Germanium microlasers on metallic pedestals, » *APL Photonics*, t. 3, n° 10, p. 106102, oct. 2018, ISSN : 2378-0967. DOI : 10.1063/1.5025705. adresse : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.5025705> (visité le 21/11/2018) (cf. p. 6, 10).

BIBLIOGRAPHIE

- [14] A. GHRIB, M. EL KURDI, M. de KERSAUSON, M. PROST, S. SAUVAGE, X. CHECOURY, G. BEAUDOIN, I. SAGNES et P. BOUCAUD, « Tensile-strained germanium microdisks, » *Applied Physics Letters*, t. 102, n° 22, p. 221112, 3 juin 2013, ISSN : 0003-6951. DOI : 10.1063/1.4809832. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/full/10.1063/1.4809832> (visité le 07/02/2020) (cf. p. 6).
- [15] J. VERBERT, « Réalisation et étude optique de microcavités à modes de galerie intégrées sur silicium, » thesis, Université Joseph Fourier (Grenoble), 1^{er} jan. 2006. adresse : <http://www.theses.fr/2006GRE10219> (visité le 24/02/2020) (cf. p. 7).
- [16] D. NAM, D. S. SUKHDEO, J.-H. KANG, J. PETYKIEWICZ, J. H. LEE, W. S. JUNG, J. VUČKOVIĆ, M. L. BRONGERSMA et K. C. SARASWAT, « Strain-Induced Pseudoheterostructure Nanowires Confining Carriers at Room Temperature with Nanoscale-Tunable Band Profiles, » *Nano Letters*, t. 13, n° 7, p. 3118-3123, 10 juil. 2013, ISSN : 1530-6984. DOI : 10.1021/nl401042n. adresse : <https://doi.org/10.1021/nl401042n> (visité le 15/02/2020) (cf. p. 9).
- [17] M. J. SÜESS, R. GEIGER, R. A. MINAMISAWA, G. SCHIEFLER, J. FRIGERIO, D. CHRASTINA, G. ISELLA, R. SPOLENAK, J. FAIST et H. SIGG, « Analysis of enhanced light emission from highly strained germanium microbridges, » *Nature Photonics*, t. 7, n° 6, p. 466-472, juin 2013, ISSN : 1749-4885, 1749-4893. DOI : 10.1038/nphoton.2013.67. adresse : <http://www.nature.com/articles/nphoton.2013.67> (visité le 21/11/2018) (cf. p. 9).
- [18] A. GASSENQ, S. TARDIF, K. GUILLOY, G. OSVALDO DIAS, N. PAUC, I. DUCHEMIN, D. ROUCHON, J.-M. HARTMANN, J. WIDIEZ, J. ESCALANTE, Y.-M. NIQUET, R. GEIGER, T. ZABEL, H. SIGG, J. FAIST, A. CHELNOKOV, F. RIEUTORD, V. REBOUD et V. CALVO, « Accurate strain measurements in highly strained Ge microbridges, » *Applied Physics Letters*, t. 108, n° 24, p. 241902, 13 juin 2016, ISSN : 0003-6951. DOI : 10.1063/1.4953788. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4953788> (visité le 07/02/2020) (cf. p. 9, 106).
- [19] K. GUILLOY, N. PAUC, A. GASSENQ, Y.-M. NIQUET, J.-M. ESCALANTE, I. DUCHEMIN, S. TARDIF, G. OSVALDO DIAS, D. ROUCHON, J. WIDIEZ, J.-M. HARTMANN, R. GEIGER, T. ZABEL, H. SIGG, J. FAIST, A. CHELNOKOV, V. REBOUD et V. CALVO, « Germanium under High Tensile Stress : Nonlinear Dependence of Direct Band Gap vs Strain, » *ACS Photonics*, t. 3, n° 10, p. 1907-1911, 19 oct. 2016, Publisher : American Chemical Society. DOI : 10.1021/acsp Photonics.6b00429. adresse : <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.6b00429> (visité le 19/10/2020) (cf. p. 9).
- [20] A. GASSENQ, K. GUILLOY, G. OSVALDO DIAS, N. PAUC, D. ROUCHON, J.-M. HARTMANN, J. WIDIEZ, S. TARDIF, F. RIEUTORD, J. ESCALANTE, I. DUCHEMIN, Y.-M. NIQUET,

