



## RAPPORT DE STAGE

(18 avril 2016 - 29 juillet 2016)

*Auteur*

**Aurélien PÉLISSIER**

**M1 PHYTEM**

---

## **Impact des effets piézoélectriques sur les propriétés optiques des nanobeams**

---

**Superviseur : Ian Michael ROUSSEAU**

**Directeurs : Dr. Raphaël BUTTÉ  
Prof. Nicolas GRANDJEAN**

*Laboratoire en Semiconducteurs Avancés pour la Photonique et l'Électronique,*



EPFL, SUISSE

## Abstract

Combination of photonic nanostructures with semiconductor quantum heterostructures has proven successful regarding the achievement of cavity quantum electrodynamics, which may provide a basis for future applications in quantum information processing or schemes for coherent control. To fulfill the conditions for such coupling, a precise tuning of the photonic bandgap and the quantum heterostructure bandgap is needed. We study in this thesis a process allowing the matching of the photonic and the heterostructure confinement mode using the piezoelectric properties of III-nitride semiconductor. We focus on InGaN/GaN quantum wells grown on Si(111) and 1D photonic nanostructure in GaN, which have the advantage of being easily achievable and working at ambient temperature. Raman and photoluminescence measurements and numerical simulation with *COMSOL* are presented; and a confinement mode tuning method by applying an external electric field is proposed.

## Résumé

Le couplage entre les structures nanophotoniques et les hétérostructures quantiques a fait ses preuves en ce qui concerne la réalisation de systèmes électrodynamiques quantiques en cavité, qui apportent de nombreuses opportunités notamment par le contrôle de l'émission spontanée ou le traitement de l'information quantique. La réalisation de tels confinements nécessite un contrôle précis des modes de confinement des cristaux nanophotoniques et des hétérostructures quantiques. Dans ce rapport, nous étudions un procédé qui, en exploitant les propriétés piézo-électriques des nitrures d'éléments III, permet d'ajuster le mode d'un cristal nanophotonique et celle d'une hétérostructure quantique pour qu'elles correspondent. Nous nous intéressons plus particulièrement aux puits quantiques InGaN/GaN épitaxiés sur Si(111) et aux cristaux photoniques 1D à base de GaN, qui ont l'avantage d'être facilement réalisables et de fonctionner à température ambiante. Des simulations numériques sur *COMSOL* ainsi que des mesures par spectroscopie Raman et micro-photoluminescence sont présentées; et une technique d'ajustement des modes de confinement par l'application d'un champ électrique externe est introduite.

## Remerciements

*Je tiens à remercier Nicolas Grandjean et Raphaël Butté pour m'avoir reçu au sein de leur laboratoire pendant ces 15 semaines de stage, et plus particulièrement Ian Rousseau pour son encadrement et son accompagnement dans mes démarches. Il m'a appris à manipuler les concepts et les technologies que j'ai utilisés. Merci enfin à toute l'équipe qui m'a accueillie dans la bonne humeur et dont les membres étaient toujours présents pour m'aider en cas de besoin.*



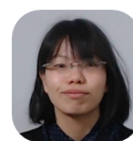
Nicolas Grandjean  
Directeur



Raphael Butté  
Directeur



Ian Rousseau  
Doctorant



Kanako Shojiki  
Collaboratrice

# Sommaire :

<b>I</b>	<b>Base théorique et travaux préliminaires</b>	<b>2</b>
I.1	Propriétés des nitrures d'éléments III et du silicium . . . . .	2
I.1.1	Structures cristallines . . . . .	2
I.1.2	Contraintes et déformations dans un cristal piézoélectrique . . . . .	3
I.1.3	Propriétés optiques . . . . .	8
I.1.4	Composés ternaires $A_xB_{1-x}N$ . . . . .	11
I.2	Confinement photonique . . . . .	12
I.2.1	Propagation des ondes électromagnétiques . . . . .	12
I.2.2	Guides d'onde . . . . .	12
I.2.3	Bande interdite photonique . . . . .	13
I.2.4	Conception et propriétés des nanobeams . . . . .	14
I.3	Techniques de caractérisation . . . . .	18
I.3.1	Micro-photoluminescence . . . . .	18
I.3.2	Spectroscopie micro-Raman . . . . .	19
<b>II</b>	<b>Prédictions et mesures</b>	<b>21</b>
II.1	Contraintes biaxiales et uniaxiales . . . . .	21
II.1.1	Équations . . . . .	21
II.1.2	Courbure et simulation avec COMSOL . . . . .	22
II.1.3	Mesures par spectroscopie Raman . . . . .	23
II.1.4	Conséquences des déformations sur les propriétés optiques du nanobeam . . . . .	25
II.2	Conception d'électrodes . . . . .	26
II.2.1	Création d'un champ selon l'axe $z$ . . . . .	27
II.2.2	Création d'un champ selon l'axe $y$ . . . . .	29
<b>III</b>	<b>Conclusion et Perspectives</b>	<b>30</b>
<b>A</b>	<b>Annexes</b>	<b>31</b>
A.1	Quelques éléments de mécanique des milieux continus . . . . .	31
A.1.1	Notation de Voigt . . . . .	31
A.1.2	Flexion d'une poutre en porte-à-faux . . . . .	32
A.2	Compensation du champ électrique interne d'un puits quantique déformé . . . . .	33
A.3	Potentiels de déformation Raman pour le Si(111) . . . . .	34

## Introduction

C'est grâce au travail novateur d'I.Akasaki, H.Amano et S.Nakamura, qui ont été récompensés par le prix Nobel de physique en 2014, que les semiconducteurs à base de nitrures d'éléments III (N-IIIs) sont actuellement largement utilisés dans les appareils optoélectroniques et électroniques. Ils ont joué un rôle majeur dans le développement des éclairages basés sur les diodes électroluminescentes blanches (DELs) [1] et sont encore aujourd'hui au coeur de la recherche pour leurs nombreuses applications notamment en ce qui concerne les diodes lasers compacts (DLs) [2] et les cavités nanophotoniques. Celles-ci ont montré un confinement de la lumière extrêmement efficace avec un facteur de qualité ( $Q = \frac{\Delta\omega}{\omega}$ ) très haut, et les technologies actuelles permettent d'atteindre des facteurs de qualité expérimentaux allant jusqu'à 9 millions dans des cristaux nanophotoniques en silicium [3].

En exploitant à la fois le confinement des cavités photoniques et le confinement quantique des hétérostructures, il est possible de réaliser un système électrodynamique quantique en cavité, qui a la particularité de changer l'habituelle émission spontanée irréversible en un échange d'énergie réversible entre l'exciton et le photon [4]. Ce couplage cohérent et ajustable fournit une base pour des applications futures comme le traitement de l'information quantique ou les systèmes de contrôle cohérent.

Pour réaliser ce couplage, il faut faire correspondre le mode électronique de l'hétérostructure quantique et le mode de cavité du cristal photonique (PhC). C'est réalisable en ajustant les bons paramètres lors de la fabrication, mais les incertitudes expérimentales induisent des imprécisions sur les modes de cavité. Il faut alors décaler modes de l'hétérostructure ou du cristal photonique après la fabrication pour les faire correspondre, et plusieurs travaux ont déjà été réalisés en ce sens. Par exemple, en utilisant la dépendance thermique de l'indice de réfraction, il est possible de régler la bande interdite photonique comme souhaitée en adaptant la température [5]. Ou encore, on peut utiliser un système de dépôt de couche atomique (ALD), qui permet de régler le PhC avec une précision de 0,1 nm [6]. Cependant, ces procédés sont globaux et ne permettent pas de régler les PhCs individuellement. Il existe également des méthodes locales, comme par exemple par oxydation laser [7], mais les ajustements sur les cristaux photoniques à base de nitrures-III n'ont été que peu étudiés, et mon travail consiste en une méthode d'ajustement locale qui, en se basant sur les propriétés piézoélectriques des N-IIIs, permet de régler chaque PhC distinctement.

Nous présentons dans la section I.1 les aspects généraux des semiconducteurs à base de nitrures d'éléments III, en se concentrant sur les effets piézoélectriques. La section I.2 est dédiée aux cristaux photoniques, plus particulièrement au nanobeam qui est au coeur de notre travail. Puis, après avoir présenté les différentes techniques de caractérisation des N-IIIs dans la section I.3, on effectuera dans le chapitre II les simulations numériques avec *COMSOL* et des mesures Raman pour mettre au point une méthode de réglage du mode de la cavité photonique, notamment avec la conception d'électrodes dans la section II.2.

# I Base théorique et travaux préliminaires

## I.1 Propriétés des nitrures d'éléments III et du silicium

### I.1.1 Structures cristallines

Le silicium cristallise dans la structure cubique diamant, mais les nitrures d'éléments III cristallisent naturellement dans la structure wurtzite [2H] (Fig.1), qui est formée de deux structures hexagonales interpénétrées. L'une est formée par les atomes d'azote (N) et l'autre par les éléments métalliques (Ga, Al ou In). La structure est caractérisée par les paramètres de maille  $a$  et  $c$  et elle satisfait idéalement les relations  $\frac{c}{a} = \sqrt{8/3} = 1,633$  et  $u = 3/8 = 0,375$ ,  $u$  étant le paramètre de déplacement interne.

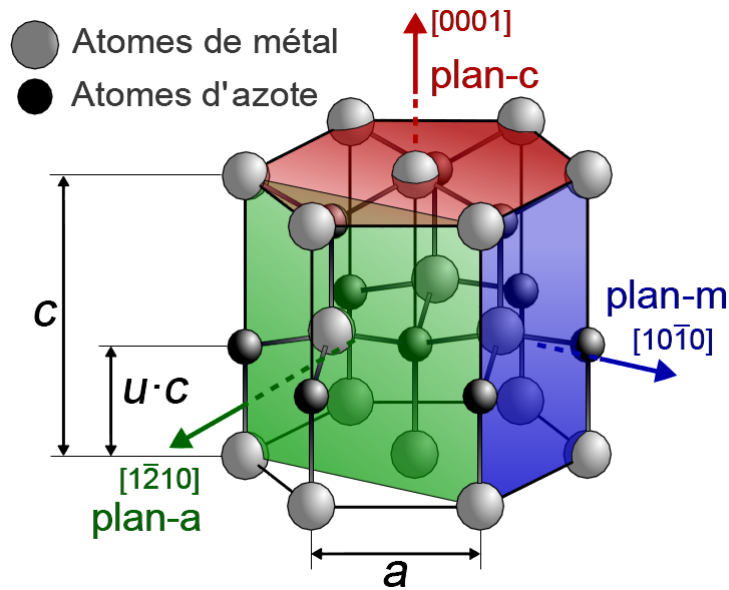


Figure 1: Schéma de la structure wurtzite [8].

Les paramètres de maille des principaux composés wurtzite binaires, ainsi que celui du silicium, sont résumés dans la Table ci-dessous :

	Cristal			
	2H-GaN	2H-AlN	2H-InN	Silicium
$a$ [Å]	3,189	3,112	3,545	5,430
$c$ [Å]	5,185	4,982	5,693	
$u$	0,376	0,380	0,377	

Table 1: Paramètres de maille  $a$ ,  $c$  et déplacement interne  $u$  des nitrures d'éléments III [9] et du silicium [10] à 300 K.

### I.1.2 Contraintes et déformations dans un cristal piézoélectrique

Considérons un cristal soumis à des contraintes externes  $\underline{\sigma}$  et placé dans un champ de déplacement électrique  $\vec{D}$ . On note  $\underline{\epsilon}$  le tenseur des déformations et  $\vec{E}$  le champ électrique interne. Les composantes  $\sigma_{ij}$  du tenseur des contraintes et  $D_i$  du champ de déplacement électrique s'écrivent :

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ijkl} \times \epsilon_{kl} - \sum_k e_{kij} \times E_k \quad \text{où} \quad i, j, k, l = x, y, z \quad (1)$$

$$D_i = P_i^{spont} + \sum_{k,l} e_{ikl} \times \epsilon_{kl} + \sum_k \epsilon_{ik} \times E_k \quad \text{où} \quad i, k, l = x, y, z \quad (2)$$

Le premier terme de l'expression (1) peut être identifié à la loi de Hooke généralisée issue de la théorie élastique, où  $C_{ijkl}$  est le tenseur de rigidité du matériau. Le second terme résulte de l'effet piézoélectrique inverse.

Les premier et second termes de l'équation (2) correspondent respectivement à la polarisation spontanée  $\vec{P}_{sp}$  et piézoélectrique  $\vec{P}_{pz}$  du cristal, où  $e_{ikl}$  est le tenseur piézoélectrique du cristal. Enfin, le troisième terme de la relation (2) représente la polarisation résultante du champ électrique interne, où  $\epsilon_{ik}$  est le tenseur de permittivité du cristal.

#### Les nitrures d'élément III

Les N-IIIs sont des cristaux pyroélectrique car ils sont non centrosymétriques. En prenant en compte la symétrie hexagonale  $C_{6v}$  des nitrures-III, il est possible de simplifier ces deux relations [11] qui deviennent, en utilisant la notation de Voigt (voir Annexe A.1.1) :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{C_{11}-C_{12}}{2} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{xz} \\ 2\epsilon_{xy} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & e_{31} \\ 0 & 0 & e_{13} \\ 0 & 0 & e_{33} \\ 0 & e_{15} & 0 \\ e_{15} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$\begin{pmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P_z^{spont} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{xz} \\ 2\epsilon_{xy} \end{pmatrix} + \epsilon_0 \begin{pmatrix} \epsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{33} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (4)$$

Les relations (3) et (4) sont à la base de notre étude, car elles sont indispensables à une description correcte des phénomènes piézoélectriques dans les nitrures d'éléments III.

### Le silicium

Contrairement aux nitrures III, le silicium possède une symétrie cubique qui est centrosymétriques et n'est donc pas un cristal piézoélectrique. Ainsi la relation (1) est restreinte à la loi de Hooke et la relation (2) ne contient plus que le troisième terme. Les tenseurs  $C_{ij}$  et  $\varepsilon_{ij}$  du silicium peuvent s'écrire, en utilisant la notation de Voigt [11] :

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \varepsilon_{ij} = \varepsilon_0 \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{11} \end{pmatrix} \quad (5)$$

Les composantes des tenseurs de rigidité, piézoélectriques et diélectriques, ainsi que les polarisations spontanées du silicium, GaN, AlN et InN, sont données dans la Table ci-dessous.

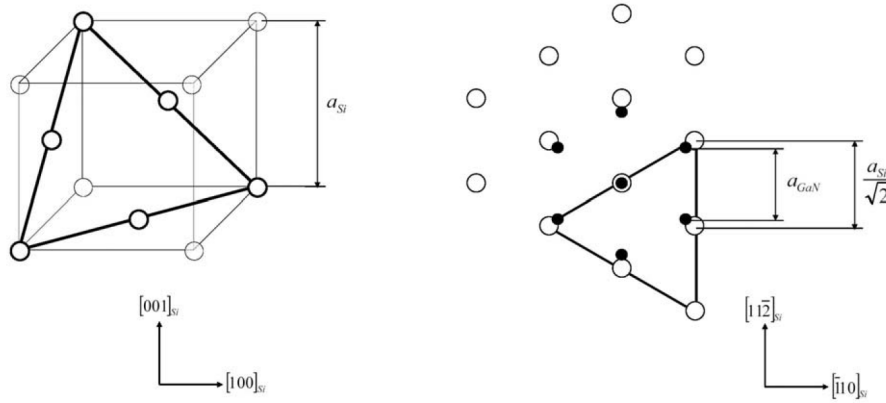
	Cristal			
	2H-GaN	2H-AlN	2H-InN	Silicium
$C_{11}$ [GPa]	390	396	223	166
$C_{12}$ [GPa]	145	137	115	64
$C_{13}$ [GPa]	106	108	92	
$C_{33}$ [GPa]	398	373	224	
$C_{44}$ [GPa]	105	116	48	80
$e_{31}$ [C m <sup>-2</sup> ]	-0,34	-0,53	-0,41	
$e_{33}$ [C m <sup>-2</sup> ]	0,67	1,5	0,69	
$e_{15}$ [C m <sup>-2</sup> ]	-0,30	-0,48	-0,32	
$\varepsilon_{11}$	9,5	9,0	15,3	11,7
$\varepsilon_{33}$	10,28	10,31	14,61	
$P_{spont}$ [C m <sup>-2</sup> ]	-0,034	0,090	-0,042	

**Table 2:** Composantes des tenseurs de rigidité, piézoélectriques et diélectriques, ainsi que les polarisations spontanées des nitrures-III [12] et du silicium [13].

