

Université Mohamed Khider – Biskra
Faculté des Sciences et de la technologie
Département : Génie électrique
Ref :.....



جامعة محمد خيضر بسكرة
كلية العلوم و التكنولوجيا
قسم: هندسة كهربائية.
المرجع:

Thèse présentée en vue de l'obtention
Du diplôme de
Doctorat en sciences

Spécialité : Electronique

**Etude des propriétés optoélectroniques d'une diode
laser à puits quantique à base du $Mg_xZn_{1-x}Se$**

Présentée par :
Mohamed LAHOUAL

Soutenue publiquement le : 01/03/2017

Devant le jury composé de :

Mr. A. ZERARKA	Professeur	Président	Université de Biskra
Mr. A. ATTAF	Professeur	Rapporteur	Université de Biskra
Mr. A. GUEDDIM	Professeur	Co-Rapporteur	Université de Djelfa
Mr. N. ATTAF	Professeur	Examineur	Université Mentouri Constantine I
Mr. L. GACEM	MCA	Examineur	Université de Djelfa
Mr.S. RAHMANE	Professeur	Examineur	Université de Biskra

REMERCIEMENTS

Au terme de cette humble recherche, qui fut intense et intensifiée,
Je souhaite exprimer ma gratitude à mes directeurs de thèse, Professeur Ahmed
GUEDDIM et Professeur Abdallah ATTAF pour avoir accepté de diriger ce
travail. J'aimerais leur témoigner ma profonde reconnaissance pour leur
disponibilité, leurs qualités pédagogiques et scientifiques. Je voudrais leur
avouer que, sans eux ce travail n'aurait jamais vu le jour.

DEDICACES

A tous ceux que j'aime

ABSTRACT

Invented in the 1960s, semiconductor lasers have had a considerable impact in both the industrial and commercial areas as military. Mastering the development of semiconductor thin films today allows for quantum well diodes covering the emission wavelengths from blue to future readers - High resolution DVD recorders until NIR for optical communications distances. The main advantage of using a short wavelength comes from the possibility of reducing the focus diameter of the laser beam and so to confine him to a small waveguide. The result is a reduction in size and increase in density optical storage systems.

This work is a study of the laser diode strain quantum well ZnSe/Mg_xZn_{1-x}Se which allows emission at 430 nm in the blue region of the electromagnetic spectrum. We used the binary material ZnSe as an active region in the strained quantum well laser diode on an Mg_xZn_{1-x}Se substrate. We calculated the physical properties (structural, electronic, optical and elastic) of Mg_xZn_{1-x}Se material that are indispensable in the calculation of optical gain.

We calculated thereafter the optical gain as a function of the mole fraction, wavelength, the width of the active region and the concentration of charge carriers and that the optimal values of the width of the well. The concentration of charge carriers and the mole fraction have been made to obtain a maximum optical gain for a blue emission. The optical spectrum of the gain is calculated using the Kohn-Luttinger method considering the parabolic model of the conduction band and the subbands coupling between heavy holes and light holes in the conduction band. The influence of the strain on the structural and optical properties, the quantification and transition energies were calculated.

Keywords

Laser, quantum well, physical propriety, strained, optical gain.

RESUME

Inventés dans les années 1960, les lasers à semi-conducteurs ont eu un impact considérable tant dans les domaines industriels et commerciaux que militaires. La maîtrise de l'élaboration des semi-conducteurs en couches minces permet aujourd'hui de réaliser des diodes à puits quantique couvrant des longueurs d'ondes d'émission allant du bleu, pour les futurs lecteurs - enregistreurs DVD à haute résolution jusqu'au proche infrarouge pour les communications optiques longues distances.

Le principal avantage lié à l'utilisation d'une longueur d'onde courte provient de la possibilité de réduire le diamètre de focalisation du faisceau laser et ainsi de pouvoir le confiner dans un petit guide d'onde. Il en résulte une réduction en taille et un accroissement en densité de stockage des systèmes optiques.

Ce travail est une étude de la diode laser à puits quantique contraint $\text{ZnSe}/\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}$ qui permet une émission à 430 nm dans la région du bleu dans le spectre électromagnétique. Nous avons utilisé le matériau binaire ZnSe comme une zone active dans la diode laser à puits quantique contraint sur un substrat $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}$. Nous avons calculé les propriétés physiques (structurales, électroniques, optiques et élastiques) du matériau $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}$ qui sont indispensables dans le calcul du gain optique.

Nous avons calculé par la suite le gain optique en fonction de la fraction molaire, longueur d'onde, la largeur de la zone active et la concentration des porteurs de charge ainsi que les valeurs optimales de la largeur de puits. La concentration des porteurs de charge et la fraction molaire ont été faite afin d'obtenir un gain optique maximale pour une émission dans le bleu. Le spectre optique du gain est calculé en utilisant la méthode de Luttinger-Kohn en considérant le modèle parabolique de la bande de conduction et le couplage des sous bandes entre les trous lourds et les trous légers de la bande de conduction. L'influence de la contrainte sur les propriétés structurales et optiques sur les énergies de quantification et de transition a été prise en considération.

Mots-clés

Laser, puits quantique, propriétés physiques, contrainte, gain optique

ملخص

منذ اختراعه في سنوات الستينات, الليزر المصنوع من المواد النصف ناقلة اثر تأثيرا كبيرا في المجالات الصناعية, التجارية وكذا العسكرية. التحكم في تصنيع أنصاف النواقل سمح اليوم بانجاز صمامات ثنائية ذات البئر الكموني تغطي المجال الضوئي من الأزرق المستعمل في أجهزة التسجيل DVD ذو الكفاءة العالية وحتى ما تحت الحمراء من اجل الاتصالات البصرية للمسافات البعيدة.

الفائدة الأساسية المرتبطة باستعمال أطوال أمواج قصيرة تأتي من إمكانية تقليص قطر التركيز في شعاع الليزر وبالتالي إمكانية حجز الشعاع داخل الموجه الموجي. ونحصل بالتالي على تقليص في الحجم ومضاعفة في التخزين للأنظمة البصرية.

هذا العمل هو دراسة لليزر صمام ثنائي ذو بئر كموني مجهود $ZnSe/Mg_xZn_{1-x}Se$ الذي سيسمح بانبعث في 430 نانومتر أي في مجال الأزرق داخل المجال الكهروضوئي. لقد استعملنا المادة الثنائية $ZnSe$ كمناطق حيوية في الليزر صمام الثنائي ذي البئر الكموني المجهود محاظرة بحاجز مصنوع من $Mg_xZn_{1-x}Se$. لقد حسبنا الخواص الفيزيائية (البنوية, الالكترونية, الضوئية و المطاطية) للمادة $Mg_xZn_{1-x}Se$ المهمين في حساب الربح الضوئي.

حسبنا فيما بعد الربح الضوئي بدلالة الكسر المولي, طول الموجة, عرض المنطقة الحيوية وتركيز حاملي الشحنة وكذا القيم الأفضل لعرض المنطقة الحيوية. تركيز حاملات الشحنة والكسر المولي تم بحيث نحصل على قيمة قصوى للربح الضوئي من اجل انبعث ضوئي ازرق. تم حساب الربح الضوئي بطريقة Luttinger-Kohn باعتبار نموذج القطع المكافئ لشريط النقل اقتران ما تحت الأشرطة بين الثقوب الثقيلة والخفيفة في شريط التكافؤ. تأثير الإجهاد على الخصائص البنوية والضوئية على تكميم مستويات الطاقة والانتقال اخذ بعين الاعتبار.

الكلمات المفتاحية

الليزر, بئر كموني, الخصائص الفيزيائية, الاجهاد, ربح ضوئي.

TABLE DES MATIÈRES

Remerciement	i
Dédicaces	ii
Résumé	iii
Table des matières	vi
Liste des figures	ix
Liste des tableaux	xii
Liste des abréviations et symboles	xiii
Introduction générale	1

Chapitre I Notions fondamentales sur le laser

I.1.	Introduction	5
I.2.	Historique	5
I.3.	L'utilisation du laser	6
I.4.	Les propriétés d'absorption et d'émission de lumière	7
I.5.	Caractéristique de la lumière laser	7
I.5.1.	Unidirectionnel	8
I.5.2.	Monochromatique	8
I.5.3.	Cohérente	8
I.6.	Principes de base du laser	8
I.6.1.	Le milieu amplificateur	8
I.6.2.	Le pompage	9
I.6.3.	La cavité	9
I.7.	Différents types de laser	10
I.7.1.	Lasers à gaz	10
I.7.2.	Les lasers à gaz rare	12
I.7.3.	Les lasers à vapeur de métal	13
I.7.4.	Le laser moléculaire à CO ₂	13
I.7.5.	Le laser chimique	14
I.7.6.	Laser solide	15
I.8.	Phénomène d'émission et d'absorption dans les semiconducteurs	15
I.8.1.	L'absorption	16
I.8.2.	L'émission spontanée	17
I.8.3.	L'émission stimulée	18
I.9.	Laser à semiconducteur	18
I.9.1.	Diode laser à homojonction	18
I.9.2.	Diode laser à double hétérojonction	20
I.9.3.	Laser à puits quantique	22
I.9.3.1.	Puits quantiques de type I	22
I.9.3.2.	Puits quantiques de type II	23
I.9.3.3.	Puits quantiques de type III	23
I.10.	Conclusion	25
	Références	26

Chapitre II Propriétés physique du Mg_xZn_{1-x}Se

II.1.	Introduction	30
II.2.	Structure de bande des semiconducteurs	30

II.2.1.	Structures cristallines	30
II.2.2.	Bandes d'énergie	33
II.3.	Les semiconducteurs II-VI	34
II.3.1.	Structure cristalline du ZnSe	34
II.3.2.	Structure de bande du semiconducteur ZnSe	35
II.3.3.	Les alliages	37
II.4.	Propriétés électroniques et optiques du matériau ternaire $Zn_{1-x}Mg_xSe$	38
II.4.1.	Gaps d'énergie	38
II.4.2.	Largeur de la bande de valence	40
II.4.3.	Gap antisymétrique	41
II.4.4.	Masses effectives des porteurs	42
II.4.5.	Indice de réfraction	45
II.4.6.	Constantes diélectriques	46
II.5.	Propriétés élastiques du matériau ternaire $Zn_{1-x}Mg_xSe$	47
II.5.1.	Constantes élastiques	48
II.5.2.	Module de compression	48
II.5.3.	Module de cisaillement	49
II.5.4.	Facteur d'anisotropie	50
II.5.5.	Module d'Young	50
II.5.6.	Coefficient de Poisson	51
II.6.	Conclusion	53
	Références	54

Chapitre III Etude quantique du gain optique

III.1.	Introduction	56
III.2.	Puits quantique	56
III.2.1.	Introduction	56
III.2.1.1.	Paramètres de maille	57
III.2.1.2.	Energie de la bande interdite	58
III.2.1.3.	l'affinité électronique	59
III.2.2.	Fonctions d'ondes et niveaux d'énergie	60
III.2.3.	Discontinuité des bandes d'énergies	63
III.2.4.	Notion de contrainte	64
III.2.5.	Densité d'états	66
III.2.6.	Détermination des pseudo-niveaux de Fermi	66
III.2.7.	Transitions optiques	67
III.3.	États électroniques dans le puits quantique	70
III.3.1.	Théorie k.p	70
III.3.1.1.	Hamiltonien des électrons dans la bande de conduction	71
III.3.1.2.	Hamiltonien des trous dans la bande de valence : description matricielle	71
III.3.2.	Le modèle de Luttinger-Kohn	71
III.3.3.	L'Hamiltonien de Bir-Pikus	72
III.4.	Le gain optique	76
III.5.	Conclusion	81
	Références	82

Chapitre IV Etude de la structure $ZnSe/Mg_{0.08}Zn_{0.92}Se$ émettant à 0.430 μ m

V.1.	Introduction	84
------	--------------	----

V.2.	Bande interdite	85
V.2.1.	L'effet de la température sur le gap	85
V.3.	L'effet de la contrainte sur la structure de bandes	86
V.3.1.	Energie de déformation	88
V.3.2.	Energie de transition	92
V.4.	Etude de la discontinuité des bandes	93
V.4.1.	Discontinuités des bandes de conduction	93
V.4.2.	Discontinuités des bandes de valence	95
V.4.3.	Gaps énergétiques relaxé et contraints	98
V.5.	Gain optique	98
V.5.1.	Evolution de gain maximum en fonction de l'injection	102
V.5.2.	Dépendance de la polarisation	102
V.6.	Courant de seuil	103
V.6.1.	Les origines du courant de seuil	104
V.6.2.	Relation courant de seuil et température	108
V.7.	Puissance émise	109
V.8.	Conclusion	111
	References	112
	Conclusion générale	114

LISTE DES FIGURES

Figure 1-1.	Illustration des processus d'absorption, d'émissions spontanée et stimulée.	7
Figure 1.2.	Cavité résonante	9
Figure 1.3.	Représentation d'un laser à gaz et de son tube a décharge	11
Figure 1.4.	Schéma des niveaux électroniques des atomes de Ne et d'He contribuant à l'établissement de l'effet laser	12
Figure 1.5.	Transitions électroniques entre les extrema des bandes de valence et de conduction. a) Semiconducteur à gap direct, les transitions sont verticales et par suite radiatives. b) Semiconducteur à gap indirect, les transitions sont obliques et non radiatives au premier ordre. c) Absorption directe de photons dans un semiconducteur à gap indirect	16
Figure 1.6.	Population des bandes d'énergie.	19
Figure 1.7.	Diagramme énergétique	20
Figure 1.8.	Diagramme d'énergie et profil de l'indice de réfraction d'une double hétérojonction	21
Figure 1.9.	Courbe de répartition du gain en énergie $g(E)$ et courbe du maximum du gain en fonction de la quantité de porteurs $g(n)$ pour a) une double hétérostructure et pour b) un structure à puits quantique	22
Figure 1.10.	Divers types d'hétérojonctions définis par la position relative des Bandes des semi-conducteurs A et B ; le type I est le plus utilise.	23
Figure 1.11.	Les niveaux quantifiés dans un puits quantique	24
Figure 2.1.	Réseau cristallin et son réseau réciproque	31
Figure 2.2.	Les fonctions de Bloch modulées par une progressive	32
Figure 2.3.	La zone de Brillouin pour une structure zinc-blende	33
Figure 2.4	hybridation chimique et bandes d'énergie dans les solides	34
Figure 2.5.	Maille zinc-blende d'un semiconducteur II-VI binaire. Elle se compose de deux sous réseaux cubiques à faces centrées, décalés d'un quart de la grande diagonale du cube et occupés l'un par l'anion et l'autre par le cation.	35
Figure 2.6.	Structure de bande du ZnSe cubique	37
Figure 2.7.	Variation des gaps directs $E_{\Gamma-\Gamma}$ et indirects $E_{\Gamma-X}$ et $E_{\Gamma-L}$ en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$	39
Figure 2.8.	Variation des gaps E_{X-X} et E_{L-L} en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$	40
Figure 2.9.	Variation de la largeur de la bande de valence en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.	41
Figure 2.10.	Variation du gap antisymétrique en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.	42
Figure 2.11.	Variation de la masse effective des électrons (en unité de m_0) en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$ aux points de haute symétrie Γ , X et L.	43-44
Figure 2.12.	Variation de la masse effective des trous lourds (en unité de m_0) en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.	44
Figure 2.13.	Variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.	45

Figure 2.14.	Variation de la constante diélectrique statique et de haute fréquence en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.	47
Figure 2.15.	Variation constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$	48
Figure 2.16.	Module de compression B_s en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$	49
Figure 2.17.	Variation du module de cisaillement C en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$	49
Figure 2.18.	Variation facteur d'anisotropie A en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$	50
Figure 2.19.	Variation du module d'Young Y_0 en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$	51
Figure 2.20.	Variation du coefficient de Poisson ν en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$	51
Figure 3.1.	(a) : Puits quantique carré de largeur L_z et de hauteur V_0 ; (b) : Couche d'un matériau semi-conducteur A possédant un gap inférieur à celui du matériau semi-conducteur B.	57
Figure 3.2.	Diagramme présentant les propriétés de bande interdite (en ordonnée) et paramètre de maille (en abscisse) de différentes famille de semiconducteurs : les séléniures, les tellurures et les arséniures. La ligne de pointillés verticaux indique le paramètre de maille moyen des structures présentées dans cette thèse.	58
Figure 3.3.	Figure extraite de "Universal alignment of hydrogen levels in semiconductors, insulators and solutions", Van de Walle et Neugebauer, illustrant les alignements de bandes calculés pour quelques matériaux des colonnes IV, III-V et II-VI de la classification périodique notamment.	59
Figure 3.4.	Solutions graphiques des équations 1.9 et 1.10. Les solutions paires et impaires correspondent à l'intersection de la droite de pente $k_0^{-1} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}}$ avec les fonctions tangente (ligne continue) et cotangente (ligne discontinue) respectivement.	61
Figure 3.5.	(a) : Mini-bandes d'énergie créées par le confinement à deux dimensions ; (b) : Densité d'états à deux dimensions (-) et à trois dimensions (- -)	62
Figure 3.6.	Les discontinuités des bandes de conduction et de valence	64
Figure 3.7.	Représentation de l'adaptation du paramètre de maille de la couche épitaxie sur un substrat	65
Figure 3.8.	Transition verticales dans l'espace de vecteur \vec{k} de la bande conduction vers la bande de valence	68
Figure 4.1.	Variation du gap en fonction de la température	86
Figure 4.2.	Structure de bande pour un semi-conducteur cubique autour de $K = 0$, a) compression biaxiale b) non contraint c) tension biaxiale	87
Figure 4.3.	La variation de la structure énergétique du puits suivant la concentration x	90
Figure 4.4.	Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la composition du magnésium	92
Figure 4.5.	Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits quantique	93

Figure 4.6.	Discontinuités des bandes de conduction en fonction de la concentration de magnésium dans le substrat (y) et dans la couche supérieure (x) (a. sous forme de contour, b. en représentation tridimensionnelle).	94-95
Figure 4.7.	Discontinuités des bandes de valence des trous légers en fonction de la composition de magnésium dans le substrat (y) et dans la couche supérieure (x) (a. sous forme de contour, b. en représentation tridimensionnelle).	96
Figure 4.8.	Discontinuités des bandes de valence des trous lourds en fonction de la composition de magnésium dans le substrat (y) et dans la couche supérieure (x) (a. sous forme de contour, b. en représentation tridimensionnelle).	97
Figure 4.9.	Gaps énergétiques du matériau $Zn_{1-x}Mg_xSe$ relaxé puis contraint $Zn_{1-x}Mg_xSe/Zn_{1-y}Mg_ySe$ en fonction de la concentration de magnésium.	98
Figure 4.10.	Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition $x=0.08$ et une largeur de puits quantique de 7 nm	99
Figure 4.11.	Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition $x=0.08$ et une largeur de puits quantique de 8 nm	99
Figure 4.12.	Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition $x=0.08$ et une largeur de puits quantique de 9 nm	100
Figure 4.13.	Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition $x=0.08$ et une largeur de puits quantique de 10 nm	100
Figure 4.14.	Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition $x=0.08$ et une largeur de puits quantique de 12 nm	101
Figure 4.15.	La variation du gain optique pour plusieurs valeurs de la largeur du puits quantique	101
Figure 4.16.	Variation du gain maximum en fonction de l'injection N	102
Figure 4.17.	TE et TM mode du gain optique en fonction de la longueur d'onde	103
Figure 4.18.	Description des différentes recombinaisons non radiatives Auger bande à bande	108
Figure 4.19.	Courant de seuil en fonction de la température	109
Figure 4.20.	Evolution de la puissance optique en fonction du courant d'injection	110

LISTE DES TABLEAUX

Tableau. 1	paramètres physiques du matériau $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{Se}$ pour $x=0.08$	52
Tableau. 2	les paramètres physiques des matériaux binaires ZnSe et MgSe	85
Tableau. 3	Les paramètres de Passler utilisés dans le travail	86
Tableau. 4	Données nécessaires pour le calcul des discontinuités des bandes de conduction et de valence au niveau de l'hétérointerface $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Se}/\text{Zn}_{1-y}\text{Mg}_y\text{Se}$	94

LISTE D'ABBREVIATIONS

h	Constant de Planck
α_i	Coefficient d'absorption du milieu
R_1	Réfectivité de la première face
R_2	Réfectivité de la deuxième face
λ	Longueur d'onde
L	Longueur de la cavité
n	Indice de réfraction
F_c	Pseudo-niveau de fermi dans la bande de conduction
F_v	Pseudo-niveau de fermi dans la bande de valence
c	La vitesse de la lumière
r_{12}	Le taux d'absorption
$r_{21}(sp)$	Le taux d'émission spontanée
r_{21}	Le taux d'émission stimulée
m^*	Masse effective
E_g	La bande interdite
α_p	La polarité
α_c	La covalencité
χ	L'affinité électronique
L_z	La largeur du puits quantique
$m_{xx,w}^*$	La masse effective de la particule dans le puits
$m_{xx,b}^*$	La masse effective de la particule dans la barrière
E_{cn}	Nième niveau dans la bande de conduction
E_{vn}	Nième niveau dans la bande de valence
m_h	Masses effectives des trous
m_e	Masses effectives des électrons
k_B	Constante de Boltzman
ε_∞	La constante diélectrique de haute fréquence
ε_0	La constante diélectrique statique
B_s	Module de compression
Y_0	Module d'Young
E_g	La bande interdite
a_0	Le paramètre de la maille
$E_{tr(e-hh)}$	Energie de transition (électron – trou lourd)
$E_{tr(e-lh)}$	Energie de transition (électron – trou léger)
Δ_0	Le splitting spin-orbite
b	Le potentiel de déformation de cisaillement
ΔE_c	La discontinuité des bandes de conduction
ΔE_v	La discontinuité des bandes de valence
$E_{v,av}$	L'énergie moyenne des bandes de valence
a_v	Le potentiel de déformation hydrostatique pour les bandes de valence
a_c	le potentiel de déformation hydrostatique pour les bandes de conduction
j_s	Courant de seuil

τ_p	La durée de vie moyenne des photons dans la cavité
E_a	L'énergie d'activation de l'effet Auger
T_0	La température caractéristique
$G(E)$	Gain optique
α_i	Les pertes
p	La puissance optique
N_s	Densité de porteur au seuil
T	Température
η	l'état de spin de l'électron
V	Le volume de la cavité
e	La charge élémentaire
BC	Bande de conduction
BV	Bande de valence
E_{glh}	Gap des trous légers
E_{ghh}	Gap des trous lourds
ε_{\perp}	Déformation dans le plan de croissance
$\varepsilon_{//}$	Déformation dans la direction croissance
C_{ij}	Tenseur d'élasticité
δ_{ij}	Tenseur de contrainte
E_g	Energie de gap
a_s	Paramètre de maille du substrat
a_e	Paramètre de maille de la couche active
E_n	L'énergie de quantification du niveau
x	La composition de l'alliage

**INTRODUCTION
GENERALE**

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Inventés dans les années 1960, les lasers à semiconducteurs ont eu un impact considérable tant dans les domaines industriels et commerciaux que militaires [1-4]. La maîtrise de l'élaboration des semi-conducteurs en couches minces permet aujourd'hui de réaliser des diodes lasers couvrant des longueurs d'ondes d'émission allant du bleu, pour les lecteurs - enregistreurs DVD à haute résolution jusqu'au proche infrarouge pour les communications optiques longues distances [5].

Le principal avantage lié à l'utilisation d'une longueur d'onde courte provient de la possibilité de réduire le diamètre de focalisation du faisceau laser et ainsi de pouvoir le confiner dans un petit guide d'onde [6]. Il en résulte une réduction en taille et un accroissement en densité de stockage des systèmes optiques.

La réalisation de composants émettant dans le violet présente un grand intérêt sur le plan technologique (notamment pour le stockage de l'information). Parmi les semiconducteurs II-VI, ZnSe a été adopté comme constituant de base de ces composants.

Des progrès très rapides ont été enregistrés ces dernières années en ce qui concerne les semiconducteurs II-VI à base de séléniure de zinc (ZnSe) avec comme étapes marquantes l'obtention de niveaux de dopage p élevés dans ZnSe et surtout la réalisation en juillet 1991 de la première diode laser, émettant dans le bleu-vert et fonctionnant à 80 Kelvin, par les chercheurs de la société américaine 3M à Minneapolis (Minnesota) [7]. Ces résultats ont été depuis reproduits et améliorés par différentes équipes aux Etats-Unis, au Japon et en Europe [8]. Fin 1994, dans le laboratoire de recherche de la société japonaise Sony, un laser a fonctionné pendant une heure à la température ambiante (25°Celsius soit environ 300 Kelvin) en mode continu. Ces succès ont établi les semiconducteurs II-VI comme les meilleurs matériaux actuels dans la recherche de lasers bleus opérant à 300 Kelvin. [9]. Une forte activité de recherche se développa sur cette famille d'hétérostructure telle que ZnCdSe/ZnMgSe, ZnCdSe/ZnCdMgSe, MgSe/BeZnCdSe et le ZnCdSe/ZnSe épitaxie en quasi-accord de maille sur un substrat InP [10]. Le dopage p du ZnSe est réalisé avec l'azote et le dopage n avec le chlore [11]. Ce système de matériaux présente des discontinuités de

bandes de conduction $\Delta E_c = 180$ meV et de valence $\Delta E_v = 60$ meV [12], une densité de courant inférieure à 200 A/cm^2 a été cependant observée pour le matériau CdZnSe [13] et une durée de vie des porteurs supérieure à 1000h [14].

Ce travail est une étude de la diode laser à puits quantique contraint Zn_{1-y}Mg_ySe / Zn_{1-x}Mg_xSe avec $y = 0$ qui permet une émission à 430 nm dans la région du violet dans le spectre électromagnétique. Dans un premier temps, nous nous proposons de calculer, moyennant la méthode empirique du pseudopotentiel, les propriétés électroniques et optiques du Zn_{1-x}Mg_xSe dans sa phase zinc-blende et pour des compositions x de magnésium allant de 0 à 1. Il est à noter ici, que notre matériau présente un écart par rapport à la loi de Vegard en ce qui concerne son paramètre de maille. L'effet de ceci est pris en considération dans nos calculs. Les propriétés investies sont : les gaps d'énergie directs et indirects, la largeur de la bande de valence, le gap antisymétrique, les masses effectives des électrons et des trous aux points de haute symétrie Γ , X et L de la première zone de Brillouin. Ont été également examinés l'indice de réfraction, le constant diélectrique statique ainsi que la constante diélectrique de haute fréquence.

Nous avons utilisé par la suite le matériau ternaire Zn_{1-x}Mg_xSe comme une zone active dans la diode laser à puits quantique contraint sur un substrat ZnSe. Nous avons calculé le gain optique en fonction de la fraction molaire, longueur d'onde, la largeur de la zone active et la concentration des porteurs de charge ainsi que les valeurs optimales de la largeur de puits, la concentration des porteurs de charge et la fraction molaire ont été faite afin d'obtenir un gain optique maximal pour une émission dans le violet. Le spectre optique du gain est calculé en utilisant la méthode de Luttinger-Kohn en considérant le modèle parabolique de la bande de conduction et le couplage des sous bandes entre les trous lourds et les trous légers de la bande de conduction [15]. L'influence de la contrainte sur les propriétés structurales et optiques, les énergies de quantification et de transition ont été calculées.

Le plan de cette thèse est composé de trois chapitres :

On présente dans le premier chapitre le principe physique de l'effet laser, ainsi que les différents types du laser.

Le deuxième chapitre est consacré aux calculs des propriétés physiques (structurale, électronique, optique et élastique) du matériau Zn_{1-x}Mg_xSe qui est à la base de notre système à puits quantique ZnSe / Zn_{1-x}Mg_xSe sachant que les propriétés de ce matériau ne sont pas toutes connues actuellement.

Le troisième chapitre présente le modèle physique utilisé dans le calcul du gain et comporte un rappel sur les états électroniques dans les semiconducteurs et notamment dans les structures à puits quantiques.

Enfin, dans le quatrième chapitre, nous avons fait le calcul de la structure laser $\text{ZnSe} / \text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Se}$ à puits quantiques contraints pour une émission à 430 nm pour des applications tel que le stockage de l'information. La contrainte et son influence sur les propriétés optiques dans les structures laser à semi conducteurs a été prise en compte. La concentration en magnésium est ajustée de façon à obtenir une longueur d'onde de 430 nm. Cette étude traite l'influence de la contrainte sur le gap, l'énergie de transition ainsi que le gain optique et la longueur d'onde correspondante. Un bon accord avec les résultats disponibles est observé. Les résultats obtenus montrent la fonctionnalité de notre système vis-à-vis du gain optique et de la fréquence d'émission.