BIBLIOGRAPHIE

- R. GEIGER, T. ZABEL, H. SIGG, J. FAIST, A. CHELNOKOV, V. REBOUD et V. CALVO, « 1.9% bi-axial tensile strain in thick germanium suspended membranes fabricated in optical germanium-on-insulator substrates for laser applications, » *Applied Physics Letters*, t. 107, n° 19, p. 191 904, 9 nov. 2015, ISSN : 0003-6951. DOI : 10 . 1063 / 1 . 4935590. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/full/10.1063/1.4935590> (visité le 11/02/2020) (cf. p. 9, 81).
- [21] D. D. CANNON, J. LIU, Y. ISHIKAWA, K. WADA, D. T. DANIELSON, S. JONGTHAMMANURAK, J. MICHEL et L. C. KIMERLING, « Tensile strained epitaxial Ge films on Si(100) substrates with potential application in L-band telecommunications, » *Applied Physics Letters*, t. 84, n° 6, p. 906-908, 4 fév. 2004, ISSN : 0003-6951. DOI : 10 . 1063 / 1 . 1645677. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.1645677> (visité le 17/01/2020) (cf. p. 8).
- [22] K. GUILLOY, N. PAUC, A. GASSENQ, P. GENTILE, S. TARDIF, F. RIEUTORD et V. CALVO, « Tensile Strained Germanium Nanowires Measured by Photocurrent Spectroscopy and X-ray Microdiffraction, » *Nano Letters*, t. 15, n° 4, p. 2429-2433, 8 avr. 2015, Publisher : American Chemical Society, ISSN : 1530-6984. DOI : 10 . 1021 / n15048219. adresse : <https://doi.org/10.1021/n15048219> (visité le 19/10/2020) (cf. p. 9).
- [23] F. T. ARMAND PILON, A. LYASOTA, Y.-M. NIQUET, V. REBOUD, V. CALVO, N. PAUC, J. WIDIEZ, C. BONZON, J. M. HARTMANN, A. CHELNOKOV, J. FAIST et H. SIGG, « Lasing in strained germanium microbridges, » *Nature Communications*, t. 10, n° 1, p. 1-8, 20 juin 2019, ISSN : 2041-1723. DOI : 10 . 1038 / s41467 - 019 - 10655 - 6. adresse : <https://www.nature.com/articles/s41467-019-10655-6> (visité le 07/02/2020) (cf. p. 9, 10, 125, 134).
- [24] J. LIU, X. SUN, R. CAMACHO-AGUILERA, L. C. KIMERLING et J. MICHEL, « Ge-on-Si laser operating at room temperature, » *Optics Letters*, t. 35, n° 5, p. 679-681, 1^{er} mar. 2010, ISSN : 1539-4794. DOI : 10 . 1364 / OL . 35 . 000679. adresse : <https://www.osapublishing.org/ol/abstract.cfm?uri=ol-35-5-679> (visité le 20/02/2020) (cf. p. 10).
- [25] S. BAO, D. KIM, C. ONWUKAEME, S. GUPTA, K. SARASWAT, K. H. LEE, Y. KIM, D. MIN, Y. JUNG, H. QIU, H. WANG, E. A. FITZGERALD, C. S. TAN et D. NAM, « Low-threshold optically pumped lasing in highly strained germanium nanowires, » *Nature Communications*, t. 8, n° 1, p. 1-7, 29 nov. 2017, ISSN : 2041-1723. DOI : 10 . 1038 / s41467 - 017 - 02026 - w. adresse : <https://www.nature.com/articles/s41467-017-02026-w> (visité le 20/02/2020) (cf. p. 10).
- [26] S. WIRTHS, R. GEIGER, N. von den DRIESCH, G. MUSSLER, T. STOICA, S. MANTL, Z. IKONIC, M. LUYSBERG, S. CHIUSI, J. M. HARTMANN, H. SIGG, J. FAIST, D. BUCA

BIBLIOGRAPHIE

- et D. GRÜTZMACHER, « Lasing in direct-bandgap GeSn alloy grown on si, » *Nature Photonics*, t. 9, n° 2, p. 88-92, fév. 2015, ISSN : 1749-4885, 1749-4893. DOI : 10 . 1038 / nphoton . 2014 . 321. adresse : <http://www.nature.com/articles/nphoton.2014.321> (visité le 21/11/2018) (cf. p. 10, 11, 131).
- [27] D. STANGE, S. WIRTHS, R. GEIGER, C. SCHULTE-BRAUCKS, B. MARZBAN, N. von den DRIESCH, G. MUSSLER, T. ZABEL, T. STOICA, J.-M. HARTMANN, S. MANTL, Z. IKONIC, D. GRÜTZMACHER, H. SIGG, J. WITZENS et D. BUCA, « Optically pumped GeSn microdisk lasers on si, » *ACS Photonics*, t. 3, n° 7, p. 1279-1285, 20 juil. 2016, ISSN : 2330-4022, 2330-4022. DOI : 10 . 1021 / acsphotonics . 6b00258. adresse : <http://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsphotonics.6b00258> (visité le 21/11/2018) (cf. p. 11, 12).
- [28] V. REBOUD, A. GASSENQ, N. PAUC, J. AUBIN, L. MILORD, Q. M. THAI, M. BERTRAND, K. GUILLOY, D. ROUCHON, J. ROTHMAN, T. ZABEL, F. ARMAND PILON, H. SIGG, A. CHELNOKOV, J. M. HARTMANN et V. CALVO, « Optically pumped GeSn microdisks with 16%Sn lasing at 3.1 um up to 180K, » *Applied Physics Letters*, t. 111, n° 9, p. 092101, 28 août 2017, ISSN : 0003-6951. DOI : 10 . 1063 / 1 . 5000353. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/full/10.1063/1.5000353> (visité le 20/02/2020) (cf. p. 12, 13, 86).
- [29] J. MARGETIS, S. AL-KABI, W. DU, W. DOU, Y. ZHOU, T. PHAM, P. GRANT, S. GHETMIRI, A. MOSLEH, B. LI, J. LIU, G. SUN, R. SOREF, J. TOLLE, M. MORTAZAVI et S.-Q. YU, « Si-Based GeSn Lasers with Wavelength Coverage of 2–3 um and Operating Temperatures up to 180 K, » *ACS Photonics*, t. 5, n° 3, p. 827-833, 21 mar. 2018. DOI : 10 . 1021 / acsphotonics . 7b00938. adresse : <https://doi.org/10.1021/acsphotonics.7b00938> (visité le 20/02/2020) (cf. p. 12, 13).
- [30] D. RAINKO, Z. IKONIC, N. VUKMIROVIĆ, D. STANGE, N. von den DRIESCH, D. GRÜTZMACHER et D. BUCA, « Investigation of carrier confinement in direct bandgap GeSn-SiGeSn 2d and 0d heterostructures, » *Scientific Reports*, t. 8, n° 1, p. 15 557, 22 oct. 2018, Number : 1 Publisher : Nature Publishing Group, ISSN : 2045-2322. DOI : 10 . 1038 / s41598 - 018 - 33820 - 1. adresse : <https://www.nature.com/articles/s41598-018-33820-1> (visité le 19/10/2020) (cf. p. 13).
- [31] D. STANGE, N. v. d. DRIESCH, D. RAINKO, S. ROESGAARD, I. POVSTUGAR, J.-M. HARTMANN, T. STOICA, Z. IKONIC, S. MANTL, D. GRÜTZMACHER et D. BUCA, « Short-wave infrared LEDs from GeSn/SiGeSn multiple quantum wells, » *Optica*, t. 4, n° 2, p. 185-188, 20 fév. 2017, Publisher : Optical Society of America, ISSN : 2334-2536. DOI : 10 . 1364 / OPTICA . 4 . 000185. adresse : <https://www.osapublishing>.