Les constantes  $e_{15}$  sont très difficiles à mesurer et la littérature est contradictoire sur le signe [14], cependant, le signe n'est pas très important pour notre étude, car c'est seulement l'amplitude des déformations qui va nous intéresser dans ce travail.

### Épitaxie des nitrures d'élément III

La croissance des nitrures d'éléments III sur silicium présente un attrait important pour son coût avantageux et les possibilités qu'il apporte en gravure. La Figure 2 donne la relation d'épitaxie attendue entre un cristal sous forme wurtzite et le silicium (111).



**Figure 2:** Alignement de la maille de la structure wurtzite par rapport à la maille du substrat de silicium [15].

On peut ainsi définir un paramètre de maille à 300 K pour le silicium (111) :

$$a_{Si(111)} = \frac{a_{Si}}{\sqrt{2}} = 3,834 \text{ \AA}$$

Dans le cas de l'hétéro-épitaxie sur un substrat suivant la direction  $z = [0001]$  d'un cristal à symétrie hexagonale, la déformation subie par la couche déposée, isotrope dans le plan perpendiculaire à la direction de croissance, a pour valeur :

$$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \frac{a_s - a_c}{a_c}$$

$a_s$  et  $a_c$  sont respectivement le paramètre de maille du substrat et de la couche déposée à l'état relaxé. Lors de l'épitaxie des N-IIIs sur le Si(111), les contraintes très importantes dans la couche déposée, typiquement de l'ordre de 10 GPa, mènent à la formation de dislocations et d'îlots très désorientés, et une couche de GaN directement déposée sur du silicium est d'une pauvre qualité. Pour contourner ce problème, on dépose une couche d'AlN intermédiaire de 50 nm entre le Si(111) et le GaN, qui a la particularité d'absorber les contraintes et de considérablement améliorer la qualité du GaN [15]. On supposera donc dans la suite de notre étude que les contraintes dans le GaN causées par la croissance sont négligeables, les contraintes due à l'épitaxie ayant été absorbées par la couche d'AlN.



### Expansion thermique

La dilatation thermique est d'une grande importance dans l'étude des contraintes dans les nitrures d'éléments III. En effet, l'hétéro-épitaxie des nitrures est effectuée à des températures aux alentours de  $T_c = 1000^\circ\text{C}$ , et le refroidissement à température ambiante engendre des contraintes dans le matériau causées par la différence de coefficient d'expansion thermique entre le substrat et la couche déposée. Le coefficient d'expansion thermique est défini par la formule,  $a$  étant le paramètre de maille du cristal :

$$\alpha(T) = \frac{1}{a} \frac{\partial a}{\partial T} \quad (6)$$

La déformation subie par la couche après un changement de température est définie à partir des coefficients de dilatations thermiques du substrat  $\alpha_s$  et de la couche déposée  $\alpha_c$  par la relation :

$$\epsilon_{th}(T_f) = \int_{T_c}^{T_f} (\alpha_c(T) - \alpha_s(T)) dT \quad (7)$$

Pour de petites déformations,  $\epsilon_{th}$  peut également s'écrire :

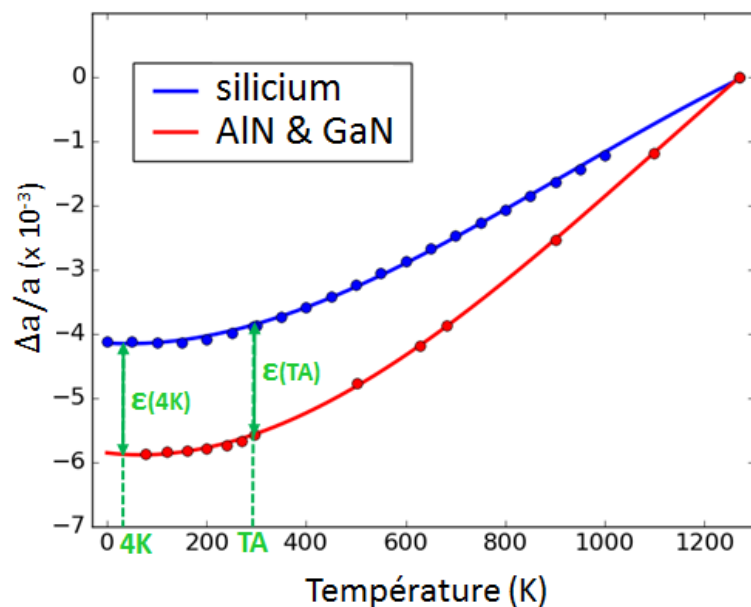
$$\epsilon_{th}(T_f) = \frac{\Delta a_c(T_c \rightarrow T_f)}{a_c(T_c)} - \frac{\Delta a_s(T_c \rightarrow T_f)}{a_s(T_c)} \quad (8)$$

Les valeurs d' $\alpha$  et de  $\frac{\Delta a}{a}$  du silicium et des N-IIIs peuvent être trouvées dans la littérature. On trouvera des mesures pour le silicium entre 4 K et 1000 K dans les références [16, 17], et celles de l'AlN dans [18]. Les propriétés thermiques du GaN étant très voisines de celles de l'AlN [15], on considèrera qu'ils se comportent de la même manière face à un changement de température.

Après un ajustement polynomial des données prises dans la littérature (Fig.3), on peut prévoir, avec une température de croissance de  $1000^\circ\text{C}$ , les déformations subies par la couche à 4 K et à température ambiante (TA).

$$\epsilon_{th}(\text{TA}) = \epsilon_{th}(4\text{ K}) = 0,17\% \quad (9)$$

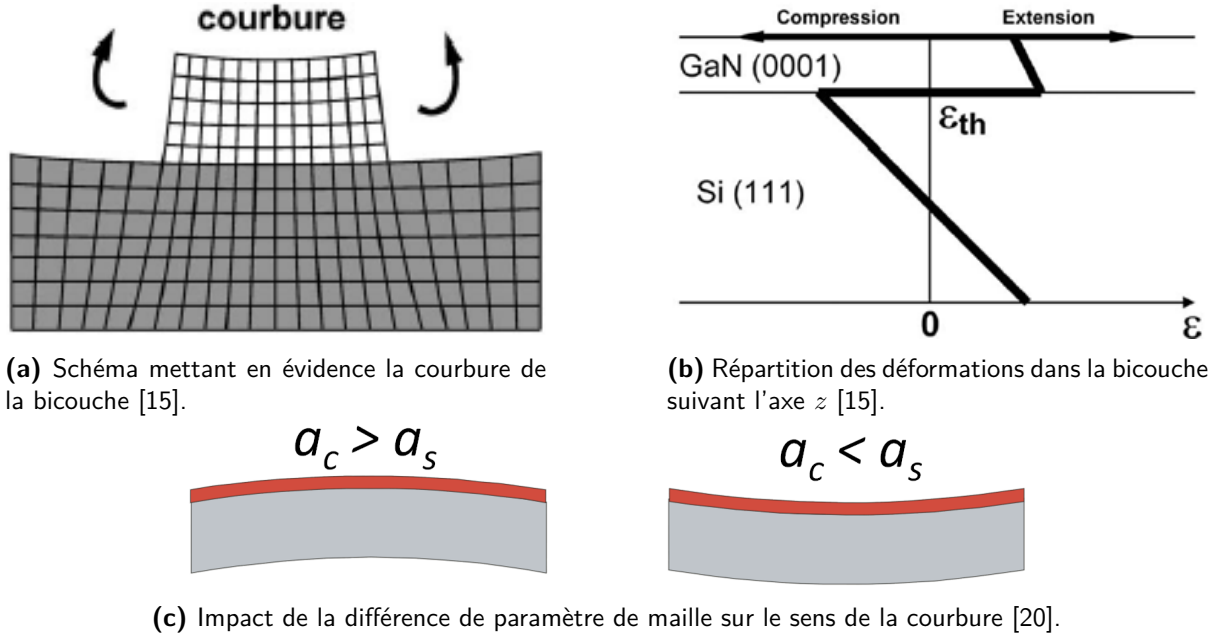
À cause de la diminution du coefficient de dilatation thermique avec la température, la différence de déformation entre 4 K et TA est négligeable. On travaillera donc par la suite à température ambiante, aucun changement notable n'ayant été prédit à 4 K.



**Figure 3:** Déformations dues à l'expansion thermique. Les points sont les valeurs prises dans la littérature, et les lignes sont le résultat des ajustements. Les doubles flèches vertes mettent en avant les déformations causées par le refroidissement.

### Courbure

Les formules précédentes ne donnent pas la distribution des contraintes dans le système couche/substrat et ne sont valables que si l'on considère que toute la contrainte est encaissée par la couche. Cependant, si on prend en compte l'équilibre des forces de tension et de compression présentes dans chaque matériau, on obtient une meilleure valeur de la contrainte encaissée par chaque couche [19]. En effet, de manière à diminuer la déformation dans les deux matériaux, la bicouche va se courber comme sur la figure 4a, et les déformations vont se répartir entre la couche et le substrat (fig.4b).



**Figure 4:** Déformations des mailles dans une bicouche substrat/couche déposée.

On trouve dans la littérature une relation liant la courbure  $\kappa$  et la déformation  $\epsilon_{xx}$  [20]. Pour une couche soumise à une contrainte biaxiale  $\sigma$ , d'épaisseur  $h_c$ , et épitaxiée sur un substrat d'épaisseur  $h_s$ , la courbure est donnée par :

$$\text{en notant } \sigma = M\epsilon_{xx}, \quad R_m = \frac{M_c}{M_s} \quad \text{et} \quad R_h = \frac{h_c}{h_s},$$

$$\kappa = 6R_m\epsilon_{xx} \left( \frac{R_h}{h_s} \right) \left( \frac{1 + R_h}{1 + R_m R_h (4 + 6R_h + 4R_h^2) + R_m^2 R_h^4} \right) \quad (10)$$

$$\text{et pour } h_c \ll h_s, \quad \text{on obtient} \quad \boxed{\kappa = 6R_m\epsilon_{xx} \frac{R_h}{h_s}}$$

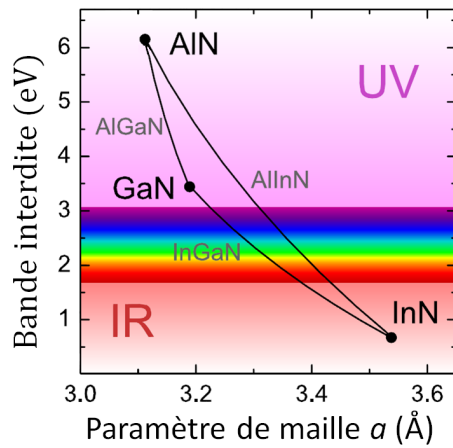
Comme la fig.4c le met en évidence, le sens de la courbure va dépendre du signe de la déformation. En utilisant la relation 10 et les résultats de l'expansion thermique 9, on peut estimer la courbure de l'échantillon GaN/Si à  $\kappa = 0,025 \text{ m}^{-1}$ , correspondant à un rayon de courbure convexe de l'ordre de  $R = \frac{1}{\kappa} = 40 \text{ m}$ .

### I.1.3 Propriétés optiques

#### Bande interdite

Les nitrures à base d'éléments III sont des semi-conducteurs à gap direct et leur énergie de bande interdite se situe dans un domaine spectral allant de l'infrarouge (IR) pour InN à l'ultraviolet (UV) pour AlN. L'intérêt des ces matériaux réside donc dans le fait qu'ils permettent de couvrir un très large domaine d'émission spectrale par la constitution d'alliages tertiaires  $A_xB_{1-x}N$ . L'énergie de bande interdite  $E_g$  de ces alliages peut être estimée par la loi de Vegard généralisée, où les non-linéarités sont prises en compte par l'introduction du facteur d'ajustement  $b_{AB}$ , donné Table 4, et illustrés par la figure 5 :

$$E_g(A_xB_{1-x}N) = x.E_g(AN) + (1-x).E_g(BN) - b_{AB}.x(1-x) \quad (11)$$



**Figure 5:** Énergie de bande interdite à 300 K des composés tertiaires N-III en phase wurtzite en fonction du paramètre de maille. Les lignes mettent en évidence la possibilité d'un réglage continu de la bande interdite allant de l'infrarouge (IR) à l'ultraviolet (UV), couvrant également le spectre visible [8].

La dépendance de la bande interdite avec la température est généralement décrite par la loi de Varshni [21] :

$$E_g(T) = E_g(0\text{ K}) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (12)$$

$\alpha$  et  $\beta$  étant les coefficients thermiques de Varshni du matériau, donnés dans la Table 3. La valeur de  $\beta$  est généralement proche de la température de Debye  $T_D$  du matériau, qu'on peut trouver dans [22].

Cristal	2H-GaN	2H-AlN	2H-InN
$E_g(300\text{ K})$ [eV]	3,42	6,14	0,64
$\alpha$ [meV/K]	0,909	1,799	0.414
$\beta$ [K]	830	1462	454

**Table 3:** Énergie de bande interdite  $E_g$ , paramètres de Varshni  $\alpha$  et  $\beta$  des nitrures d'éléments III [22].

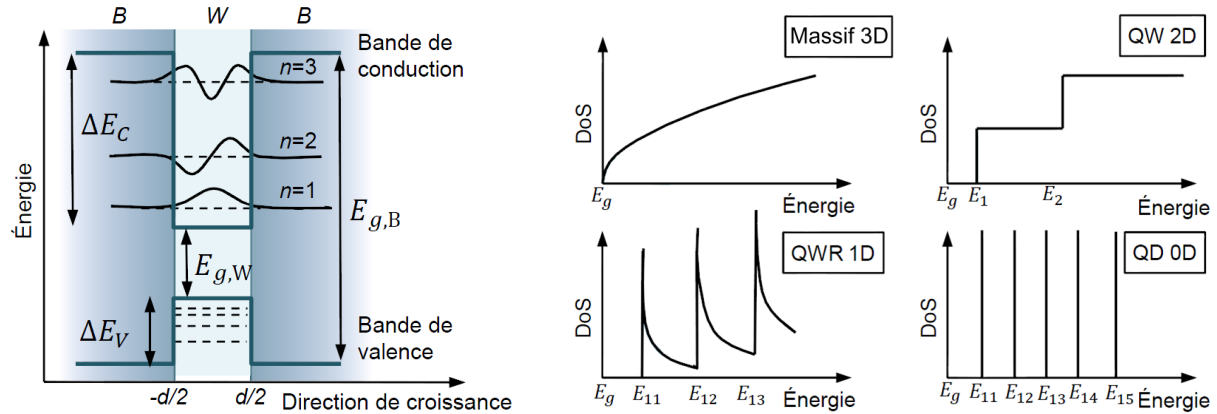
AB	$b_{AB}$ [eV]
InGaIn	1,4
AlGaIn	0,7
AlInN	2,5

**Table 4:** Facteurs d'ajustement non linéaires des composés tertiaires à base de N-III relaxés [23].

### Confinement quantique

Un puits de potentiel, comme illustré sur la figure 6a, est créé lorsqu'une couche de semiconducteur (W) avec une bande interdite  $E_{g,W}$  est intégrée dans une couche (B) avec une bande interdite plus grande  $E_{g,B} > E_{g,W}$ . Si l'épaisseur du puits approche la longueur d'onde de De Broglie de l'électron (typiquement une dizaine de nanomètres), le mouvement des électrons et des trous est alors quantifié et les niveaux d'énergie permis deviennent discrets, menant au confinement quantique, comme l'illustre la figure 6b.