Références

- [1] Y. Arakawa, "Theory of gain, modulation response, and spectral linewidth in AlGaAs quantum well lasers", IEEE, Journal of Quantum Electronics, 21. 1666-1674 (1985)
- [2] S. L. Chuang, "Physics of photonic devices", Wiley&Sons, Inc., New York (2009)
- [3] N. Holonyak, "Quantum-well heterostructure lasers". IEEE J. Quantum Electron, 16, 170-186 (1980)
- [4] I. Sukhoivanov, "Nonlinear gain model and its application for numerical investigation of semiconductor lasers", Microwave & Optical Technol. Lett. 21, 474 - 477 (1999)
- [5] P. S. Zory, Jr (ed.), Quantum Well Lasers, Academic Press, New York (1993).
- [6] W. P. Risk, T. R. Gosnell, A. V. Nurmikko, "Compact blue-green lasers", Cambridge University Press 2003
- [7] M. C. Tamargo, W. Lin, S. P. Guo, Y. Luo, Y. Guo, and Y. C. Chen, "Full-color light emitting diodes from ZnCdMgSe/ZnCdSe quantum well structures grown on InP substrates", J. Cryst. Growth, vol. 214/215, pp. 1058–1063, (2000)
- [8] L. Zeng, B. X. Yang, A. Cavus, W. Lin, Y. Y. Guo, M. C. Tamargo, Y. Guo, and Y. C. Chen, "Red–green–blue photopumped lasing from ZnCdMgSe/ZnCdSe quantum well laser structures grown on InP", Appl. Phys. Lett., vol. 72, pp. 3136–3138, (1998)
- [9] L U You-Ming, SHEN De-Zhen, LIU Yi-Chun, LI Bing-Hui, L. Hong-Wei, Z. Ji-Ying, F. Xi-Wu, "Optical Properties of ZnCdSe/ZnMgSe Multiple Quantum Wells Grown by Molecular Beam Epitaxy", chin.phys.lett. vol. 19, no. 8 (2002)
- [10] A. Cavus, L. Zeng, M. C. Tamargo, N. Bambha, F. Semendy, and A. Gary, "ZnCdSe/ZnCdMgSe quantum wells on InP substrates for visible emitters", Appl. Phys. Lett., vol. 68, pp. 3446–3448, (1996)
- [11] J.S. Song, J.H. Chang, H.Y. Lee, D.C. Oh, J.J. Kim, H. Makino, M.W. Cho, T. Yao, "Control and determination of ZnMgBeSe quaternary alloy composition", Journal of Crystal Growth 258 (2003) 368–373
- [12] R.A. Taylor, R.A. Adams, J.F. Ryan, R.M. Park, "Exciton recombination dynamics in ZnCdSe/ZnSe quantum wells", Journal of Crystal Growth 159 822-825, 1996.
- [13] Jen Y. Jen, Takeharu Tsutsumi, Izuru Souma, Yasuo Oka, James R. Anderson, Malgorzata Gorska, "Stimulated blue emission processes in Zn_{1-x}Cd_xSe/ZnSe multi-quantum wells", Applied Surface Science 92 (1996) 547-551.
- [14] J. J. Davies, L. C. Smith, and D. Wolverson, A. Gust, C. Kruse, and D. Hommel, V. P. Kochereshko, "Motion-enhanced magnetic moments of excitons in ZnSe", Physical review B 81, 085208 2010.
- [15] J. Luttinger, "Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields". Phys, Rev. 97, 869–883, 1955

Chapitre I
NOTIONS FONDAMENTALES
SUR LE LASER

Chapitre I

NOTIONS FONDAMENTALES SUR LE LASER

I.1. Introduction

Peu d'innovations du siècle passé ont autant changé notre vie quotidienne que le laser. Aujourd'hui, le laser (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation) est entré dans le langage courant puisque, grâce à ses caractéristiques particulières, le laser est exploité dans de très nombreuses applications [1-6].

L'un des avantages décisifs des lasers est la possibilité d'obtention d'émission de rayonnements à la fois très directifs, monochromatiques et cohérente : cela permet d'une part d'optimiser un éclairage de cible ou une concentration d'énergie, même sur de longues distances, et d'autre part de simplifier les optiques associées et de filtrer plus efficacement les rayonnements parasites [7].

Après un rappel des principes de base du laser, des phénomènes physiques contribuant à l'émission de lumière laser, ainsi que les caractéristiques de cette lumière, nous présenterons les différents types de lasers : lasers à gaz CO₂, lasers solides pompés par diodes laser, et s'achève par les lasers à semiconducteur notamment les lasers à puits quantique.

I.2. Historique

En 1917, A. Einstein établit le concept d'émission stimulée en analysant un système atomique d'une population d'atomes à 2 niveaux d'énergie, le rayonnement électromagnétique ne peut interagir avec ce système que si son énergie individuelle des photons qui le composent $h\nu$ est égale à la différence d'énergie entre les deux états permis du milieu. La statistique de Boltzmann définit la répartition des atomes entre les deux niveaux, et la loi de Planck fournit la densité spectrale du rayonnement électromagnétique du corps noir constitué par cette population d'atomes. Les phénomènes d'absorption et d'émission spontanée des photons d'énergie $h\nu$ sont pris en compte par Einstein, qui admet qu'à l'équilibre thermodynamique le nombre, par unité de temps, de transitions du niveau n vers le niveau m est égal à celui de m vers n . Dans ces hypothèses, Einstein démontre que la loi de Planck entraîne la nécessité du concept d'émission stimulée [8].

En 1940, V.A.Fabrikant réalise la première inversion de population dans ses mesures d'absorption de lumière entre deux états excités d'espèces gazeuses, au cours desquelles il parvient à désexciter rapidement le niveau le moins énergétique [9]. Dans les années 1952-1954 le phénomène d'amplification stimulée est observé simultanément par les deux équipes de Townes, Gordon et Zeiger (États-Unis) et de Basov et Prokhorov (URSS) [10]. En 1954, le jet moléculaire en sortie d'un four dans lequel se trouvent des molécules d'ammoniac (NH_3) excitées par collision, passe entre deux électrodes qui effectuent le tri des espèces excitées. Ces dernières sont envoyées dans une cavité résonnante et les expérimentateurs observent une émission dans un guide d'onde à $2,3 \times 10^{10}$ Hz, le Maser (microwave amplifier by stimulated emission of radiation) est ainsi inventé [11]. Cela conduit, en 1958, Townes et Schawlow à élaborer le concept du laser (light amplification by stimulated emission of radiation), à partir d'un milieu actif pompé optiquement placé dans un interféromètre de Fabry-Pérot, qui constitue la cavité résonnante [12].

En 1960, le physicien américain Théodore Maiman obtint pour la première fois une émission laser au moyen d'un cristal de rubis [13]. Un an plus tard Ali Javan mit au point un laser au gaz (hélium et néon) [14]. Dans les années 60, les études portent largement sur le pompage optique, en particulier grâce à N. Blombergen et A. Kastler [15]. La faisabilité d'une émission laser au sein d'un semi-conducteur fut démontrée expérimentalement dans l'arséniure de gallium (GaAs) en 1962 par R.N. Hall et al [16]. En 1966, Peter Sorokin construit le premier laser à colorant [17].

I.3. L'utilisation du laser

Le rayonnement laser est exploité dans de très nombreuses applications [18-23]: dans nos salons et nos bureaux, il permet la lecture optique des supports CD et DVD qui présentent des capacités élevées de données; dans les centres médicaux, le laser est utilisé pour l'ablation de tissus, la rectification de défauts visuels tels que la myopie, le durcissement des amalgames dentaires, etc.; dans l'industrie, il permet le découpage de métaux, le nettoyage non destructif et non chimique de surfaces; le rayonnement laser est également utilisé comme outil d'alignement pour effectuer des mesures précises sur de grandes distances sur les chantiers de construction, pour la recherche spatiale ou fondamentale; au niveau militaire, les lasers sont développés pour le guidage des missiles, voire comme arme directe [24]. Dans les laboratoires de recherche fondamentale, le laser est utilisé pour l'analyse et la modification des molécules et des matériaux. Il est également utilisé pour capturer des atomes dans un espace confiné afin de comprendre les propriétés fondamentales de la matière [25]. Finalement, des lasers de plus

en plus puissants sont utilisés pour faciliter les processus de fission, voire de fusion nucléaires [26].

I.4. Les propriétés d'absorption et d'émission de lumière

Au début du vingtième siècle, on connaissait déjà les processus d'absorption et d'émission spontanée mais on ignorait l'existence de l'émission stimulée [27]. Einstein a montré que, pour que la loi de Planck soit valide, il fallait, en plus de l'émission spontanée, postuler l'existence de l'émission stimulée [28]. Ces trois processus sont illustrés à la figure I-1 et définis comme suit :

Absorption : un photon d'énergie $h\nu$ est absorbé par un atome initialement dans un niveau 1 , le faisant passer à un niveau excité 2 ; la différence d'énergie entre les deux niveaux, $E_2 - E_1$, est $h\nu$.

Emission spontanée : un photon d'énergie $h\nu$, qui correspond à la différence d'énergie entre deux niveaux 1 et 2 d'un atome, $h\nu = E_2 - E_1$, est émis par un atome initialement dans un niveau excité 2 , le faisant passer au niveau 1 sans qu'il y ait d'interaction avec un photon).

Emission stimulée : processus par lequel un photon d'énergie $h\nu$ entre en interaction avec un atome qui est initialement dans l'état excité 2 ; l'atome se désexcite en émettant un second photon. Ce dernier est identique au premier, il a la même phase, la même direction et la même polarisation que le photon incident.

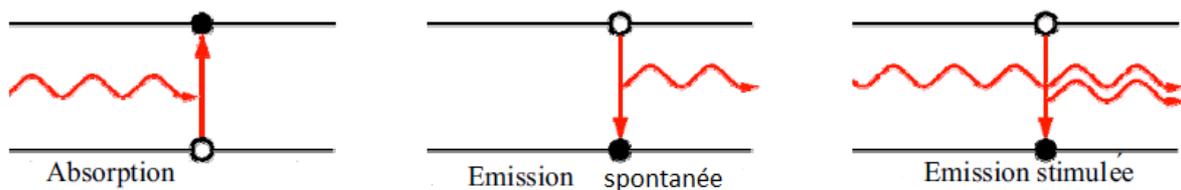


Figure 1.1. Illustration des processus d'absorption, d'émissions spontanée et stimulée.

I.5. Caractéristique de la lumière laser

L'émission stimulée est à la base de l'effet laser, les lasers produisent une lumière domptée bien différente de la lumière ordinaire produite par les leds (diode électroluminescente), soleil ou les ampoules. Cette lumière possède différentes caractéristiques [29,30]:

I.5.1. Unidirectionnel

Le faisceau se déplace dans une seule et même direction. Cependant, il peut y avoir une divergence d'un degré d'arc provoquée par la diffraction lorsque le faisceau se propage dans un milieu, ainsi, le diamètre du faisceau peut augmenter jusqu'à un mm par mètre parcouru.

I.5.2. Monochromatique

Contrairement à la lumière émise par le soleil ou par une ampoule à incandescence qui est poly chromatique (constituée de plusieurs longueurs d'onde), la lumière produite par un laser n'est composée que d'une seule raie lumineuse. Elle contient très peu de longueurs d'onde d'opération du laser.

I.5.3. Cohérente

La lumière produite par un laser ne comporte pas d'interférences : les ondes lumineuses sont toutes émises de la même manière et en même temps : elles sont en phases. Ainsi, chaque photon qui la compose oscille en même temps de la même manière. La directivité de la lumière laser est d'ailleurs une conséquence de sa cohérence.

I.6. Principes de base du laser

Le laser est un oscillateur optique basé sur l'amplification d'un signal lumineux, réalisée par l'émission stimulée de l'atome du milieu actif [31]. Le laser est capable de créer la lumière en micro onde, en infrarouge, dans l'ultraviolet et même dans les rayons x.

Le Fonctionnement d'un laser nécessite la coexistence de trois éléments essentiels [32]:

1. Un milieu amplificateur qui est formé d'électrons, d'atomes, molécules, ions ou cristaux de semi- conducteurs...
2. Le processus de pompage pour exciter ces électrons (atomes molécules, etc....).
3. Une cavité optique ou résonateur qui permet le passage du faisceau lumineux plusieurs fois par le milieu amplificateur.

I.6.1. Le milieu amplificateur

C'est un système actif qui est un siège du gain optique qui compense les pertes par absorption, diffusion, réflexion, diffraction,..., il peut être constitué d'atomes, de molécules, d'ions ou d'électrons. Ce milieu possède une structure appropriée de niveaux d'énergie discrets ayant la capacité de stocker l'énergie reçue de l'extérieur. Pour qu'il y ait amplification du rayonnement par traversée du milieu atomique, il faut que le nombre

d'émissions stimulées par unité de temps soit supérieur à celui des absorptions. Il doit donc y avoir davantage d'atomes dans le niveau excité E_2 que dans le niveau fondamental E_1 : $N_2 > N_1$; c'est l'inversion de population.

I.6.2. Le pompage

Pour qu'il y ait émission stimulée, il faut que le niveau excité soit plus peuplé que le niveau fondamental, on dit qu'on a une inversion de population. L'inversion de population peut être obtenue par un dispositif dit « de pompage »: Le système de pompage peut être de différente nature: pompage optique (lampes flash, lampes à arc continues ou lampes à filament de tungstène, diodes laser ou autres lasers ...), électrique (décharges dans des tubes de gaz, courant électrique dans des semi-conducteurs ...) ou même chimique. Le pompage permet d'amener une majorité des particules à l'état excité (Excitation optique, Décharge électrique, ...). Il y a ensuite accumulation d'électrons sur le niveau métastable, c'est l'inversion de population. Celle-ci favorise l'émission stimulée, chaque nature de milieu amplificateur associée par une méthode de pompage (optique ou électrique ou chimique).

I.6.3. La cavité

Le milieu amplificateur est placé entre deux miroirs plans parallèles distants de L . L'un des deux est partiellement transparent pour permettre à une partie de l'énergie du faisceau de sortir. L'ensemble n'est autre qu'un interféromètre de Pérot et Fabry ou une onde se propageant suivant la direction x ne pourra avoir une amplitude notable que si elle interfère constructivement avec elle-même à chaque aller et retour.

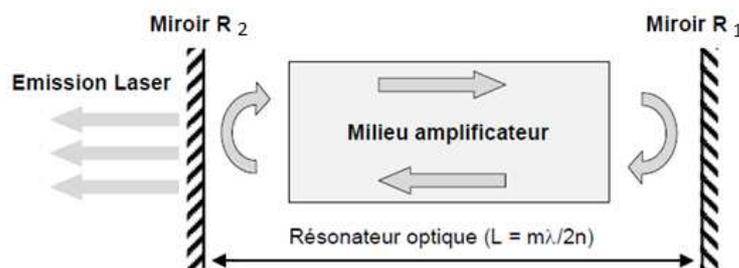


Figure 1.2. Cavité résonante

Le gain au seuil est donné par la relation suivant:

$$g_s = \alpha_i + \frac{1}{2L} \ln \left(\frac{1}{R_1 R_2} \right) \quad (1.1)$$

α_i : Coefficient d'absorption du milieu

L : longueur de la cavité.

R_1 et R_2 : réflectivités de faces.

D'autre part, pour qu'il y ait des interférences constructives, il faut que la longueur de la cavité soit égale à un nombre entier de demi longueur d'onde de la lumière
Figure I.2 on a donc

$$L = m \cdot \frac{\lambda}{2n} \quad (1.2)$$

m : l'ordre des modes qui peuvent exister dans la cavité

n : indice de réfraction

I.7. Différents types de laser

I.7.1. Lasers à gaz

Dans les lasers à gaz et, en particulier, dans le laser He-Ne, ceci est obtenu dans un tube à décharge, qui consiste essentiellement en un tube scellé contenant le mélange gazeux [33]. Le schéma d'un montage typique est présenté à la Figure I.3. Les composants principaux sont indiqués, tels que le tube, la cathode, l'anode et les miroirs. L'énergie nécessaire au maintien de l'inversion de population provient donc d'une décharge électrique dans le gaz, qui est obtenue en appliquant une haute tension électrique entre l'anode et la cathode.

L'émission laser est ainsi intrinsèquement liée à l'établissement et à la stabilité d'un plasma, dans le tube à décharge. Le plasma est généralement allumé par l'application d'une surtension transitoire entre l'anode et la cathode, ou éventuellement, par un filament chauffé qui émet des électrons dans le mélange gazeux [34]. Avec l'application d'une haute tension entre l'anode et la cathode, les quelques électrons et atomes ionisés, générés lors de la phase d'allumage du plasma, sont accélérés vers les électrodes. Lors de leurs déplacements, ils entrent ainsi en collision avec d'autres atomes encore neutres dans le mélange, les ionisant à leur tour et engendrant progressivement le plasma.

Une régulation des courants ionique et électronique dans le tube permet le maintien d'un plasma stable et donc le fonctionnement continu du laser. Un contrôle approprié du plasma permet d'obtenir une émission laser pulsée lorsque celle-ci est recherchée.

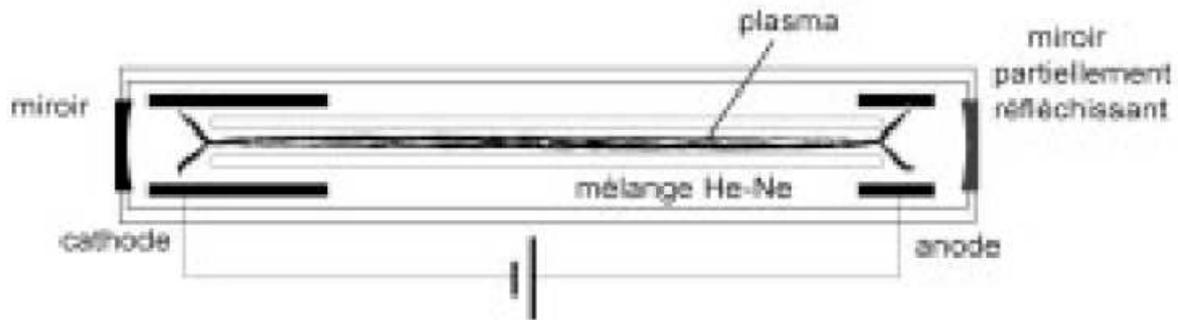


Figure 1.3. Représentation d'un laser à gaz et de son tube a décharge

Dans le cas du laser He-Ne, le gaz est un mélange de ces deux types d'atomes. Toutefois, ce sont les atomes de Ne qui sont responsables de l'activité optique. Les atomes d'He sont ajoutés parce qu'ils favorisent le processus de pompage, c'est-à-dire l'inversion de population dans les niveaux du Ne. Un schéma des différents niveaux électroniques des atomes de Ne et d'He est présenté à la Figure I.4.

Les photons lasers correspondent à la désexcitation du Ne depuis les niveaux 2p vers les niveaux 1s. L'inversion de population est effectivement possible puisque le temps de vie des premiers niveaux est de l'ordre de 100 ns, alors qu'il n'est que d'environ 10 ns pour les seconds. La longueur d'onde la plus utilisée vaut 632.8 nm et correspond à la lumière rouge bien caractéristique du laser He-Ne. Toutefois, d'autres transitions optiques sont permises et c'est en choisissant des miroirs présentant un coefficient de réflexion approprié à une de ces longueurs d'onde que la fréquence d'émission du laser est sélectionnée dans la cavité [35]. L'occupation des niveaux 5s ou 4s du Ne peut en principe résulter uniquement des collisions entre les atomes de Ne et les particules chargées du plasma.

La probabilité d'excitation du Ne vers ces états est toutefois fortement accrue par la présence des atomes d'He. Ces derniers sont en effet aisément excités vers leurs niveaux 23s ou 21s. Les atomes de Ne peuvent alors être efficacement excités dans les états métastables 5s ou 4s, grâce à la possibilité d'un transfert d'énergie résonnant lors des collisions avec les atomes d'He excités. L'inversion de population tend donc à s'établir et à être entretenue par le plasma. Comme il est expliqué précédemment, la désexcitation cohérente vers les niveaux inférieurs de temps de vie limité, 3p ou 4p, engendre l'émission stimulée de photons dans la cavité [36].

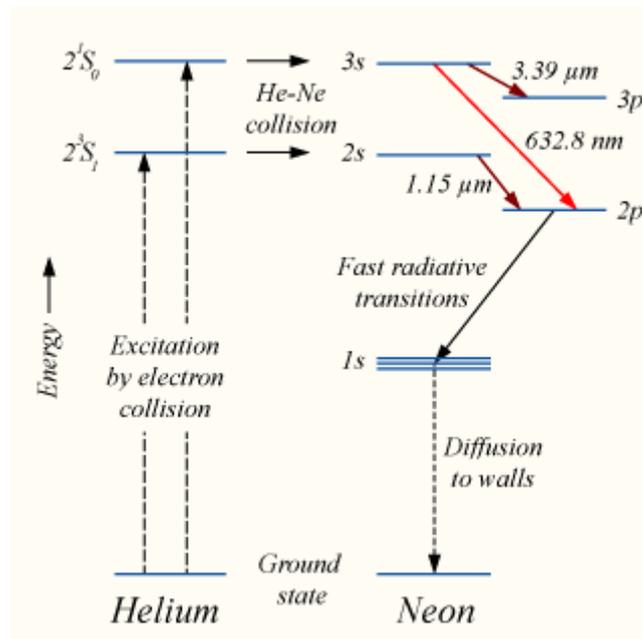


Figure 1.4. Schéma des niveaux électroniques des atomes de Ne et d'He contribuant à l'établissement de l'effet laser

Les autres lasers à gaz fonctionnent selon un principe similaire, reposant sur l'établissement d'un plasma dans un tube à décharge. Les longueurs d'onde émises sont caractéristiques des atomes ou molécules composant le mélange gazeux.

I.7.2. Les lasers à gaz rare

L'argon (Ar) est un des atomes de gaz rare les plus utilisés dans cette gamme de lasers [37]. Il est responsable d'une émission laser visible verte, correspondant à une longueur d'onde de 514 nm. Il n'est pas nécessaire de le mélanger à un autre gaz pour obtenir un plasma. Des collisions multiples sont toutefois nécessaires pour engendrer l'excitation des atomes vers les états électroniques appropriés à l'établissement d'une inversion de population, aussi ces lasers se distinguent par une très forte densité de plasma, de deux ordres de grandeur supérieure à celle d'un laser He-Ne, et par un rendement peu élevé, de l'ordre de 0.1 %. Les puissances accessibles sont comprises entre 100 mW et 20 W.

Pour des puissances supérieures à 1W, il est nécessaire de refroidir le tube de gaz, généralement par un courant d'eau. D'autres gaz rares peuvent également être exploités : le krypton (Kr), le néon ou encore le xénon (Xe) [38]. Le Kr est particulièrement intéressant car il engendre une lumière laser blanche, qui est la superposition des raies d'émission rouge à 647 nm, jaune à 568.2 nm, verte à 520.8 nm et bleue à 476.2 nm.

I.7.3. Les lasers à vapeur de métal

Le laser à hélium et cadmium (Cd) est certainement le plus représentatif de cette classe de lasers, où les transitions optiques actives résultent de transitions électroniques entre états excités d'atomes métalliques ionisés [39]. Ces lasers ont la particularité d'émettre à des longueurs d'onde plus courtes que les lasers He-Ne et à gaz rares cités précédemment. Pour le He-Cd, elles valent 441 nm et 325 nm, soit situées à la fin du spectre de la lumière visible et dans l'ultraviolet. Le principe de fonctionnement est toutefois très similaire au laser He-Ne. Le Cd est, ici, l'élément optiquement actif et l'He favorise le maintien d'un plasma stable [40]. Tout comme les atomes de Ne dans le laser He-Ne, les atomes de Cd sont efficacement ionisés et excités vers un état métastable par la réaction de transfert résonant d'énergie lors des collisions avec des atomes d'He ionisés dans le plasma.

La dispersion des atomes de Cd dans la phase gazeuse est assurée par sublimation à partir d'un four. Le tube à décharge doit être maintenu à haute température afin de prévenir la condensation des atomes de Cd. Les puissances possibles sont de l'ordre de 50 mW en continu à 441 nm et 10 fois moins à 325 nm. Ces lasers présentent donc des caractéristiques complémentaires au laser He-Ne, mais fonctionnent dans des gammes de fréquences plus élevées et à moyenne puissance [41].

I.7.4. Le laser moléculaire à CO₂

Pour obtenir un rayonnement laser dans l'infrarouge, il apparaît judicieux d'exploiter les degrés de liberté de vibration des molécules, plutôt que les transitions électroniques, comme cela était le cas pour les lasers à hélium et néon, argon et vapeur de cadmium, discutés ci-dessus. Dans cette section, nous présentons le laser à dioxyde de carbone CO₂ qui est largement utilisé en laboratoire et dans l'industrie [42]. Il permet de générer dans l'infrarouge des puissances allant jusqu'à plusieurs kW. La molécule de CO₂ possède trois modes de vibration qui peuvent être aisément exploités : les modes de déformation à 667 cm⁻¹, d'élongation symétrique à 1337 cm⁻¹ et d'élongation asymétrique à 2347 cm⁻¹. L'inversion de population correspond à exciter majoritairement les molécules dans le mode d'élongation asymétrique. En se désexcitant vers les modes de déformation ou d'élongation symétrique, les molécules de CO₂ émettent des photons de 9.4 et 10.6 μm, respectivement [43].

Toutefois, l'excitation des molécules de CO₂ requiert l'utilisation d'un mélange contenant également de l'azote (N₂) et de l'hélium (He). La composition et la pression des gaz varient fortement en fonction du type de laser. Cependant, un laser continu standard présentera une pression totale du mélange entre 10 et 50 Torr, avec des concentrations

d'environ 15 % pour le CO_2 et le N_2 , et de 70 % pour l'He. Comme dans les exemples précédents, c'est la présence de l'hélium qui garantit l'existence du plasma et ainsi l'excitation des modes de vibration des molécules de N_2 et de CO_2 . Diatomique, le N_2 ne présente qu'un seul mode de vibration à 2330 cm^{-1} [44]. Au vu de la proximité de cette fréquence avec celle du mode d'élongation asymétrique du CO_2 , une fois qu'il est excité, le N_2 peut se relaxer en transférant de manière résonante son énergie au CO_2 . Un pompage efficace de l'occupation du niveau vibrationnel asymétrique du CO_2 est donc assuré et l'inversion de population par rapport au niveau fondamental ainsi réalisée. Notons qu'en plus de maintenir le plasma, l'He entrant en collision avec le CO_2 favorise la désexcitation des modes de vibration inférieurs de la molécule, favorisant d'autant l'inversion de population et ainsi l'émission stimulée dans la cavité. Bien qu'indispensable au fonctionnement d'un laser à CO_2 , le plasma est à l'origine d'une dissociation partielle de la molécule.

En pratique, il est donc indispensable de disposer de catalyseurs favorisant la réduction du CO en CO_2 , ou de remplacer constamment le mélange gazeux. Enfin, afin d'éviter le peuplement thermique des deux modes de vibration inférieurs du CO_2 , la température du mélange gazeux ne peut pas trop s'élever. L'alimentation continue en mélange gazeux suivant l'axe de la cavité évite ces problèmes de dégradation du mélange par décomposition du CO_2 et de surchauffe du gaz. Les puissances que cette configuration autorise peuvent atteindre quelques kW, pour une consommation en gaz de l'ordre de 240 litres d'He, 30 litres de CO_2 et 45 litres de N_2 par heure et par kW. En l'absence de flux, les puissances possibles ne sont que de seulement quelques watts, voire quelques dizaines de watts si le tube est refroidi [45].

I.7.5. Le laser chimique

Dans les cas précédents, l'énergie requise pour engendrer l'inversion de population entre états est directement fournie par le plasma maintenu dans le tube à décharge. Pour le laser chimique, l'énergie est apportée par une réaction chimique exothermique qui excite les molécules dans un état vibrationnel. Tout comme dans le cas du laser moléculaire à CO_2 , ce sont les modes de vibrations qui sont exploités et donc l'émission laser est également infrarouge [46].