BIBLIOGRAPHIE

- org/optica/abstract.cfm?uri=optica-4-2-185 (visité le 19/10/2020) (cf. p. 13).
- [32] D. STANGE, N. von den DRIESCH, T. ZABEL, F. ARMAND-PILON, D. RAINKO, B. MARZBAN, P. ZAUMSEIL, J.-M. HARTMANN, Z. IKONIC, G. CAPELLINI, S. MANTL, H. SIGG, J. WITZENS, D. GRÜTZMACHER et D. BUCA, « GeSn/SiGeSn Heterostructure and Multi Quantum Well Lasers, » *ACS Photonics*, t. 5, n° 11, p. 4628-4636, 21 nov. 2018, Publisher : American Chemical Society. DOI : 10.1021/acsp Photonics.8b01116. adresse : <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.8b01116> (visité le 19/10/2020) (cf. p. 13).
- [33] N. v. d. DRIESCH, D. STANGE, D. RAINKO, I. POVSTUGAR, P. ZAUMSEIL, G. CAPELLINI, T. SCHRÖDER, T. DENNEULIN, Z. IKONIC, J.-M. HARTMANN, H. SIGG, S. MANTL, D. GRÜTZMACHER et D. BUCA, « Advanced GeSn-SiGeSn group IV heterostructure lasers, » *Advanced Science*, t. 5, n° 6, p. 1700955, 2018, _eprint : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/adv.201700955>, ISSN : 2198-3844. DOI : 10.1002/adv.201700955. adresse : <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adv.201700955> (visité le 19/10/2020) (cf. p. 13).
- [34] R. R. LIETEN, C. FLEISCHMANN, S. PETERS, N. M. SANTOS, L. M. AMORIM, Y. SHIMURA, N. UCHIDA, T. MAEDA, S. NIKITENKO, T. CONARD, J.-P. LOCQUET, K. TEMST et A. VANTOMME, « Structural and optical properties of amorphous and crystalline GeSn layers on si, » *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, t. 3, n° 12, P403-P408, 2014, ISSN : 2162-8769, 2162-8777. DOI : 10.1149/2.0091412jss. adresse : <https://iopscience.iop.org/article/10.1149/2.0091412jss> (visité le 17/03/2020) (cf. p. 16).
- [35] J. AUBIN, J. M. HARTMANN, A. GASSENQ, J. L. ROUVIERE, E. ROBIN, V. DELAYE, D. COOPER, N. MOLLARD, V. REBOUD et V. CALVO, « Growth and structural properties of step-graded, high sn content GeSn layers on ge, » *Semiconductor Science and Technology*, t. 32, n° 9, p. 094006, août 2017, ISSN : 0268-1242. DOI : 10.1088/1361-6641/aa8084. adresse : <https://doi.org/10.1088/1361-6641/aa8084> (visité le 21/02/2020) (cf. p. 16, 21).
- [36] K. KNOWLES et P. HOWIE, « The directional dependence of elastic stiffness and compliance shear coefficients and shear moduli in cubic materials, » 31 déc. 2014, ISSN : 0374-3535. DOI : <https://www.repository.cam.ac.uk/handle/1810/246611>. adresse : <https://www.repository.cam.ac.uk/handle/1810/246611> (visité le 17/03/2020) (cf. p. 17).
- [37] R. CHEN, « Germanium-Tin : A material and technology for Group IV Photonics integration on silicon, » thèse de doct., Stanford University, 2014 (cf. p. 21).