On peut, en se basant sur ce concept, distinguer les puits quantiques (QWs), les fils quantiques (QWRs) et les boîtes quantiques (QDs) selon si le confinement est respectivement à une, deux, ou trois dimensions(s).



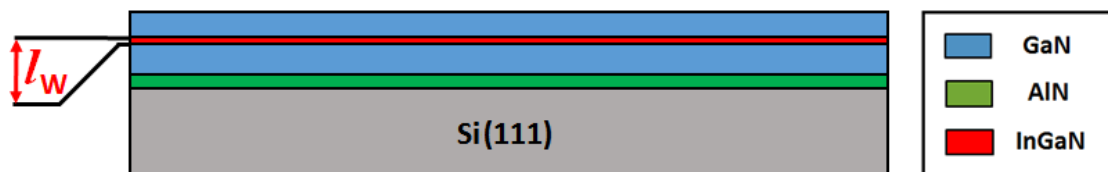
(a) Diagramme schématique d'un puits quantique rectangulaire

(b) Densité d'états (DoS) pour une couche épaisse et pour les confinements à une, deux, et trois dimension(s)

**Figure 6:** Caractéristiques des hétérostructures quantiques QW, QWR et QD [24].

### Puits quantique InGaN/GaN

On utilise dans ce travail un puits quantique d' $\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$  d'épaisseur  $l_W = 2,5$  nm, intégré dans une couche de GaN d'épaisseur 250 nm et fabriqué comme sur la figure 7. La couche d'AlN (50 nm) permet d'absorber les contraintes dues à l'épitaxie sur le silicium et ainsi d'améliorer la qualité du GaN (cf partie I.1.2).



**Figure 7:** Puits quantique InGaN/GaN.

En appliquant la loi de Vegard (Eq.17) aux paramètres de maille, on peut estimer les contraintes subies par la couche d'InGaN :

$$\epsilon_{QW} = \frac{a_{\text{GaN}} - a_{\text{InGaN}}}{a_{\text{InGaN}}} = -1,65\% \quad \text{soit} \quad \sigma \approx 8 \text{ GPa} \quad (13)$$

Ces contraintes très élevées forment des dislocations dans l'InGaN, qui sont susceptibles de fortement altérer la qualité du puits quantique.

### Champ électrique interne

D'après l'équation (4), le champ électrique  $\vec{E}_{QH}$  dans une hétérostructure quantique s'écrit :

$$\vec{E}_{QH} = \frac{\vec{P}_{sp}^W - \vec{P}_{sp}^B}{\epsilon_r^W \epsilon_0} + \frac{\vec{P}_{pz}^W - \vec{P}_{pz}^B}{\epsilon_r^W \epsilon_0} + \vec{E}_{ext} \quad \text{où} \quad \vec{P}_{sp} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P_{sp} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \vec{P}_{pz} = \begin{pmatrix} P_{pz}^x \\ P_{pz}^y \\ P_{pz}^z \end{pmatrix} \quad (14)$$

$\vec{P}_{sp}$  et  $\vec{P}_{pz}$  sont respectivement les polarisations spontanée et piézoélectrique du matériau et  $\vec{E}_{ext}$  le champ électrique externe appliqué dans l'hétérostructure. On trouve dans la littérature des relations permettant de calculer les polarisations spontanées et piézoélectriques de l' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  [25] :

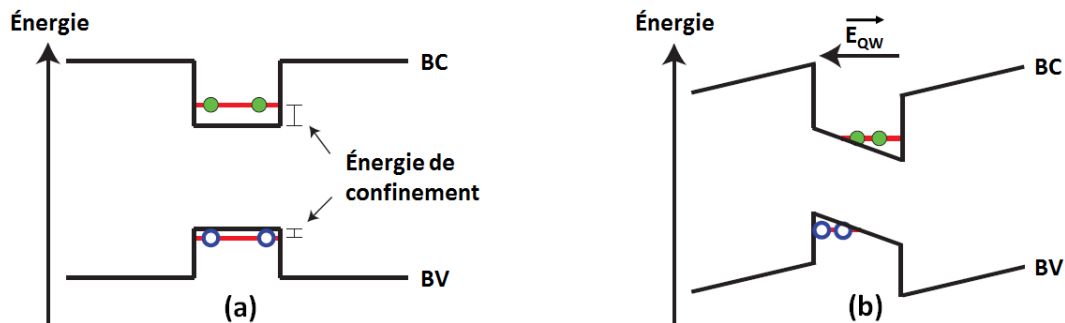
$$\begin{aligned} P_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}^{sp} &= -0,042x - 0,034(1-x) + 0,038x(1-x) \\ \vec{P}_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}}^{pz} &= x \vec{P}_{\text{InN}}^{pz}(\epsilon_{QH}) + (1-x) \vec{P}_{\text{GaN}}^{pz}(\epsilon_{QH}) \end{aligned} \quad (15)$$

On peut calculer  $\vec{P}_{\text{InN}}^{pz}(\epsilon)$  et  $\vec{P}_{\text{GaN}}^{pz}(\epsilon)$  avec les relations piézoélectriques données dans la partie I.1.2, et si on considère qu'il n'y a pas de contraintes de cisaillement, on a  $P_{pz}^x = P_{pz}^y = 0$ .

### Effet Stark

La présence d'un champ électrique dans une hétérostructure quantique a pour conséquence de décaler l'énergie de transition de celle-ci, ce phénomène est connu sous le nom d'effet Stark confiné quantique (QCSE) [25].

Pour un puits quantique, le champs électrique interne  $E_{QW}$  va provoquer une déformation des bandes de conduction (BC) et de valence (BV), comme schématisée sur la figure 8. Cette déformation va provoquer un décalage de l'énergie de transition  $\Delta E = -eE_{QW}l_W$ , où  $E_{QW}$  est le champ électrique interne selon  $z$ ,  $l_W$  la longueur de confinement selon  $z$ , et  $e$  la charge élémentaire.

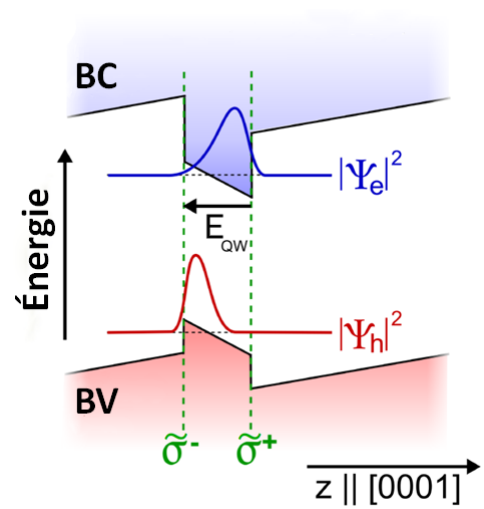


**Figure 8:** Structure de bande d'un puits quantique sans (a) et avec (b) la présence d'un champ électrique interne [26].

De plus, les fonction d'états des porteurs de charge ( $h^+$  et  $e^-$ ) vont se décaler comme sur la figure 9 et le recouvrement de leur enveloppe va diminuer, induisant une augmentation du temps de vie radiatif  $\tau_{rad}$  (règle d'or de Fermi), qui est relié au rendement quantique interne de l'émission lumineuse ( $IQE$ ) du puits quantique par la relation, avec  $\tau_{n.rad}$  le temps de vie non radiatif [27] :

$$IQE = \frac{\tau_{rad}^{-1}}{\tau_{tot}^{-1}} \quad \text{où} \quad \tau_{tot}^{-1} = \tau_{rad}^{-1} + \tau_{n.rad}^{-1} \quad (16)$$

Il faut remarquer que les propriétés optiques d'un puits quantique ne sont pas affectées par des champ électriques latéraux.



**Figure 9:** Déformations des fonctions d'onde  $\Psi_e$  d'un électron et  $\Psi_h$  d'un trou. [8]

#### I.1.4 Composés tertiaires $A_xB_{1-x}N$

Pour calculer un paramètre  $Y$  d'un composé binaire  $A_xB_{1-x}N$ , on peut l'approcher par la loi de Vegard, qui énonce qu'il existe une relation linéaire entre le paramètre de la structure binaire et les concentrations de ses éléments constitutifs :

$$Y_{A_xB_{1-x}N} = x.Y_{AN} + (1-x).Y_{BN} \quad (17)$$

Cette loi est vérifiée expérimentalement et est une bonne approximation pour la plupart des constantes énoncées plus haut. Cependant, certaines comme la polarisation spontanée  $P_{spont}$  ou l'énergie de bande interdite  $E_g$  nécessitent l'introduction d'un facteur non linéaire pour une estimation correcte.

## I.2 Confinement photonique

### I.2.1 Propagation des ondes électromagnétiques

#### Equations de Maxwell

La propagation des ondes électromagnétiques ( $\vec{E}$ ,  $\vec{B}$ ) dans un milieu diélectrique est gouvernée par les quatre équations de Maxwell :

$$\begin{aligned} \overrightarrow{\text{rot}} \vec{E} &= -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} & \text{div} \vec{E} &= \frac{\rho}{\epsilon} \\ \overrightarrow{\text{rot}} \vec{B} &= \mu \left( \vec{j} + \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) & \text{div} \vec{B} &= 0 \end{aligned} \quad (18)$$

où  $\rho$  et  $\vec{j}$  sont respectivement la densité volumique de charge et de courant,  $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$  et  $\mu = \mu_0 \mu_r$  respectivement la permittivité et la perméabilité du matériau. La vitesse de propagation de l'onde est  $v = \frac{1}{\sqrt{\epsilon \mu}}$ .

Dans le cas unidimensionnel, les solutions des équations de Maxwell peuvent s'écrire sous la forme :

$$E(x, t) = E(x) e^{ik_x x - \omega t} \quad (19)$$

où  $\omega$  est la pulsation et  $k_x$  le vecteur d'onde suivant x.

#### Indice de réfraction

L'indice de réfraction optique est défini par la relation :

$$n_{op} = \frac{c}{v} = \sqrt{\mu_r \epsilon_r} \quad (20)$$

Dans un milieu diélectrique non magnétique,  $\mu_r = 1$  donc  $n_{op} = \sqrt{\epsilon_r}$ , L'indice de réfraction est donc directement relié à la permittivité relative  $\epsilon_r$ . Cette relation implique que si deux matériaux ont une constante diélectrique différente, alors leur indice de réfraction l'est aussi.

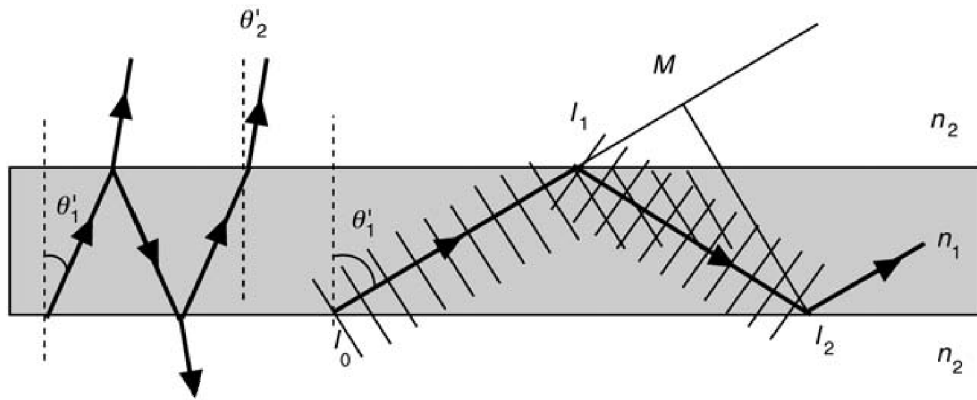
### I.2.2 Guides d'onde

Le principe du guide d'onde repose sur la loi de Snell-Descartes :

$$n_1 \sin(\theta_1) = n_2 \sin(\theta_2) \quad (21)$$

Si  $n_2 < n_1$ , on a l'existence d'un angle critique  $\theta_c = \arcsin(\frac{n_2}{n_1})$  où la lumière est totalement réfléchi à l'intérieur du guide d'onde pour un angle d'incidence supérieur ( $\theta_1 > \theta_c$ ), on parle alors de réflexion totale interne (TIR).

Toutes les ondes électromagnétiques vérifiant  $\theta_1 > \theta_c$  vont donc être confinées dans le matériau d'indice  $n_1$ . On peut donc, grâce à ce mécanisme, confiner la lumière dans les directions souhaitées en adaptant correctement la forme du matériau.



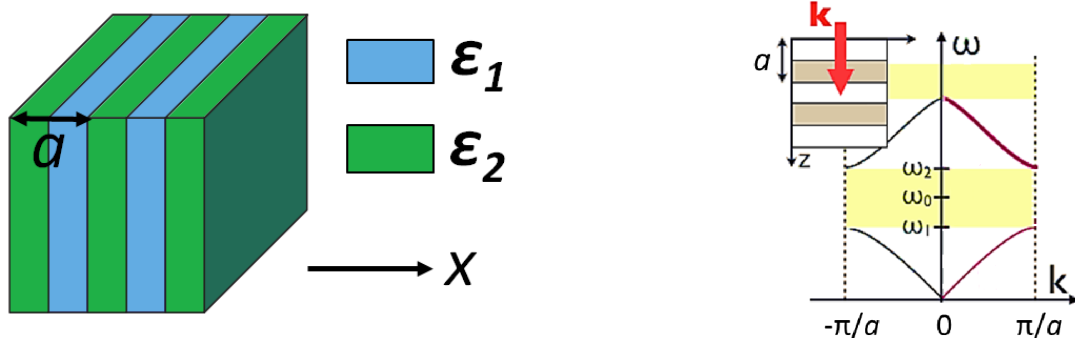
**Figure 10:** Schéma des faisceaux optiques dans le guide d'onde avec  $n_1 < n_2$  [28]. À gauche, pour  $\theta_1 < \theta_c$ , le faisceau est transmis à l'extérieur; tandis que à droite, pour  $\theta_1 > \theta_c$ , le faisceau est confiné dans le guide.

### I.2.3 Bande interdite photonique

#### Cristaux photoniques

Les cristaux photoniques sont des structures périodiques de matériaux diélectriques qui modifient la propagation des ondes électromagnétiques en créant des groupes de modes autorisés et interdits. L'absence de modes propagatifs des ondes électromagnétiques dans une plage de longueur d'onde est alors qualifiée de bande interdite photonique. Lorsque la périodicité est dans une direction unique, on parle de cristal photonique 1D, ou de miroir de Bragg.

Dans un cristal photonique formé par des cellules de longueur  $a$  répétées selon l'axe  $x$  comme sur la fig.11a, la constante diélectrique est reproduite périodiquement  $\varepsilon(x) = \varepsilon(z + ma)$ ,  $m \in \mathbb{Z}$  et on peut, grâce au théorème de Bloch, montrer que la symétrie en translation dans le cristal permet de restreindre l'étude du diagramme de dispersion à la première zone de Brillouin (PZB), qui est  $k \in (-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ [29].



**(a)** Illustration d'un cristal photonique 1D, deux matériaux de constantes diélectriques  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  sont alternés périodiquement dans le cristal.