Le laser HF est le plus connu. Ici, les réactifs sont les gaz H_2 et F_2 qui produisent l'HF suivant deux réactions exothermiques. La réaction implique un transfert de charge entre les atomes. Celui-ci est très rapide et se réalise avant même que la distance d'équilibre pour former la liaison ionique entre l'hydrogène et le fluor ne soit atteinte. La molécule de HF est

donc laissée dans un état vibrationnel très excité pouvant correspondre à une dizaine de photons [47].

I.7.6. Laser solide

Le milieu actif d'un laser à corps solide est constitué d'ions incorporés en faible quantité dans un hôte cristallin ou vitreux. On utilise principalement des ions métalliques ou de terres rares pour le dopage [48]. Leurs transitions laser se situent généralement dans le visible ou proche infrarouge. Par l'influence de l'hôte (réseau cristallin ou milieu vitreux), le profil d'amplification des ions actifs est élargi de façon homogène. La largeur de ligne est plus importante que dans le cas des lasers à gaz et dépend de plus, pour un même ion actif, du milieu hôte dans lequel il est incorporé. C'est par pompage optique qu'on produit généralement l'inversion de population.

Pour le laser à trois niveaux, le pompage commence à partir du niveau fondamental E_1 dans une bande d'absorption E_4 . La transition non radiative entre E_4 et E_3 est très rapide. Le niveau d'arrivée de la transition laser est le niveau fondamental E_1 . Il s'ensuit que pour obtenir une inversion de population, la durée de vie du niveau E_3 doit être suffisamment longue et la moitié des ions au moins doit se trouver dans un état excité (lumière de pompage très intense) [49].

Le seuil de pompage est donc généralement élevé pour un laser à trois niveaux, et on obtiendra plus facilement un fonctionnement en régime pulsé qu'en régime continu. Un représentant typique de cette espèce est le laser à rubis (premier laser réalisé pratiquement). Le laser à quatre niveaux montre les mêmes principes de fonctionnement, à part que le niveau d'arrivée E_2 de la transition laser se situe au dessus du niveau fondamental E_1 et qu'il est de courte durée de vie [50].

I.8. Phénomène d'émission et d'absorption dans les semiconducteurs

L'interaction du rayonnement avec les électrons du semiconducteur se manifeste selon trois processus distincts [51] :

- un photon peut induire le saut d'un électron, d'un état occupé de la bande de valence vers un état libre de la bande de conduction, créant une paire électron-trou. C'est le processus d'absorption.
- un électron de la bande de conduction peut retomber spontanément vers un état vide de la bande de valence avec émission d'un photon, c'est l'émission spontanée.

- un photon présent dans le semiconducteur peut induire la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de la bande de valence, avec émission d'un deuxième photon de même énergie, c'est l'émission stimulée. Ce processus sera mis à profit dans les lasers à semiconducteur.

Ces différents processus sont conditionnés par la conservation de l'énergie $h\nu=E_{cn}-E_{vm}$ avec $n=m$ et la conservation de la quantité de mouvement p , la transition d'un électron entre les bandes de valence et de conduction, se fait donc avec la conservation du vecteur d'onde (transition verticale dans l'espace des k). On dit que les transitions sont radiatives, c'est-à-dire accompagnées de l'absorption ou de l'émission d'un photon.

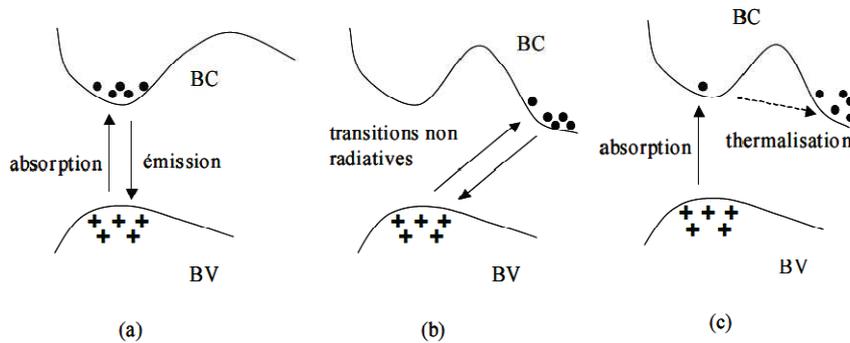


Figure 1.5. Transitions électroniques entre les extrema des bandes de valence et de conduction. a) Semiconducteur à gap direct, les transitions sont verticales et par suite radiatives. b) Semiconducteur à gap indirect, les transitions sont obliques et non radiatives au premier ordre. c) Absorption directe de photons dans un semiconducteur à gap indirect

I.8.1. L'absorption

Un photon incident cède son énergie à un électron de la bande de valence (BV) et le fait "monter" dans la bande de conduction (BC), c'est un processus de génération radiative. Si l'électron dans un système quantique se trouve dans l'état énergétique le plus faible E_{v1} , il peut absorber un photon et donc atteindre le niveau d'énergie supérieur E_{c1} . La probabilité d'occupation de l'état d'énergie E_{v1} est donnée par la statistique de Fermi-Dirac [52]:

$$f_{v1} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{v1} - E_F}{k_b \cdot T}\right)} \tag{1.3}$$

Ou E_F est le pseudo-niveau de fermi pour le niveau considéré et k_b la constante de Boltzmann. La probabilité que l'état E_{c1} soit vide est $1-f_{c1}$.

$$1 - f_{c1} = 1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{c1} - E_F}{k_b \cdot T}\right)} \quad (1.4)$$

La densité de photon est donnée par [53]:

$$P(E) = \frac{8\pi n^2 E^2}{h^3 c^3} \left[1 + \frac{E}{n} \left(\frac{dn}{dE} \right) \right] \left(\exp\left(\frac{E}{k_b T}\right) - 1 \right)^{-1} \quad (1.5)$$

Où n est l'indice de réfraction, c la vitesse de la lumière, T la température absolue.

Le taux d'absorption est donc :

$$r_{12} = B_{12} \cdot f_{c1} (1 - f_{c1}) P(E_{21}) \quad (1.6)$$

Où B_{12} est un facteur de proportionnalité qui représente physiquement la probabilité de la transition de l'électron du niveau E_{v1} vers le niveau E_{c1} . Dans le cas où l'électron se trouve déjà dans le niveau supérieur, deux processus peuvent se produire [54].

I.8.2. L'émission spontanée

C'est le processus où l'électron descend à l'état inférieur en émettant un photon de fréquence ν . Si la plupart des électrons émettent de cette façon, le rayonnement résultant est incohérent car il n'y a pas de relation entre les instants d'émission d'un électron à un autre. Le flux émis par émission spontanée est indépendant de l'amplitude du champ électromagnétique incident ; il est proportionnel au nombre d'électron dans l'état excité et inversement proportionnel à leur durée de vie (c'est-à-dire au temps moyen pour qu'un électron passe dans l'état excité avant de retourner au niveau le plus bas) [55]. Le taux d'émission spontanée est :

$$r_{21}(sp) = A_{21} \cdot f_{c1} (1 - f_{v1}) \quad (1.7)$$

Où A_{21} est la probabilité pour que l'électron de l'état E_{c1} retourne spontanément à l'état E_{v1} .

I.8.3. L'émission stimulée

L'émission stimulée d'un photon par un électron est déclenchée par la présence du rayonnement incident. Dans ce cas, l'instant où se produit l'émission est dicté par le champ excitateur, auquel elle se superpose en phase. Il s'agit donc d'un processus cohérent, qui constitue le cœur même du mécanisme laser. Le taux dû à l'émission stimulée est proportionnel au nombre d'électron qui se trouvent dans l'état excité, au débit de photons incidents et à la même probabilité d'absorption que dans le cas de l'absorption [56].

Le taux d'émission stimulée est :

$$r_{21} = B_{21} \cdot f_{c1} (1 - f_{v1}) P(E_{21}) \quad (1.8)$$

Où B_{21} est un facteur de proportionnalité qui représente physiquement la probabilité de la transition de l'électron du niveau E_{c1} vers le niveau E_{v1} . On peut donc voir qu'un milieu, dont les électrons se trouvent en plus grand nombre dans l'état fondamental que dans l'état excité, absorbera une fraction du faisceau incident, ce qui se produit obligatoirement lorsque le milieu est en équilibre thermique avec son environnement.

Au contraire, il y'aura production nette de rayonnement si les électrons sont plus nombreux dans l'état excité. La recherche de matériaux laser doit donc se concentrer sur des milieux qui ne soient pas en équilibre thermodynamique et pour lesquels la durée de vie du niveau excité ne soit pas trop courte; la durée de vie de la plupart des états laser va de quelques microsecondes à des dizaines de millisecondes [57].

I.9. Laser à semiconducteur

Dans les semiconducteurs, les niveaux d'énergie sont groupés dans des bandes permises où leur répartition est quasi-continue. Cette spécificité du semiconducteur entraîne deux conséquences au niveau du laser. La première est que la condition classique d'inversion de population entre deux niveaux discrets, ($N_2 > N_1$) doit s'exprimer ici dans un formalisme adapté à la structure de bandes d'énergie [58].

I.9.1. Diode laser à homojonction

Dans la structure à homojonction, l'effet laser se produit entre les états du bas de la bande de conduction, où se thermalisent les électrons injectés dans cette bande, et les états du sommet de la bande de valence où se thermalisent les trous créés dans cette bande. La condition d'inversion de population entre ces deux ensembles d'états s'écrit :

$$E_{Fc} - E_{Fv} > E_g \tag{1.9}$$

C'est-à-dire que les pseudo-niveaux de Fermi des électrons et des trous dans le matériau excité, sont respectivement dans les bandes de conduction et de valence. Ceci se traduit par le diagramme énergétique représenté sur la figure I.6.

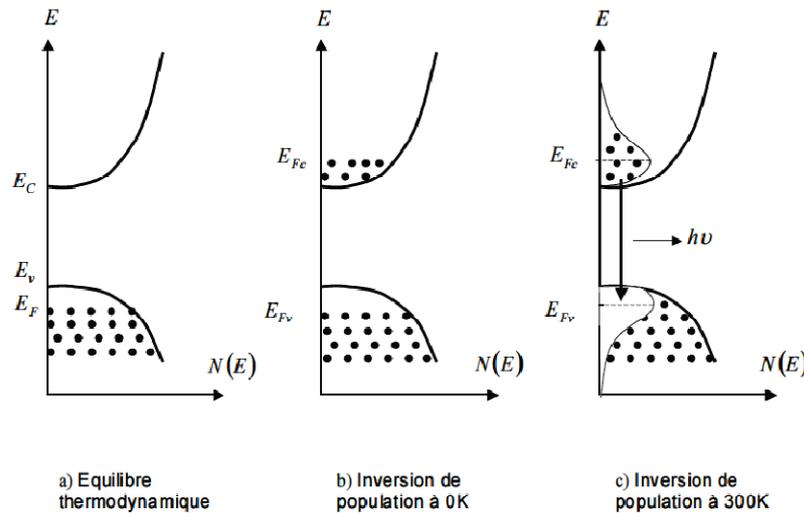


Figure 1.6. Population des bandes d'énergie

Pour réaliser l'inversion de population dans les lasers à semi-conducteur, il faut donc créer beaucoup de paires électron-trou dans le matériau massif [59]. On injecte beaucoup d'électrons dans une région de type p, au moyen d'une jonction p-n. La structure du laser est celle d'une diode électroluminescente, mais dont les régions de types n et p sont dégénérées. La région de type p est très dopée pour qu'à l'équilibre, le niveau de Fermi soit dans la bande de valence. La région de type n est très dopée pour que la densité d'électrons injectés dans la région de type p sous l'action de la tension de polarisation, soit telle que le pseudo-niveau de Fermi des électrons E_{Fc} soit dans la bande de conduction.

En raison du processus d'excitation mis en jeu, les lasers à semi-conducteurs sont appelés lasers à injection ou diodes lasers. La configuration de la jonction p-n est représentée sur la figure I.7 [60]. Sous l'effet d'une polarisation directe (vient de source de pompage électrique), un courant circule dans la jonction qui correspond au passage des électrons de la région n vers la région p et inversement pour les trous. A l'interface de la jonction, c'est-à-dire au niveau de la zone active, il y a confinement puis recombinaison radiative des porteurs électrons et trous (processus de l'électroluminescence) et émission d'un rayonnement [61].

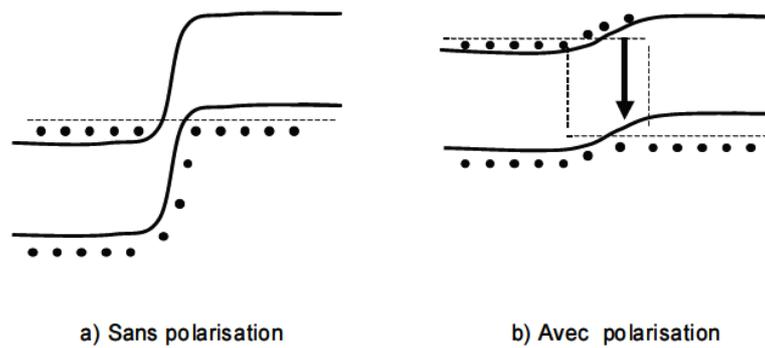


Figure 1.7. Diagramme énergétique

Dans le laser semi-conducteur à homojonction [62] :

1. Le pompage est assuré par l'injection des porteurs à travers une jonction PN polarisée en direct.
2. Le milieu amplificateur est le semi-conducteur où on a réalisé une inversion de population.
3. La cavité résonante est formée par les faces clivées (plans cristallins) qui limitent la zone active.

I.9.2. Diode laser à double hétérojonction

Le laser à semi-conducteur a connu un essor commercial important avec la mise au point de la double hétérojonction, créant une double barrière de potentiel pour les porteurs minoritaires injectés [63]. Le confinement de porteurs qui en résulte, conduit alors à une grande facilité d'inversion de population. La différence de potentiel appliquée doit juste excéder la hauteur de la bande interdite de la structure et la diode laser peut fonctionner à température ambiante. La largeur de la zone d'inversion de population est fixée lors de la fabrication et correspond à l'épaisseur de la couche active. Elle ne dépend pas de la différence de potentiel, le contrôle du fonctionnement de la diode laser en est donc fortement simplifié [64].

Un des grands avantages de la structure à double hétérojonction, est le guidage optique qu'elle offre naturellement [65]. En effet, les indices de réfraction des couches à grand bande interdite sont plus faibles que celui de la couche confinée à petit gap. La zone active est également un guide d'onde. Il s'en suit que même les photons émis en dehors de l'axe de la

cavité peuvent être guidés et donc être également amplifiés pour participer au rayonnement laser [66].

Dans les années 70, Kroemer a proposé la première amélioration du courant de seuil des lasers à semi-conducteurs à travers la double hétérostructure [67]. Le diagramme énergétique et la variation de l'indice de réfraction d'une telle structure sont schématisés dans la Figure I.10. Le matériau de la couche active est non dopé et il est confiné par deux couches dopées respectivement N et P. L'énergie de la bande interdite des couches de confinement est supérieure à l'énergie des photons générés dans la couche active pour éviter leur absorption et assurer un confinement du champ électromagnétique.

Lorsque la diode est polarisée en directe, la jonction p-i-n apporte un maximum de porteurs dans la couche active (i) et le confinement augmente la probabilité de recombinaisons. Ce double confinement (photons et porteurs) entraîne un bon recouvrement entre le mode optique et la zone d'injection des porteurs. Le paramètre, évaluant ce taux de recouvrement, est appelé le facteur de confinement.

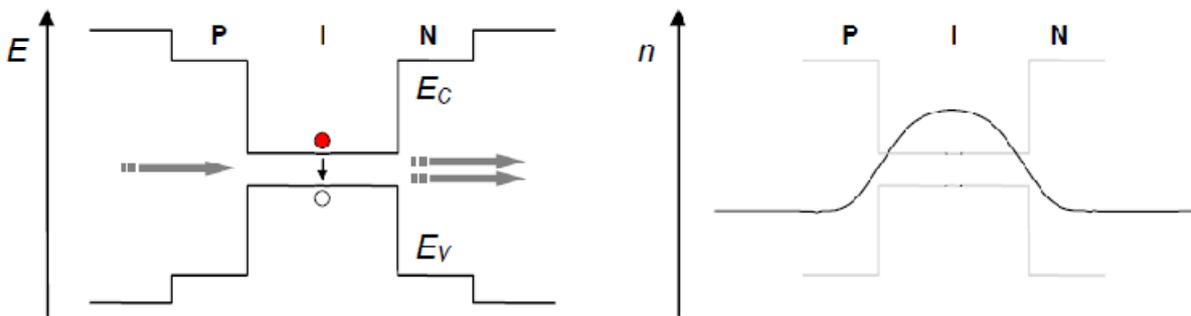
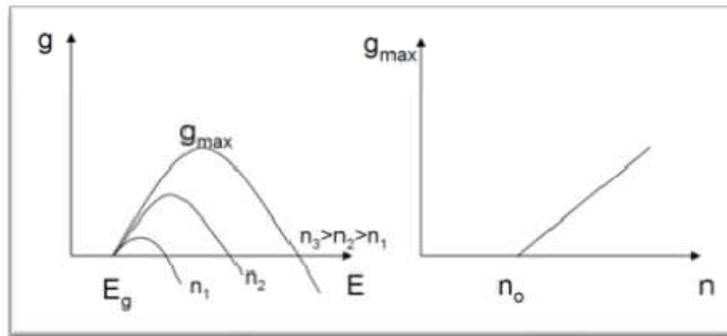


Figure 1.8. Diagramme d'énergie et profil de l'indice de réfraction d'une double hétérojonction

Cependant, pour ce type de structure, le maximum du gain n'est pas situé exactement au gap et donc une partie de l'inversion de population est inutile (Figure I.9.a). L'utilisation d'un puits quantique permet d'amener le maximum du gain au gap (Figure I.9-b) pour ajuster le nombre d'états utiles à l'inversion de population. Les laboratoires américains Bell ont été les premiers à démontrer la diminution du courant de seuil des lasers grâce à une structure à puits quantique.

a) Double hétérostructure



b) Puits quantique

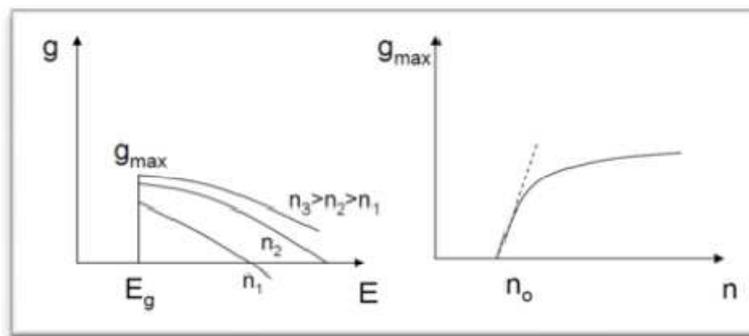


Figure 1.9. Courbe de répartition du gain en énergie $g(E)$ et courbe du maximum du gain en fonction de la quantité de porteurs $g(n)$ pour a) une double hétérostructure et pour b) un structure à puits quantique

I.9.3. Laser à puits quantique

Depuis de nombreuses années, la physique des hétérostructures à base de semiconducteurs s'est développée parallèlement à celle des semiconducteurs massifs. Si bien qu'il est désormais possible de réaliser, par épitaxie sous jets moléculaires, des empilements de couches minces (d'épaisseur typiquement inférieure à 30 nm) de deux semiconducteurs de bandes interdites différentes. La définition du puits quantique implique l'existence de trois types de puits [68].

I.9.3.1. Puits quantiques de type I

Des puits quantiques de type-I où les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon dépend des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits.

I.9.3.2. Puits quantiques de type II

Des puits quantiques de type-II où les porteurs sont confinés dans deux matériaux adjacents. Dans ce cas, l'énergie du photon est fonction des énergies de confinement des porteurs mais aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure,

I.9.3.3. Puits quantiques de type III

La configuration dite de type-III qui est un cas particulier du type-II dans lequel le bas de la bande de conduction se trouve en dessous du haut de la bande de valence. Cette situation appelé aussi configuration semi-métallique, Elle offre une grande souplesse dans le choix de la longueur d'onde d'émission puisque l'énergie du photon émis n'est alors fonction que des énergies de confinement des électrons et des trous, donc des épaisseurs des couches, Voir la figure II-5.

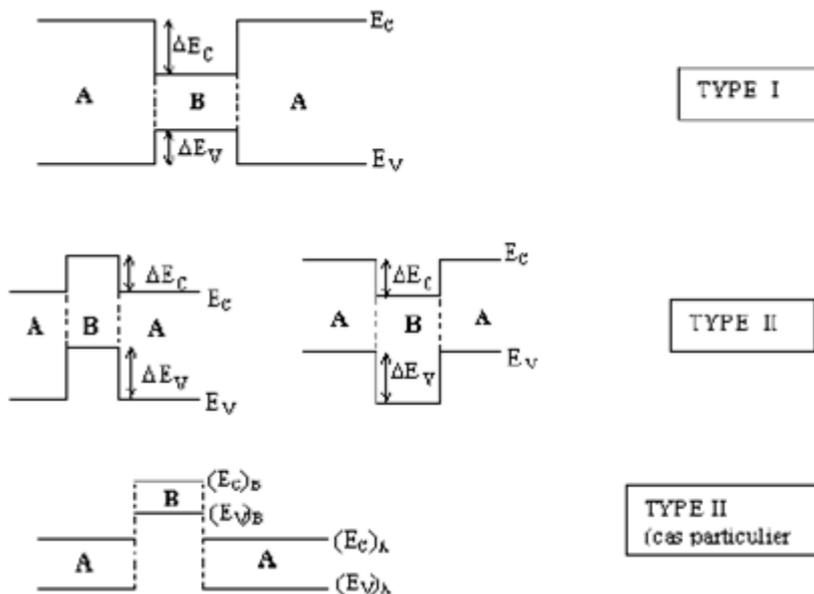


Fig. 1.10. Divers types d'hétérojonctions définis par la position relative des Bandes des semi-conducteurs A et B ; le type I est le plus utilisé.

La structure des échantillons que nous étudions est de type I, et met en jeu des contraintes et des déformations. Lorsqu'un matériau dont le paramètre de maille diffère légèrement de celui du substrat sur lequel il est déposé, le paramètre de maille de la couche s'adapte à celui du substrat. La couche ainsi déformée accumule de l'énergie élastique et

lorsqu'elle atteint une épaisseur critique, des dislocations apparaissent pour réduire cette énergie, affectant ainsi la qualité cristalline du matériau.

Dans la suite de ce travail, ces phénomènes de relaxation seront considérés comme négligeables dans la mesure où les couches épitaxiées sont minces. Les contraintes jouent un rôle essentiel dans la configuration électronique d'un puits quantique. Elles peuvent modifier la largeur de la bande interdite [69].

Une diode laser à puits quantique contraint est constituée d'un empilement de couches sur substrat. La structure du composant comporte [70]:

1. Une couche active constituée par un ou plusieurs puits quantiques contraints de quelques dizaines d'Angströms d'épaisseur.
2. Un guide optique constitué de deux couches barrières de quelques dizaines d'Angströms d'épaisseur.
3. centaines d'Angströms entourées de deux couches de confinement de $1 \mu m$ environ.

La couche active est constituée d'un matériau de bande interdite inférieure à celle des couches adjacentes et constitue un puits quantique de potentiel pour les porteurs de charge.

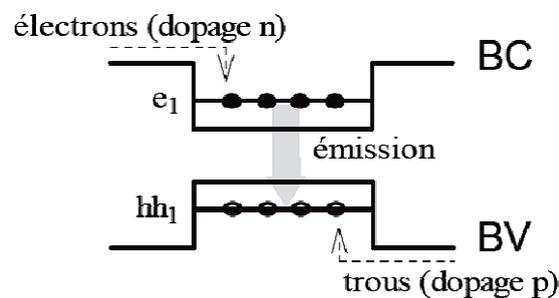


Figure 1.11. Les niveaux quantifiés dans un puits quantique

Ces derniers, compte tenu de la largeur du puits ($L_p = 07 \rightarrow 50 \text{ nm}$), sont soumis à la quantification de leur mouvement qui prend alors un caractère bidimensionnel. Les états d'énergies des particules correspondent donc à des niveaux quantifiés.

De plus, compte tenu de l'épitaxie du matériau de la couche active sur le matériau de paramètre de maille initialement différent, le puits quantique est contraint, ce qui modifie également les énergies des particules et conféré au puits des propriétés électroniques particulières [71].

Par ailleurs, un des problèmes fondamentaux du laser à puits quantique contraint ou non contraint est que l'interaction entre l'onde optique et les porteurs est faible en raison de la largeur du puits. Aussi, pour remédier à cet inconvénient, on utilise l'effet de confinement séparé qui consiste à améliorer le confinement de photon en ajoutant de part et d'autre de la zone active un guide d'onde. Ce dernier peut être réalisé

1. Soit grâce au matériau barrière de composition constante épitaxie sur la couche de confinement.
2. Soit grâce au matériau barrière de composition graduelle épitaxie sur couche de confinement.

I.10. Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous avons exposé les concepts fondamentaux concernant la physique des lasers. Nous nous sommes attachés à présenter les propriétés de la lumière émise par ces sources. Nous avons également décrit les différents types du laser. Nous avons finalement abordé les diodes lasers à homojonction, à double-hétérojonction et particulièrement les lasers à puits quantique. Nous verrons dans le chapitre suivant les propriétés physiques du matériau ZnMgSe qui sera à la base de notre structure à puits quantique.