BIBLIOGRAPHIE

- [38] J. M. HARTMANN et J. AUBIN, « Assessment of the growth/etch back technique for the production of ge strain-relaxed buffers on si, » *Journal of Crystal Growth*, t. 488, p. 43-50, 15 avr. 2018, ISSN : 0022-0248. DOI : 10.1016/j.jcrysgro.2018.02.036. adresse : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022024818300897> (visité le 21/02/2020) (cf. p. 21).
- [39] R. W. OLESINSKI et G. J. ABBASCHIAN, « The ge-sn (germanium-tin) system, » *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, t. 5, n° 3, p. 265-271, 1^{er} juin 1984, ISSN : 0197-0216. DOI : 10.1007/BF02868550. adresse : <https://doi.org/10.1007/BF02868550> (visité le 27/08/2020) (cf. p. 21).
- [40] C. (C), *Structural Mechanics Module Users Guide*. adresse : <https://doc.comsol.com/5.4/doc/com.comsol.help.sme/StructuralMechanicsModuleUsersGuide.pdf> (visité le 17/03/2020) (cf. p. 31).
- [41] M. J. SÜESS, « Highly strained si and ge microand nanobridges for micro- and optoelectronic applications, » Doctoral Thesis, ETH Zurich, 2014. DOI : 10.3929/ethz-a-010182474. adresse : <https://www.research-collection.ethz.ch/handle/20.500.11850/85765> (visité le 12/02/2020) (cf. p. 31, 34).
- [42] IOFFE. (22 juil. 2020). NSM Archive - Physical Properties of Semiconductors, adresse : <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/> (visité le 22/07/2020) (cf. p. 32).
- [43] H. P. SINGH, « Determination of thermal expansion of germanium, rhodium and iridium by x-rays, » *Acta Crystallographica Section A: Crystal Physics, Diffraction, Theoretical and General Crystallography*, t. 24, n° 4, p. 469-471, 1^{er} juil. 1968, ISSN : 0567-7394. DOI : 10.1107/S056773946800094X. adresse : [//scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?a05935](http://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?a05935) (visité le 12/12/2019) (cf. p. 32).
- [44] Y. OKADA et Y. TOKUMARU, « Precise determination of lattice parameter and thermal expansion coefficient of silicon between 300 and 1500 k, » *Journal of Applied Physics*, t. 56, n° 2, p. 314-320, 15 juil. 1984, ISSN : 0021-8979, 1089-7550. DOI : 10.1063/1.333965. adresse : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.333965> (visité le 17/01/2020) (cf. p. 32).
- [45] D. F. GIBBONS, « Thermal expansion of some crystals with the diamond structure, » *Physical Review*, t. 112, n° 1, p. 136-140, 1^{er} oct. 1958, Number : 1, ISSN : 0031-899X. DOI : 10.1103/PhysRev.112.136. adresse : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.112.136> (visité le 26/02/2020) (cf. p. 32, 143).
- [46] Z. SONG, W. FAN, C. S. TAN, Q. WANG, D. NAM, D. H. ZHANG et G. SUN, « Band structure of GeSn alloy : a full-zone 30 kp model, » *New Journal of Physics*, t. 21, n° 7, p. 073037, 23 juil. 2019, ISSN : 1367-2630. DOI : 10.1088/1367-2630/ab306f. (visité le 18/03/2020) (cf. p. 35, 68, 119).

BIBLIOGRAPHIE

- [47] J. MATHEWS, R. T. BEELER, J. TOLLE, C. XU, R. ROUCKA, J. KOUVETAKIS et J. MENÉNDEZ, « Direct-gap photoluminescence with tunable emission wavelength in Ge_{1-y}Sn_y alloys on silicon, » *Applied Physics Letters*, t. 97, n° 22, p. 221 912, 29 nov. 2010, Number : 22, ISSN : 0003-6951. DOI : 10 . 1063 / 1 . 3521391. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.3521391> (visité le 11/08/2020) (cf. p. 36).
- [48] R. ROUCKA, R. BEELER, J. MATHEWS, M.-Y. RYU, Y. KEE YEO, J. MENÉNDEZ et J. KOUVETAKIS, « Complementary metal-oxide semiconductor-compatible detector materials with enhanced 1550 nm responsivity via Sn-doping of Ge/Si(100), » *Journal of Applied Physics*, t. 109, n° 10, p. 103 115, 15 mai 2011, Number : 10, ISSN : 0021-8979. DOI : 10 . 1063 / 1 . 3592965. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.3592965> (visité le 11/08/2020) (cf. p. 36).
- [49] B. DUTT, H. LIN, D. S. SUKHDEO, B. M. VULOVIC, S. GUPTA, D. NAM, K. C. SARASWAT et J. S. HARRIS JR., « Theoretical Analysis of GeSn Alloys as a Gain Medium for a Si-Compatible Laser, » *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, t. 19, n° 5, p. 1502 706-1502 706, sept. 2013, Number : 5, ISSN : 1558-4542. DOI : 10 . 1109 / JSTQE . 2013 . 2241397 (cf. p. 36).
- [50] H. Pérez Ladrón de GUEVARA, A. G. RODRÍGUEZ, H. NAVARRO-CONTRERAS et M. A. VIDAL, « Nonlinear behavior of the energy gap in Ge_{1-x}Sn_x alloys at 4K, » *Applied Physics Letters*, t. 91, n° 16, p. 161 909, 15 oct. 2007, Number : 16, ISSN : 0003-6951. DOI : 10 . 1063 / 1 . 2800296. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.2800296> (visité le 11/08/2020) (cf. p. 36).
- [51] C. XU, P. M. WALLACE, D. A. RINGWALA, L.-Y. CHANG, C. D. POWELEIT, J. KOUVETAKIS et J. MENENDEZ, « Mid-infrared (3-8 μ m) GeSn alloys (0.15 < y < 0.30) : Synthesis, structural, and optical properties, » *Applied Physics Letters*, t. 114, n° 21, p. 212 104, 27 mai 2019, ISSN : 0003-6951. DOI : 10 . 1063 / 1 . 5100275. adresse : <https://asu.pure.elsevier.com/en/publications/mid-infrared-3-8-%CE%BC-m-gesub1-subsubsubsnsubsubsub-alloys-015-1t-y-1> (visité le 11/12/2019) (cf. p. 36, 56).
- [52] G. HE et H. A. ATWATER, « Interband Transitions in Sn_xGe_{1-x} Alloys, » *Physical Review Letters*, t. 79, n° 10, p. 1937-1940, 8 sept. 1997. DOI : 10 . 1103 / PhysRevLett . 79 . 1937. adresse : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.79.1937> (visité le 11/08/2020) (cf. p. 36).
- [53] H. TRAN, W. DU, S. A. GHETMIRI, A. MOSLEH, G. SUN, R. A. SOREF, J. MARGETIS, J. TOLLE, B. LI, H. A. NASEEM et S.-Q. YU, « Systematic study of Ge_{1-x}Sn_x absorption coefficient and refractive index for the device applications of Si-based optoelectronics, » *Journal of Applied Physics*, t. 119, n° 10, p. 103 106, 2016, Publisher : Ame-