**(b)** Diagramme de dispersion, un contraste diélectrique adapté produit une bande interdite [30].

**Figure 11:** Cristaux photoniques 1D.

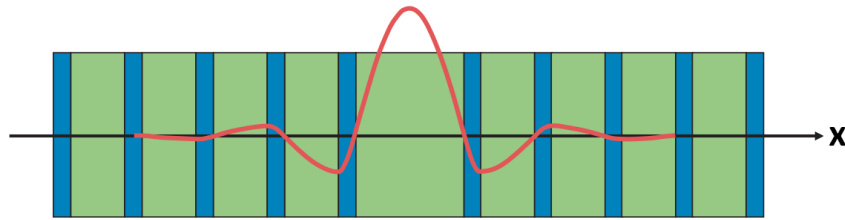
Lorsque le milieu de propagation est formé de couches successives ayant des constantes diélectriques différentes, l'onde électromagnétique est diffractée par le paramètre périodique. À un certain point, par exemple au centre de la zone de Brillouin, les ondes allant vers l'avant



et vers l'arrière se couplent à travers les réflexions qui s'effectuent aux interfaces, donnant lieu à un anticroisement des ondes sur les côtés de la zone de Brillouin ( $k = \pm \frac{\pi}{a}$ ), ce qui forme la bande interdite dite photonique (cf Fig.11b). La longueur d'onde interdite  $\lambda_0$  est reliée au paramètre périodique  $a$  par la relation  $\lambda_0 = 2a.n_{op}$ , où  $n_{op}$  est l'indice de réfraction effectif du cristal photonique.

### Cavités

Les cavités dans les cristaux photoniques sont des défauts volontairement insérés dans la structure qui forment de nouveaux états localisés dans le cristal photonique, c'est donc l'interruption de la périodicité du cristal photonique, illustrée sur la figure 12, qui permet le confinement de la lumière dans la cavité.



**Figure 12:** Défaut dans un cristal multicouche, formé en doublant l'épaisseur qui sépare normalement les différentes couches. La courbe rouge est le champ électrique confiné dans la cavité (pour une propagation selon  $x$ ), [29].

La durée de vie des photons dans la cavité  $\tau$  est directement reliée au facteur de qualité  $Q$  par la relation  $Q = \omega\tau$ ; un facteur de qualité élevé est donc synonyme de confinement efficace. Le facteur de qualité est sans dimension et peut être estimé avec le spectre de la cavité en divisant la pulsation de résonance par la largeur à mi-hauteur :  $Q = \frac{\omega_0}{\Delta\omega}$ .

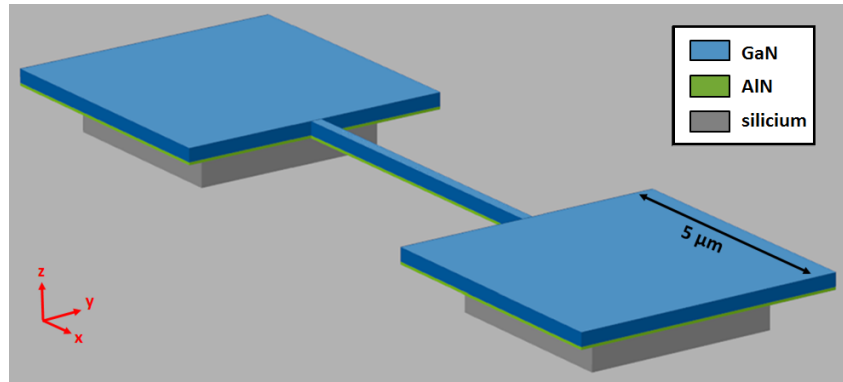
### I.2.4 Conception et propriétés des nanobeams

On travaille avec un puits quantique InGaN/GaN déjà étudié précédemment dans la partie I.1.3 pour sa photoluminescence dans le bleu, et on choisit de travailler avec un cristal photonique 1D (nanobeam) car c'est une structure simple et qui peut être fabriquée avec des matériaux ayant un faible contraste diélectrique. C'est le système nanobeam/puits quantique qui va nous permettre d'obtenir un système quantique électrodynamique en cavité.

#### Design du cristal photonique

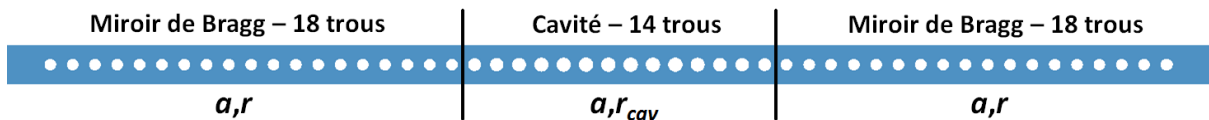
Pour assurer le confinement optique dans les trois dimensions, on utilise les deux mécanismes étudiés précédemment :

- Par réflexion totale interne dans la direction  $y$  et  $z$ . On utilisera une poutre de GaN suspendue dans l'air ( $\varepsilon_{GaN} > \varepsilon_{air}$ ) et encastrée aux deux extrémités par deux PADs, comme sur la figure 13. Les dimensions  $x \times y \times z$  de la poutre utilisées pour ce travail sont  $6 \mu\text{m} \times 200 \text{ nm} \times 250 \text{ nm}$ , une couche d'AlN d'épaisseur 50 nm est ajoutée à la fabrication pour améliorer la qualité du GaN. Ces dimensions sont le résultat d'un compromis entre les stabilités mécaniques et les limitations de la croissance.



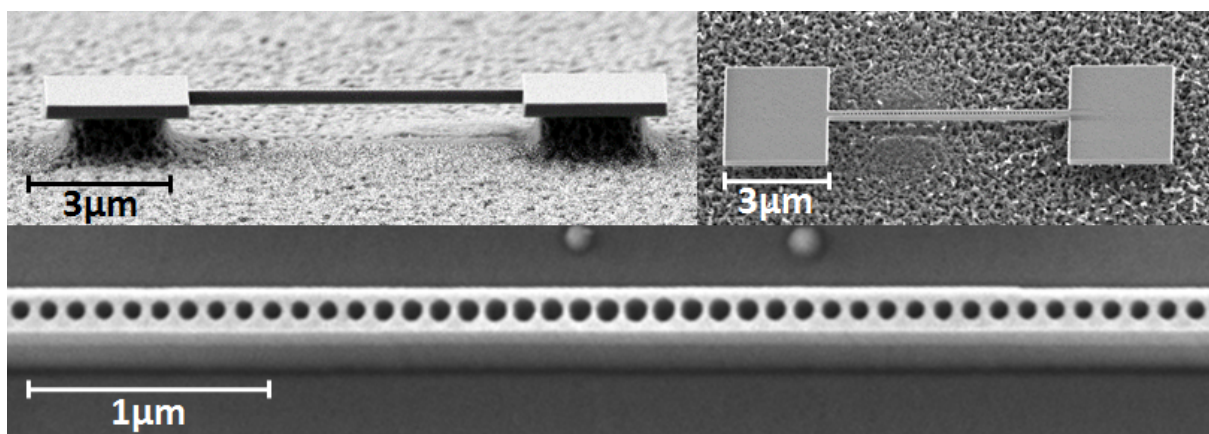
**Figure 13:** système nanobeam/PAD

- Par l'effet de la bande interdite photonique dans la direction  $x$ . L'une des solutions qui confine la lumière le plus efficacement est une succession de trous avec une augmentation localisée de leur taille pour créer la cavité, comme la figure 14 le met en évidence. La longueur d'onde de confinement souhaitée est aux alentours de  $\lambda_0 = 445$  nm (émission du puits quantique d'InGaN dans le bleu), et on peut estimer  $a = \frac{\lambda_0}{2n_{eff}}$ , où  $n_{eff}$  est l'indice de réfraction effectif du cristal photonique.



**Figure 14:** Design du nanobeam, avec les miroirs de Bragg formés par 18 trous de rayon  $r$  entourant la cavité formée par 14 trous de rayon  $r_{cav} > r$  avec une augmentation quadratique du rayon des trous, la distance  $a$  qui sépare le centre des trous est gardé constante.

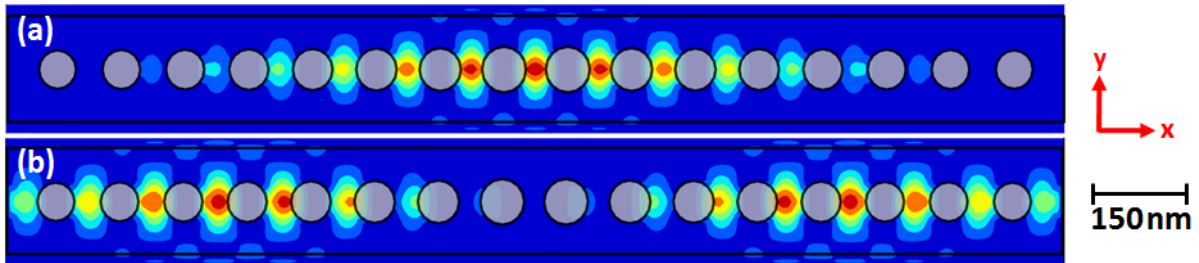
On utilisera dans notre étude les paramètres  $a = 119$  nm,  $r = 35$  nm et  $r_{cav} = 42$  nm. Ces paramètres sont le résultat de l'étude [27] dont le but était de déterminer les paramètres de cavité optimaux d'un cristal photonique 1D à spectre bleu. Des photos obtenues par microscope électronique à balayage (MEB) des nanobeams fabriqués sont présentés figure 15



**Figure 15:** photos obtenues par microscope électronique à balayage (MEB) d'un nanobeam, on peut bien distinguer les PADs, le cristal photonique, et l'augmentation de la taille des trous de la cavité.

### Modes de la cavité

Si la différence de rayons des trous de la cavité et du miroir de Bragg est suffisante (On parle de profondeur de la cavité photonique), le champ électrique se propageant selon  $x$  dans le nanobeam va être confiné selon plusieurs modes, comme le montre la Fig.16. Les spectres de ces modes sont étudiés dans la partie I.3.1.



**Figure 16:** Profil du champ  $|E_y|$  du mode fondamental (a) et du mode au second ordre (b) de la cavité obtenu par simulation 3D FDTD [27].

En ajustant la profondeur de la cavité, il est possible d'augmenter ou de diminuer l'importance des modes supérieurs. Pour obtenir un facteur de qualité du mode fondamental optimal, on règle la profondeur de la cavité de façon à ce que les deux premiers modes soient bien présent, car cela garanti que la luminosité du mode fondamental est à son maximum. La présence des modes d'ordres supérieur n'a pas de conséquences sur la cavité quantique électrodynamique tant que le recouvrement entre l'émission du puits quantique et celle des ordres supérieurs est nul, ce qui est le cas dans la plupart des cas.

### Facteur de qualité

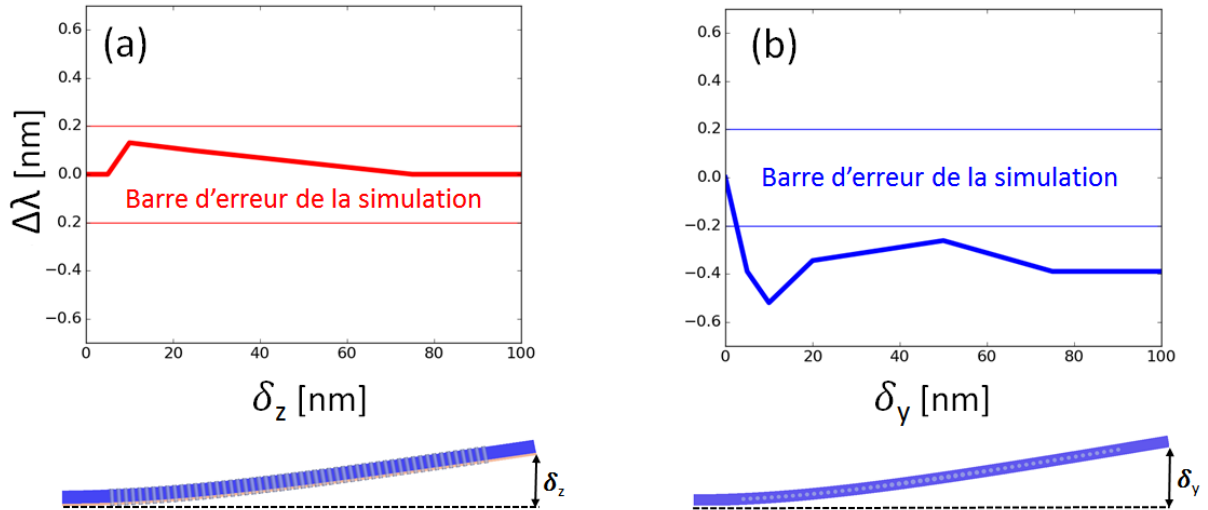
Avec les paramètres donnés précédemment, les simulations prédisent des facteurs de qualité du mode fondamental relativement élevés, pouvant atteindre les  $Q_{th} = 10^7$  [27]. Cependant, le facteur de qualité expérimental  $Q_{exp}$  est réduit de  $Q_{th}$  par les imperfections de fabrication  $Q_{fab}$  et l'absorption du GaN  $Q_{abs}$  suivant la relation :

$$\frac{1}{Q_{exp}} = \frac{1}{Q_{th}} + \frac{1}{Q_{fab}} + \frac{1}{Q_{abs}} \quad (22)$$

Expérimentalement, on mesure avec la microphotoluminescence dans la partie I.3.1 que le facteur de qualité expérimental  $Q_{fab}$  est au moins deux ordres de grandeur plus faible que  $Q_{th}$ . Les prédictions numériques sur  $Q_{th}$  n'ont donc pas d'impact sur  $Q_{exp}$  à moins qu'il baisse de deux ordres de grandeur.

### Conséquence des déformations

On travaille dans cette étude avec des déformations au maximum de l'ordre de 1%, une telle déformation sur les trous ou sur la cavité du cristal photonique est négligeable. Par contre, le cristal photonique est très sensible à la courbure, et une étude avec le logiciel *FDTD Simulation*, présentée figure 17, montre qu'une courbure de l'ordre du nanomètre induit un décalage sur le mode de la cavité photonique suffisant pour être mesuré expérimentalement ( $> 0,1$  nm). La courbure du nanobeam a été modélisée par une déformée décrite par un polynôme de degré quatre, dont le calcul est présenté en annexe A.1.2.