References

- [1] L. Esaki & R. Tsu, "Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors", *IBM J. Res. Dev.* 14, 61, 1970.
- [2] E. Burstein & C. Weisbuch, "Confined Electrons and Photons: New Physics and Devices", 1995.
- [3] C. H. Townes: "The laser's roots: Townes recalls the early days", *Laser Focus* 14(8):52–58, August, 1978.
- [4] M. A. Haase, J. Qiu, J. M. De Puydt and H. Cheng, "Blue-green diode lasers", *Appl. Phys. Lett.*, 59, 1272–1274, 1991.
- [5] W. P. Risk, T. R. Gosnell, A. V. Nurmikko, "Compact blue-green lasers", Cambridge University Press, 2003
- [6] S. H. Park, Yong-Tae Moon, Dae-Seob Han, Joong Seo Park, Myeong-Seok Oh and Doyeol Ahn, "Light emission enhancement in blue InGaAlN/InGaN quantum well structures", *Appl. Phys. Lett.* 99, 181101 (2011)
- [7] S. Nakamura and G. Fasol, "The blue laser diode", Springer, Berlin, 1997.
- [8] Albert Einstein: *Mitt. Phys. Ges. Zurich* 16(18):47, 1916. English translations appear in B.L. van der Waerden (ed.), *Sources of Quantum Mechanics*, North-Holland, Amsterdam, 1967; and in D. ter Haar (ed.), *The Old Quantum Theory*, Pergamon, Oxford and New York, 1967.
- [9] fabrikant
- [10] N.G. Basov and A.M. Prokhorov: "3-level gas oscillator". *Zh. Eksp. Teor. Fiz. (JETP)* 27:431, 1954.
- [11] B. Lengyel: "Evolution of masers and lasers", *American Journal of Physics* 34(10): 903–913, October, 1966.
- [12] A. L. Schawlow and C. H. Townes: "Infrared and optical masers", *Physical Review* 112:1940,; also U.S. patent 2,929,922, 1958
- [13] T. H. Maiman: "Stimulated optical radiation in ruby", *Nature* 187:493, 1960.
15. Arthur L. Schawlow, "Masers and lasers," *IEEE Transactions on Electron Devices*, ED 23:773–779, July 1976.
- [14] Ali Javan, W.R. Bennett Jr., and D.R. Herriott: "Population inversion and continuous optical maser oscillation in a gas discharge containing a He-Ne mixture", *Physical Review Letters* 6:106, 1961.
- [15] R. W. G. Brown, E.R. Pike: "A history of optical and optoelectronic physics in the twentieth century", Brown, L.M., Pais, A., Pippard, B., (eds.), in: *Twentieth Century Physics*, Vol. III, Bristol, Philadelphia: IOP Publishing, and New York: AIP Press, p. 1385, 1995.
- [16] R. N. Hall, G. E. Fenner, J. D. Kingsley, T. J. Soltys, and R. O. Carlson, *Phys. Rev. Lett.*, 9, 366, 1962.
- [17] P. Sorokin and J.R. Lankard: "Stimulated emission observed from an organic dye, chloroaluminum phthalocyanine", *IBM Journal of Research & Development* 10: 162, 1966.
- [18] H. C. Casey, Jr, and M. B. Panish, "Heterostructure Lasers", Academic Press, New York, 1978.
- [19] Y. Suematsu, "Semiconductor Lasers and Optical Integrated Circuits" (in Japanese), Ohmsha, Tokyo, 1984.
- [20] Japan Society of Applied Physics (ed.), "Fundamentals of Semiconductor Lasers" (in Japanese), Ohmsha, Tokyo, 1987.
- [21] R. Ito and M. Nakamura, "Semiconductor Lasers—Fundamentals and Applications" (in

- Japanese), Baifukan, Tokyo, 1989.
- [22] G. P. Agrawal and N. K. Dutta, "Semiconductor Lasers", second edition, Van Nostrand Reinhold, New York, 1993.
- [23] W. W. Chow, S. W. Koch, and M. Sergeant, "Semiconductor Laser Physics", Springer, Berlin (1993).
- [24] Japan Society of Applied Physics (ed.), K. Iga (ed.), "Semiconductor Lasers" (in Japanese), Ohmsha, Tokyo (1994).
- [25] L. A. Coldren and S. W. Corzine, "Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits", John Wiley, New York (1995).
- [26] K. Iga and F. Koyama, "Surface Emitting Lasers" (in Japanese), Ohmsha (1990).
- [27] William B. Bridges: "Laser oscillation in singly ionized argon in the visible spectrum". Applied Physics Letters 4:128–130, 1964; erratum, Applied Physics Letters 5:39, 1964.
- [28] D.A.G. Deacon, et al.: "First operation of a free-electron laser", Physical Review Letters 38:892, 1977.
- [29] J.C. Dainty (ed.): "Laser Speckle and Related Phenomena", 2d ed., Springer-Verlag, Berlin and New York, 1984.
- [30] K. Thyagarajan and A.K. Ghatak: "Lasers Theory & Application", Plenum, New York, pp. 365–402, 1982.
- [31] P.W. Milonni and J.H. Eberly: "Lasers", Wiley-Interscience, New York, 1988.
- [32] Koichi Shimoda: "Introduction to Laser Physics", Springer-Verlag, Berlin and New York, 1984.
- [33] C.G.B. Garrett, , "Gas Lasers", McGraw-Hill, pp.62-75, 1967
- [34] D.C. Sinclair, , W.E. Bell, "Gas Laser Technology", Holt Rinehart, 1980
- [35] J.B. Ferguson, , R.H. Morris: "Single Mode Collapse in 6238 Angstrom Helium Neon Lasers", Applied Optics, 1978
- [36] M.J. Beesley, "Lasers and their applications", Taylor & Francis LTD, 1976.
- [37] H. Belaidi, M. Himbert, Y. Millerieux, A. Razet, and P. Juncar, "Stability Transfer of Stabilized Ar⁺ Laser on Optically Pumped 12 Laser Towards a Frequency Standard Around 1.3 μm ", IEEE transactions on instrumentation and measurement, vol 44, no 2, april 1995
- [38] G.A. Naylor, , R.R. Lewis, , A.J. Kearsley, , "Gas Laser Technology"; Proc. SPIE 894, 1988
- [39] J. P. Goldsborough and E. B. Hodges, "Stable long lie operation of He-Cd lasers at 4416 \AA and 3250 \AA ", presented at the 1979 CLEA Conf.. Washington, D. C.
- [40] W. Sasaki and T. Ohita, "Oscillation Spectra in He-Zn II and He-Cd II Hollow Cathode Metal Vapor Lasers", Journal of quantum electronics, Vol. QE-18, NO. 1, January 1982
- [41] T. S. Fahlen: "High pulse rate, mode-locked copper vapor laser", IEEE J. Quantum Electron., vol. QE-13, pp. 546-547, July 1977
- [42] D. N. Dederich,: "CO₂ laser fusion of a vertical root fracture", J Am Dent Assoc, 130(8), 1195-1199, 1999
- [43] S. Gouw-Soares, , A. Stabholz, , J. L. Lage-Marques, , D. M. Zezell, , E. B. Groth, , & C. P. Eduardo, , "Comparative study of dentine permeability after apicectomy and surface treatment with 9.6 microm TEA CO₂ and Er:YAG laser irradiation". Research Support, Non-U.S. Gov't. J Clin Laser Med Surg, 22(2), 129-139, 2004
- [44] A. Obata, T. Tsumura, K. Niwa, Y. Ashizawa, T. Deguchi, & M. Ito: "Super pulse CO₂ laser for bracket bonding and debonding", Eur J Orthod, 21(2), 193-198, 1999
- [45] J. M. Auerhammer, R. Walker, A. F. G. Meer, B. Jean, "Longitudinally excited CO₂", Laser applied physics B, 1999.
- [46] R.A. Meinzer: Proc. 3rd Int. "Symposium on Gas-Flow and Chemical Lasers", Journal

- de Physique, Supplément Colloque (ISBN 2-902731-23-X), 1980, p. 155, 1980
- [47] V.I.Lvov, A.A.Stepanov, V.A.Shcheglov, Proc. 4th Int. "Symposium on Gas-Flow and Chemical Lasers 1982", Onorato, M. (ed.), New York, London: Plenum Press, p. 471, 1984
- [48] F. M. Mitschke, L.F. Mollenauer: "Ultrashort pulses from the soliton laser", Opt. Lett. 12 407–409, 1987
- [49] A. Cordova-Plaz, M. I. F. Dignonnet and H. I. Shaw: "Miniature CW and active internally Q-switched Nd : MgO : LiNbO₃ lasers", IEEE J. Quantum Electron, QE-23, pp. 262-266, 1987
- [50] S. M. Klimentov, S. V. Garnov, V. I. Konov, T. V. Kononenko, P. A. Pivovarov, O. G. Tsarkova, D. Breitling, F. Dausinger: "Effect of low-threshold air breakdown on material ablation by short laser pulses", Physics of Wave Phenomena, Volume 15, Issue 1, pp 1 11, 2007
- [51] L. V. Tung, H. V. Phuc: "Nonlinear optical absorption via two-photon process in asymmetrical semi-parabolic quantum wells", Superlattices and Microstructures 89 288-295, 2016
- [52] R. Dupuis: "An introduction to the development of the semiconductor laser", IEEE J, Quantum Electron. QE-23 651–7, 1987.
- [53] G. Bastard and J.A. Brum: "Electronic states in semiconductor heterostructures", IEEE Journal of Quantum Electronics, 22(9), September, 1986.
- [54] C. Sibia, T.M. Benson, M. Marciniak · T. Szoplik, "Photonic Crystals: Physics and Technology", Springer, 2008
- [55] T. Ando, "Hole Subbands at GaAs/AlGaAs Heterojunctions and Quantum Wells", Journal of the Physical Society of Japan, 54(4), april 1985.
- [56] M. Altarelli, "Electronic structure and semiconductor-semimetal transition in InAs-GaSb superlattices", Physical Review B, 28(2), july 1983.
- [57] M. Asada, A. Kameyama, and Y. Suematsu, "Gain and Intervalence Band Absorption in Quantum-Well Lasers", IEEE Journal of Quantum Electronics, QE-20(7), july 1984.
- [58] J. V. Moloney et al., "Quantum design of semiconductor active materials: laser and amplifier applications", Laser & Photon. Rev. 1 (1), 24, 2007
- [59] H. Kressel and H. Nelson, "Close-confinement gallium arsenide PN junction lasers with reduced optical loss at room temperature", RCA Rev. **30** 106–13 1969.
- [60] Z. I. Alferov, "The History and future of semiconductor heterostructures from the Point of View of a Russian Scientist", Physica Scripta, T 68, 32, 1996.
- [61] Z. I. Alferov and R. F. Kazarinov, Russian patent application N950840 "Semiconductor Laser with Electrical Pumping", priority March 30, 1963.
- [62] D. Sands, "Diode Lasers", IOP Publishing Ltd 2005.
- [63] R. Dingle and C. H. Henry, "Quantum effects in heterostructure lasers", US Patent 3.982.207, 1976.
- [64] P. Zory and L D. Comerford, "Grating-coupled double-heterostructure AlGaAs diode lasers" IEEE J, Quantum Electron. 11 451–57, 1974.
- [65] R. Dingle, W. Wiegmann, and C. H. Henry, "Quantized states of confined carriers in very thin Al_xGa_{1-x}GaAs-Al_xGa_{1-x}As heterostructures", Phys. Rev. Let. 33, 827, 1974.
- [66] Z. I. Alferov, V. M. Andreev, E. L. Portnoi and M. K. Trukan, "AlAs-GaAs heterojunction injection laser with a low room-temperature threshold", Fiz Tekh Poluprovodn. **3** 1328–32, 1969.
- [67] H. Kroemer, "A proposed class of heterojunction injection lasers", Proc. IEEE 51, 1782, 1963
- [68] P. S. Zory, Jr (ed.), "Quantum Well Lasers", Academic Press, New York (1993).
- [69] T. Chungy, J. H. Ohz, S. Leey, J. Jeongy and K. J. Changy, "Optical properties of ZnSSe/ZnMgSSe quantum wells", Semicond. Sci. Technol. 701–707 1997.
- [70] L.C. Andreani, A. Pasquarello, and F. Bassani, "Hole subbands in strained GaAs-

- Ga_{1-x}Al_xAs quantum wells: Exact solution of the effective-mass equation", Physical Review B, 36(11), october 1987.
- [71] A. V. Kavokin, V. P. Kochereshko, G. R. Posina, and I. N. Uraltsev, D. R. Yakovlev, G. Landwehr, R. N. Bicknell-Tassius, and A. Waag, "Effect of the electron Coulomb potential on hole confinement in II-VI quantum wells", Physical review B Volume 46, Number 15 October 1992.

Chapitre II
PROPRIETES PHYSIQUE DU
Mg_xZn_{1-x}Se

Chapitre : II

PROPRIETES PHYSIQUE DU $Mg_xZn_{1-x}Se$ **II.1. Introduction**

Les composants optoélectroniques à semiconducteurs tel que les diodes laser qui émettent dans le bleu sont fabriquées à partir d'un matériau semi-conducteur III-V ou II-VI à gap direct [1-5]. Pour comprendre le fonctionnement de ces composants, nous devons posséder une connaissance de base de la structure des atomes et de l'interaction des particules qui les composent.

Le but de ce chapitre est de décrire la structure de bande des semiconducteurs II-VI notamment les matériaux ZnSe et MgZnSe qui forment le puits et la barrière de notre puits quantique ainsi que les propriétés structurales, électroniques, optiques et élastiques du matériau MgZnSe au voisinage du centre de la zone de Brillouin ($k=0$) qui est une zone de grande importance dans les transitions optiques. La connaissance de la bande interdite, la masse effective des électrons, des trous lourds et des trous légers, l'indice de réfraction ainsi que les autres paramètres physiques du matériau MgZnSe, nous permettent de calculer le gain optique due aux transitions électroniques dans la présence d'une onde optique qui est une propriété primordiale de jugement de l'efficacité du laser.

II.2. Structure de bande des semiconducteurs**II.2.1. Structures cristallines**

La forme la plus stable de la matière à température nulle est celle formée par un arrangement périodique d'atomes dans une structure cristalline [6]. Une structure cristalline est engendrée par un réseau périodique à chaque point duquel se situe un motif répété à (presque) l'infini, motif qui peut être un atome ou un assemblage d'atomes. Un réseau cristallin peut être engendré par trois vecteurs fondamentaux a_1 , a_2 et a_3 c'est-à-dire que tous les motifs atomiques soient distribués sur des points r_i :

$$r_i = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3 \quad (2.1)$$

Où les n_i sont des entiers quelconques. La forme prise par l'hamiltonien décrivant un électron dans la structure périodique d'un cristal est :

$$H_{crist} = \frac{p^2}{2m} + \sum_i U(r - r_i) \quad (2.2)$$

Soit encore :

$$H_{crist} = \frac{p^2}{2m} + V(r) \quad (2.3)$$

Ou $V(r)$ possède la périodicité du cristal :

$$V(r + r_i) = V(r) \quad (2.4)$$

Le potentiel périodique peut être décomposé sous forme de la série de Fourier :

$$V(r) = \sum_{G \in RR} \tilde{V}(G) e^{-iGr} \quad (2.5)$$

Ou les points G ($OG = G$) sont disposés sur un réseau réciproque (RR) engendré par les vecteurs unitaires :

$$A_1 = 2\pi \frac{a_2 \times a_3}{a_1 \times a_2 \times a_3} ; \quad A_2 = 2\pi \frac{a_3 \times a_1}{a_2 \times a_3 \times a_1} ; \quad A_3 = 2\pi \frac{a_1 \times a_2}{a_3 \times a_1 \times a_2}$$

La figure 2.1 représente un réseau cristallin unidimensionnel et monoatomique et son réseau réciproque.

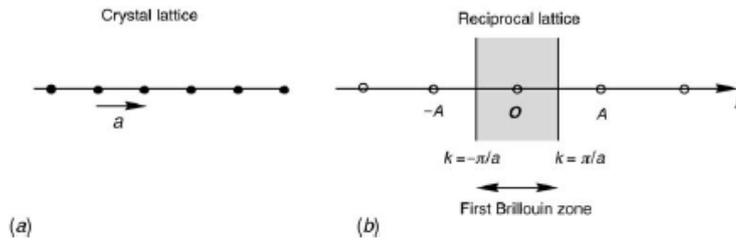


Figure 2.1. Réseau cristallin et son réseau réciproque

Les solutions de l'équation de Schrödinger sont des fonctions de Bloch :

$$\Psi(r) = u_k(r) e^{-ik.r} \quad (2.6)$$

Ou les fonctions $u_k(r)$ présentent la périodicité du cristal :

$$u_k(r + r_i) = u_k(r) \quad (2.7)$$

La partie réelle (ou imaginaire) d'une telle fonction de Bloch est présentée en figure 2.2 : on notera cette forme particulière de fonctions d'onde atomiques à variation rapide

modulées par les fonctions à variation lente en $\exp(-ik.r)$. Ce sont ces modulations qui sont transportées dans le cristal, donnant lieu au phénomène de masse effective [7].

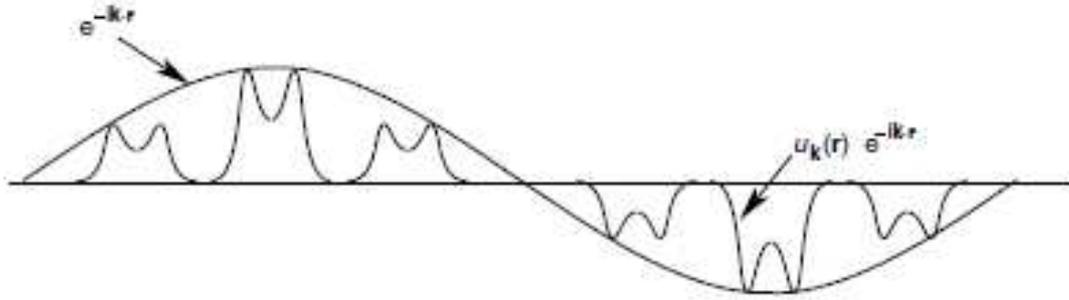


Figure 2.2. Les fonctions de Bloch modulées par une progressive

Les ondes de Bloch sont stationnaire (vont et viennent entre des surfaces limitantes). On utilise plus souvent les conditions aux limites périodiques de Born-von Karman qui consistent à imposer à la fonction d'onde $\Psi(r)$ d'être la même dans chacune des boites identiques de dimensions $L_1 \times L_2 \times L_3$ c'est-à-dire que $\Psi(r) = \Psi(r + n_1L_1 + n_2L_2 + n_3L_3)$. Les vecteurs d'onde k appartiennent donc à un réseau réciproque décrit par les points :

$$k_1 = n_1 \frac{2\pi}{Na_1} ; \quad k_2 = n_2 \frac{2\pi}{Na_2} ; \quad k_3 = n_3 \frac{2\pi}{Na_3}$$

Les vecteurs d'onde k appartiennent à une zone définie par :

$$-\frac{\pi}{a_1} \leq k_1 \leq \frac{\pi}{a_1} ; \quad -\frac{\pi}{a_2} \leq k_2 \leq \frac{\pi}{a_2} ; \quad -\frac{\pi}{a_3} \leq k_3 \leq \frac{\pi}{a_3}$$

Cette zone est limitée par les plans médiateurs des premiers points du réseau réciproque : c'est la première zone de Brillouin du réseau réciproque, représentée sur la figure 2.3, elle est un octaèdre à faces tronquées dont les points de haute symétrie sont notés Γ (centre de zone), X (bord de zone dans les directions (100) et équivalentes) et L (bord de zone dans les directions (111) et équivalentes) [8].

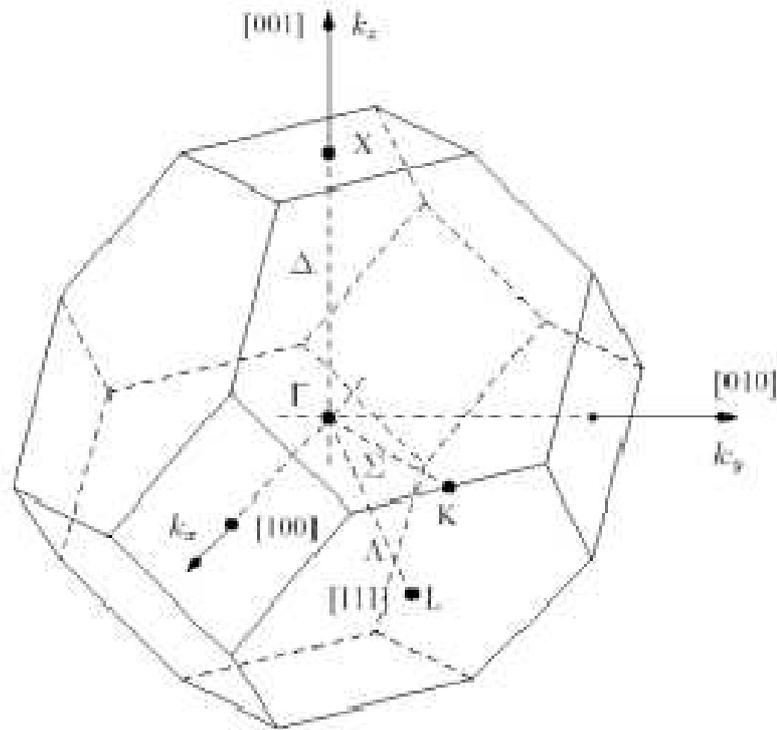


Figure 2.3. La première zone de Brillouin

II.2.2. Bandes d'énergie

Lorsque deux atomes identiques se rapprochent, les orbitales des électrons s'hybrident. Il y a levée de dégénérescence entre les niveaux d'énergie sur chaque atome et il se forme deux niveaux distincts : le niveau liant et le niveau anti-liant. La généralisation de l'interaction entre un nombre infini d'atomes conduit à l'apparition d'un ensemble compact de niveaux liants formant une bande de valence, et de niveaux anti-liants, formant une bande de conduction : ces deux bandes forment des continus d'états permis aux électrons. Il y a apparition d'une bande d'énergie interdite si l'écart entre les deux niveaux de départ est suffisamment grand pour que les bandes de conduction et de valence ne se chevauchent pas [9].

Il y a deux types bien distincts de bandes interdites. Dans un premier cas, le sommet de la bande de valence et le bas de la bande de conduction la plus basse en énergie dans la zone de Brillouin se situe au même endroit de la zone de Brillouin. Nous verrons que les transitions optiques entre les niveaux inférieurs de la bande de conduction et les niveaux supérieurs de la bande de valence se font à k constant. Une telle transition est donc possible entre les deux extrema : une telle bande interdite est dite directe. Dans le ZnSe, les deux extrema sont situés à $k=0$: c'est le point Γ de la zone de Brillouin (figure 2.4 a). Dans un

deuxième cas, le sommet de la bande de valence et le bas de la bande de conduction se situent à deux endroits différents de la zone de Brillouin : une transition entre deux extrema des deux différentes bandes se fait à k non constant : une telle bande interdite est dite indirecte (figure 2.4 b). C'est le cas du silicium [10].

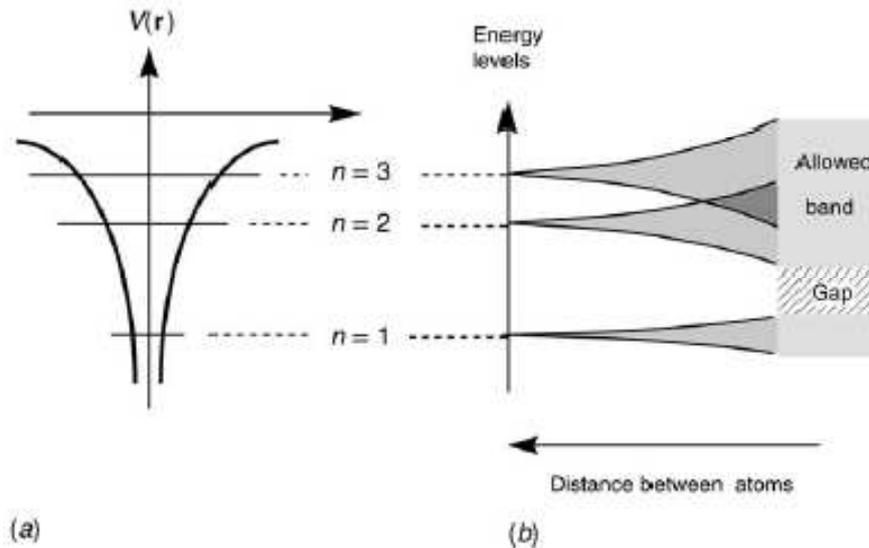


Figure 2.4. Hybridation chimique et bandes d'énergie dans les solides

II.3. Les semiconducteurs II-VI

Les semiconducteurs II-VI sont formés suivant la classification périodique de Mendeleïev à partir des éléments des colonnes II et VI tel que le ZnSe. Ils sont obtenus, soit de monocristaux massifs, soit par croissance épitaxiale de couches minces et cristallisent dans la structure zinc blende ou würtzite [11]. Dans notre étude, c'est la structure zinc blende représentée sur les figures 1.1 et 1.2 qui nous intéresse; elle est caractérisée par deux sous-réseaux à faces centrées décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart d'une diagonale principale du cube élémentaire.

II.3.1. Structure cristalline du ZnSe

Les atomes de zinc et les atomes de sélénium, forment deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la grande diagonale du cube (figure 2.5).

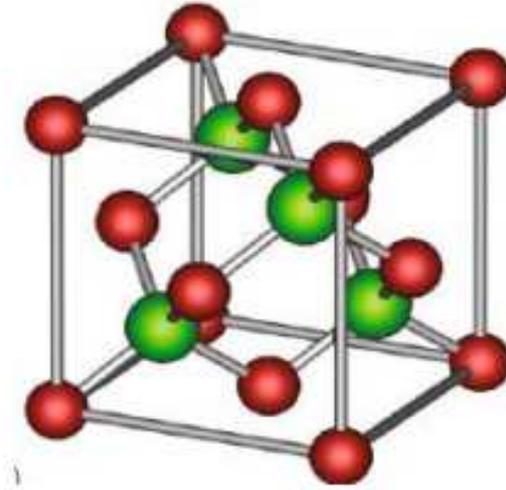


Figure 2.5. Maille zinc-blende d'un semiconducteur II-VI binaire. Elle se compose de deux sous réseaux cubiques à faces centrées, décalés d'un quart de la grande diagonale du cube et occupés l'un par l'anion et l'autre par le cation

II.3.2. Structure de bande du semiconducteur ZnSe

Les semiconducteurs II-VI présentent une structure de bande à gap direct. Le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se trouvent au même point de la zone de Brillouin (point Γ sur la figure 2.6). Le rendement de l'émission lumineuse est alors élevé puisque les transitions radiatives sont alors possibles. Cette propriété ouvre les portes à l'élaboration de dispositifs optoélectroniques tels les diodes lasers ou les diodes électroluminescentes. Une meilleure compréhension de la structure de bande des matériaux II-VI est donc primordiale [12].

Le ZnSe est un semi-conducteur de la famille des II-VI, c'est-à-dire composé d'un élément de la colonne II et d'un élément de la colonne VI, le sélénium. Ce matériau se présente principalement dans une structure « zinc blende », chaque atome de zinc est entouré de quatre atomes de sélénium formant un tétraèdre régulier, La maille cristalline sous cette forme contient donc quatre molécules de ZnSe. Cette structure cristalline présente une faible énergie de phonon optique (31 meV) ce qui a deux effets : tout d'abord la transmission du matériau s'étend jusqu'à l'infrarouge lointain et ensuite, les mécanismes non-radiatif multi-phonon vont être minoritaires ce qui va améliorer la durée de vie d'émission même à température ambiante. Le ZnSe a ainsi été remarqué pour son rendement quantique optique proche de l'unité défini comme le rapport entre la durée de

vie de fluorescence par la durée de vie radiative. Ces éléments font du ZnSe un bon matériau pour les lasers [13].

Les liaisons tétraédriques sont issues de l'hybridation sp^3 des fonctions d'onde des électrons où s et p sont les orbitales atomiques des atomes isolés:

$$|S\rangle, |P_x\rangle, |P_y\rangle, |P_z\rangle$$

Chaque cellule dispose de six orbitales p (trois liantes et trois antiliantes) et deux orbitales s (une liante et une antiliante). Le remplissage des états s'opère de la manière suivante : deux électrons occupent les états liants s et les six autres électrons remplissent les états liants p, tandis que les niveaux antiliants restent vides à basse température. Pour les matériaux solides cristallins, les bandes électroniques prennent la place des niveaux atomiques décrits précédemment; ainsi les trois orbitales p liantes donnent naissance à trois bandes de valence dégénérées au centre de la zone de Brillouin $k = 0$. Cette dégénérescence disparaît partiellement en présence du couplage spin-orbite et conduit à un quadruplet de symétrie Γ_8 correspondant à un moment cinétique total $J = 3/2$ et à un doublet de symétrie Γ_7 ($J = 1/2$). Pour des vecteurs d'onde $k \neq 0$, le quadruplet Γ_8 donne lieu à deux doublets, Γ_{8h} relatif aux trous lourds ($J_z = \pm 3/2$) et Γ_{8l} associé aux trous légers ($J_z = \pm 1/2$). La bande issue des états s anti-liants est appelée bande de conduction. Le couplage spin-orbite sépare les bandes Γ_8 et Γ_7 d'une énergie notée Δ . L'écart d'énergie entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence est appelé énergie de bande interdite ou gap, noté E_g ; c'est un paramètre déterminant pour les propriétés électroniques et optiques du matériau [14].

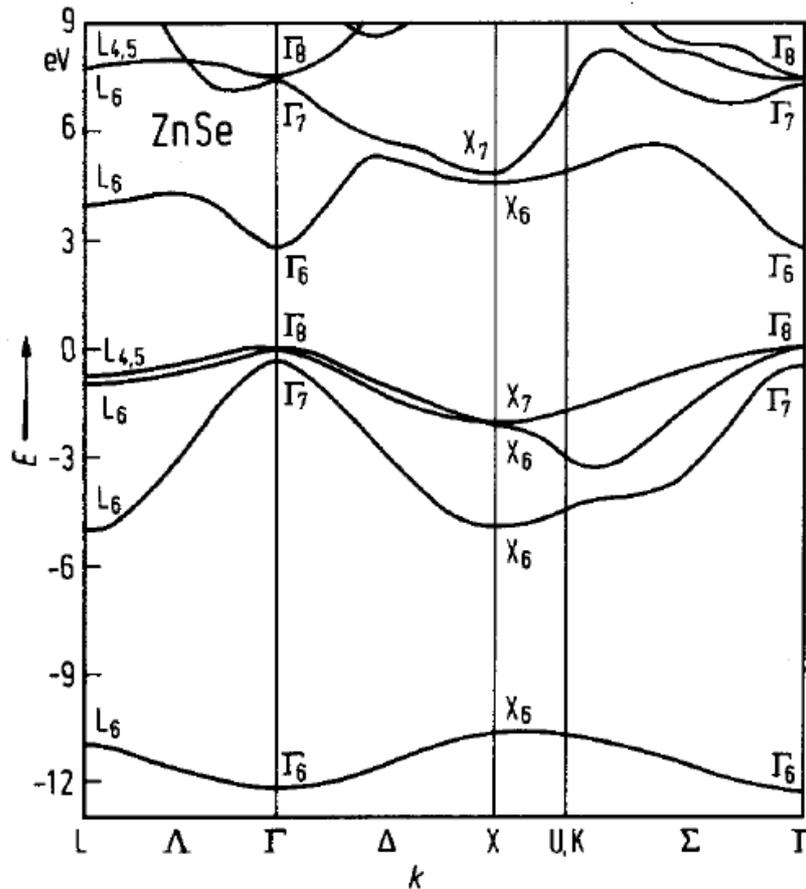


Figure 2.6. Structure de bande du ZnSe cubique

II.3.3. Les alliages ternaires

Il est possible d'avoir un matériau ternaire en combinant deux semi-conducteurs II-VI pour former (II, II) VI ou II (VI, VI). L'avantage principal de se servir de composés ternaires ou quaternaires est que la bande interdite et le paramètre de maille de ces alliages sont ajustables, par conséquent, la longueur d'onde de la lumière émise est ajustable aussi, en autant que l'énergie du photon sera toujours légèrement supérieur à celle de la bande interdite.