BIBLIOGRAPHIE

- rican Institute of Physics, ISSN : 0021-8979. DOI : 10.1063/1.4943652. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4943652> (cf. p. 36).
- [54] J.-Z. CHEN, H. LI, H. H. CHENG et G.-E. CHANG, « Structural and optical characteristics of Ge_{1-x}Sn_x/Ge superlattices grown on Ge-buffered Si(001) wafers, » *Optical Materials Express*, t. 4, n° 6, p. 1178-1185, 1^{er} juin 2014, ISSN : 2159-3930. DOI : 10.1364/OME.4.001178. adresse : <https://www.osapublishing.org/ome/abstract.cfm?uri=ome-4-6-1178> (visité le 11/08/2020) (cf. p. 36).
- [55] H. LIN, R. CHEN, W. LU, Y. HUO, T. I. KAMINS et J. S. HARRIS, « Investigation of the direct band gaps in Ge_{1-x}Sn_x alloys with strain control by photoreflectance spectroscopy, » *Applied Physics Letters*, t. 100, n° 10, p. 102109, 5 mar. 2012, Publisher : American Institute of Physics, ISSN : 0003-6951. DOI : 10.1063/1.3692735. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.3692735> (visité le 17/08/2020) (cf. p. 36).
- [56] C. G. Van de WALLE, « Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory, » *Phys. Rev. B*, t. 39, p. 1871, 1989. adresse : <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.39.1871> (visité le 18/03/2020) (cf. p. 36).
- [57] Q. THAI, « Emission laser et modélisation du gain optique dans des microcavités Germanium-Etain (GeSn), » thèse de doct., 16 oct. 2019. adresse : <http://www.theses.fr/s163658> (visité le 17/03/2020) (cf. p. 38).
- [58] S. L. CHUANG, *Physics of Photonic Devices*. 2009, ISBN : 0-470-29319-5 (cf. p. 41).
- [59] M. d. KERSAUSON, « Vers un laser germanium dopé N et contraint en tension, » thesis, Paris II, 26 juin 2013. adresse : <http://www.theses.fr/2013PA112107> (visité le 11/02/2020) (cf. p. 51, 52).
- [60] A. GHRIB, « Ingénierie de contrainte dans des cavités germanium : vers une application de laser intégré sur silicium, » thèse de doct., Université Paris Sud - Paris XI, 8 déc. 2014. adresse : <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01127101> (visité le 16/04/2020) (cf. p. 51).
- [61] O. MADELUNG, « Elements of the IVth group and IV-IV compounds, » in *Semiconductors : Data Handbook*, O. MADELUNG, éd., Berlin, Heidelberg : Springer, 2004, p. 7-70, ISBN : 978-3-642-18865-7. DOI : 10.1007/978-3-642-18865-7_2. adresse : https://doi.org/10.1007/978-3-642-18865-7_2 (visité le 16/04/2020) (cf. p. 54).