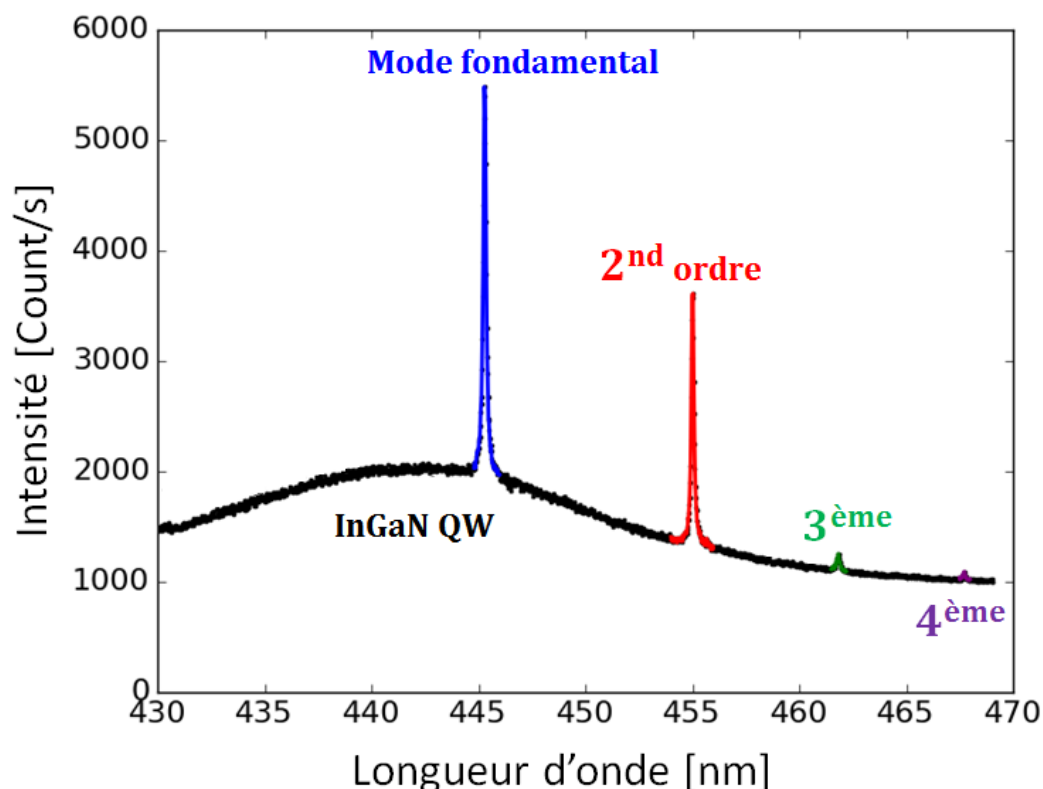
**Figure 17:** Impact d'une courbure selon l'axe  $z$  (a) et l'axe  $y$  (b) sur la longueur d'onde du mode de la cavité photonique, *FDTD Simulation*. Les incertitudes de simulations sur la longueur d'onde sont de 0,2 nm

Il apparaît sur ces simulations qu'une courbure selon l'axe  $z$  n'a quasiment aucun impact sur la cavité photonique (le décalage observé étant de l'ordre des incertitudes de simulation). Par contre, une courbure selon l'axe  $y$  semble avoir des conséquences sur la cavité, notamment entre 0 et 10 nm. Ceci peut être expliqué par le fait qu'une courbure selon  $z$  ne change presque pas la symétrie  $y$  du nanobeam ( $E(y) = E(-y)$ ), alors qu'un courbure selon  $y$  l'abolit. Il semble donc qu'un réglage contrôlé de cette courbure nous permettrait de décaler l'énergie du mode de la cavité comme souhaité.

### I.3 Techniques de caractérisation

#### I.3.1 Micro-photoluminescence

La technique de caractérisation par micro-photoluminescence ( $\mu$ PL) est basée sur la photo-excitation des échantillons par faisceau laser, fournissant des informations sur les propriétés optiques et électroniques du matériau [31]. Cette technique est non destructive et est idéale pour les caractérisations optiques des structures submicroniques grâce à sa résolution spatiale de quelques centaines de nanomètres avec un contrôle précis de la position de l'échantillon. La figure 18 montre le spectre classique d'un nanobeam obtenu par  $\mu$ PL, mettant en évidence le puits quantique InGaN et les modes du cristal photonique.



**Figure 18:** Spectre de photoluminescence d'un nanobeam, mettant en évidence le puits quantique InGaN (Gaussienne en noire) et les modes du cristal photonique (Lorentziennes colorées).

Si les simulations numériques prédisent des facteurs de qualité atteignant les  $10^6$  voir  $10^7$  pour les nanobeams, on atteint difficilement les 5000 expérimentalement. Cette différence d'environ 3 ordres de grandeur est expliquée par la relation 22, et est causée par les défauts de fabrication. Ceci implique que les variations du facteur de qualité causées par la courbure prévues par la simulation ne pourront pas être mesurées expérimentalement. On s'intéressera donc par la suite seulement aux décalages en longueur d'onde.

### I.3.2 Spectroscopie micro-Raman

La spectroscopie micro-Raman repose sur l'effet de diffusion inélastique de la lumière et utilise les propriétés optiques des matériaux pour déterminer les états de contrainte dans l'échantillon avec une précision de quelques centaines de nanomètres. C'est une méthode de caractérisation très pratique car non destructive mais nécessitant des outils théoriques complexes [32]. On se contentera dans ce rapport d'en énumérer les aspects importants.

Dans le cas des nitrures d'éléments III, six modes de vibrations optiques, énumérés dans le tableau 5, sont visibles expérimentalement. Et lorsque le cristal est déformé, la longueur d'onde  $\lambda$  des modes varient. Le déplacement Raman  $\omega = \frac{10^7}{\lambda} \text{cm}^{-1}$  suit alors, en notant  $\omega_0$  le décalage Raman du cristal non déformé et  $\Delta\omega = \omega - \omega_0$ , les relations suivantes [33] :

$$\begin{aligned}\Delta\omega(A_1) &= a_{A_1}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) + b_{A_1}\epsilon_{zz} \\ \Delta\omega(E) &= a_E(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) + b_E\epsilon_{zz} \pm c_E\sqrt{(\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy})^2 + 4\epsilon_{xy}^2}\end{aligned}\quad (23)$$

Cependant, le décalage Raman du mode  $A_1^{LO}$  dépend également de la densité de porteurs de charge [34], qu'il faut prendre en compte avant de mesurer les déformations dans le cristal. Les constantes  $a_\lambda$ ,  $b_\lambda$ ,  $c_\lambda$  [35, 36] et  $\omega_0$  à 300 K [34] des phonons du GaN sont données dans la Table 5 :

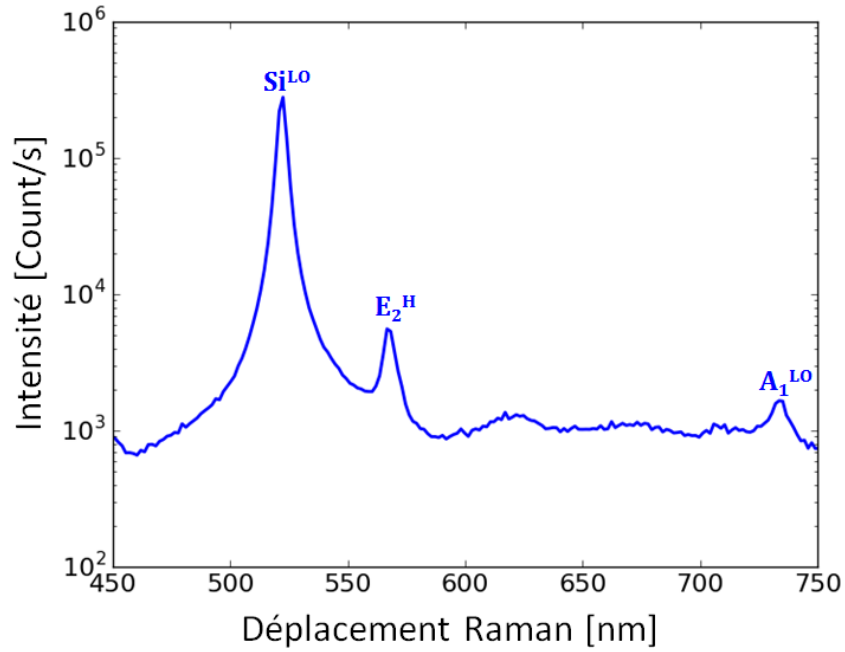
Dans le cas du silicium, il y a trois modes de vibrations optiques,  $\text{Si}_1^{TO}$ ,  $\text{Si}_2^{TO}$  et  $\text{Si}^{LO}$  [37]. À l'état non déformé, ces trois états sont dégénérés et ne forment qu'un seul pic dans le spectre à  $\omega_0 = 520,5 \text{cm}^{-1}$ . Lorsque le cristal est déformé, les déplacements Raman  $\Delta\omega_{i=1,2,3}$  des modes  $\text{Si}_1^{TO}$ ,  $\text{Si}_2^{TO}$  et  $\text{Si}^{LO}$  sont donnés par la relation :

$$\Delta\omega_i = \frac{\xi_i}{2\omega_0}, \quad \text{où les } \xi_i \text{ sont les valeurs propres de la matrice} \quad (24)$$

$$\begin{pmatrix} p\epsilon_{xx} + q(\epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) & 2r\epsilon_{xy} & 2r\epsilon_{xz} \\ 2r\epsilon_{xy} & p\epsilon_{yy} + q(\epsilon_{xx} + \epsilon_{zz}) & 2r\epsilon_{yz} \\ 2r\epsilon_{xz} & 2r\epsilon_{yz} & p\epsilon_{zz} + q(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) \end{pmatrix}$$

Les constantes  $p$ ,  $q$  et  $r$  du silicium [37] sont données dans la Table 5. Dans le cas où il n'y a pas de contrainte de cisaillement, les valeurs propres sont simplement les coefficients diagonaux de la matrice. Mais dans le cas du silicium (111), il faut changer de base et les calculs sont non triviaux.

Les modes possibles à observer expérimentalement dépendent de l'orientation de l'échantillon et de la polarisation des ondes utilisées [32]. On utilisera dans ce travail des ondes de direction  $Z\bar{Z}$ , qui permet d'observer les modes  $\text{Si}^{LO}$ ,  $E_2^H$  et  $A_1^{LO}$ . Le déplacement Raman des modes étant sensible à la température, on travail avec un laser 488 nm avec une puissance faible ( $P < 1,0 \text{mW}$ ) ce qui permet de ne pas trop chauffer l'échantillon ( $< 10 \text{K}$ ). La Figure 19 donne le spectre typique d'un système Si(111)/GaN, où on reconnaît bien les trois modes.



**Figure 19:** Spectre Raman d'un nanobeam, mettant en évidence les différents modes.

GaN	Phonon $\lambda$						Si	Silicium
	$E_2^L$	$E_2^H$	$E_1^{TO}$	$E_1^{LO}$	$A_1^{TO}$	$A_1^{LO}$		
$a_\lambda$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]	115	-818	-820	-776	-630	-685	$-1.43\omega_0^2$	$p$ [ $\text{cm}^{-2}$ ]
$b_\lambda$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]	-80	-797	-680	-704	-1290	-997	$-1.89\omega_0^2$	$q$ [ $\text{cm}^{-2}$ ]
$c_\lambda$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]	?	?	?	?			$-0.59\omega_0^2$	$r$ [ $\text{cm}^{-2}$ ]
$\omega_0^{300\text{K}}$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]	144	567	559	741	532	734	520.5	$\omega_0^{300\text{K}}$ [ $\text{cm}^{-1}$ ]

**Table 5:** Caractéristiques des phonons du GaN et du silicium, les potentiels de déformation  $a_\lambda$  et  $b_\lambda$  sont donnés avec une précision de l'ordre de  $\pm 30 \text{ cm}^{-1}$ .

Les cristaux étant généralement soumis à une contrainte biaxiale ( $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$ ), aucune mesure de  $c_\lambda$  n'a été effectuée par le passé sur le GaN, mais des mesures sur des cristaux wurtzites CdS peuvent être trouvées dans la ref [33].

## II Prédiction et mesures

### II.1 Contraintes biaxiales et uniaxiales

#### II.1.1 Équations

Les PADs sont en contact avec le silicium, ils sont donc sous contrainte biaxiale à cause de la différence de paramètre de maille entre le silicium et l'AlN, principalement causée par le refroidissement. Par contre, le nanobeam est suspendu et n'est pas en contact avec le silicium, mais il est encasté aux deux extrémités avec les PADs et on peut donc émettre l'hypothèse qu'il est soumis à une contrainte uniaxiale. On suppose également que les contraintes de cisaillement sont négligeables, on a donc  $\sigma_{yz} = \sigma_{xz} = \sigma_{xy} = 0$ . En utilisant ces conditions et en négligeant l'effet piézoélectrique inverse, on peut simplifier la relation (3) des cristaux wurtzites comme ci-dessous :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad (25)$$

On peut donc trouver les relations entre la contrainte  $\sigma$  et les déformations  $\epsilon_{xx}$ ,  $\epsilon_{yy}$  et  $\epsilon_{zz}$ , pour les déformations biaxiales et uniaxiales. On donne l'application numérique pour le GaN.

#### Contrainte biaxiale

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma \\ \sigma \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} \epsilon_{yy} = \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{zz} = -2\frac{C_{13}}{C_{33}}\epsilon_{xx} \\ \sigma = \left(C_{11} + C_{12} - 2\frac{C_{13}^2}{C_{33}}\right)\epsilon_{xx} \end{cases} \Rightarrow \boxed{\begin{matrix} \epsilon_{yy} = \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{zz} = -0,53\epsilon_{xx} \\ \sigma = 479\epsilon_{xx} \end{matrix}} \quad (26)$$

#### Contrainte uniaxiale

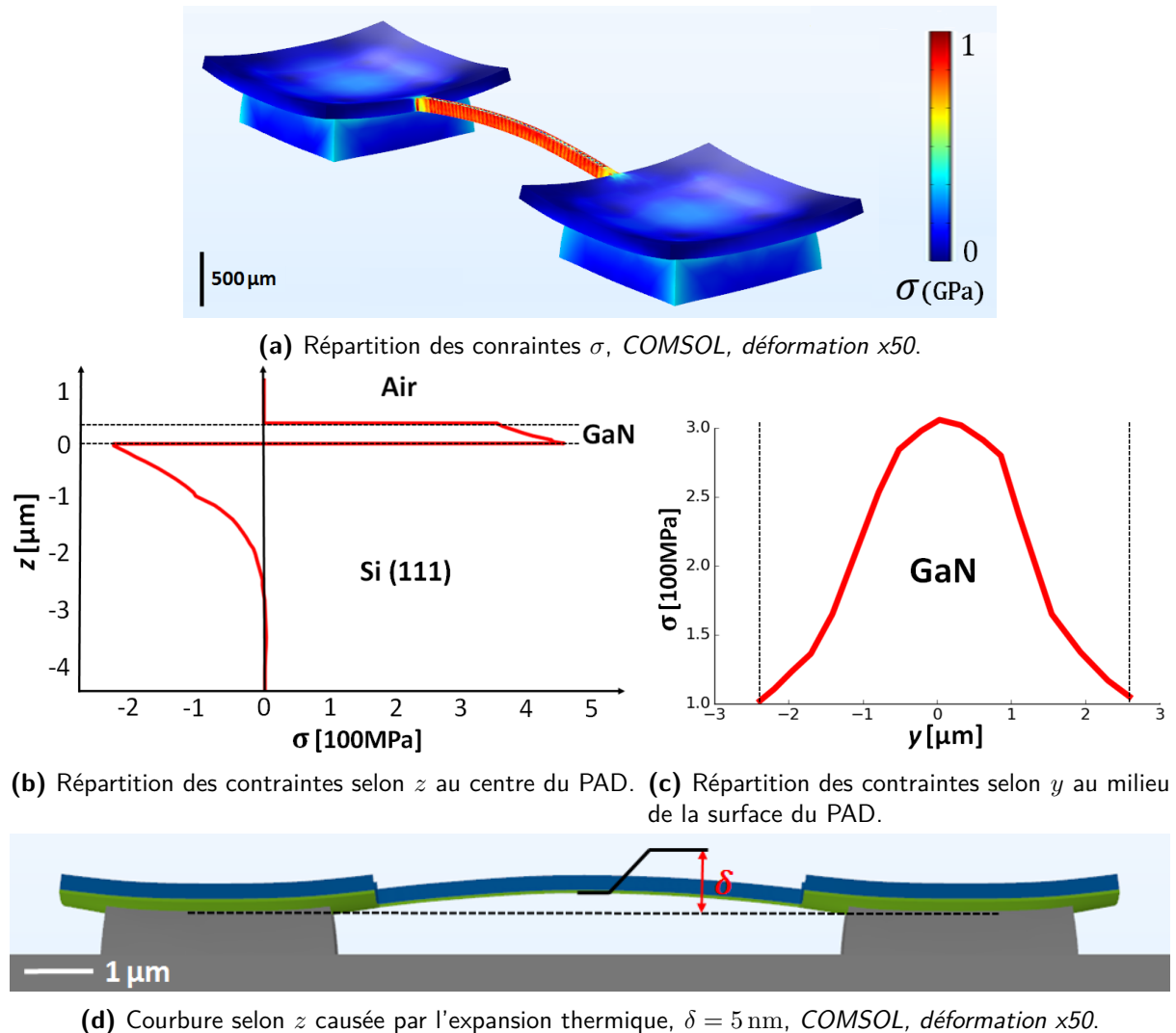
$$\text{en posant } A = \frac{C_{12} - \frac{C_{13}^2}{C_{33}}}{C_{11} - \frac{C_{13}^2}{C_{33}}} \quad \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} \epsilon_{yy} = -A\epsilon_{xx} \\ \epsilon_{zz} = \frac{C_{13}}{C_{33}}(A-1)\epsilon_{xx} \\ \sigma = \left(C_{11} - A.C_{12} + \frac{C_{13}^2}{C_{33}}(A-1)\right)\epsilon_{xx} \end{cases} \Rightarrow \boxed{\begin{matrix} \epsilon_{yy} = -0,32\epsilon_{xx} \\ \epsilon_{zz} = -0,18\epsilon_{xx} \\ \sigma = 325\epsilon_{xx} \end{matrix}} \quad (27)$$



## II.1.2 Courbure et simulation avec COMSOL

## Expansion thermique

On utilise le logiciel de simulation *COMSOL Multiphysics* pour simuler la répartition des contraintes dans le système nanobeam/PADs. En définissant une température initiale de  $1000^\circ\text{C}$  (température de croissance du GaN), on peut observer les effets du refroidissement à température ambiante sur le système, les résultats sont présentés figure 20.