Le paramètre de maille varie linéairement avec la concentration de cet atome suivant la loi de Vegard [15]. Dans le cas d'un alliage ternaire $A_{1-x}B_xC$:

$$a_{A_{1-x}B_xC} = (1-x)a_{A-C} + xa_{B-C} \quad (2.8)$$

Contrairement au paramètre de maille, la bande interdite des alliages ternaires ne varie pas linéairement avec la composition entre les valeurs des deux matériaux binaires dont ils sont issus. La valeur de la bande interdite des alliages présentent une non-linéarité plus ou moins forte avec la composition suivant la nature des différents matériaux.

L'origine de ce phénomène peut être attribuée au désordre local de l'alliage [16]. Ainsi, des calculs de structures de bandes prenant en compte les configurations réelles des atomes en substitution sur le site cristallin permettent de déduire ces variations non-linéaires de la bande interdite en fonction de la composition du ternaire. Il a ainsi été démontré que la répartition des atomes substitutionnels sur des sites ordonnés localisés influe sur la courbure (ou "bowing") de l'énergie du gap de l'alliage. Ceci a été publié pour des alliages ayant le cation en commun par Poon et al. [17]. Pour ceux ayant un anion en commun [18], l'effet peut être encore plus marqué avec une relaxation de la position des atomes afin de minimiser l'énergie totale du système.

II.4. Propriétés électroniques et optiques du matériau ternaire $Zn_{1-x}Mg_xSe$

Les alliages semiconducteurs $Zn_{1-x}Mg_xSe$ ont des applications dans les dispositifs optiques dans la région bleue [19]. Pour contribuer à une meilleure compréhension des propriétés des semiconducteurs à base de zinc et de magnésium, nous avons choisi d'étudier l'alliage $Zn_{1-x}Mg_xSe$. Ces alliages sont des candidats prometteurs [20,21] vu leurs gaps d'énergie et leurs constantes du réseau qui peuvent varier dans une large gamme avec la stœchiométrie x . L'électroluminescence bleu-violet obtenue à partir de cristaux de $Zn_{1-x}Mg_xSe$ a montré que ce matériau pourrait également être utilisé pour des dispositifs émetteurs de lumière de courte longueur d'onde [21]. Un laser bleu-vert à base des semiconducteurs II-VI contenant Mg et opérant continuellement à température ambiante avec une durée de vie supérieure à 100 h a été déjà démontré [22,23].

II.4.1. Gaps d'énergie

La dépendance du gap direct $E_{\Gamma-\Gamma}$ au centre de la zone de Brillouin, des gaps indirects $E_{\Gamma-X}$ et $E_{\Gamma-L}$ du $Zn_{1-x}Mg_xSe$ dans la phase zinc blende est montrée sur la Figure 2.7. On note que le gap direct $E_{\Gamma-\Gamma}$ augmente de façon monotone lorsque la composition x augmente de 0 à 1. Les gaps indirects $E_{\Gamma-X}$ et $E_{\Gamma-L}$ augmentent d'abord respectivement jusqu'à $x \approx 0.4$ et $x \approx 0.5$, puis ils diminuent. Notre matériau reste à gap direct sur toute la plage des compositions x (0 à 1). Un comportement similaire a été rapporté dans Réfs. [24,25].

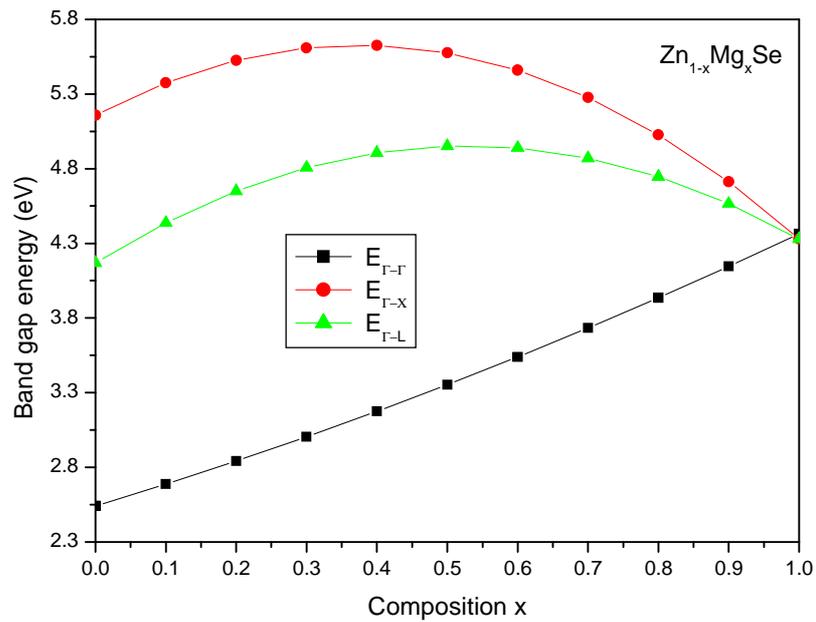


Figure 2.7. Variation des gaps direct $E_{\Gamma-\Gamma}$ et indirects $E_{\Gamma-X}$ et $E_{\Gamma-L}$ en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$

Les gaps d'énergie E_{X-X} et E_{L-L} aux points de haute symétrie X et L de la zone de Brillouin en fonction de la concentration du magnésium ont été également calculés et tracés sur la Figure 2.8. On note que le gap E_{X-X} diminue de façon monotone à mesure que la composition x de l'alliage augmente alors que le gap E_{L-L} augmente sur la même plage de composition.

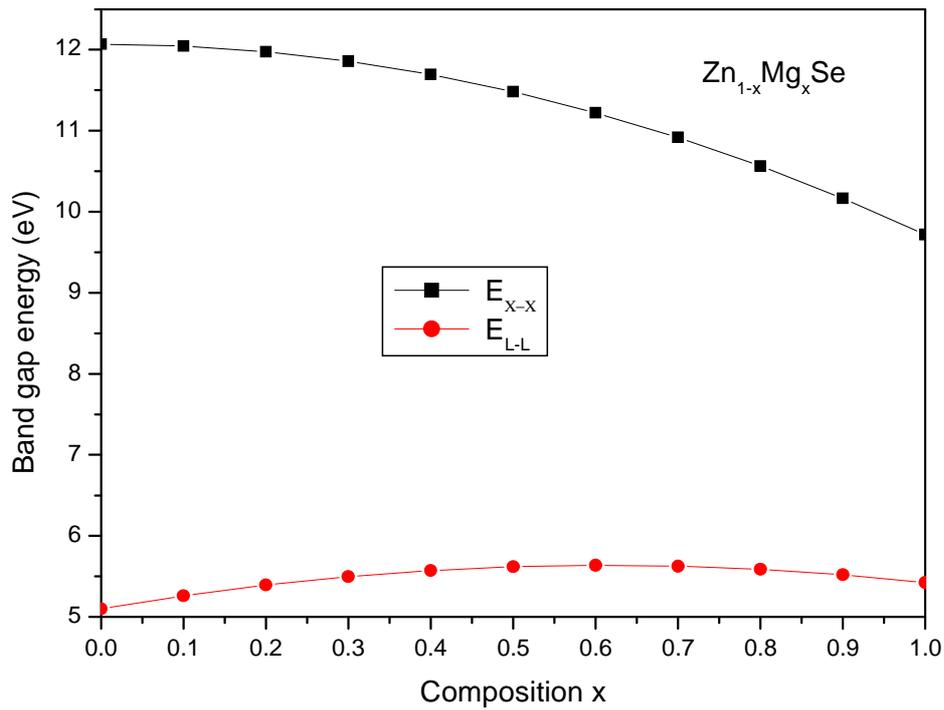


Figure 2.8. Variation des gaps E_{X-X} et E_{L-L} en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$

II.4.2. Largeur de la bande de valence

La variation de la largeur de la bande de valence du $Zn_{1-x}Mg_xSe$ avec la composition x est illustrée sur la Figure 2.9. Elle diminue de façon monotone lorsque la composition x augmente de 0 à 1. Ainsi l'ionicité de notre matériau diminuerait à mesure que l'on incorpore davantage d'atomes Mg.

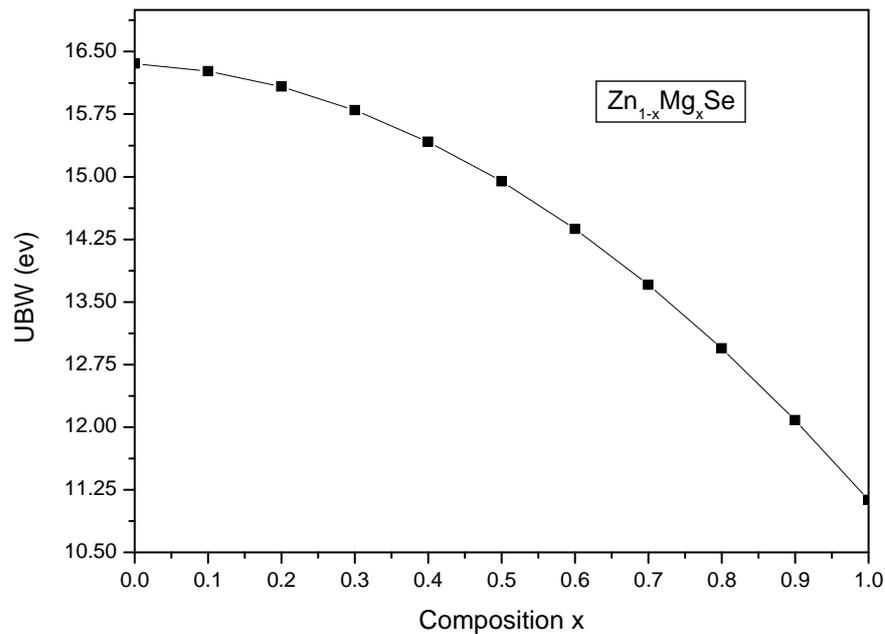


Figure 2.9. Variation de la largeur de la bande de valence en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$

II.4.3. Gap antisymétrique

Une autre propriété importante observée dans la structure des bandes est l'existence d'un *gap* énergétique entre la première et la deuxième bande de valence au point de haute symétrie X . Ce *gap* dit *antisymétrique* a été proposé par Chelikowsky *et al.* [26] comme une mesure qualitative de l'ionocité du cristal. En effet, il augmente avec la croissance de l'ionocité ou du transfert de charge. Ceci a été confirmé par Bouarissa et collaborateurs dans leurs travaux sur les semiconducteurs IV-IV, III-V et II-VI [27-29].

La Figure 2.10 montre que ce *gap* antisymétrique dans le $Zn_{1-x}Mg_xSe$ diminue à mesure que la composition x augmente indiquant par conséquent une augmentation de l'ionocité de notre matériau. Ce résultat a pu être prédit à partir du comportement de la largeur de la bande de valence.

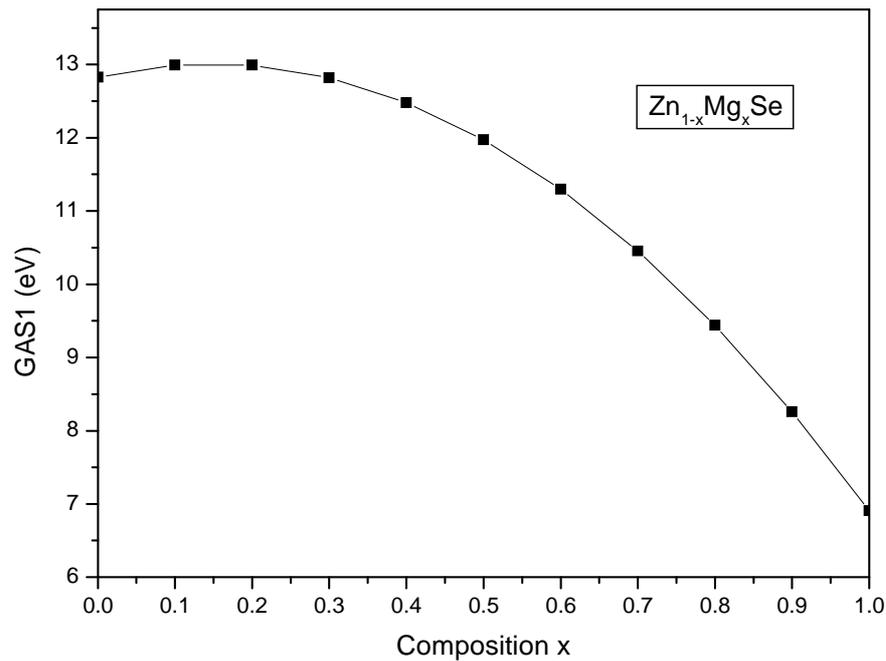


Figure 2.10. Variation du gap antisymétrique en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$

II.4.4. Masses effectives des porteurs

Les masses effectives des électrons et des trous lourds sont des paramètres qui peuvent donner d'importantes informations sur les propriétés de transport dans les semiconducteurs. Ces paramètres peuvent être obtenus à partir de la structure des bandes d'énergie du matériau.

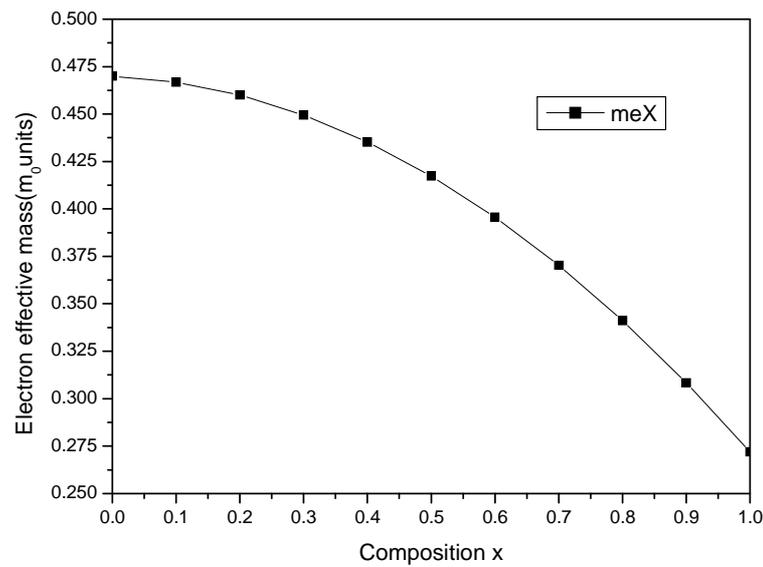
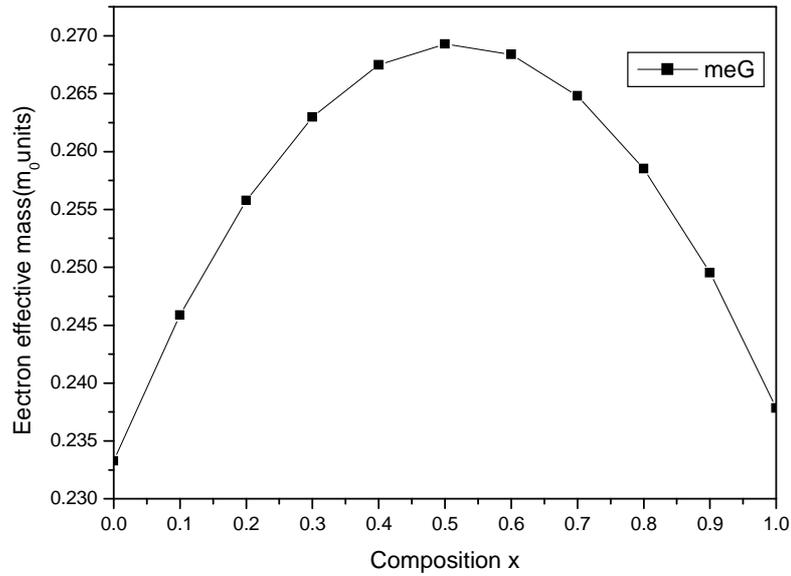
Théoriquement la masse effective est généralement un tenseur de rang 2 et dépend donc de la direction. Cependant, si l'on considère l'approximation des bandes paraboliques, on peut déterminer les masses effectives au voisinage du maximum de la bande de valence et du minimum de la bande de conduction, comme étant des scalaires, à partir de la courbure des bandes selon l'expression suivante [30] :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{4\pi}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \quad (2.9)$$

k étant le vecteur d'onde et h la constante de Planck.

Les masses effectives des électrons aux points de haute symétrie Γ , X et L ont été calculées. Leur évolution en fonction de la composition x de l'alliage $Zn_{1-x}Mg_xSe$ est

montrée sur la Figure 2.11. La masse effective des électrons au point Γ augmente d'abord pour x variant de 0 à 0.5 puis diminue au-delà de $x=0.5$. La masse effective au point X diminue d'une manière monotone lorsque la composition x augmente de 0 à 1, alors que la masse effective au point L augmente, de la même façon, sur la même gamme de concentrations.



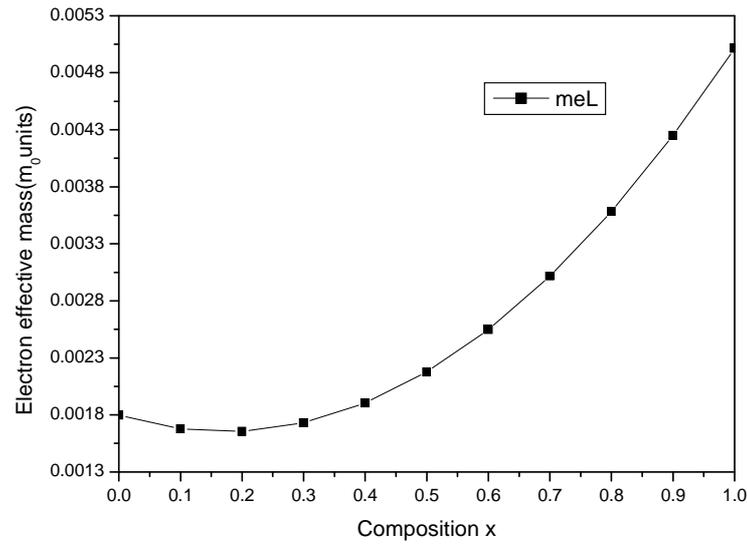


Figure 2.11. Variation de la masse effective des électrons (en unité de m_0) en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$ aux points de haute symétrie Γ , X et L

La masse effective des trous lourds au centre de la zone de Brillouin a été examinée et représentée sur la Figure 2.12. Cette masse effective augmente d'abord pour x entre 0 et 0.2 puis diminue pour x entre 0.2 et 1.

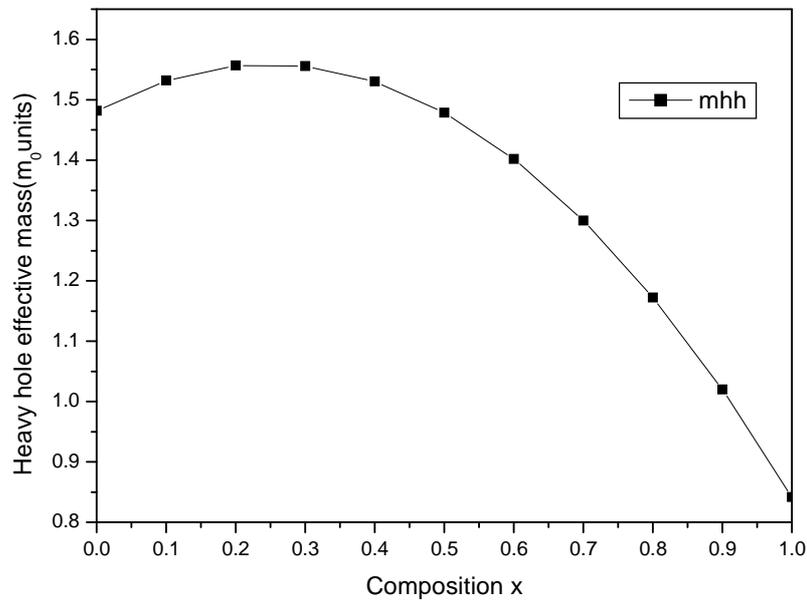


Figure 2.12. Variation de la masse effective des trous lourds (en unité de m_0) en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$

II.4.5. Indice de réfraction

La connaissance de l'indice de réfraction est d'une grande importance dans la conception des composants à hétérostructures ainsi que d'autres dispositifs à guidage d'onde. C'est pourquoi nous nous sommes intéressés à déterminer cet indice de réfraction dans le cas de notre matériau.

L'indice de réfraction est calculé en utilisant l'expression empirique de Herve et Vandamme [31] :

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B}\right)^2} \quad (2.10)$$

où $A = 13.6$ eV et $B = 3.4$ eV.

Nous avons adopté ce modèle car il est connu pour donner des résultats en meilleur accord avec l'expérience pour les semiconducteurs III-V que d'autres modèles [32,33].

La Figure 2.13 représente l'indice de réfraction comme fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$ dans l'intervalle 0-1. On remarque que cet indice de réfraction diminue d'une manière monotone lorsque la composition x augmente de 0 à 1. On peut donc affirmer que toute augmentation de la composition x de l'alliage réduit considérablement l'indice de réfraction.

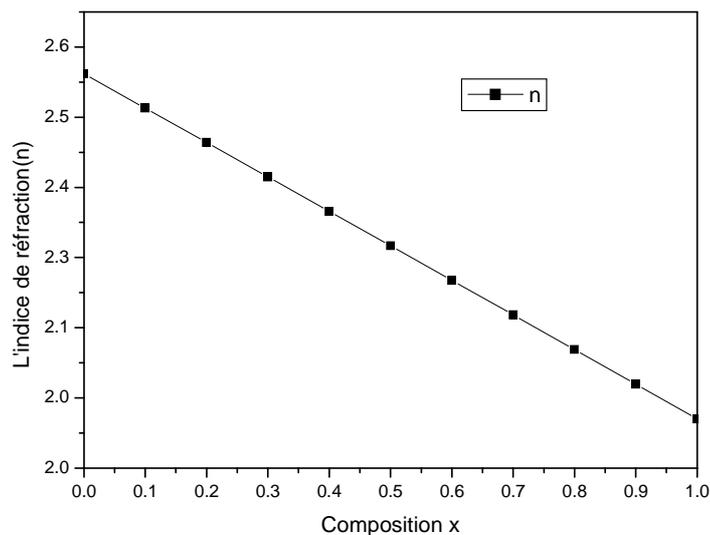


Figure 2.13. Variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$

II.4.6. Constantes diélectriques

La constante diélectrique constitue une information essentielle lors de la conception des condensateurs ainsi que dans d'autres conditions où un matériau devrait introduire une capacité dans un circuit. Dans les matériaux polaires les déplacements atomiques créent des dipôles.

La constante diélectrique de haute fréquence ϵ_∞ est déterminée comme le carré de l'indice de réfraction [34] :

$$\epsilon_\infty = n^2 \quad (2.11)$$

Quant à la constante diélectrique statique ϵ_0 , elle est reliée à celle de haute fréquence à travers le modèle de Harrison [34] :

$$\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_\infty - 1} = 1 + v \quad (2.12)$$

où

$$v = \frac{\alpha_p^2(1 + 2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \quad (2.13)$$

α_p et α_c étant respectivement la polarité et la covalencité du matériau reliées par [34] :

$$\alpha_c^2 = 1 - \alpha_p^2 \quad (2.14)$$

La Figure 2.14 illustre le comportement des constantes diélectriques statiques et de haute fréquence de l'alliage $Zn_{1-x}Mg_xSe$ lorsque la concentration du magnésium varie de 0 à 1. On note que la constante diélectrique statique augmente de façon monotone avec la composition x alors que la constante diélectrique de haute fréquence diminue quasi-linéairement.

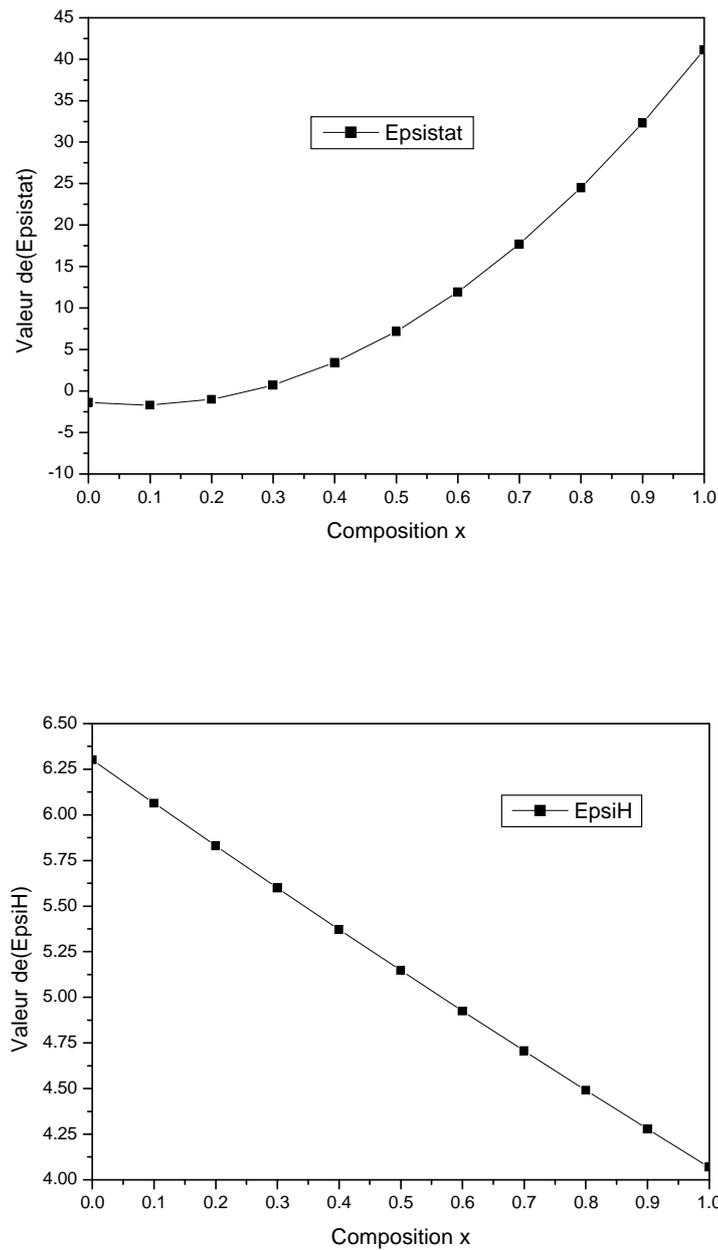


Figure 2.14. Variation de la constante diélectrique statique et de haute fréquence en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$

II.5. Propriétés élastiques du matériau ternaire $Zn_{1-x}Mg_xSe$

Les propriétés élastiques d'un matériau jouent un rôle prépondérant dans l'étude de l'effet des contraintes (*strain*) sur les propriétés électroniques et dans la détermination des discontinuités de bandes au niveau des hétérointerfaces [35]. Pour ce faire nous avons déterminés d'abord les constantes élastiques de notre matériau $Zn_{1-x}Mg_xSe$. S'agissant d'une structure à symétrie cubique, seules trois constantes C_{11} , C_{12} et C_{44} sont à déterminer.