BIBLIOGRAPHIE

- [62] R. LOUDON, « The Raman effect in crystals, » *Advances in Physics*, t. 13, n° 52, p. 423-482, 1^{er} oct. 1964, Publisher : Taylor & Francis _eprint : <https://doi.org/10.1080/00018736400101051>, ISSN : 0001-8732. DOI : 10.1080/00018736400101051. adresse : <https://doi.org/10.1080/00018736400101051> (visité le 15/07/2020) (cf. p. 55).
- [63] F. CERDEIRA, C. J. BUCHENAUER, F. H. POLLAK et M. CARDONA, « Stress-Induced Shifts of First-Order Raman Frequencies of Diamond- and Zinc-Blende-Type Semiconductors, » *Physical Review B*, t. 5, n° 2, p. 580-593, 15 jan. 1972, Publisher : American Physical Society. DOI : 10.1103/PhysRevB.5.580. adresse : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.5.580> (visité le 16/04/2020) (cf. p. 55).
- [64] A. GASSENQ, S. TARDIF, K. GUILLOY, I. DUCHEMIN, N. PAUC, J. M. HARTMANN, D. ROUCHON, J. WIDIEZ, Y. M. NIQUET, L. MILORD, T. ZABEL, H. SIGG, J. FAIST, A. CHELNOKOV, F. RIEUTORD, V. REBOUD et V. CALVO, « Raman-strain relations in highly strained Ge : Uniaxial (100), (110) and biaxial (001) stress, » *Journal of Applied Physics*, t. 121, n° 5, p. 055702, 1^{er} fév. 2017, Publisher : American Institute of Physics, ISSN : 0021-8979. DOI : 10.1063/1.4974202. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.4974202> (visité le 19/10/2020) (cf. p. 56).
- [65] A. GASSENQ, L. MILORD, J. AUBIN, N. PAUC, K. GUILLOY, J. ROTHMAN, D. ROUCHON, A. CHELNOKOV, J. M. HARTMANN, V. REBOUD et V. CALVO, « Raman spectral shift versus strain and composition in GeSn layers with 6%–15% Sn content, » *Applied Physics Letters*, t. 110, n° 11, p. 112101, 13 mar. 2017, Publisher : American Institute of Physics, ISSN : 0003-6951. DOI : 10.1063/1.4978512. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4978512> (visité le 16/04/2020) (cf. p. 56).
- [66] H. LIN, R. CHEN, Y. HUO, T. I. KAMINS et J. S. HARRIS, « Raman study of strained GeSn alloys, » *Applied Physics Letters*, t. 98, n° 26, p. 261917, 27 juin 2011, Publisher : American Institute of Physics, ISSN : 0003-6951. DOI : 10.1063/1.3606384. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.3606384> (visité le 19/10/2020) (cf. p. 56).
- [67] J.-H. FOURNIER-LUPIEN, S. MUKHERJEE, S. WIRTHS, E. PIPPEL, N. HAYAZAWA, G. MUSSLER, J. M. HARTMANN, P. DESJARDINS, D. BUCA et O. MOUTANABBIR, « Strain and composition effects on Raman vibrational modes of silicon-germanium-tin ternary alloys, » *Applied Physics Letters*, t. 103, n° 26, p. 263103, 23 déc. 2013, Publisher : American Institute of Physics, ISSN : 0003-6951. DOI : 10.1063/1.4855436. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.4855436> (visité le 19/10/2020) (cf. p. 56).

BIBLIOGRAPHIE

- [68] Y. P. VARSHNI, « Temperature dependence of the energy gap in semiconductors, » *Physica*, t. 34, n° 1, p. 149-154, 1^{er} jan. 1967, ISSN : 0031-8914. DOI : 10.1016/0031-8914(67)90062-6. adresse : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0031891467900626> (visité le 19/10/2020) (cf. p. 62).
- [69] M. BERTRAND, Q.-M. THAI, J. CHRÉTIEN, N. PAUC, J. AUBIN, L. MILORD, A. GASSENQ, J.-M. HARTMANN, A. CHELNOKOV, V. CALVO et V. REBOUD, « Experimental calibration of sn-related varshni parameters for high sn content GeSn layers, » *Annalen der Physik*, t. 531, n° 6, p. 1 800 396, 2019, ISSN : 1521-3889. DOI : 10.1002/andp.201800396. adresse : <https://www.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.201800396> (visité le 12/12/2019) (cf. p. 62).
- [70] A. ELBAZ, D. BUCA, N. v. d. DRIESCH, K. PANTZAS, G. PATRIARCHE, N. ZEROUNIAN, E. HERTH, X. CHECOURY, S. SAUVAGE, I. SAGNES, A. FOTI, R. OSSIKOVSKI, J.-M. HARTMANN, F. BOEUF, Z. IKONIC, P. BOUCAUD, D. GRÜTZMACHER et M. E. KURDI, « Ultra-low-threshold continuous-wave and pulsed lasing in tensile-strained GeSn alloys, » *Nature Photonics*, p. 1-8, 16 mar. 2020, Publisher : Nature Publishing Group, ISSN : 1749-4893. DOI : 10.1038/s41566-020-0601-5. adresse : <https://www.nature.com/articles/s41566-020-0601-5> (visité le 16/04/2020) (cf. p. 72, 126, 132, 139).
- [71] J. LIU, X. SUN, D. PAN, X. WANG, L. C. KIMERLING, T. L. KOCH et J. MICHEL, « Tensile-strained, n-type Ge as a gain medium for monolithic laser integration on Si, » *Optics Express*, t. 15, n° 18, p. 11 272-11 277, 3 sept. 2007, Number : 18, ISSN : 1094-4087. DOI : 10.1364/OE.15.011272. adresse : <https://www.osapublishing.org/oe/abstract.cfm?uri=oe-15-18-11272> (visité le 05/06/2020) (cf. p. 75).
- [72] R. GEIGER, « Direct band gap germanium for si-compatible lasing, » Doctoral Thesis, ETH Zurich, 2016. DOI : 10.3929/ethz-a-010645406. adresse : <https://www.research-collection.ethz.ch/handle/20.500.11850/116627> (visité le 05/06/2020) (cf. p. 76, 134).
- [73] E. ROSENCHER et B. VINTER, *Optoélectronique*. Masson, 1998. adresse : <https://www.dunod.com/sciences-techniques/optoelectronique> (visité le 21/07/2020) (cf. p. 76).
- [74] C. B. P. BONZON, « Phase and mode control of structured semiconductor lasers, » Doctoral Thesis, ETH Zurich, 2016. DOI : 10.3929/ethz-a-010656750. adresse : <https://www.research-collection.ethz.ch/handle/20.500.11850/116941> (visité le 05/06/2020) (cf. p. 79).