**Figure 20:** Résultats des simulations *COMSOL* pour un refroidissement de  $1000^\circ\text{C}$ .

On peut remarquer sur ces simulations deux phénomènes importants :

- Les contraintes dans le nanobeam ( $\sigma \approx 800 \text{ MPa}$ ) sont beaucoup plus élevées que celles au centre des PADs ( $\sigma \approx 300 \text{ MPa}$ ), comme le met en évidence la figure 20a.
- Les PADs et le nanobeam sont courbés et les contraintes ne sont pas uniformément réparties ; de plus le silicium subit des contraintes de compression ( $\sigma \approx -200 \text{ MPa}$ ).

Ces deux phénomènes sont corrélés. En effet, le PAD, qui est en contact direct avec le silicium, se courbe pour mieux répartir ses contraintes, comme le mettent en évidence les Figures 20b et 20c. Par contre, le nanobeam est étiré des deux côtés et ne peut pas se relâcher. De plus, il subit la courbure des PADs, ce qui le courbe également avec une flèche de  $\delta = 5 \text{ nm}$  (Fig.20d).

### II.1.3 Mesures par spectroscopie Raman

On a pu, grâce à la spectroscopie Raman, vérifier les résultats de nos simulations *COMSOL* et si l'état des déformations des nanobeams et des PADs est bien respectivement uniaxiale et biaxiale. Des mesures sur les modes  $A_1^{LO}$ ,  $E_2^H$  et  $Si^{LO}$  ont été effectuées à température ambiante (300 K). En appliquant les expressions du déplacement Raman (23) et (24) à notre cas, on peut écrire :

$$\begin{aligned}
 \Delta\omega(Si) &= B\epsilon_{xx} \quad \text{pour une contrainte biaxiale} \\
 \Delta\omega(A_1) &= a_{A_1}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) + b_{A_1}\epsilon_{zz} \\
 \Delta\omega(E_2)^{horizontal} &= a_{E_2}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) + b_{E_2}\epsilon_{zz} + c_{E_2}|\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}| \\
 \Delta\omega(E_2)^{vertical} &= a_{E_2}(\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy}) + b_{E_2}\epsilon_{zz} - c_{E_2}|\epsilon_{xx} - \epsilon_{yy}|
 \end{aligned} \tag{28}$$

Le calcul de la constante  $B = -413 \text{ cm}^{-1}$  est effectué en annexe A.3. Dans le cas de  $E_2^H$ , le décalage Raman n'est pas le même si le nanobeam est horizontal ou vertical, car le rôle de  $\epsilon_{xx}$  et celui de  $\epsilon_{yy}$  sont inversés. Nos mesures nous ont également permis de mesurer la constante  $c_{E_2^H}$  du GaN.

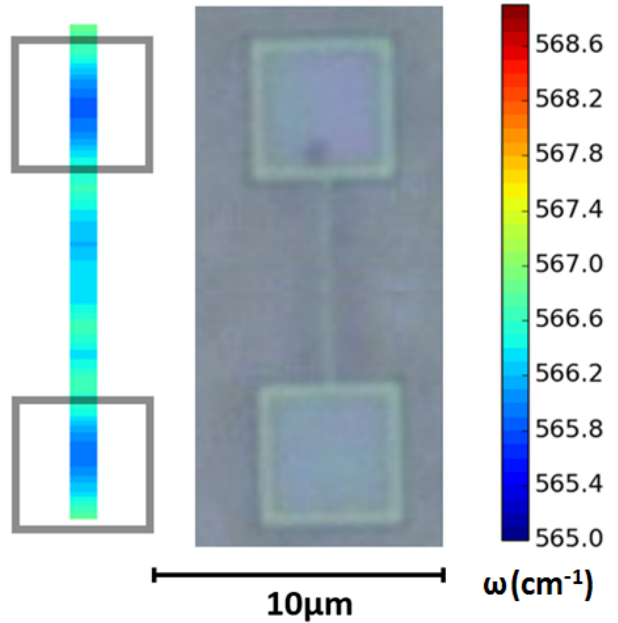
#### Scan XY

Un scan XY des modes  $A_1^{LO}$ ,  $E_2^H$  et  $Si^{LO}$  a été effectué sur un nanobeam horizontal et un nanobeam vertical avec un laser 488 nm. On remarque nettement dans chaque cas un décalage Raman différent sur le nanobeam et le PAD, impliquant que leur état de déformation n'est pas le même. La Figure 21 présente le scan d'un nanobeam vertical du mode  $E_2^H$ .

#### Calcul des déformations

Nos mesures sont limitées par la résolution du spectromètre, qui est  $1 \text{ cm}^{-1}$ . Ce travail est donc une première approche, mais il sera nécessaire d'utiliser une meilleure installation expérimentale pour des mesures plus précises. Les mesures sont effectuées avec un laser 488 nm et les moyennes des mesures sur 11 nanobeams verticaux et 11 horizontaux sont présentées table 6.

On peut dans un premier temps observer que le déplacement Raman est quasiment identique pour les PADs verticaux et horizontaux, cela implique avec l'équation 28 que l'état de déformation des PADs ne dépend pas de l'orientation est qu'il est biaxiale ( $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$ ). Ensuite, on remarque que le déplacement Raman est beaucoup plus important pour le mode  $A_1^{LO}$  que  $E_2^H$  alors que les coefficients  $a_\lambda$  et  $b_\lambda$  sont du même ordre de grandeur (voir table 5). C'est à cause



**Figure 21:** Scan XY du mode  $E_2^H$  effectué sur un nanobeam vertical.

de l'influence de la densité de porteurs de charge [34], qui modifie le décalage Raman du mode  $A_1^{LO}$ . On doit donc, pour calculer les déformations dans le GaN, utiliser les résultats du mode  $E_2^H$ , et on peut remarquer une différence claire sur les mesures des nanobeams verticaux et horizontaux, ce qui signifie que la contrainte dans les nanobeams est bien uniaxiale. En ce qui concerne les mesures sur le mode  $Si^{LO}$ , on peut noter que le signe du déplacement Raman est opposé à celui du mode  $E_2^H$ , impliquant une contrainte opposée, ce qui est en accord avec les prédictions *COMSOL* (Fig.20b). Par contre, on remarque que les mesures sur les nanobeams verticaux et horizontaux sont différentes, ce qui ne devrait pas être le cas étant donné que ce mode ne dépend pas de l'orientation, cette différence n'est pas comprise et on utilisera donc les résultats des PADs dans nos calculs. En utilisant les relations (26), (27), (28) et les résultats de la Table.6, on peut calculer les déformations et on obtient :

$$\begin{array}{l}
 \epsilon_{xx}(Beam) = 0,18 \pm 0,12 \% \quad \leftrightarrow \quad \sigma_{uniaxiale}(Beam) = 650 \pm 390 \text{ MPa} \\
 \epsilon_{xx}(PAD) = 0,07 \pm 0,04 \% \quad \leftrightarrow \quad \sigma_{biaxiale}(PAD) = 287 \pm 190 \text{ MPa} \\
 \epsilon_{xx}(Silicium) = -0,097 \pm 0,12 \% \quad \leftrightarrow \quad \sigma_{biaxiale}(Silicium) = -174 \pm 200 \text{ MPa} \\
 c_{E_2^H} = 118 \pm 236 \text{ cm}^{-1}
 \end{array} \quad (29)$$

Malgré les incertitudes élevés, ces résultats sont en accord avec les prédictions des simulations numériques *COMSOL*, et la valeur de  $c_{E_2^H}$  semble cohérente. Notre modèle des déformations induites par l'expansion thermique est donc une approche correcte de la réalité.

phonon $\lambda$	$A_1^{LO}$	$E_2^H$	$Si^{LO}$
$\Delta\omega_\lambda(\text{PAD-V}) [cm^{-1}]$	-1,5	-0,8	0,4
$\Delta\omega_\lambda(\text{PAD-H}) [cm^{-1}]$	-1,4	-0,8	0,4
$\Delta\omega_\lambda(\text{Beam-V}) [cm^{-1}]$	3,7	-0,5	0,4
$\Delta\omega_\lambda(\text{Beam-H}) [cm^{-1}]$	1,8	-1,0	0,2

**Table 6:** Moyenne des mesures de déplacement Raman sur 11 nanobeams verticaux(V) et 11 horizontaux(H), la précision des mesures est estimé à  $\pm 0,5 \text{ cm}^{-1}$ .

### II.1.4 Conséquences des déformations sur les propriétés optiques du nanobeam

#### Conséquences sur le puits quantique

On peut supposer avec la formule 14 que la polarisation piézoélectrique produit par les déformations dans le GaN pourrait diminuer ou augmenter le champ électrique interne du puits quantique, et que les différentes déformations entre le PAD et le nanobeam impliqueraient des différences sur la qualité du puits quantique. On a vu dans la partie I.1.3, que sans déformation extérieur, le puits quantique InGaN est sous contrainte biaxiale correspondant à une déformation de  $-1,65\%$ , et le champ électrique interne s'écrit donc :

$$E_{QW} = \frac{P_{sp}^{\text{GaN}} - P_{sp}^{\text{InGaN}}}{\varepsilon_r \varepsilon_0} - \frac{P_{pz}^{\text{InGaN}}(1,65\%)}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \quad (30)$$

Si le GaN est soumis à une déformation biaxiale  $\epsilon_{\text{GaN}}$ , l'InGaN va subir une déformation  $\epsilon_{\text{InGaN}} = \epsilon_{\text{GaN}} - 0,0165$ , et en négligeant la non-linéarité de la polarisation piézoélectrique, on peut écrire.

$$E_{QW}(\epsilon_{\text{GaN}}) = \frac{P_{sp}^{\text{GaN}} - P_{sp}^{\text{InGaN}}}{\varepsilon_r \varepsilon_0} + \frac{P_{pz}^{\text{GaN}}(\epsilon_{\text{GaN}}) - P_{pz}^{\text{InGaN}}(\epsilon_{\text{GaN}})}{\varepsilon_r \varepsilon_0} - \frac{P_{pz}^{\text{InGaN}}(-1,65\%)}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \quad (31)$$

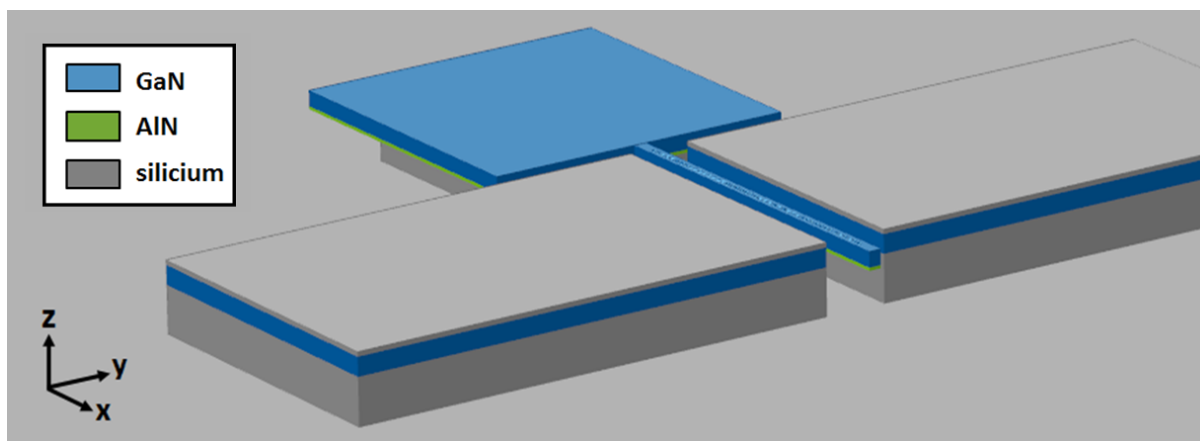
On remarque au niveau de cette relation que le champ électrique interne va directement dépendre de la différence de polarisation piézoélectrique entre le GaN et l'InGaN pour une même déformation  $\epsilon_{\text{GaN}}$ . Cependant, avec la relation 15, il apparait que  $P_{pz}^{\text{GaN}}(\epsilon)$  et  $P_{pz}^{\text{InGaN}}(\epsilon)$  sont très proches, et que la contribution au champ électrique interne de leur différence pour une déformation absolument inférieur à  $1\%$  est négligeable. Si on voulait obtenir un champ électrique interne nul dans le puits quantique, on obtient par le calcul présenté en annexe (A.2) une déformation  $\epsilon_{\text{GaN}} = 5,8\%$ , ce qui est irréalisable expérimentalement. On peut donc avancer que les déformations dans le nanobeam et le PAD ne peuvent à elles seules avoir des conséquences sur le puits quantique.

#### Conséquences sur le cristal photonique

La flèche due à l'expansion thermique ( $\delta_z = 5 \text{ nm}$ ) est selon  $z$ , et comme expliqué dans la partie I.2.4, une flèche selon  $z$  n'affecte pas les propriétés optiques de la structure nanophotonique de manière significative. les déformations induites par l'expansion thermique n'affectent donc pas la cavité photonique.

## II.2 Conception d'électrodes

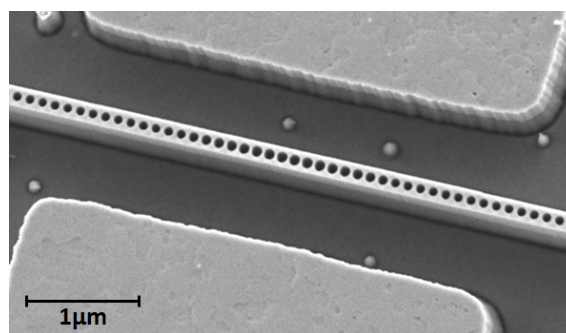
Le but de cette partie est de concevoir des électrodes pour créer un champ électrique dans le nanobeam, permettant de contrôler les déformations du cristal photonique et le champ interne du puits quantique. On modélise les électrodes par  $2 \times 2$  plaques métalliques séparées par une couche de GaN (Fig.22).