II.5.1. Constantes élastiques

Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} de notre alliage $Zn_{1-x}Mg_xSe$ ont été déterminées pour diverses concentrations de magnésium dans la gamme 0-1. L'accord entre nos résultats et ceux expérimentaux est généralement satisfaisant. Vu la non disponibilité de données pour toutes les compositions du $Zn_{1-x}Mg_xSe$, nos résultats peuvent servir de référence. La dépendance des constantes élastiques de la concentration x de magnésium est montrée sur la Figure 2.15. Lorsque x varie de 0 à 1, toutes les constantes élastiques diminuent avec des taux différents mais en gardant toujours le même comportement qualitatif. Pour les composés parents nos résultats sont en accord avec les valeurs rapportés dans la littérature [36] dans la limite de 5%.

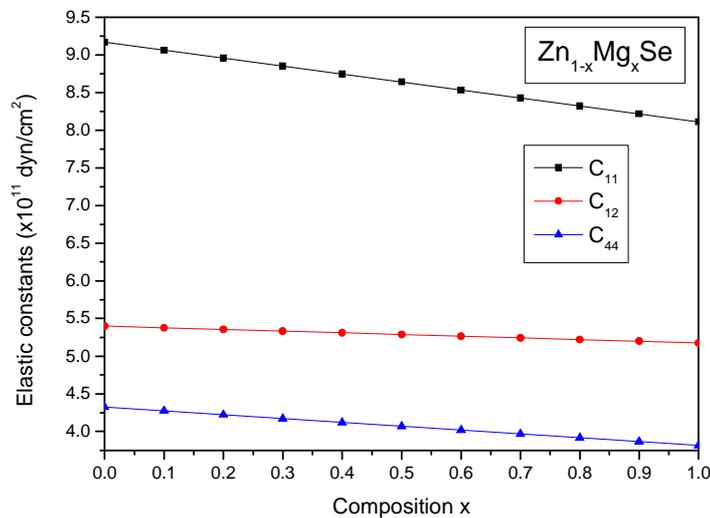


Figure 2.15. Variation constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$

II.5.2. Module de compression

La détermination des constantes élastiques rend possible le calcul du module de compression B_s , de cisaillement C' et d'Young Y_0 . La variation du module de compression en fonction de la composition x allant de 0 à 1 est montrée sur la Figure 2.16. B_s diminue à mesure que l'on incorpore d'avantage d'atomes de magnésium. Ceci indique que l'incorporation de Mg dans le ZnSe conduit à une diminution de la rigidité de notre cristal. Pour les composés parents nos résultats sont en accord avec les valeurs rapportés dans la littérature [36] dans la limite de 5%.

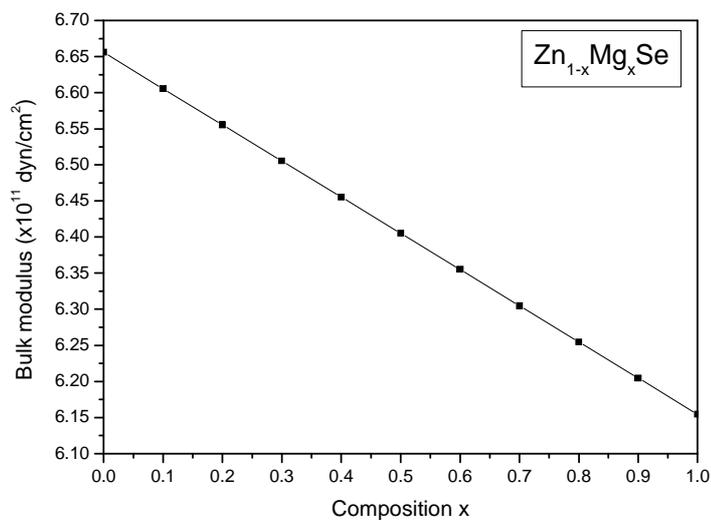


Figure 2.16. Module de compression B_s , en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$

II.5.3. Module de cisaillement

Pareil au comportement du module de compression, le module de cisaillement C' du $Zn_{1-x}Mg_xSe$, représenté sur la Figure 2.17, diminue lorsque la composition x augmente de 0 à 1. L'on peut conclure aussi de ce résultat une diminution de la rigidité de notre matériau.

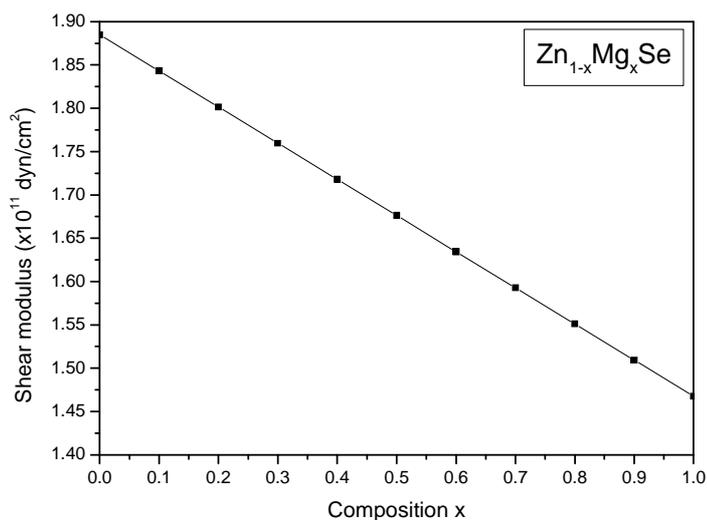


Figure 2.17. Variation du module de cisaillement C' en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$

II.5.4. Facteur d'anisotropie

La Figure 2.18 représente comment varie le facteur d'anisotropie A du $Zn_{1-x}Mg_xSe$ lorsque la composition de l'alliage augmente de 0 à 1. A diminue quand x augmente. Ainsi, notre matériaux devient de moins en moins anisotrope à mesure que l'on va du ZnSe au MgSe.

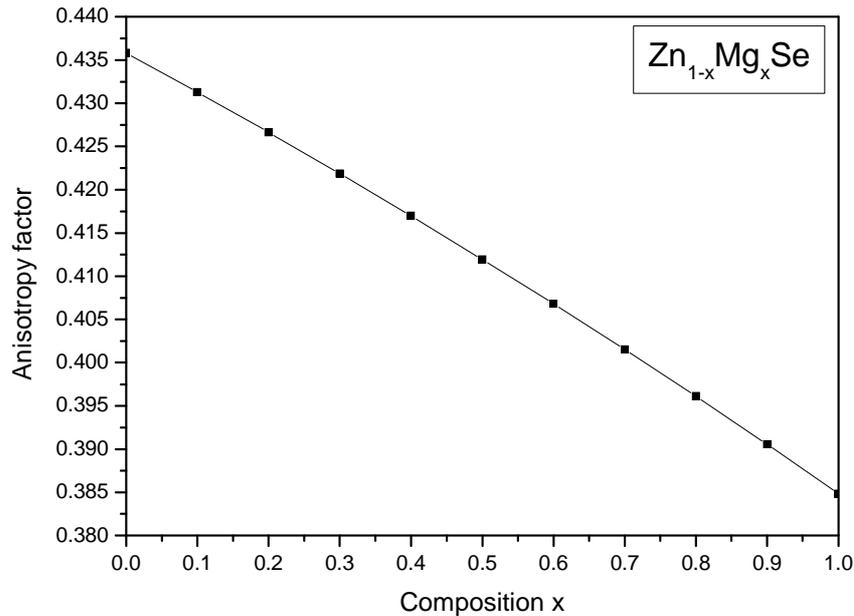


Figure 2.18. Variation facteur d'anisotropie A en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$

II.5.5. Module d'Young

Le module d'Young Y_0 de notre matériau a été calculé pour diverses compositions de magnésium dans l'intervalle 0-1. Les résultats de calcul sont représentés sur la Figure 2.19. L'on note que l'augmentation de la composition x résulte en une diminution du module d'Young Y_0 de notre alliage. Nos résultats calculés pour les composés parents de notre alliage sont en bon accord avec les valeurs rapportées dans la Réf. [36].

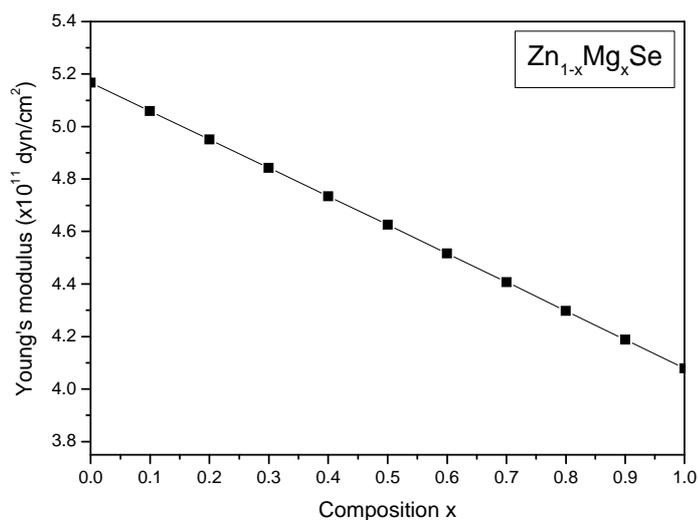


Figure 2.19. Variation du module d'Young Y_0 en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$

II.5.6. Coefficient de Poisson

Etant déterminées les constantes élastiques permettent de calculer le coefficient de Poisson. La Figure 2.20 illustre l'amélioration de ce paramètre lorsque la composition x de l'alliage croit de 0 à 1. Néanmoins, cette amélioration demeure faible comme il est bien connu dans le cas des alliages III-V.

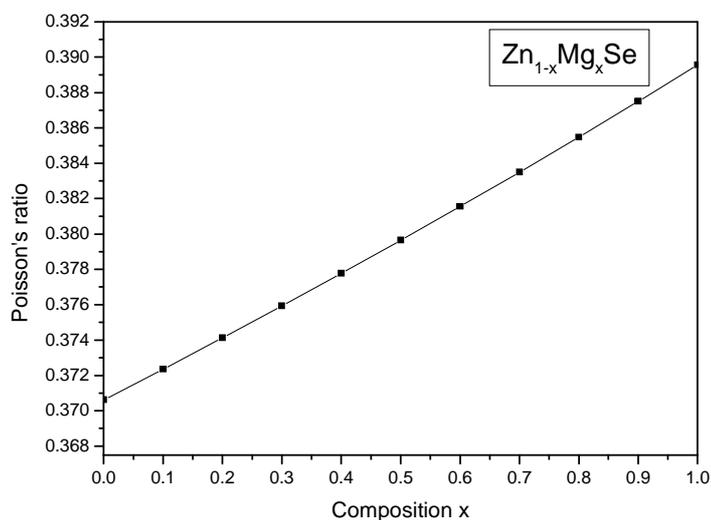


Figure 2.20. Variation du coefficient de Poisson ν en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$

On peut récapituler les résultats pour $x= 0.08$ dans le tableau 1, cette valeur pour x va nous permettre dans le chapitre IV d'avoir une structure à puits quantique qui émet dans le bleu.

Tableau 1 : paramètres physiques du matériau $Mg_xZn_{1-x}Se$ pour $x=0.08$

Paramètres	Symboles	Valeurs
Gaps direct et indirects	$E_{\Gamma-\Gamma}, E_{\Gamma-X}, E_{\Gamma-L}$	2.6, 4.45, 5.32
Les gaps	E_{L-L}, E_{X-X}	5.3, 12
Largeur de la bande de valence	UBW	16.10
Gap antisymétrique	GAS1	12.95
La masse effective des électrons	$m_{\text{gamma}}, m_x, m_L$	0.245, 0.465, 0.016
La masse effective des trous lourds	mhh	1.52
L'indice de réfraction	n	2.51
la constante diélectrique statique	ϵ_0	2.4
La constante diélectrique de haute fréquence	ϵ_∞	6.10
Constantes élastiques	C_{11}, C_{12}, C_{44}	9, 5.4, 4.26
Module de compression	B_s	6.61
Module de cisaillement	C'	1.85
Facteur d'anisotropie	A	0.432
Le module d'Young	Y_0	5.08
Coefficient de Poisson	ν	0.372

II.6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons détaillé la structure de bandes du matériau ZnSe et calculé les propriétés physiques (structurales, électroniques, optiques et élastiques) du matériau $Mg_xZn_{1-x}Se$ qui sont utiles dans notre travail et qui ne sont pas connues ou au moins que peu d'études ont été effectuées sur ce matériau jusqu'à nos jours c'est pour ça, nous voyons notre modeste travail en tant qu'une contribution scientifique pour ceux qui vont utiliser ce matériau dans les diverses applications physiques.

Références

- [1] M.A. Parker, "Physics of Optoelectronics", CRC Press, New York, 2004.
- [2] M. A. Haase, J. Qiu, J. M. De Puydt and H, Cheng, "Blue-green diode lasers", Appl. Phys. Lett., **59**, 1272–1274, 1991.
- [3] C. Van de Walle, "II–VI blue/green light emitters. In Semiconductors and Semimetals", Vol. 44, ed, R. Gunshor and A. Nurmikko. San Diego: Academic Press, pp. 122–160 1997.
- [4] C. Lamberti, "Characterization of Semiconductor Heterostructures and Nanostructures", Elsevier B.V 2008.
- [5] Seoung-Hwan Park, Polarization characteristics of 480–680 nm $(1 \times 1 \times \bar{2})$ InGaN/GaN quantum well structures with strain relaxation effects, Superlattices and Microstructures 86 531–535 (2015)
- [6] J. H. Davies and A. R. Long, Eds, "Physics of nanostructures", IOP Publishing, Bristol, 1992.
- [7] N. W. Ashcroft, and N. D. Mermin, "Physique des solides", Les Ulis, première ed, 2002.
- [8] M. G. Burt, "Fundamentals of envelope function theory for electronic states and photonic modes in nanostructures", J. Phys Condensed Matter, 9:R53, 1999.
- [9] M. G. Burt, "Fundamentals of envelope function theory for electronic states and photonic modes in nanostructures", J. Phys Condensed Matter, 9:R53, 1999.
- [10] S. Peter, Jr. Zory, "Quantum well lasers", Academic Press. Inc, 1993.
- [11] M.A. Ghebouli, H. Choutri, N. Bouarissa, Band structure, structural properties and stability of $CaxMg_{1-x}S$ alloys, Phys. Scr, 87 015701, 2013.
- [12] W. P. Risk, T. R. Gosnell, A. V. Nurmikko, "Compact blue-green lasers", Cambridge University Press, 2003
- [13] T. Chungy, J. H. Ohz, S. Leey, J. Jeongy and K. J. Changy, "Optical properties of ZnSSe/ZnMgSSe quantum wells", Semicond. Sci. Technol. 701–707, 1997.
- [14] J. Piprek, "Optoelectronic devices advanced simulation and analysis", Springer Science+Business Media, Inc, 2005.
- [15] L. Vegard, "Die Konstitution der Mischkristalle und die Raumfüllung der Atome". Zeitschrift für Physik. 5 (1): 17–26, 1921.
- [16] H. Mariette, J. Chevalier, P. Leroux-Hugon, "Local-Environment Effect on the Nitrogen Bound State in GaP_xAs_{1-x} Alloys : Experiments and Coherent-Potential Approximation", Theory Phys. Rev. B 21, 5706, 1980.
- [17] H.C.Poon, Z.C.Feng, Y.P.Feng, M.F. Li, "Relativistic Band Structure of Ternary II-VI Semiconductor Alloys Containing Cd, Zn, Se and Te", J. Phys. Condens. Matter 7, 2783, 1995.
- [18] S.H. Wei, A. Zunger, "Disorder Effects on the Density of States of the II-VI Semiconductor Alloys $Hg_{0.5}Cd_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Zn_{0.5}Te$ and $Hg_{0.5}Zn_{0.5}Te$ " Phys. Rev. B 43, 1662, 1991.
- [19] S.A. Park, H.J. Song, W.T. Kim, H.G. Kim, M.S. Jin, C.D. Kim, C.S. Yoon, J. Appl. Phys. 83 (1998) 3429.
- [20] H. Okuyama, Y. Kishita and A. Ishibashi, Phys. Rev. B 57 (1998) 2257.
- [21] X. Liu, U. Bindley, Y. Sasaki and J.K. Furdyna, J. Appl. Phys. 91 (2002) 2859.
- [22] S. Taniguchi, T. Hino, S. Itoh, K. Nakano, N. Nakayama, A. Ishibashi and M. Ikeda, Electron. Lett. 32 (1996) 552.
- [23] A. Cavus, L. Zeng, M.C. Tamargo, N. Bamvpha, A. Semendy and A. Gray, J. Appl. Phys. 68 (1996) 3446.

- [24] Z.Charifi, H. Baaziz, N. Bouarissa, "Predicted electronic properties of zinc-blende $Zn_{1-x}Mg_xSe$ alloys Mater", Chem. Phys. 84 273, 2004.
- [25] S.A. Park, H.J. Song, W.T.Kim, H.G. Kim, M.S. Jin, C.D. Kim, C.S. Yoon, J. Appl. Phys. 83 3429, 1998.
- [26] J.R.Chelikowsky, T.J.Wagner, A.Jin, and J.H.Weaver, Phys. Rev. B 40 9644, 1989.
- [27] N.Bouarissa, R.N.West, and H.Aourag, "Positron annihilation in narrow-gap semiconductors", Phys. Stat. Sol. (b) 188 723, 1995.
- [28] N.Bouarissa, "Substrate effect on the electronic structure in $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/GaSb$ and $Ga_xIn_{1-x}As_ySb_{1-y}/InAs$ ", Infrared Phys. Technol. 10 (1999) 423 and references cited therein.
- [29] A.Bechiri, N.Bouarissa, "Energy band gaps for the $GaxIn_{1-x}AsyP_{1-y}$ alloys lattice matched to different substrates", Superlatt. Microstruct. 39 (2006) 478 and references cited therein.
- [30] W.Nakwaski, "Effective masses of electrons and heavy holes in GaAs, InAs, AlAs and their ternary compounds", Physica B 210, 1995.
- [31] P.J.L. Herve, L.K.J. Vandamme, "General relation between refractive index and energy gap in semiconductors", Infrared Phys. Technol. 35 609, 1994.
- [32] S. Sakai, Y. Ueta, and Y. Terauchi, "Band Gap Energy and Band Lineup of III-V Alloy Semiconductors Incorporating Nitrogen and Boron", Jpn. J. Appl. Phys. Part 1 32 4413, 1993
- [33] M.Kondow, K.Uomi, K.Hosomi, and T.Mozume, "Gas-Source Molecular Beam Epitaxy of GaN_xAs_{1-x} Using a N Radical as the N Source", Jpn. J. Appl. Phys. 33 L1056, 1994.
- [34] G.A.Samara, "Temperature and pressure dependences of the dielectric constants of semiconductors", Phys. Rev. B 27 (1983) 3494.
- [35] A. Gueddim, and N. Bouarissa, "Theoretical investigation of the conduction and valence band offsets of $GaAs_{1-x}N_x / GaAs_{1-y}N_y$ heterointerfaces", Appl.Surf.Sci. 253 7336, 2007.
- [36] S.Adachi, "Properties of group-IV, III-V and II-VI semiconductors", J.Wiley and Sons, England, 2005.

Chapitre III
ETUDE QUANTIQUE
DU GAIN OPTIQUE

Chapitre : III

ETUDE QUANTIQUE DU GAIN OPTIQUE

III.1. Introduction

Le gain optique dans un laser à puits quantique contraint en fonction de la structure microscopique a fait l'objet de nombreux travaux aussi bien expérimentaux que théoriques [1-6]. Ce chapitre a pour objet de développer le calcul du gain optique. Les niveaux d'énergies des électrons, des trous lourds et des trous légers dans le puits quantique sont déterminés par la résolution de l'équation de Schrödinger dans l'approximation de la fonction enveloppe [7]. Le décalage des niveaux d'énergie du à la contrainte est considéré. Une structure des bandes parabolique anisotropique est utilisée afin d'approximer la bande de valence par la théorie kp de Luttinger Kohn pour faciliter par la suite la simulation utilisée dans ce travail [8]. Il s'agit donc d'évaluer le rapport entre le nombre net de photons et le nombre de photons injectés dans la zone active du composant.

III.2. Puits quantique**III.2.1. Introduction**

Grâce au développement de la croissance, il est devenu possible d'élaborer des structures de types puits quantiques [10]. Par ces propriétés optiques et électroniques fort intéressantes du fait que le comportement physique de la structure est quantique, il a suscité un intérêt considérable et a été l'objet de nombreuses études durant les dernières décennies [11].

On forme un puits de potentiel par la superposition d'une fine couche de matériau semi-conducteurs (quelques nanomètres) de faible gap B entre deux barrière de matériaux semi-conducteurs de plus grand gap A , Cela conduit à une discontinuité des bandes de valence et de conduction à l'origine de la création d'un puits de potentiel aussi bien pour les trous que pour les électrons. Une telle structure confine les porteurs dans la direction croissance. Les états électroniques ne se situent plus ni au sommet de la bande de valence ni au minimum de la bande de conduction mais sont quantifiés en niveaux d'énergie discrets, d'ou l'intérêt de son utilisation dans la zone active d'un laser, c'est-à-dire pour des épaisseurs de puits inférieures typiquement à 300 Å.

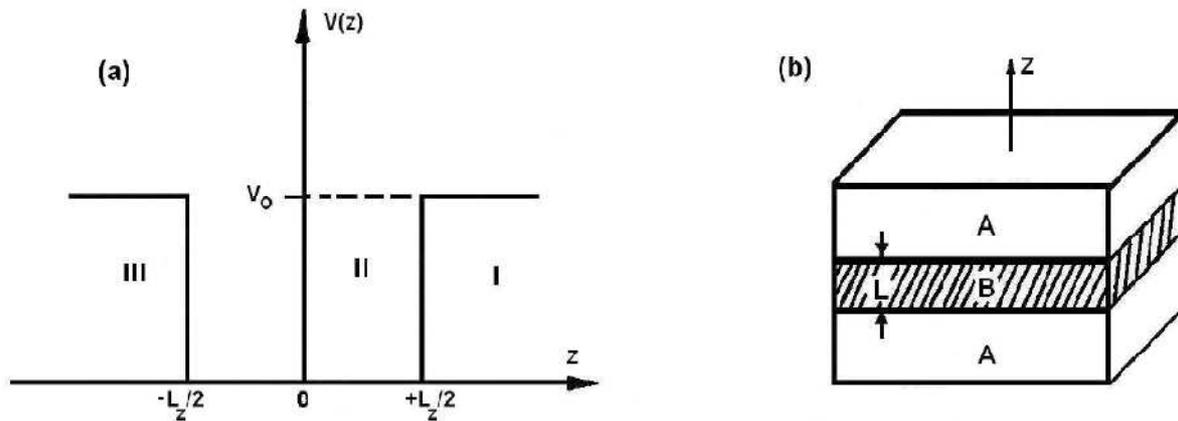


Figure 3.1. (a) Puits quantique carré de largeur Lz et de hauteur V_0 ; (b) : Couche d'un matériau semi-conducteur A possédant un gap inférieur à celui du matériau semi-conducteur B.

Dans les systèmes à puits quantiques le mouvement de l'électron est libre dans le plan de la couche mais n'est pas possible suivant la direction de croissance. Nous parlons ainsi d'une structure bidimensionnelle [12,13]. En raison de la faible largeur du puits, les niveaux d'énergie des porteurs sont quantifiés suivant la direction de croissance. Pour réaliser un laser à puits quantique qui émet dans le bleu, il faut bien adapter le choix des matériaux répondant aux besoins. Les principaux paramètres pilotant ce choix sont :

III.2.1.1. Paramètres de maille

Pour l'élaboration des puits quantiques, on cherche à accorder les paramètres de maille des couches successives, afin de limiter les contraintes donc les défauts. La figure (3.2) reporte les énergies de bandes interdites en fonction du paramètre de maille pour quelques uns des systèmes cubiques de trois grandes familles de semi-conducteur [13]: II-VI, III-V et IV-IV. Ce tableau nous permet de voir toutes les combinaisons possibles ainsi que leur efficacité du point de vue des énergies pour les études optiques.

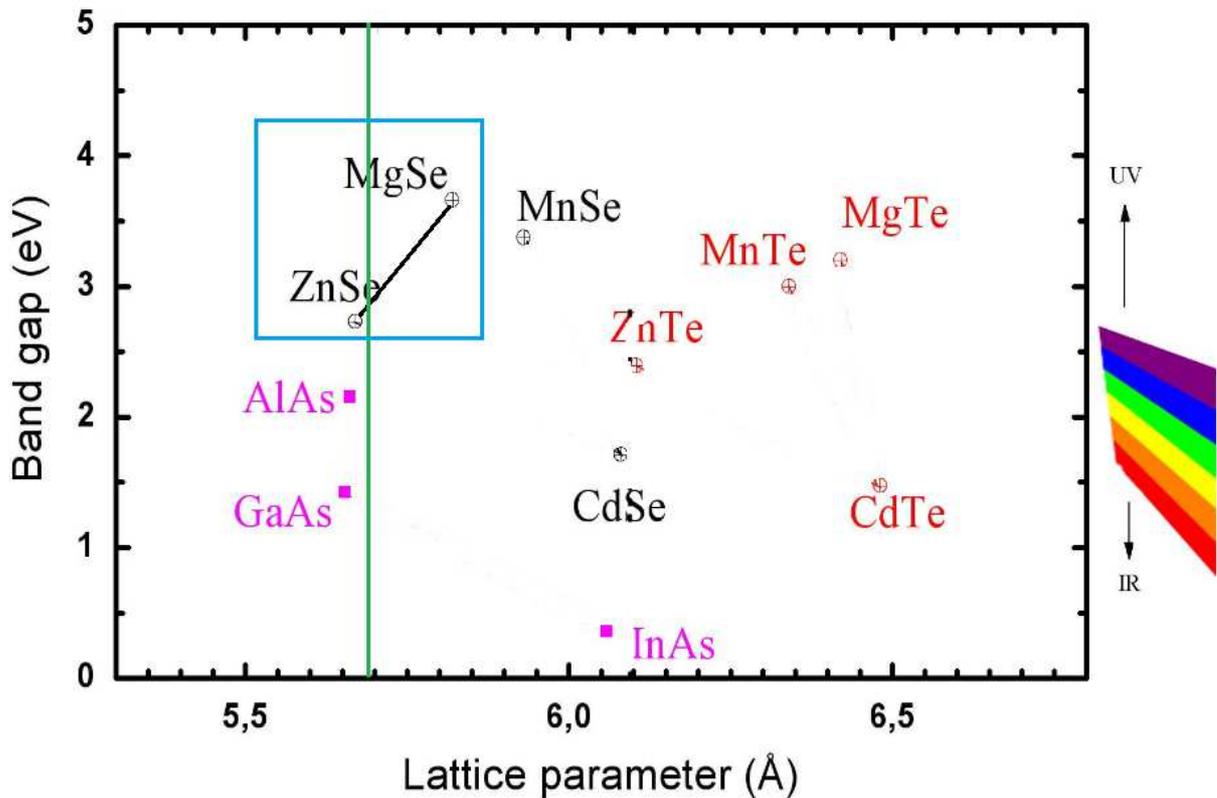


Figure 3.2. Diagramme présentant les propriétés de bande interdite (en ordonnée) et paramètre de maille (en abscisse) de différentes famille de semi-conducteurs : les sélénures, les tellurures et les arséniures. La ligne de pointillés verticaux indique le paramètre de maille moyen des structures présentées dans cette thèse.

III.2.1.2. Energie de la bande interdite

Une caractéristique importante à noter est la répartition de la bande interdite dans une hétérostructure. En fait, les positions relatives des bas de bandes de conduction et des hauts de bande de valence sont d'une importance capitale pour les propriétés optiques et optoélectroniques [14]. Le choix des matériaux d'un dispositif prend énormément en compte la nature de l'alignement de bande d'énergie de ces constituants. Van Del WALL et al. [15] présente une étude concernant l'alignement relatif de bande interdite d'une large famille des matériaux présentée sur la figure (3.3).