BIBLIOGRAPHIE

- [75] S. GUPTA, R. CHEN, Y.-C. HUANG, Y. KIM, E. SANCHEZ, J. S. HARRIS et K. C. SARASWAT, « Highly Selective Dry Etching of Germanium over Germanium–Tin ($\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$) : A Novel Route for $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ Nanostructure Fabrication, » *Nano Letters*, t. 13, n° 8, p. 3783-3790, 14 août 2013, Number : 8, ISSN : 1530-6984. DOI : 10 . 1021 / n14017286. adresse : <https://doi.org/10.1021/n14017286> (visité le 09/06/2020) (cf. p. 81).
- [76] G. P. AGRAWAL et N. K. DUTTA, *Semiconductor Lasers*, 2^e éd. Springer US, 1993, ISBN : 978-1-4613-0481-4. DOI : 10 . 1007 / 978 - 1 - 4613 - 0481 - 4. adresse : <https://www.springer.com/gp/book/9781461304814> (visité le 09/06/2020) (cf. p. 93).
- [77] S. TARDIF, A. GASSENQ, K. GUILLOY, N. PAUC, G. OSVALDO DIAS, J.-M. HARTMANN, J. WIDIEZ, T. ZABEL, E. MARIN, H. SIGG, J. FAIST, A. CHELNOKOV, V. REBOUD, V. CALVO, J.-S. MICHA, O. ROBACH et F. RIEUTORD, « Lattice strain and tilt mapping in stressed ge microstructures using x-ray laue micro-diffraction and rainbow filtering, » *Journal of Applied Crystallography*, t. 49, n° 5, p. 1402-1411, 1^{er} oct. 2016, Number : 5 Publisher : International Union of Crystallography, ISSN : 1600-5767. DOI : 10 . 1107 / S1600576716010347. adresse : <http://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?vh5056> (visité le 19/10/2020) (cf. p. 108).
- [78] K. TAKEUCHI, K. SUDA, R. YOKOGAWA, K. USUDA, N. SAWAMOTO et A. OGURA, « Biaxial stress evaluation in GeSn film epitaxially grown on ge substrate by oil-immersion raman spectroscopy, » *Japanese Journal of Applied Physics*, t. 55, n° 9, p. 091 301, 4 août 2016, Number : 9, ISSN : 1347-4065. DOI : 10 . 7567 / JJAP . 55 . 091301. adresse : <https://iopscience.iop.org/article/10.7567/JJAP.55.091301/meta> (visité le 09/06/2020) (cf. p. 111).
- [79] Q. M. THAI, N. PAUC, J. AUBIN, M. BERTRAND, J. CHRÉTIEN, V. DELAYE, A. CHELNOKOV, J.-M. HARTMANN, V. REBOUD et V. CALVO, « GeSn heterostructure micro-disk laser operating at 230 K, » *Optics Express*, t. 26, n° 25, p. 32 500-32 508, 10 déc. 2018, Publisher : Optical Society of America, ISSN : 1094-4087. DOI : 10 . 1364 / OE . 26 . 032500. adresse : <https://www.osapublishing.org/oe/abstract.cfm?uri=oe-26-25-32500> (visité le 18/11/2020) (cf. p. 123).
- [80] W. DOU, « High Sn content GeSn Alloy towards Room temperature Mid Infrared Laser, » *Theses and Dissertations*, 1^{er} août 2018 (cf. p. 125).
- [81] P. BLOOD, *Quantum Condensed Laser Devices, Optical gain and recombination in semiconductors*, 1st. Oxford, University Press, 2015, ISBN : 978-0-19-964452-0 (cf. p. 129).