**Figure 22:** Design des électrodes, *COMSOL*.

Pour les nanobeams encastrés des deux côtés, les simulations ont montré qu'en appliquant une tension de 200 V, on ne peut pas dépasser une courbure de 1 nm, ce qui est beaucoup trop faible pour avoir un impact observable sur le PhC (cf. partie I.2.4). C'est pourquoi, pour obtenir des effets observables expérimentalement, les simulations sont présentées pour un nanobeam en porte-à-faux comme sur la figure 22, où la courbure du nanobeam par l'application d'un champ électrique est plus significative.

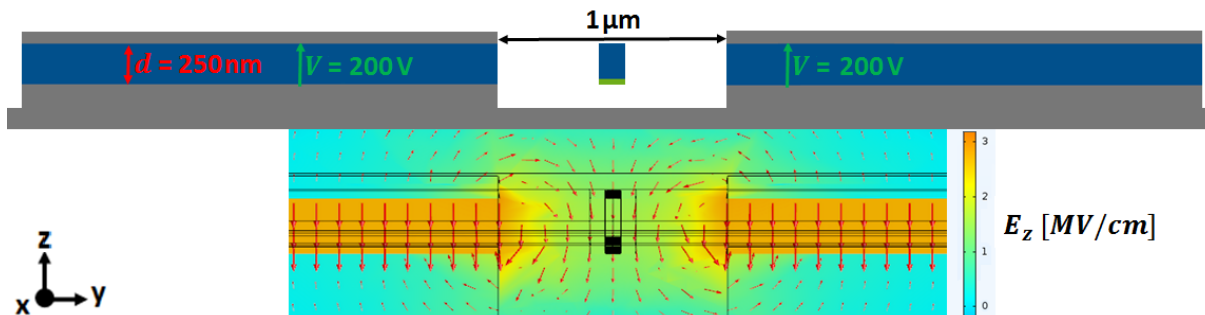
Pour des plaques infinies, le champ électrique créé par ces électrodes est donné par la relation  $E = \frac{U}{d}$  où  $U$  est la tension appliquée aux bornes des électrodes et  $d$  est la distance qui les sépare. Expérimentalement, il est facile d'appliquer une tension de 200V. Cependant, pour des raisons de faisabilité, les plaques ne sont pas infinies et on doit ainsi prendre en compte les effets de bord. La distance séparant les deux électrodes est  $d_z = 250$  nm sur l'axe  $z$  et  $d_y = 1$   $\mu\text{m}$  sur l'axe  $y$ . La figure 23 montre une photo des électrodes obtenue par MEB.



**Figure 23:** Photo MEB des électrodes avant l'enlèvement du silicium.

### II.2.1 Création d'un champ selon l'axe $z$

Les deux électrodes conçues étant des plans XY, le plus naturel est d'appliquer une différence de potentiel entre la partie inférieure et supérieure (Fig.24). On va donc créer un champ électrique selon l'axe  $z$ .



**Figure 24:** Lignes de champ électrique, et valeurs de  $E_z$  en couleur (échelle log), *COMSOL*.

La simulation *COMSOL* nous permet de calculer les effets de bord, et on trouve un facteur d'environ 5 entre le champ entre les plaques et le champ réellement présent dans le nanobeam. Ce champ a pour effet de courber le nanobeam comme le montre la Figure 25, et on trouve une relation linéaire entre la tension appliquée  $V$  et la flèche  $\delta$  (Fig.29). Pour une tension de 200 V, le champ appliqué au niveau du nanobeam est  $E_z^{beam} = 1,5 \text{ MV/cm}$  et la flèche est  $\delta = 5 \text{ nm}$ .



**Figure 25:** Courbure du nanobeam due à l'application d'un champ électrique selon  $z$ , pour  $V = 200 \text{ V}$ ,  $\delta = 5 \text{ nm}$ .

#### Conséquences sur le cristal photonique

Comme on l'a vu dans la partie I.2.4, Une courbure selon l'axe  $z$  n'a pas d'influence significative (un décalage d'au moins 0,1 nm) sur le mode de cavité du cristal photonique. L'application d'un champ électrique selon  $z$  ne permet donc pas de régler la cavité du cristal photonique efficacement.

#### Conséquences sur le puits quantique

Comme expliqué dans la partie I.1.3, par l'intermédiaire de l'effet Stark, l'application du champ électrique devrait décaler la transition du puits quantique de  $-eE_W l_W$ . Dans notre cas, pour  $E_z = 1,5 \text{ MV/cm}$ , le décalage en énergie devrait être de l'ordre de 0,2 eV correspondant à une longueur d'onde  $\Delta\lambda = 25 \text{ nm}$  pour le puits quantique InGaN. l'application d'une tension selon  $z$  devrait donc avoir des effets observables expérimentalement sur le puits quantique.

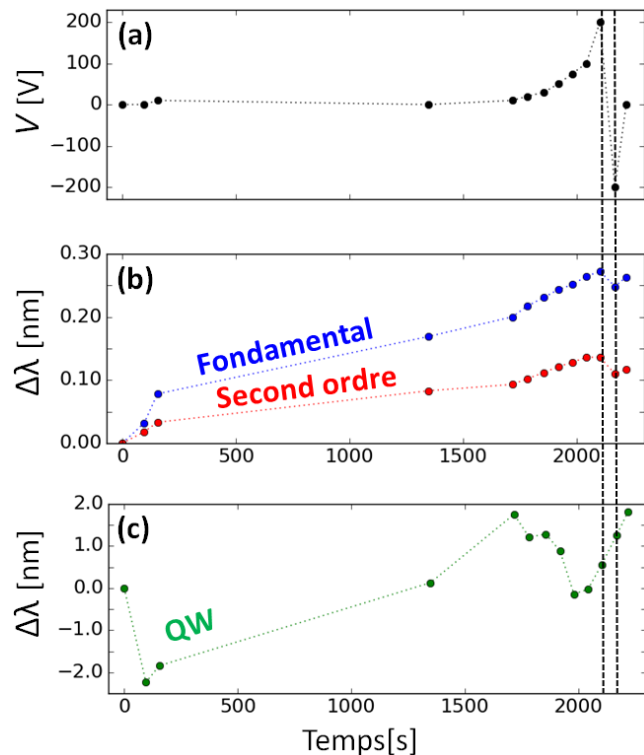
### Mesures

On a pu, en appliquant une tension sur les électrodes selon le modèle décrit plus haut, vérifier l'impact d'un champ électrique selon  $z$  sur le mode photonique et du puits quantique. Les mesures n'ont pas pu être effectuées sur des nanobeams en porte-à-faux, car la préparation des échantillons demande plusieurs mois et il n'a pas été possible de le faire pendant le stage. On a donc réalisé nos mesures sur deux nanobeams déjà préparés, encastrés aux deux extrémités dans les PADs. On présente les résultats sur la figure 26.

On remarque sur la figure 26, que même en gardant une tension constante, les longueurs d'onde des modes du PhC se décalent, rendant les mesures peu fiables. Ce phénomène est à priori dû au dépôt de carbone sur l'échantillon par excitation laser, qui modifie localement l'indice de réfraction et donc les propriétés optiques du cristal photonique. On peut d'ailleurs observer les zones carbonisées avec un MEB.

Comme expliqué plus haut, l'impact du champ électrique sur le PhC devrait être négligeable. Pourtant on remarque un léger décalage de 0,5 nm (Fig.26b) lorsqu'on passe de 200 V à -200 V (marqué par les lignes en pointillé). Cependant cela n'a pas été observé sur l'autre nanobeam, c'est donc peut être une incertitude de mesure.

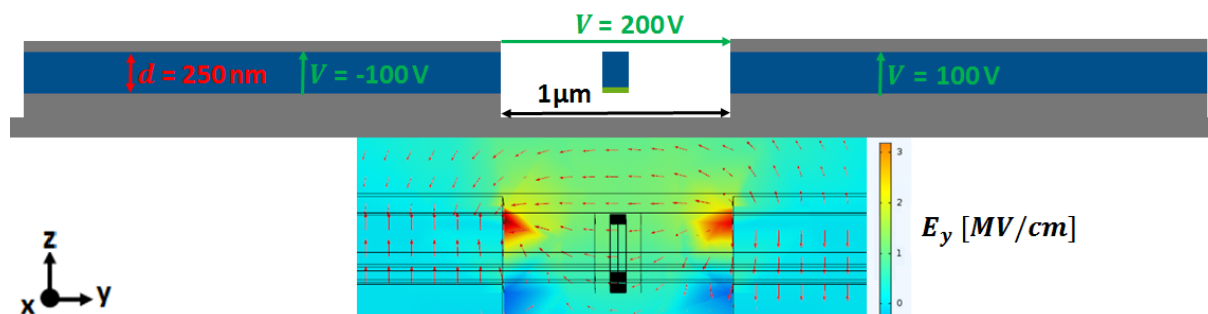
Théoriquement, le champ électrique interne du puits quantique de l'ordre de 1 MV/cm devrait décaler la transition d'une dizaine de nanomètre. Cependant, on ne remarque aucun décalage clair sur la figure 26c, et il semble même aléatoire. Comme expliqué dans la partie I.1.3, les contraintes extrêmes dans le puits quantique InGa<sub>N</sub> altèrent sa qualité, ce qui pourrait expliquer l'absence de mesures révélatrices. Pour obtenir des puits quantiques de meilleure qualité, on pourra diminuer le taux d'indium ou effectuer la croissance sur un substrat en SiC. On pourra également effectuer des mesures de spectroscopie laser à résolution temporelle et chercher des variations sur le taux de recombinaison radiative.



**Figure 26:** Évolution de (a) la tension appliquée aux bornes des électrodes, (b) du décalage de la cavité photonique des deux premiers modes et (c) du décalage de la transition du puits quantique en fonction du temps.

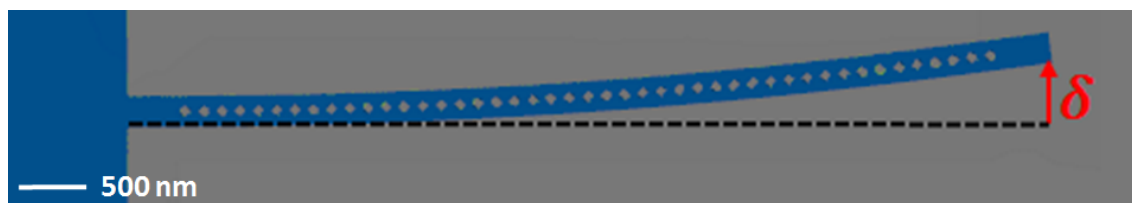
### II.2.2 Création d'un champ selon l'axe $y$

Comme on le met en avant dans la partie I.2.4, le cristal photonique est beaucoup plus sensible à une courbure selon  $y$  qu'à une courbure selon  $z$ . De plus, un champ électrique selon  $y$  permettrait de modifier l'énergie du mode de la cavité photonique sans décaler celle du puits quantique, car celui-ci n'est affecté que par un champ électrique selon  $z$ . On peut donc créer un champ électrique selon  $y$  en appliquant une différence de potentiel entre la partie droite et la partie gauche (Fig.27). Cependant c'est impossible à réaliser expérimentalement sans aussi créer une différence de potentiel sur l'axe  $z$ , mais on verra que cela n'a pas de conséquences.



**Figure 27:** Lignes de champ électriques, et valeurs de  $E_y$  en couleur (échelle log), *COMSOL*.

Pour une tension appliquée de 200 V, on trouve avec *COMSOL*, un champ électrique moyen dans le nanobeam ayant pour valeur  $E_y = 0,8 \text{ MV/cm}$ . Ce champ a pour effet de courber le nanobeam comme le montre la Figure 28. Pour une tension de 200 V, la flèche selon  $y$  est  $\delta = 4 \text{ nm}$ , et même avec l'application d'un champ électrique selon  $z$ , le nanobeam n'est pas courbé selon  $z$ , car  $E_z$  est de sens opposé à droite et à gauche. La distance qui sépare les électrodes étant plus élevée que dans la section précédente ( $d_z = 250 \text{ nm}$  et  $d_y = 1 \mu\text{m}$ ), la courbure du nanobeam est un peu moins sensible à la tension appliquée (Fig.29), mais reste tout de même significative.

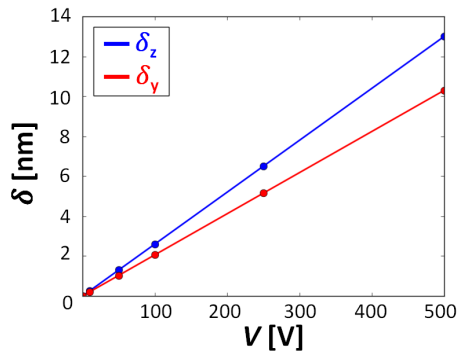


**Figure 28:** Courbure du nanobeam dans le plan XY due à l'application d'un champ électrique selon  $y$ , *COMSOL*, pour  $V = 200 \text{ V}$ ,  $\delta = 4 \text{ nm}$ .

#### Conséquences sur le cristal photonique

En utilisant les résultats de la partie I.2.4, une flèche de 4 nm selon l'axe  $y$  décale le mode de cavité de  $\Delta\lambda = 0,35 \text{ nm}$ . C'est assez pour être observable expérimentalement et c'est idéal pour un réglage fin et précis du couplage entre le puits quantique et le cristal photonique.





**Figure 29:** Évolution de la flèche  $\delta_z$  (en bleu) et  $\delta_y$  (en rouge) en fonction de la tension appliquée  $V$  aux électrodes respectivement selon  $z$  et selon  $y$ . Pour une tension négative, le nanobeam se courbe de la même manière, mais dans l'autre sens, *COMSOL*.

### III Conclusion et Perspectives

Dans ce rapport, une nouvelle méthode de réglage de la cavité photonique du nanobeam est présentée. On a pu étudier les déformations dans le nanobeam à l'aide des simulations numériques *COMSOL* et de la spectroscopie Raman. Puis, on a pu modéliser des électrodes pour appliquer un champ électrique dans la nanobeam et en observer les effets.

Finalement, en fabriquant des puits quantiques de meilleure qualité et des nanobeams en porte-à-faux comme présenté dans la dernière partie de ce rapport, on devrait être en mesure d'observer expérimentalement les effets d'une tension appliquée aux électrodes, et régler la longueur d'onde de la cavité photonique ou du puits quantique selon si on applique le champ selon l'axe  $z$  ou  $y$ .

C'est par l'intermédiaire de ce réglage qu'il sera possible, en faisant varier la tension aux bornes des électrodes, de régler les modes de cavité du puits quantique et du cristal photonique à la même longueur d'onde. Ce procédé apporterait de nouvelles opportunités dans l'étude des systèmes électrodynamiques quantiques en cavité ; et pour un confinement plus efficace, on pourra remplacer le puits quantique par une boîte quantique au centre de la cavité photonique (Fig.30), comme effectué dans les travaux [4].



**Figure 30:** Insertion d'une boîte quantique au centre de la cavité d'un nanobeam [38].

## A Annexes

### A.1 Quelques éléments de mécanique des milieux continus

#### A.1.1 Notation de Voigt

Toute contrainte appliquée à un cristal est une grandeur tensorielle de rang 2, de même que la déformation externe de la maille qu'elle induit [11]. Par ailleurs, les conditions d'équilibre statique du cristal imposent aux tenseurs d'être symétriques.

La notation de Voigt permet d'écrire les tenseurs des contraintes et des déformations sous forme de vecteurs à 6 composantes, reliés aux composantes des tenseurs d'origine par les relations [11] :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{xz} & \epsilon_{yz} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 2\epsilon_{yz} \\ 2\epsilon_{xz} \\ 2\epsilon_{xy} \end{pmatrix} \quad (32)$$

On peut ainsi écrire sous forme matricielle des tenseurs de rang trois ( $e_{ikl} \leftrightarrow e_{ij}$ ) ou quatre ( $C_{ijkl} \leftrightarrow C_{ij}$ ).