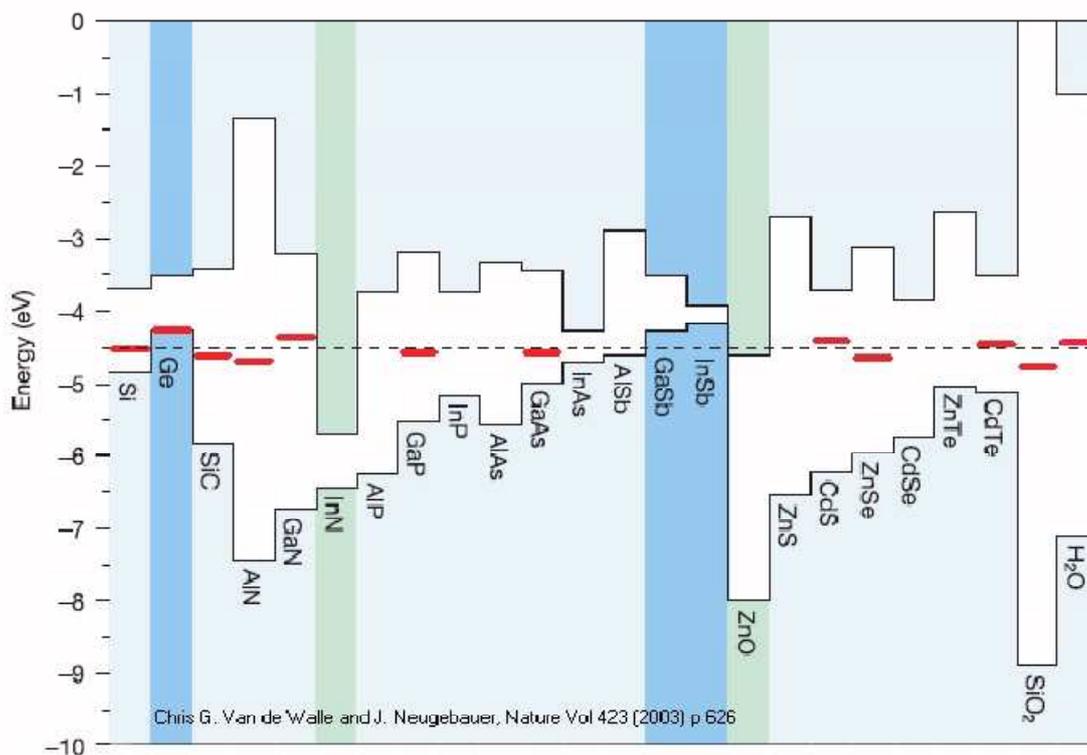


Figure 3.3 Figure extraite de "Universal alignment of hydrogen levels in semiconductors, insulators and solutions", Van de Walle et Neugebauer, illustrant les alignements de bandes calculés pour quelques matériaux des colonnes IV, III-V et II-VI de la classification périodique notamment.

On constate la présence de deux principaux cas de figure : alignement de type-I et un autre type d'accordement de bande interdite de type-II.

Dans une structure de type-I : les électrons et les trous se trouvent confinés dans la même couche (chapitre I) et la répartition des différences de bande interdite entre la bande de valence et la bande de conduction dépend de la nature des deux différents matériaux considérés. Par exemple, dans le cas de l'hétérojonction $\text{ZnSe} / \text{Mg}_x \text{Zn}_{1-x} \text{Se}$, le décalage de bande de valence est de l'ordre de 20% de la bande interdite et les 80% restant constituent le décalage des bandes de conduction avec une fraction molaire du Magnésium de l'ordre de $x=0.08$. Ces valeurs de décalage ont été déterminées expérimentalement à partir des propriétés optiques des hétérostructures réalisées avec les matériaux correspondants [16].

III.2.1.3. 1'affinité électronique

La seconde caractéristique essentielle pour construire le diagramme de bandes d'énergie d'une hétérojonction est l'affinité électronique qui est pris dans notre travail une Constante dans le cas du ZnSe $\chi=4,38\text{eV}$ [17] qui correspond à la valeur estimé par Pawlis et all [16].

Par contre, dans le cas du $Mg_xZn_{1-x}Se$, l'affinité électronique est un paramètre mal connu, difficile à déterminer qui dépend de la composition atomique du matériau. La plupart des auteurs, utilisent des relations semi-empiriques obtenues à partir de l'affinité électronique des semiconducteurs correspondant aux cas extrêmes qui sont dans notre cas le ZnSe ($x=0$) et MgSe ($x=1$) [17].

III.2.2. Fonctions d'ondes et niveaux d'énergie

La figure 3.1.b schématise un PQ carré de profondeur finie V_0 et de largeur L_z .

Le potentiel $V(z)$ est défini par la relation :

$$V(w) = \begin{cases} 0 & \text{si } |z| < L_z/2 \\ V_0 & \text{si } |z| > L_z/2 \end{cases} \quad (3.1)$$

L'équation de Schrödinger en l'absence d'une interaction électron-trou s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(z) \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (3.2)$$

Où m_{xx}^* est la masse effective de la particule (électron ou trou), E et ψ sont, respectivement, la valeur propre de l'énergie et la fonction d'onde de la particule.

Le potentiel V est supposé être fonction de la coordonnée z seulement, dans ce cas, la fonction d'onde peut être séparée en deux fonctions, la première $\Phi(x, y)$ décrit le mouvement de la particule dans le plan xy du PQ et la deuxième $\zeta(z)$ fonction uniquement de la variable z pour le mouvement dans la direction z , soit :

$$\psi(x, y, z) = \Phi(x, y) \cdot \zeta(z) \quad (3.3)$$

L'énergie de la particule est la somme de deux termes et s'écrit :

$$E = E_z^n + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m_{xx}^*} \quad (3.4)$$

Où $xx = c, hh, lh$

Le premier terme E_z^n est l'énergie de la particule dans la direction z et le deuxième désigne son énergie cinétique dans le plan xy .

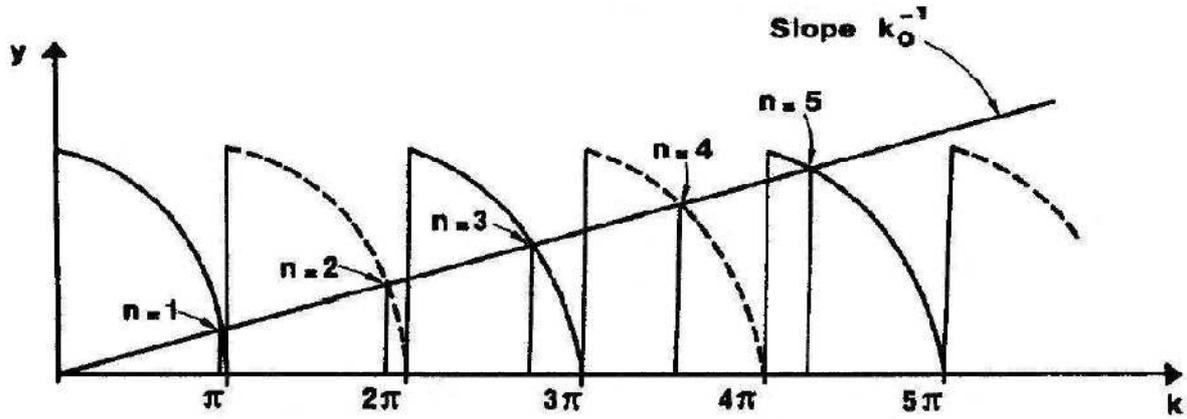


Figure 3.4. Solutions graphiques des équations 3.7 et 3.8. Les solutions paires et impaires correspondent à l'intersection de la droite de pente $k_0^{-1} = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0}}$ avec les fonctions tangente (ligne continue) et cotangente (ligne discontinue) respectivement.

La résolution de l'équation de Schrödinger 1.2, donne pour $\zeta(z)$ les solutions suivantes :

a/ États avec n pairs :

$$\zeta(z) = \begin{cases} B \sin(k_z z) & \text{si } |z| < L_z/2 \\ \pm C \sin(\pm \kappa z) & \text{si } |z| > L_z/2 \end{cases} \quad (3.5)$$

b/ États avec n impairs :

$$\zeta(z) = \begin{cases} A \cos(k_z z) & \text{si } |z| < L_z/2 \\ C \sin(\pm \kappa z) & \text{si } |z| > L_z/2 \end{cases} \quad (3.6)$$

avec :

$$\kappa^2 = \frac{2m_{xx,b}^*}{\hbar^2} (V - E_z^n)$$

et

$$k_z^2 = \frac{2m_{xx,w}^*}{\hbar^2} (E_z^n)$$

$m_{xx,w}^*$ et $m_{xx,b}^*$ étant les masses effectives de la particule dans le puits et la barrière respectivement. L'énergie est solution des équations séculaires suivantes :

$$\tan \left[\sqrt{\frac{m_{xx,w}^* E_z^n}{2\hbar^2}} L_z \right] = \sqrt{\frac{V - E_z^n}{E_z^n}} \quad \text{si } n \text{ est pair} \quad (3.7)$$

$$\cot \left[\sqrt{\frac{m_{xx,w}^* E_z^n}{2\hbar^2}} L_z \right] = -\sqrt{\frac{V - E_z^n}{E_z^n}} \quad \text{si } n \text{ est impair} \quad (3.8)$$

Il n'y a pas de solution analytique pour les équations 3.7 et 3.8, leur résolution graphique (fig. 3.4) ou numérique donne les valeurs propres de l'énergie E_z^n . Dans le cas particulier d'un puits infini $V_0 \approx \infty$, la solution analytique existe et l'énergie, dans ce cas, est donnée par :

$$E_z^n = \frac{\hbar^2}{2m_{xx,w}^*} \left[\frac{n\pi}{L_z} \right]^2 \quad (3.9)$$

Le nombre d'états à l'intérieur d'un puits fini est égal à :

$$1 + \text{Int} \left[\left(\frac{2m_{xx,w}^* V_0 L_z^2}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{1/2} \right] \quad (3.10)$$

Où $\text{Int}(x)$ est la partie entière de x .

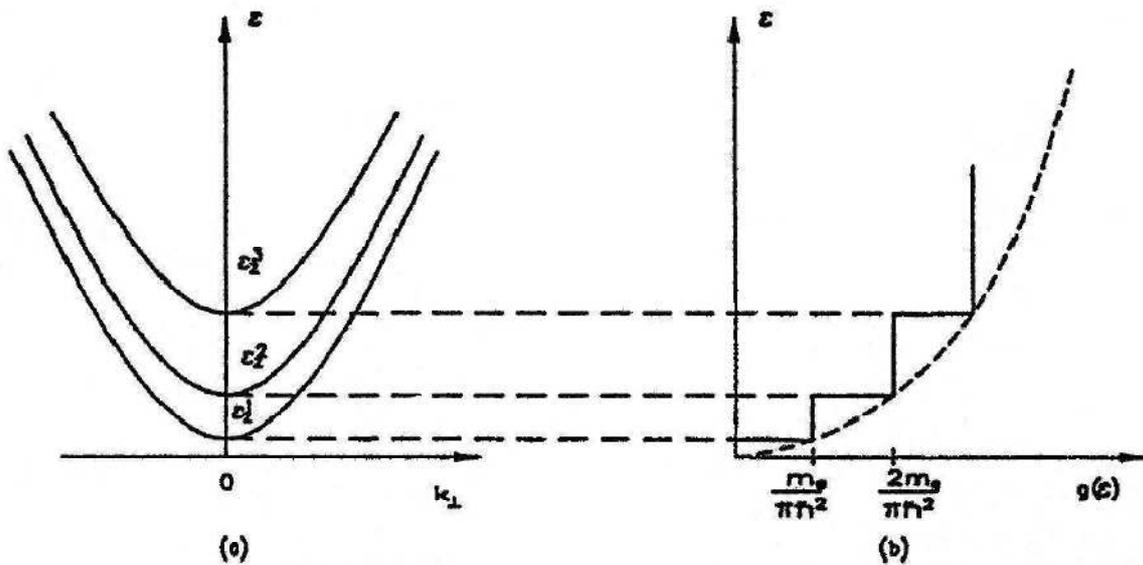


Figure 3.5. (a) : Mini-bandes d'énergie créées par le confinement à deux dimensions ;

(b) : Densité d'états à deux dimensions (-) et à trois dimensions (- -)

III.2.3. Discontinuité des bandes d'énergies

La figure (3.5) montre les bandes d'énergie créées par le confinement dans un puits quantique ainsi que la densité d'états à deux dimensions et à trois dimensions.

Les niveaux d'énergie dans la bande de conduction et la bande de valence dans un puits quantique peuvent être écrits :

$$E_{xx,str}^n = E_{xx,b}^n + \Delta E_{xx,str} \quad (3.11)$$

En incluant l'influence de la barrière [18]

$$E_{xx,b}^n = E_{xx}^n n^2 \left(n + \frac{2}{\pi} \sqrt{\frac{m_{xx,b}^* E_{xx}^n}{m_{xx,w}^* (\Delta E_{xx} + \Delta E_{xx,str})}} \right)^{-2} \quad (3.12)$$

$$E_{xx}^n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_{xx,w}^* L_z^2} \quad (3.13)$$

Où E_{xx}^n est le niveau quantique dans une barrière infinie, n est le nombre du niveau quantique, $m_{xx,b}^*$ est la masse effective de la barrière, ΔE_c et ΔE_v sont les hauteurs de la barrière de potentiel pour les bandes de conduction et de valence respectivement calculés en utilisant l'affinité électronique [5]:

$$\Delta E_c = \chi_0^{qw} - \chi_0^{bar} \quad (3.14)$$

$$\Delta E_v = E_g^{bar} - E_g^{qw} - \Delta E_c \quad (3.15)$$

Alternativement, la hauteur de la barrière peut être trouvé à travers le model de la théorie de solide, ou la structure de bande peut être trouvé par la moyenne d'énergie de la

bande de valence pour un semiconducteur non contraint et l'énergie du split-off donné par Van De Walle [19]

$$E_{v,av}^0 = E_v^0 - \Delta_0/3 \tag{3.16}$$

$$\Delta E_v = E_{v,avg}^{qw} - E_{v,avg}^{bar} + \Delta_0^{qw}/3 - \Delta_0^{bar}/3 \tag{3.17}$$

Dans le cas où $\chi_0^A > \chi_0^B$, ΔE_c est positive et la jonction est du type I [5]. La structure est présentée sur la figure

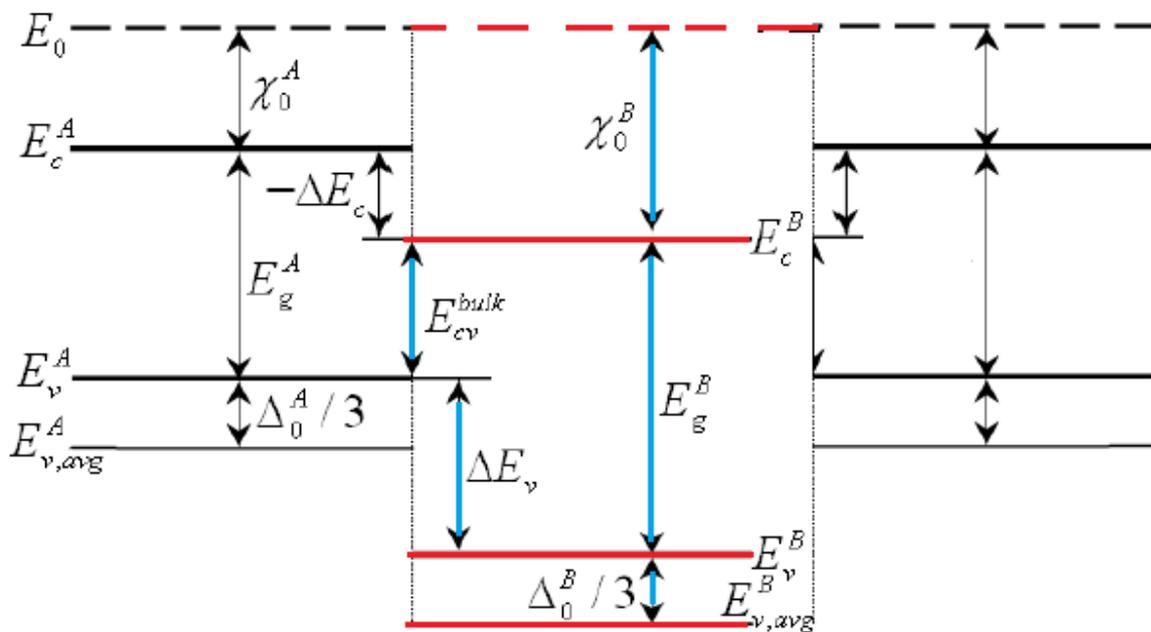


Figure 3.6. Les discontinuités des bandes de conduction et de valence

La maille cristalline est déformée par la contrainte. Cependant, il est supposé d'être toujours périodique et la fonction de Bloch est encore applicable.

III.2.4. Notion de contrainte

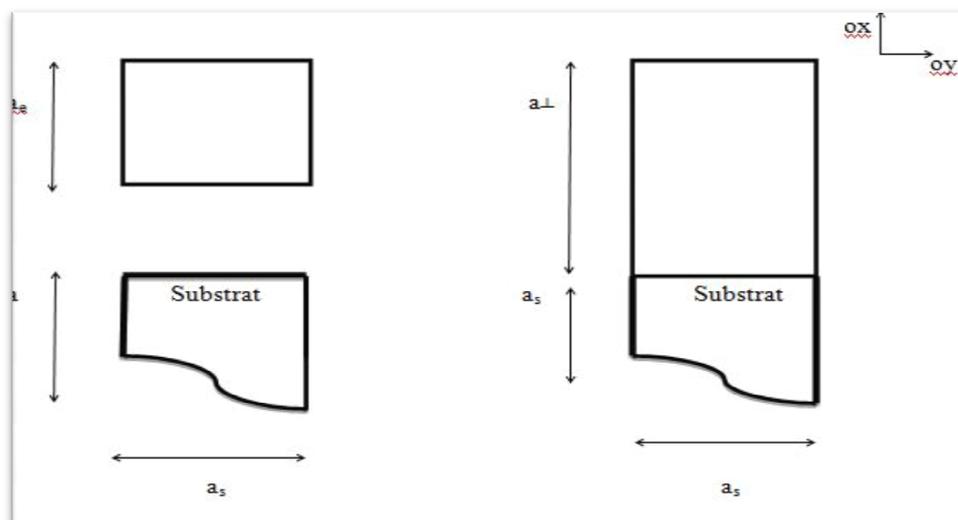
La succession des couches formant la structure des diodes lasers a puits quantique ZnSe /Mg_xZn_(1-x)Se impose l'épitaxie de deux matériaux de paramètre de mailles différents

ZnSe et $Mg_x Zn_{(1-x)}Se$ constituant respectivement le puits et les barrières. Deux cas peuvent se présenter :

1. Si l'épaisseur de la couche active est supérieure à une certaine épaisseur appelée épaisseur critique, les déformations induites par le désaccord de maille sont telles que la génération de dislocations au sein de la couche ZnSe devient énergiquement favorable, autorisant ainsi la relaxation de la contrainte. Cette situation est catastrophique quant aux propriétés électroniques du matériau.
2. Si l'épaisseur de la couche active reste inférieure critique, le paramètre de maille du matériau ZnSe peut s'adapter à celui du $Mg_x Zn_{(1-x)}Se$ dans le plan de croissance comme le représente la figure II.8 grâce à une déformation élastique tétragonale de sa maille cristalline. La couche $Mg_x Zn_{(1-x)}Se$, plus épaisse, reste non déformée.

De l'adaptation du paramètre de maille du $Mg_x Zn_{(1-x)}Se$ à celui de ZnSe résulte une contrainte biaxiale dans le plan de l'interface de composantes σ_{yy} et σ_{zz} .

Dans les paragraphes qui suivent, il sera tout d'abord calculé la déformation de la couche ZnSe épitaxiée sur $Mg_x Zn_{(1-x)}Se$. Il sera ensuite analysé l'influence de cette déformation sur les bandes de valence et de conduction de ce matériau et enfin l'énergie de la bande interdite du ZnSe contraint sera déterminée.



**Figure 3.7. Représentation de l'adaptation du paramètre de maille
De la couche épitaxie sur un substrat**

III.2.5. Densité d'états

La densité d'état à deux dimensions $\rho^{2D}(E)$ est définie comme étant le nombre d'états par unité d'énergie et par unité de surface du plan de la couche [20]. Pour un puits infini, dans l'approximation des bandes paraboliques, la courbe de dispersion $E(k)$, consiste en une série de paraboles (fig. 1.3.a) séparées par la quantité :

$$E_z^n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m_{xx}^* L_z^2} \quad \text{avec } n = \text{entier} \neq 0 \quad (3.18)$$

Chaque parabole donne lieu à une densité d'état constante égale à :

$$\frac{m_{xx}^*}{\pi \hbar^2} \quad (3.19)$$

La densité d'état totale dans le puits est donnée par [4]:

$$\rho^{2D}(E) = 2 \sum_{n, k_x, k_y} \delta \left[E - E_z^n - \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_{xx}^*} \right] \quad (3.20)$$

Où sous forme compacte en utilisant la fonction escalier $\Theta(E)$:

$$\rho^{2D}(E) = \frac{m_{xx}^*}{\pi \hbar^2} \sum_n \Theta(E - E_z^n) \quad (3.21)$$

III.2.6. Détermination des pseudo-niveaux de Fermi

Quand la non-parabolicité des bandes peut être omettre, la densité (par unité de volume) des électrons et des trous dans un puits quantique de largeur L_w s'écrit [21]:

$$n = \int \frac{\rho_{2Dc}(E_2) f_2 dE_2}{L_w} \quad (3.22)$$

$$p = \int \frac{\rho_{2Dv}(E_1) (1 - f_1) dE_1}{L_w} \quad (3.23)$$

Ou ρ_{2Dc} et ρ_{2Dv} sont les densités d'états des électrons et des trous respectivement dans le puits quantique, f_1 et f_2 sont les probabilités d'occupation des électrons dans la bande de valence et de conduction respectivement. Après l'intégration et en remplaçant les densités d'états et les probabilités par leurs formules nous obtenons :

$$n = \frac{m_e k_B T}{\pi \hbar^2 L_w} \sum_n \ln \left[\exp \left(\frac{F_c - E_{cn}}{k_B T} \right) + 1 \right] \quad (3.24)$$

$$p = \frac{m_h k_B T}{\pi \hbar^2 L_w} \sum_n \ln \left[\exp \left(\frac{E_{vn} - F_v}{k_B T} \right) + 1 \right] \quad (3.25)$$

Où m_e et m_h sont les masses effectives des électrons et des trous respectivement, F_c et F_v sont les pseudo-niveaux de Fermi dans la bande de conduction et de valence. Des formules précédentes, on peut déduire :

$$\frac{F_c - E_{c1}}{k_B T} = \ln \left[\exp \left(\frac{\pi \hbar^2 n L_w}{m_e k_B T} \right) - 1 \right] \quad (3.26)$$

$$\frac{E_{v1} - F_v}{k_B T} = \ln \left[\exp \left(\frac{\pi \hbar^2 p L_w}{m_h k_B T} \right) - 1 \right] \quad (3.27)$$

Les pseudo-niveaux de Fermi peuvent être retrouvés de ces deux formules et la condition de neutralité électrique :

$$n + N_A^- = p + N_D^+ \quad (3.28)$$

La condition pour la quelle nous aurions l'effet du laser (lasing) est [4]:

$$F_c - F_v > \hbar \omega \quad (3.29)$$

Où $\hbar \omega$ est plus grande que l'énergie de la bande interdite.

III.2.7. Transitions optiques

La règle d'or de fermi donne le taux de la transition pour une seule paire d'états de la bande de conduction et de la bande de valence [22]. Nous savons que beaucoup d'états k existent dans les bandes de conduction et de valence. Pour trouver le taux de transition totale, nous devons additionner les taux de transition permises sur toutes les paires, c'est-à-dire les transitions verticales dans l'espace k [23]. Nous pouvons alors additionner sur tous les états électroniques N_s entre les bandes comme l'illustre la figure III-3. Le taux de transition totale par unité de volume (une unité $s^{-1} \text{ cm}^{-1}$) est donné par

$$\begin{aligned}
W_{c \rightarrow v} &= \frac{1}{v} \int W_{e \rightarrow h} dN_s = \frac{1}{v} \int W_{e \rightarrow h} \frac{1}{v} \frac{dN_s}{dk} dk \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} \int |H'_{eh}|^2 \delta(E_{eh} - \hbar\omega) \rho(k) dk
\end{aligned}
\tag{3.30}$$

Où $E_{eh} = E_e - E_h$ et H' est l'Hamiltonien.

Nous avons introduit l'énergie de transition E_{eh} dans la fonction delta. Nous avons aussi converti à une intégration dans l'espace k en utilisant la densité d'état additionné sur les k transition verticales.

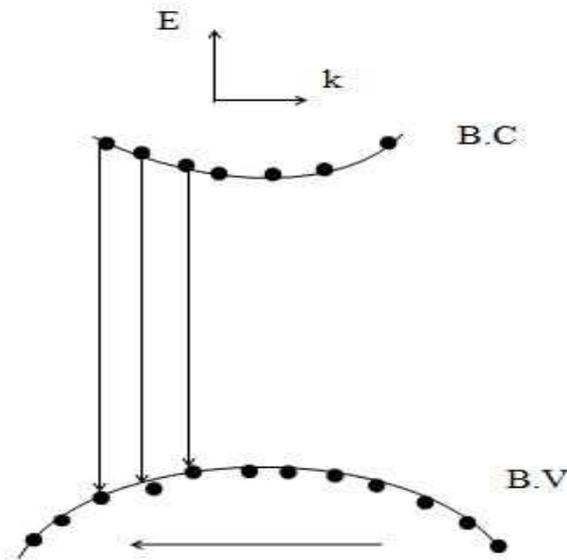


Figure 3.8. Transition verticales dans l'espace de vecteur \vec{k} de la bande conduction vers la bande de valence

En utilisant le changement de variable dans la fonction delta, $x = E_{eh} - \hbar\omega$, l'expression 3.30 devient

$$W_{c \rightarrow v} = \frac{2\pi}{\hbar} \int |H'_{eh}|^2 \delta(x) \rho(k) = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{eh}|^2 \left[\frac{\rho(k)}{dE_{eh}/dk} \right]_{E_{eh}=\hbar\omega}
\tag{3.31}$$

Le terme entre crochets est défini comme densité d'états réduite. Si nous supposons que les bandes d'énergie sont sous forme paraboliques, alors le terme entre crochets peut être simplifié en utilisant l'équation de l'énergie en fonction du vecteur d'onde \vec{k}

$$E_e(k) = E_c + \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e}, \quad E_h(k) = E_v - \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} \quad (3.32)$$

Et

$$E_g = E_c - E_v$$

On aura

$$E_{eh} = E_e - E_h = \left[E_c + \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e} \right] - \left[E_v - \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} \right] = E_g + \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} \quad (3.33)$$

$$\frac{dE_{eh}}{dk} = \frac{\hbar^2 k}{m_r}, \quad \text{ou} \quad \frac{1}{m_r} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h}$$

L'énergie de gap $E_g = E_c - E_v$, est bien définie comme le gap entre deux sous-bandes d'énergie dans le puits quantique et correspond aux bords du matériau massif. Avec l'usage de la masse réduite m_r , nous pouvons écrire

$$w_{c \rightarrow v} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{eh}|^2 \rho_{red}(E_{eh} - E'_g), \quad \text{ou} \quad E_{eh} = \hbar\omega \quad (3.34)$$

Pour les bandes paraboliques et avec l'usage de la masse réduite m_r , les énergies individuelles E_e et E_h sont reliées avec l'énergie de transition E_{eh} par

$$E_e = E_c + \frac{m_r}{m_e} (E_{eh} - E_g) \quad (3.35)$$

$$E_h = E_v - \frac{m_r}{m_h} (E_{eh} - E_g) \quad (3.36)$$

III.3. États électroniques dans le puits quantique

III.3.1. Théorie k.p

La théorie k.p consiste à construire, sous forme de matrice, des Hamiltoniens dont les valeurs propres donnent la structure de bande au voisinage du centre de la zone de Brillouin [24]. Pour construire ces matrices, il est évidemment primordial de savoir sur quelles bases on les construit et donc de connaître les fonctions d'onde qui servent de base.

En partant des fonctions et énergies propres au centre de la zone de Brillouin ($k=0$) pour un semi-conducteur II-VI, et en négligeant l'effet des excitons qui est faible car la bande interdite du puits est large, on peut déterminer la relation de dispersion locale des bandes de conduction et de valence pour des valeurs du vecteur d'onde voisins de $k=0$ avec la méthode k.p du Hamiltonien Luttinger-Kohn [25] avec la contrainte de Pikus et Bir [26].