BIBLIOGRAPHIE

- [82] X. WANG, A. CUERVO COVIAN, L. JE, S. FU, H. LI, J. PIAO et J. LIU, « GeSn on Insulators (GeSnOI) Toward Mid-infrared Integrated Photonics, » *Frontiers in Physics*, t. 7, 2019, Publisher : Frontiers, ISSN : 2296-424X. DOI : 10 . 3389 / fphy . 2019 . 00134. adresse : <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fphy.2019.00134/full> (visité le 15/10/2020) (cf. p. 131).
- [83] Q. M. THAI, J. CHRETIEN, M. BERTRAND, L. CASIEZ, A. CHELNOKOV, V. REBOUD, N. PAUC et V. CALVO, « GeSn optical gain and lasing characteristics modelling, » *Physical Review B*, t. 102, n° 15, p. 155 203, 16 oct. 2020, Publisher : American Physical Society. DOI : 10 . 1103/PhysRevB . 102 . 155203. adresse : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.155203> (visité le 19/10/2020) (cf. p. 132).
- [84] Y. ZHOU, Y. ZHOU, Y. MIAO, S. OJO, S. OJO, H. TRAN, G. ABERNATHY, G. ABERNATHY, J. M. GRANT, J. M. GRANT, S. AMOAH, G. SALAMO, G. SALAMO, W. DU, J. LIU, J. MARGETIS, J. TOLLE, Y.-h. ZHANG, G. SUN, R. A. SOREF, B. LI, S.-Q. YU et S.-Q. YU, « Electrically injected GeSn lasers on Si operating up to 100 K, » *Optica*, t. 7, n° 8, p. 924-928, 20 août 2020, Publisher : Optical Society of America, ISSN : 2334-2536. DOI : 10 . 1364/OPTICA . 395687. adresse : <https://www.osapublishing.org/optica/abstract.cfm?uri=optica-7-8-924> (visité le 19/10/2020) (cf. p. 132, 139).
- [85] E. M. T. FADALY, A. DIJKSTRA, J. R. SUCKERT, D. ZISS, M. A. J. van TILBURG, C. MAO, Y. REN, V. T. van LANGE, K. KORZUN, S. KÖLLING, M. A. VERHEIJEN, D. BUSSE, C. RÖDL, J. FURTHMÜLLER, F. BECHSTEDT, J. STANGL, J. J. FINLEY, S. BOTTI, J. E. M. HAVERKORT et E. P. A. M. BAKKERS, « Direct-bandgap emission from hexagonal ge and SiGe alloys, » *Nature*, t. 580, n° 7802, p. 205-209, avr. 2020, Number : 7802 Publisher : Nature Publishing Group, ISSN : 1476-4687. DOI : 10 . 1038 / s41586 - 020 - 2150 - y. adresse : <https://www.nature.com/articles/s41586-020-2150-y> (visité le 27/08/2020) (cf. p. 140).
- [86] M. S. DRESSELHAUS. (2002). Applications of Group Theory to the Physics of Solids, adresse : <http://web.mit.edu/course/6/6.734j/www/group-full102.pdf> (visité le 22/07/2020) (cf. p. 147).
- [87] R. S. MULLIKEN, « Report on Notation for the Spectra of Polyatomic Molecules, » *The Journal of Chemical Physics*, t. 23, n° 11, p. 1997-2011, 1^{er} nov. 1955, Publisher : American Institute of Physics, ISSN : 0021-9606. DOI : 10 . 1063 / 1 . 1740655. adresse : <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.1740655> (visité le 22/07/2020) (cf. p. 148).
- [88] G. H. LOECHELT, N. G. CAVE et J. MENENDEZ, « Polarized off-axis Raman spectroscopy : A technique for measuring stress tensors in semiconductors, » *Journal*

BIBLIOGRAPHIE

of Applied Physics, t. 86, n° 11, p. 6164-6180, déc. 1999, Number : 11, ISSN : 0021-8979. DOI : 10.1063/1.371670. adresse : <https://asu.pure.elsevier.com/en/publications/polarized-off-axis-raman-spectroscopy-a-technique-for-measuring-s> (visité le 22/07/2020) (cf. p. 150).

Résumé

En raison de leur bande interdite à caractère direct, les semi-conducteurs à base de l'alliage germanium-étain (GeSn) font l'objet d'une attention particulière pour des dispositifs optoélectroniques. Contrairement au germanium pur, l'alliage GeSn possède une transition énergétique inter-bandes directe à partir d'une concentration d'environ 6 % à l'état relaxé, lui conférant du gain optique nécessaire pour observer l'effet laser à basse température. La température de fonctionnement de l'effet laser est d'autant plus élevée que la couche optiquement active est riche en étain. Toutefois, l'incorporation d'étain dans l'alliage se heurte à l'heure actuelle à des limites technologiques en terme de croissance du matériau à partir d'une concentration supérieure à 16 %. L'application d'une déformation en tension se présente donc comme une approche alternative pour modifier le diagramme de bande et amplifier le gain du matériau pour envisager des applications à température ambiante.

Dans un premier chapitre, les grandeurs utiles et les effets de la déformation sur la structure de bande ont été introduits.

Le cas d'une déformation bi-axiale de l'alliage GeSn est ensuite abordée dans des structures micro-disques contraints par couche tenseur, puis par des membranes croix suspendues. La déformation est estimée par simulation FEM, spectroscopie Raman et Photoluminescence. L'effet Laser est également étudié.

Dans un dernier chapitre, la déformation uni-axiale selon [100] est présentée via des structures micro-ponts, montrant l'effet laser jusqu'à 273 K. A l'aide de la diffraction micro-laue, une étude de la déformation est également menée.

Abstract

Due to the direct band gap, semiconductors based on the germanium-tin alloy (GeSn) are the subject of special care for opto-electronic devices. Unlike pure germanium, unstrained GeSn alloys have a direct inter-band energy transition from a concentration of around 6 %, providing an optical gain necessary to observe the laser effect at low temperatures. The operating temperature of the laser effect is increasing with the tin content. However, alloying tin in germanium faces technological issues in terms of material growth for a concentration higher than 16%. The application of a tensile strain can be an alternative approach to modify the band diagram and amplify the material gain in order to consider applications at room temperature.

In a first chapter, useful quantities and effects of the deformation on the band structure are introduced.

GeSn alloys under bi-axial tensile strain are studied in micro-disk cavities stressed by tensor layer, and then in suspended cross-like membranes using strain management. The strain is estimated by FEM simulation, Raman spectroscopy and photoluminescence. The laser effect is also shown.

In a final chapter, [100] uni-axial tensile strain is presented in micro-bridge structures, demonstrating the laser effect up to 273 K. Thanks to micro-laue diffraction, a tensile strain measurement is also carried out.