### A.1.2 Flexion d'une poutre en porte-à-faux

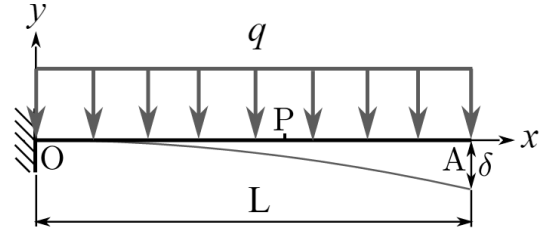
On peut modéliser un nanobeam en porte-à-faux soumis à une contrainte uniforme par une poutre encastré d'un coté et libre de l'autre et soumise à une charge  $q$  uniformément répartie (Fig.31). La déformée  $y(x)$  de la poutre est liée au moment fléchissant  $Mf_z$  par la relation :

$$y''(x) = -\frac{Mf_z}{EI}$$

La force à considérer en un point P est la masse de la partie [PA] dont on considère qu'elle s'applique au milieu de [PA]. En notant  $x = OP$ , le moment fléchissant  $Mf_z$  est :

$$Mf_z = -\frac{1}{2}(L-x)q(L-x)$$

où  $E$  est le module d'Young du matériau qui compose la poutre et  $I$  Le moment quadratique de la poutre. On a donc :



**Figure 31:** Flexion d'une poutre encastrée d'un côté soumise à une charge uniformément répartie.

$$y''(x) = -\frac{q}{2EI}(L^2 - 2xL + x^2)$$

$$\Rightarrow y(x) = -\frac{q}{2EI} \left( \frac{L^2 x^2}{2} - \frac{Lx^3}{3} + \frac{x^4}{12} \right) + C_1 x + C_2$$

$$\text{or } y'(0) = 0 \Rightarrow C_1 = 0 \text{ et } y(0) = 0 \Rightarrow C_2 = 0$$

$$\text{donc } y = -\frac{q}{2EI} x^2 \left( \frac{L^2}{2} - \frac{Lx}{3} + \frac{x^2}{12} \right)$$

$$\text{et } \delta = y(L) = -\frac{qL^4}{8EI}$$

Et en substituant, on obtient finalement :

$$y(x) = \frac{\delta}{3L^4} x^2 (6L^2 - 4Lx + x^2)$$

## A.2 Compensation du champ électrique interne d'un puits quantique déformé

On cherche à compenser le champ électrique interne du puits quantique InGaN/GaN étudié dans la partie II.1.4 par une contrainte biaxiale correspondant à une déformation  $\epsilon$ . On rappelle que l'InGaN est initialement déformé à 1,65 % par les contraintes biaxiales du GaN, et en utilisant les relations prises dans [25], on a :

$$\begin{aligned}
 P_{sp}^{\text{GaN}} &= -0,034 \text{ C m}^{-2} \\
 P_{sp}^{\text{In}_x\text{GaN}_{1-x}} &= -0,042x - 0,034(1-x) + 0,038x(1-x) \\
 P_{pz}^{\text{In}_x\text{GaN}_{1-x}} &= xP_{InN}^{pz}(\epsilon) + (1-x)P_{\text{GaN}}^{pz}(\epsilon) \\
 P_{pz}^{\text{GaN}} &= -0,918\epsilon + 9,541\epsilon^2 \\
 P_{pz}^{\text{InN}} &= -1,373\epsilon + 7,559\epsilon^2
 \end{aligned} \tag{33}$$

On peut calculer la polarisation spontanée et piézoélectrique de l' $\text{In}_x\text{GaN}_{1-x}$  avec  $x = 0,15$  :

$$\begin{aligned}
 P_{sp}^{\text{InGaN}} &= -0,030 \text{ C m}^{-2} \\
 P_{pz}^{\text{InGaN}} &= -0,986\epsilon + 9,244\epsilon^2
 \end{aligned}$$

Et en injectant dans l'expression du champ électrique interne souhaité nul, on obtient :

$$\begin{aligned}
 E_{QW} &= \frac{P_{sp}^W - P_{sp}^B}{\epsilon_r^W \epsilon_0} + \frac{P_{pz}^W - P_{pz}^B}{\epsilon_r^W \epsilon_0} = 0 \\
 \Leftrightarrow (P_{sp}^W - P_{sp}^B) + (P_{pz}^W - P_{pz}^B) &= 0 \\
 \Leftrightarrow P_{pz}^B(\epsilon) - P_{pz}^W(\epsilon - 0,0165) &= 0,004 \\
 \Leftrightarrow 0,297\epsilon^2 + 0,373\epsilon - 0,0188 &= 0 \\
 \Rightarrow \boxed{\epsilon = 5,8 \%}
 \end{aligned}$$

### A.3 Potentiels de déformation Raman pour le Si(111)

Dans notre étude, le substrat de Si(111) est soumis à une contrainte biaxiale, et on peut écrire :

$$\underline{\underline{\epsilon}}_{(111)} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \epsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad \epsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \epsilon_{xx}. \quad (34)$$

En effectuant le changement de base comme dans l'étude [39], on obtient :

$$\underline{\underline{\epsilon}}_{(100)} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \epsilon_2 & \epsilon_2 \\ \epsilon_2 & \epsilon_1 & \epsilon_2 \\ \epsilon_2 & \epsilon_2 & \epsilon_1 \end{pmatrix} \quad \text{où} \quad \begin{aligned} \epsilon_1 &= \frac{4C_{44}}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_2 &= -\frac{C_{12} + 2C_{12}}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} \epsilon_{xx} \end{aligned}. \quad (35)$$

Pour calculer le déplacement Raman, on cherche les valeurs propres de la matrice :

$$\begin{pmatrix} \epsilon_1(p+2q) & 2r\epsilon_2 & 2r\epsilon_2 \\ 2r\epsilon_2 & \epsilon_1(p+2q) & 2r\epsilon_2 \\ 2r\epsilon_2 & 2r\epsilon_2 & \epsilon_1(p+2q) \end{pmatrix} \quad \text{qui sont} \quad \begin{aligned} \xi_{1,2} &= \epsilon_1(p+2q) - 2\epsilon_2r \\ \xi_3 &= \epsilon_1(p+2q) + 4\epsilon_2r \end{aligned}. \quad (36)$$

On peut donc écrire les décalages Raman des modes  $\text{Si}_{1,2}^{TO}$  et  $\text{Si}^{LO}$  :

$$\begin{aligned} \Delta\omega_{TO} &= \frac{\xi_{1,2}}{2\omega_0} = A\epsilon_{xx} & \text{où} & \quad A = \frac{2C_{44}(p+2q) + (C_{11} + 2C_{12})r}{\omega_0(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})} \\ \Delta\omega_{LO} &= \frac{\xi_3}{2\omega_0} = B\epsilon_{xx} & & \quad B = \frac{2C_{44}(p+2q) - 2(C_{11} + 2C_{12})r}{\omega_0(C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44})} \end{aligned}. \quad (37)$$

En utilisant les valeurs données dans la Table.2, on peut calculer ces constantes, et on obtient :

$$\boxed{\begin{aligned} A &= -1,64\omega_0 = -854 \text{ cm}^{-1} \\ B &= -0,79\omega_0 = -413 \text{ cm}^{-1} \end{aligned}} \quad (38)$$

## Bibliographie :

- [1] Shuji Nakamura. The roles of structural imperfections in InGaN-based blue light-emitting diodes and laser diodes. *Science*, 281(5379) :956–961, 1998.
- [2] Shuji Nakamura and Gerhard Fasol. Biographies. In *The Blue Laser Diode*, pages 317–318. Springer, Berlin, 1997.
- [3] Hiroshi Sekoguchi, Yasushi Takahashi, Takashi Asano, and Susumu Noda. Photonic crystal nanocavity with a q-factor of 9 million. *Optics Express*, 22(1) :916–924, 2014.
- [4] Peter Lodahl, Sahand Mahmoodian, and Søren Stobbe. Interfacing single photons and single quantum dots with photonic nanostructures. *Reviews of Modern Physics*, 87(2) :347, 2015.
- [5] Barbara Wild, Rolando Ferrini, Romuald Houdre, Mikael Mulot, Srinivasan Anand, and CJM Smith. Temperature tuning of the optical properties of planar photonic crystal microcavities. *Applied physics letters*, 84(6) :846–848, 2004.
- [6] Charlton J Chen, Chad A Husko, Inanc Meric, Ken L Shepard, Chee Wei Wong, William MJ Green, Yurii A Vlasov, and Solomon Assefa. Deterministic tuning of slow-light in photonic-crystal waveguides through the c and l bands by atomic layer deposition. *Applied Physics Letters*, 96(8) :081107, 2010.
- [7] HS Lee, S Kiravittaya, S Kumar, JD Plumhof, L Balet, LH Li, M Francardi, A Gerardino, A Fiore, A Rastelli, et al. Local tuning of photonic crystal nanocavity modes by laser-assisted oxidation. *Applied Physics Letters*, 95(19) :191109, 2009.
- [8] G.Rossbach. *High-Density Excitonic Effects in GaN : Mott-Transition and Polariton Lasing*. PhD thesis, EPFL, n.6245, 2014.
- [9] Qimin Yan, Patrick Rinke, Matthias Scheffler, and Chris G Van de Walle. Strain effects in group-III nitrides : Deformation potentials for AlN, GaN, and InN. *Applied Physics Letters*, 95(12) :121111, 2009.
- [10] H Morkoc, S Strite, GB Gao, ME Lin, B Sverdlov, and M Burns. Large-band-gap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semiconductor device technologies. *Journal of Applied Physics*, 76(3) :1363–1398, 1994.
- [11] JF Nye. *Propriétés physiques des cristaux*. Dunod, Paris, 1961.
- [12] T Hanada. Basic properties of ZnO, GaN, and related materials. In *Oxide and Nitride Semiconductors*, pages 1–19. Springer, 2009.
- [13] M Levinstein, S Rumyantsev, and M Shur. Handbook series on semiconductor parameters, vol. 1, 2 World Scientific. *London,(1996, 1999)*, 1999.
- [14] Bijay Kumar Sahoo. Effect of piezoelectric polarization on phonon group velocity in nitride wurtzites. *Journal of Materials Science*, 47(6) :2624–2629, 2012.
- [15] E. Feltn. *Hétéro-épitaxie de Nitrure de Gallium sur substrat de silicium (111) et applications*. PhD thesis, UNIVERSITE DE NICE SOPHIA-ANTIPOLIS, 2003.
- [16] KG Lyon, GL Salinger, CA Swenson, and GK White. Linear thermal expansion measurements on silicon from 6 to 340 K. *Journal of Applied Physics*, 48(3) :865–868, 1977.

- [17] Hiromichi Watanabe, Naofumi Yamada, and Masahiro Okaji. Linear thermal expansion coefficient of silicon from 293 to 1000 K. *International journal of thermophysics*, 25(1) :221–236, 2004.
- [18] Glen A Slack and SF Bartram. Thermal expansion of some diamondlike crystals. *Journal of Applied Physics*, 46(1) :89–98, 1975.
- [19] S Timoshenko. Analysis of bi-metal thermostats. *Journal of the Optical Society of America*, 11(3) :233–255, 1925.
- [20] A Krost, A Dadgar, G Strassburger, and R Clos. GaN-based epitaxy on silicon : stress measurements. *physica status solidi (a)*, 200(1) :26–35, 2003.
- [21] Yatendra Pal Varshni. Temperature dependence of the energy gap in semiconductors. *Physica*, 34(1) :149–154, 1967.
- [22] Junqiao Wu. When group-III nitrides go infrared : New properties and perspectives. *Journal of Applied Physics*, 106(1) :011101, 2009.
- [23] I Vurgaftman and JR Meyer. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 94(6) :3675–3696, 2003.
- [24] Eli Kapon. Quantum wire lasers. *Proceedings of the IEEE*, 80(3) :398–410, 1992.
- [25] Raphaël Butté and Nicolas Grandjean. Effects of polarization in optoelectronic quantum structures. In *Polarization Effects in Semiconductors*, pages 467–511. Springer, New York, 2008.
- [26] M.Lupatini. Electrical and optical characteristics of single InGaN/GaN quantum well light-emitting diodes with and without bottom superlattice. Master’s thesis, EPFL, 2016.
- [27] I.Sanchez. Characterization of the active medium and optical modes of III-nitride based nanobeam photonic cavities. Master’s thesis, EPFL, 2016.
- [28] Emmanuel Rosencher and Borge Vinter. *Optoelectronics*. Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [29] D. John, G.Steven, N.Joshua, and D.Robert. *Photonic Crystals : Molding the Flow of Light*. Princeton University Press, Princeton, second edition, 2007.
- [30] Jana Jágerská. *Dispersion Properties of Photonic Crystals and Silicon Nanostructures Investigated by Fourier-Space Imaging*. PhD thesis, EPFL, n.4956, 2011.
- [31] Dobri Simeonov. *Synthesis and optical investigation of single polar GaN/AlN quantum dots*. PhD thesis, EPFL, n.4282, 2009.
- [32] J. Gleize. *Dynamique de réseau de nanostructures à base de nitrures d’éléments III à grande bande interdite : effets de l’anisotropie de la structure wurtzite*. PhD thesis, UNIVERSITE DE TOULOUSE PAUL SABATIER, 2001.
- [33] RJ Briggs and AK Ramdas. Piezospectroscopic study of the raman spectrum of cadmium sulfide. *Physical Review B*, 13(12) :5518, 1976.
- [34] M Kuball. Raman spectroscopy of GaN, AlGaIn and AlN for process and growth monitoring/control. *Surface and Interface Analysis*, 31(10) :987–999, 2001.

- [35] V Yu Davydov, NS Averkiev, IN Goncharuk, DK Nelson, IP Nikitina, AS Polkovnikov, AN Smirnov, MA Jacobson, and OK Semchinova. Raman and photoluminescence studies of biaxial strain in GaN epitaxial layers grown on 6H-SiC. *Journal of Applied Physics*, 82(10) :5097–5102, 1997.
- [36] F Demangeot, J Frandon, MA Renucci, Olivier Briot, Bernard Gil, and Roger-Louis Aulombard. Raman determination of the phonon deformation potentials in  $\alpha$ -GaN. *MRS Internet Journal of Nitride Semiconductor Research*, 1 :e23, 1996.
- [37] G Ndong, G Picardi, C Licitra, D Rouchon, J Eymery, and R Ossikovski. Determination of the biaxial stress in strained silicon nano-strips through polarized oblique incidence raman spectroscopy. *Journal of Applied Physics*, 114(16) :164309, 2013.
- [38] Murray W McCutcheon and Marko Lončar. Design of a silicon nitride photonic crystal nanocavity with a quality factor of one million for coupling to a diamond nanocrystal. *Optics express*, 16(23) :19136–19145, 2008.
- [39] S Dhar. *Analytical Mobility Modeling for Strained Silicon-Based Devices*. PhD thesis, Vienna University of Technology, 2007. URL = <http://www.iue.tuwien.ac.at/phd/dhar/node17.html>.



## Calendrier

Semaine(s)	Travail effectué
1 – 2	Lecture de documents et études des spectres de $\mu$ PL avec Python, mesures de la polarisation des modes du nanobeam.
3	Compréhension et mise au point d'un modèle des déformations dans le nanobeam : Contraintes biaxiales et uniaxiales.
4 – 5	Analyse des données Raman sur le GaN.
6 – 7	Déformations sur COMSOL, comparaisons avec les mesures Raman.
8 – 10	Modélisation des électrodes sur COMSOL, conséquences de l'application d'un champ électrique sur le puits quantique et le cristal photonique avec FDTD.
11	Analyse de données Raman sur le silicium et analyse de données sur l'application d'un champ électrique selon $z$ .
12 – 15	Rédaction d'un rapport complet et détaillé pour le laboratoire, 40pages.