L'hamiltonien d'un électron dans un cristal massif s'écrit :

$$H = \frac{\vec{P}^2}{2m_0} + V(r) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\nabla}V \wedge \vec{P}) \cdot \vec{\sigma} \quad (3.37)$$

Où $\vec{P} = i\hbar\nabla$ est le vecteur d'impulsion, m_0 est la masse de l'électron libre, $V(r)$ représente le potentiel cristallin périodique et $\vec{\sigma}$ est le spin de l'électron représenté par les matrices de Pauli. L'équation de Schrödinger qu'il faudra résoudre est :

$$H\psi_{n\vec{k}} = E\psi_{n\vec{k}} \quad (3.38)$$

Les fonctions d'onde $\psi_{n\vec{k}}$ résultent du théorème de Bloch s'écrivent sous la forme suivante:

$$\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \cdot \exp(i\vec{k}\vec{r}) \quad (3.39)$$

$u_{n\vec{k}}(\vec{r})$ est la partie périodique de la fonction de Bloch et $\exp(i\vec{k}\vec{r})$ est un terme d'onde plane. n représente l'indice de bande et \vec{k} le vecteur d'onde de l'électron.

On a :

$$\vec{P}\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r})(\vec{P} + \hbar\vec{k})u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3.39)$$

$$\vec{P}^2\psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}\vec{r})(\vec{P}^2 + 2\hbar\vec{k}\vec{P} + \hbar^2\vec{k}^2)u_{n\vec{k}}(\vec{r}) \quad (3.40)$$

III.3.1.1. Hamiltonien des électrons dans la bande de conduction

Lorsque l'énergie de gap E_g est suffisamment élevée, on peut négliger le couplage entre la bande de conduction et la bande de valence. Cette approximation est notamment valable pour les matériaux à base de GaAs ou d'InP, très utilisés dans les composants optoélectroniques. Pour calculer l'onde enveloppe des états de conduction, il faut résoudre l'équation de Schrödinger selon l'approximation de Ben-Daniel-Duke [27]:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_e} \frac{\partial}{\partial z} \right) + \frac{\hbar^2 k_\rho^2}{2m_e} + V_c(z) \right) \Psi(z) = E \Psi(z) \quad (3.41)$$

Où V_c est le potentiel de conduction donné en (1.36), m_e est la masse effective de l'électron. Cette formulation prend en compte la dispersion en énergie selon le plan parallèle aux couches ainsi que la contribution à l'affinité et la variation hydrostatique de l'énergie de conduction. Sans couplage, la relation de dispersion en énergie selon k_ρ est donnée selon l'approximation parabolique:

$$E_c(k_\rho) = E_c(0) + \frac{\hbar^2}{2m_e} k_\rho^2 \quad (3.42)$$

Cependant cette approximation n'est pas toujours valable surtout quand la structure comporte des matériaux dont la masse effective dans chaque matériau est très différente.

III.3.1.2. Hamiltonien des trous dans la bande de valence : description matricielle

Le problème des états de valence est plus complexe en raison de la dégénérescence des trous lourds et des trous légers et de la proximité de la bande dite de split-off (spin-orbite). Les deux bandes de trous lourds et de trous légers se trouvent alors découplées à la fois par la quantification du mouvement dans la direction z et par la contrainte bi-axiale. Le modèle faisant intervenir ces deux contributions est le modèle de Pikus-Bir.

III.3.2. Le modèle de Luttinger-Kohn

Le Hamiltonien Luttinger-Kohn dans la base des fonctions d'onde $|J, m_j\rangle$ pour $J = 3/2$, $|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle, |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$ sans contrainte est :

$$H_0 = \begin{bmatrix} P + Q & \tilde{R} & -S & 0 \\ \tilde{R}^\dagger & P - Q & 0 & S \\ -S^\dagger & 0 & P - Q & \tilde{R} \\ 0 & S^\dagger & \tilde{R}^\dagger & P + Q \end{bmatrix} \quad (4.43)$$

Avec

$$\tilde{R} = |R| - i|S|$$

$$\tilde{R}^\dagger = |R| + i|S|$$

$$P = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m} \right) \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$$

$$Q = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m} \right) \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2)$$

$$S = \sqrt{3} \left(\frac{\hbar^2}{m} \right) \gamma_3 k_z (k_x - ik_y)$$

$$R = - \left(\frac{\hbar^2}{m} \right) \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \bar{\gamma} (k_x - ik_y)^2 - \frac{\sqrt{3}}{4} (\gamma_3 - \gamma_2) (k_x + ik_y)^2 \right]$$

Nous définissons les phases θ_S et θ_R de R et S par :

$$R = |R| e^{i\theta_R}$$

$$S = |S| e^{i\theta_S}$$

III.3.3. L'Hamiltonien de Bir-Pikus

La déformation ξ entraîne un changement d'énergie décrite par un hamiltonien. La contrainte uniaxiale introduit un Hamiltonien de contrainte H_ξ donné par :

$$H_\xi = \begin{bmatrix} \xi & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\xi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\xi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \xi \end{bmatrix} \quad (3.44)$$

Ou ξ est le potentiel de contrainte. La base pour la matrice 1 est :

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left[(X - iY) \uparrow \right] + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow\rangle$$

$$\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} \left| (X + iY) \downarrow \right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \left| Z \uparrow \right\rangle$$

$$\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left| (X - iY) \downarrow \right\rangle$$

Pour simplifier le problème, nous mettons une transformation unitaire de la matrice 4x4 $H = H_0 + H_\xi$ suivant la méthode de Broido et Sham [28] et Twardowski et Herman [29] dans :

$$\bar{H} = \bar{U} H \bar{U}^\dagger \quad (3.45)$$

$$\bar{H} = \begin{bmatrix} H^U & 0 \\ 0 & H^L \end{bmatrix} \quad (3.46)$$

Ou le block bas H^L et haut H^U sont donnés par :

$$H^\sigma = \begin{bmatrix} P \pm Q \pm \xi & R \\ R^* & P \mp Q \mp \xi \end{bmatrix} \quad (3.47)$$

$$R = |R| - i|S|$$

Ou $\sigma=U$ (L) refaire à haut (ou bas) avec le signe \pm et la transformation entre les anciens bases

$\left| \frac{3}{2}, \nu \right\rangle$ ($\nu = \pm \frac{3}{2}, \pm \frac{1}{2}$) et les nouveaux bases est :

$$|1\rangle = \alpha \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle - \alpha^* \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle$$

$$|2\rangle = -\beta^* \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$|3\rangle = \beta^* \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \beta \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$|1\rangle = \alpha \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle + \alpha^* \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle$$

La transformation unitaire \bar{U} est défini par :

$$\bar{U} = \begin{bmatrix} \alpha^* & 0 & 0 & -\alpha \\ 0 & -\beta & \beta^* & 0 \\ 0 & \beta & \beta^* & 0 \\ \alpha & 0 & 0 & \alpha \end{bmatrix} \quad (3.48)$$

Ou

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left[i \left(\frac{3\pi}{4} - \frac{3\phi}{2} \right) \right]$$

$$\beta = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp \left[i \left(-\frac{\pi}{4} + \frac{\phi}{2} \right) \right]$$

$$\phi = \tan^{-1} \left(\frac{k_y}{k_x} \right)$$

Nous considérons un puits quantique de largeur L, croître suivant la direction (001), nous choisissons l'origine dans le centre du puits. Pour calculer la structure de bande et les fonctions d'ondes des électrons et des trous du puits quantique, nous avons utilisé la théorie de la masse effective (méthode k.p). Pour simplifier les calculs, nous supposons que les bandes de conduction et de valence sont découplées qui est une bonne approximation pour les semiconducteurs à grande gap tel ZnSe. Pour la bande de conduction, une bande parabolique et isotrope est utilisée. Pour la bande de valence, nous avons utilisé le Hamiltonien 4x4 de Luttinger-Kohn, que ces éléments sont dérivés de la méthode k.p.

$$H = \begin{bmatrix} P + Q + \xi & R & 0 & 0 \\ R^\dagger & P - Q - \xi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P - Q - \xi & R \\ 0 & 0 & R^\dagger & P + Q + \xi \end{bmatrix} \quad (3.49)$$

+ V(z)

Avec

$$P = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m} \right) \gamma_1 \left(k_x^2 + k_y^2 - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

$$Q = \frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{m} \right) \gamma_2 \left(k_x^2 + k_y^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

$$R = \frac{\hbar^2}{m} \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \bar{\gamma} (k_x^2 + k_y^2) - \sqrt{3} \gamma_3 (k_x^2 + k_y^2)^{1/2} \frac{\partial}{\partial z} \right]$$

$V(z)$ est le potentiel des trous ; $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ sont les paramètres de Luttinger ; m est la masse de l'électron libre ; $\bar{\gamma} = \frac{1}{2}(\gamma_1 + \gamma_2)$, R^\dagger est l'adjoint de R ; et ξ est le potentiel de la contrainte donné par :

$$\xi = b \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}} X \quad (3.50)$$

Où b est le potentiel de déformation, C_{11} et C_{12} sont les constantes diélectriques, et X est le stress effective.

$$\psi_{m\vec{k}_\parallel}^U(\vec{r}) = \sum_{\nu=1,2} g_m^{(\nu)}(\vec{k}_\parallel, z) e^{i\vec{k}_\parallel \cdot \vec{\rho}} |\nu\rangle \quad (3.51)$$

$$\psi_{m\vec{k}_\parallel}^L(\vec{r}) = \sum_{\nu=3,4} g_m^{(\nu)}(\vec{k}_\parallel, z) e^{i\vec{k}_\parallel \cdot \vec{\rho}} |\nu\rangle \quad (3.52)$$

Où $g_m^{(\nu)}(\vec{k}_\parallel, z)$ sont les fonctions enveloppes, $|\nu\rangle$ représente la transformation de la fonction enveloppe dans le centre de la zone, et refaire à la nouvelle base, m est l'indice des sous bandes du puits quantique, $\vec{k}_\parallel = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$, $\vec{\rho} = x \hat{x} + y \hat{y}$, et U et L représente les blocks haut et bas, respectivement. La fonction enveloppe $g_m^{(\nu)}$ satisfait :

$$\begin{aligned} \sum_{\nu'=1,2} \left[H_{\nu\nu'}^U(\vec{k}_\parallel, -i \frac{\partial}{\partial z}) + V(z) \delta_{\nu\nu'} \right] g_m^{(\nu')}(\vec{k}_\parallel, z) \\ = E_m^U(\vec{k}_\parallel) g_m^{(\nu)}(\vec{k}_\parallel, z) \end{aligned} \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\nu'=1,2} \left[H_{\nu\nu'}^L(\vec{k}_\parallel, -i \frac{\partial}{\partial z}) + V(z) \delta_{\nu\nu'} \right] g_m^{(\nu'+2)}(\vec{k}_\parallel, z) \\ = E_m^L(\vec{k}_\parallel) g_m^{(\nu+2)}(\vec{k}_\parallel, z) \end{aligned} \quad (3.54)$$

Pour $\nu=1,2$. Les blocks Hamiltoniens H^U et H^L sont donnés par :

$$H^\sigma = \begin{bmatrix} P \pm Q \pm \xi & R \\ R^\dagger & P \mp Q \mp \xi \end{bmatrix} \quad (3.55)$$

Ou $\sigma = U$ (ou L) représente le haut (ou le bas) signe. Nous résolvons numériquement les problèmes du couplage des valeurs propre donnés par 6a et 6b en utilisant la méthode de différence finis.

III.4. Le gain optique

L'interaction entre les photons et les électrons dans un semiconducteur est décrite par le hamiltonien suivant [30,31]:

$$H = \frac{1}{2m_0} (p - eA)^2 + V(r) \quad (3.56)$$

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(r) - \frac{1}{2m_0} (p \cdot A + A \cdot p) + \frac{e^2 A^2}{2m_0} \quad (3.57)$$

Ce hamiltonien peut se mettre sous la forme:

$$H = H_0 + H_{int} \quad (3.58)$$

Avec

$$H_{int} \simeq -\frac{e}{m_0} A \cdot p$$

Ou le terme $e^2 A^2 / 2m_0$ a été négligé car $|eA| \ll |p|$.

Le nombre de photons injectés N_{inj} est égal au rapport de l'intensité optique S reçue par l'énergie d'un photon de pulsation ω :

$$N_{inj} = \frac{S}{\hbar\omega} \quad (3.59)$$

Le potentiel vecteur A du champ optique est de la forme:

$$A = A_0 \cos(kr - \omega t) \hat{e} \quad (3.60)$$

Les champs électrique et magnétique se déduisent des équations de Maxwell:

$$E(r, t) = -\frac{\partial A}{\partial t} = -\omega A_0 \sin(kr - \omega t) \hat{e} \quad (3.61)$$

$$H(r, t) = \frac{1}{\mu} \nabla \times A = -\frac{1}{\mu} A_0 \sin(kr - \omega t) k \times \hat{e} \quad (3.62)$$

L'intensité optique est la moyenne du vecteur de Poynting:

$$S = \langle E(r, t) \times H(r, t) \rangle = \frac{n_r c \epsilon_0 \omega^2 A_0^2}{2} \quad (3.63)$$

n_r est l'indice de réfraction du matériau considéré, μ la perméabilité magnétique, ϵ_0 la constante diélectrique du vide et c la vitesse de la lumière dans le vide.

Le nombre de photons injectés est S divisé par l'énergie d'un photon:

$$N_{inj} = \frac{S}{\hbar \omega} = \frac{n_r c \epsilon_0 \omega A_0^2}{2 \hbar} \quad (3.64)$$

Le nombre net de photons N_{net} est égal à la différence entre le nombre de photons émis $R_{c \rightarrow v}$ par le passage d'un électron de la bande de conduction vers un trou de la bande de valence et le nombre de photons absorbés $R_{v \rightarrow c}$ par le passage d'un électron de la bande de valence vers un état vacant de la bande de conduction. Ces deux quantités se calculent d'après la règle d'or de Fermi:

$$R_{v \rightarrow c} = \frac{2}{V} \sum_{l,m} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\eta} | H_{int} | \psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\sigma} \rangle \right|^2 \delta(E_l^c(\vec{k}_{\parallel}) - E_m^{h,\sigma}(\vec{k}_{\parallel}) - \hbar \omega) f_{h,\sigma}^m (1 - f_c^l) \quad (3.65)$$

$$R_{c \rightarrow v} = \frac{2}{V} \sum_{l,m} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\eta} | H_{int} | \psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\sigma} \rangle \right|^2 \delta(E_m^{h,\sigma}(\vec{k}_{\parallel}) - E_l^c(\vec{k}_{\parallel}) - \hbar \omega) f_c^l (1 - f_{h,\sigma}^m) \quad (3.66)$$

l parcourant les états de conduction et m les états de valence. Le premier facteur 2 vient du fait que l'on prend en compte les deux états de spin possibles pour l'électron [32,33,34]. La règle de conservation des moments implique que les moments de deux états électroniques permettant une transition via l'émission ou l'absorption d'un photon doivent être identiques. C'est pour cela que, dans les expressions de $R_{v \rightarrow c}$ et $R_{c \rightarrow v}$, la somme est faite sur le même moment k_p pour les états de conduction et de valence.

D'autre part, l'électron à l'état l est caractérisé par la fonction d'onde:

$$\psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\eta}(\vec{r}) = \frac{e^{ik_{\rho}\cdot r}}{\sqrt{C}} g_l^{(v)}(\vec{k}_{\parallel}, z) |s\eta\rangle \quad (3.67)$$

où $\eta = \uparrow \text{ou } \downarrow$, la constante C étant choisie de manière à normer la fonction d'onde: $|\Psi_{c,n}^{\sigma}|^2 = 1$

Pour un trou, s'agissant de la partie haute du hamiltonien, on a:

$$\psi_{m\vec{k}_{\parallel}}^U(\vec{r}) = \frac{e^{ik_{\rho}\cdot r}}{\sqrt{C}} \left[g_m^{(hh)}(\vec{k}_{\parallel}, z) |1\rangle + g_m^{(lh)}(\vec{k}_{\parallel}, z) |2\rangle + g_m^{(sh)}(\vec{k}_{\parallel}, z) |3\rangle \right] \quad (3.68)$$

Pour un état de la partie basse du hamiltonien:

$$\psi_{m\vec{k}_{\parallel}}^L(\vec{r}) = \frac{e^{ik_{\rho}\cdot r}}{\sqrt{C}} \left[g_m^{(hl)}(\vec{k}_{\parallel}, z) |4\rangle + g_m^{ll}(\vec{k}_{\parallel}, z) |5\rangle + g_m^{sl}(\vec{k}_{\parallel}, z) |6\rangle \right] \quad (3.69)$$

U et L représentant la partie haute et basse du hamiltonien des trous de la bande de valence (1.46). Les facteurs d'occupation des bandes de conduction et de valence f_c^l et $f_{h,\sigma}^m$ sont donnés par les relations suivantes:

$$f_c^l = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_l^c(\vec{k}_{\parallel}) - E_{fc}}{k_B T}\right)} \quad \text{et} \quad f_{h,\sigma}^m = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_m^{h,\sigma}(\vec{k}_{\parallel}) - E_{fv}}{k_B T}\right)}$$

f_c^l et $1 - f_c^l$ représentent, respectivement, l'occupation des électrons et des trous dans la bande de conduction. De même, $f_{h,\sigma}^m$ et $1 - f_{h,\sigma}^m$ représentent, respectivement, l'occupation des électrons et des trous dans la bande de valence.

Le nombre net de photons N_{net} est donc:

$$N_{inj} = R_{v \rightarrow c} - R_{c \rightarrow v} = \frac{2}{V} \sum_{l,m} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\eta} | H_{int} | \psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\sigma} \rangle \right|^2 \delta(E_v^m - E_c^n - \hbar\omega) (f_v - f_c) \quad (3.70)$$

Or :

$$\langle \psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\eta} | H_{int} | \psi_{l\vec{k}_{\parallel}}^{\sigma} \rangle = -\frac{eA_0}{2m_0} \hat{\epsilon} \cdot \vec{M}_{lm}^{\sigma\eta}(\vec{k}_{\parallel}) \quad (3.71)$$

L'élément de matrice p_{cv} dépendant des fonctions de Bloch, incluant également les fonctions enveloppes et il est donné par :

$$\hat{\epsilon} \cdot \vec{M}_{lm}^{\sigma\eta}(\vec{k}_{\parallel}) = \begin{cases} \sum_{v=1,2} \langle g_m^{(v)} | \phi_l \rangle \langle v | \hat{\epsilon} \cdot e\vec{r} | S, \eta \rangle & \text{for } \sigma = U \\ \sum_{v=3,4} \langle g_m^{(v)} | \phi_l \rangle \langle v | \hat{\epsilon} \cdot e\vec{r} | S, \eta \rangle & \text{for } \sigma = L \end{cases} \quad (3.72)$$

Ou ϕ_l est la fonction enveloppe pour la bande de conduction et S représente la partie symétrique sphérique de la fonction périodique de Bloch pour la bande de conduction au centre de la zone. Après quelque manipulation mathématique, nous pouvons obtenir

$|\hat{\epsilon} \cdot \vec{M}_{lm}^{\eta\sigma}(\vec{k}_{\parallel})|^2$ pour la polarisation TM et la polarisation TE :

1) Pour le mode TM ($\hat{\epsilon} = \hat{z}$)

$$|\hat{\epsilon} \cdot \vec{M}_{lm}^{\eta U}(\vec{k}_{\parallel})|^2 = \frac{1}{3} \langle S | ez | Z \rangle^2 \langle \phi_l | g_m^{(2)} \rangle^2 \quad (3.73)$$

$$|\hat{\epsilon} \cdot \vec{M}_{lm}^{\eta L}(\vec{k}_{\parallel})|^2 = \frac{1}{3} \langle S | ez | Z \rangle^2 \langle \phi_l | g_m^{(3)} \rangle^2 \quad (3.74)$$

2) Pour le mode TE ($\hat{\epsilon}$ est sur le plan x - y)

$$\begin{aligned} |\hat{\epsilon} \cdot \vec{M}_{lm}^{\eta U}(\vec{k}_{\parallel})|^2 &= \frac{1}{4} \langle S | ex | X \rangle^2 \cdot \left\{ \langle \phi_l | g_m^{(1)} \rangle^2 + \frac{1}{3} \langle \phi_l | g_m^{(2)} \rangle^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{\sqrt{3}} \langle \phi_l | g_m^{(1)} \rangle \langle \phi_l | g_m^{(2)} \rangle \cos 2\phi \right\} \end{aligned} \quad (3.75)$$

$$\begin{aligned} |\hat{\epsilon} \cdot \vec{M}_{lm}^{\eta L}(\vec{k}_{\parallel})|^2 &= \frac{1}{4} \langle S | ex | X \rangle^2 \cdot \left\{ \langle \phi_l | g_m^{(4)} \rangle^2 + \frac{1}{3} \langle \phi_l | g_m^{(3)} \rangle^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{\sqrt{3}} \langle \phi_l | g_m^{(4)} \rangle \langle \phi_l | g_m^{(3)} \rangle \cos 2\phi \right\} \end{aligned} \quad (3.76)$$

Ou $\phi = \tan^{-1}(k_y/k_x)$, et $\eta = \uparrow$ ou \downarrow pour les deux état de spin. Dans ce calcul, nous avons utilisé pour le matériau massif la valeur $\langle S | ez | Z \rangle$ qui est donné par :

$$\langle S|ex|X\rangle = \langle S|ez|Z\rangle = -\frac{eh}{\sqrt{2}} \left[\frac{E_g + \Delta}{E_g(E_g + 2\Delta/3)m_c^*} \right]^{1/2} \quad (3.77)$$

Ou Δ est l'énergie de spin-orbite et m_c^* est la masse effective de la bande de conduction.

On peut donc exprimer le nombre net de photons émis en fonction de A_0 :

$$N_{net} = \frac{\pi e^2 A_0^2}{V \hbar m_0^2} \sum_{l,m} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} |\hat{\epsilon} \cdot \vec{M}_{lm}^{\sigma\eta}(\vec{k}_{\parallel})|^2 \delta(E_m^{h,\sigma}(\vec{k}_{\parallel}) - E_l^c(\vec{k}_{\parallel}) - \hbar\omega) (f_{h,\sigma}^m - f_c^l) \quad (3.78)$$

Le rapport de N_{net} par N_{inj} permet de calculer le gain matériau en fonction de la longueur d'onde des photons, de l'indice réel du matériau, de l'interaction photon-électron et de l'occupation des bandes d'énergie:

$$g_{mat} = -\frac{N_{net}}{N_{inj}} = -\frac{\pi e^2}{n_r \epsilon_0 c m_0^2 \omega V} \sum_{l,m} \sum_{\vec{k}_{\parallel}} |\hat{\epsilon} \cdot \vec{M}_{lm}^{\sigma\eta}(\vec{k}_{\parallel})|^2 \delta(E_m^{h,\sigma}(\vec{k}_{\parallel}) - E_l^c(\vec{k}_{\parallel}) - \hbar\omega) (f_{h,\sigma}^m - f_c^l) \quad (3.79)$$

Ou σ représente les blocks haut et bas du Hamiltonien, η est l'état de spin de l'électron, l et m sont les indices des sous bandes pour la bande de conduction et de valence, respectivement, $\hat{\epsilon}$ est le vecteur de polarisation du champ optique, ϵ_0 est la permittivité de l'espace libre, $\vec{M}_{lm}^{\sigma\eta}$ est l'élément de la matrice du dipôle optique entre le l ème sous bande dans la bande de conduction avec l'état de spin η et le m ème sous bande dans la bande de valence d'Hamiltonien H^σ 2×2 , f_c^l et $f_{h,\sigma}^m$ sont les fonctions de Fermi, $E_l^c(\vec{k}_{\parallel})$ et $E_m^{h,\sigma}(\vec{k}_{\parallel})$ sont les énergies de la l ème sous bande dans la bande de conduction et m ème sous bande dans la bande de valence de H^σ à (\vec{k}_{\parallel}) , respectivement. ω est la fréquence angulaire du photon, V est le volume. Les pseudo-niveaux de Fermi sont déterminés numériquement pour chaque densité de porteur par la somme des fonctions de Fermi sur k_x , k_y et les indices des sous bandes.

III.5. Conclusion

Pour aboutir au calcul du gain optique, dans un premier temps, nous avons rappelé la résolution de l'équation de Schrödinger pour un puits quantique fini qui nous a permis de trouver les niveaux d'énergies dans la structure dans l'approximation de la fonction enveloppe, nous avons présenté également les principaux paramètres pilotant le choix du matériau, Par la suite nous avons décrit brièvement la notion de contrainte qui améliore le gain optique [9], nous avons donné notamment les éléments essentiels à la compréhension de la densité d'états et les transitions optiques dans un puits quantique. Enfin, nous avons détaillé la méthode de calcul du gain optique dans un puits quantique contraint qui sera appliquée dans le calcul numérique dans le chapitre V.

Références

- [1] M. Yamanishi, "Comment on Polarization Dependent Momentum Matrix Elements in Quantum Well Lasers", *Jpn. J. Appl. Phys.* 23, L35-L36, 1984.
- [2] D. Kasemset, "Graded barrier single quantum well lasers-Theory and experiment", *IEEE J. Quantum Electron.* 19, 1025-1030, 1983.
- [3] A. Sugimura, "Threshold current for AlGaAs quantum well lasers", *IEEE J. Quantum Electron.* 20, 336-343, 1984.
- [4] S. L. Chuang, "Physics of optoelectronic devices", Wiley&Sons, Inc., New York, 1995.
- [5] J. Piprek, "Semiconductor optoelectronics devices, Introduction to physics and simulation", Academic Press, Amsterdam, 2003.
- [6] S. L. Chuang, "Physics of photonic devices", Wiley&Sons, Inc., New York, 2009.
- [7] M. G. Burt, "Fundamentals of envelope function theory for electronic states and photonic modes in nanostructures", *J. Phys Condensed Matter*, 9:R53, 1999.
- [8] J. Luttinger, "Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields", *Phys. Rev.* 97, 869-883, 1955.
- [9] A. Asgari, S. Dashti, "Optimization of optical gain in Al_xGa_{1-x}N/GaN/Al_xGa_{1-x}N strained quantum well laser", *Optik* 123 1546-1549, 2012.
- [10] N. Holonyak, "Quantum-well heterostructure lasers", *IEEE J. Quantum Electron.* 16, 170-186, 1980.
- [11] A. Pawlis, T. Berstermann, C. Bruggemann, M. Bombeck, D. Dunker, D. R. Yakovlev, N. A. Gippius, K. Lischka and M. Bayer, "Exciton states in shallow ZnSe/(Zn,Mg)Se quantum wells: Interaction of confined and continuum electron and hole states", *Physical review B* 83, 115302, 2011.
- [12] C. Van de Walle, "II-VI blue/green light emitters. In Semiconductors and Semimetals", Vol. 44, ed, R. Gunshor and A. Nurmikko. San Diego: Academic Press, pp. 122-160, 1997.
- [13] P. Y. Dang and Y. R. Wu, "Optical polarization anisotropy of tensile strained InGaN/AlInN quantum wells for TM mode lasers", *J. Appl. Phys.* 108, 083108 (2010)
- [14] D. Kleinman, "Band-gap renormalization in semiconductor quantum wells containing carriers", *Phys. Rev. B.* 32, 2266-2272, 1985.
- [15] C. Van De Walle, "Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory", *Phys. Rev. B* 39, 1871-1883, 1989.
- [16] A. Pawlis, T. Berstermann, C. Bruggemann, M. Bombeck, D. Dunker, D. R. Yakovlev, N. A. Gippius, K. Lischka, and M. Bayer, "Exciton states in shallow ZnSe/(Zn,Mg)Se quantum wells: Interaction of confined and continuum electron and hole states", *Physical review B* 83, 115302, 2011.
- [17] D. T. F. Marple, "Refractive index of ZnSe, ZnTe, and CdTe", *Journal of applied physics* volume 35, no.3 march 1964.
- [18] V. Kononenko, "Laser parameters of quantum-well heterostructures", ICTP, Trieste, IC/91/63, 26 -36, 1991.
- [19] C. Van De Walle, "Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory", *Phys. Rev. B* 39, 1871-1883, 1989.
- [20] D. Shaw, "Diffusion mechanisms in II-VI materials", *Journal of Crystal Growth*, 86:778, 1988.
- [21] C.S. Chang and S.L. Chuang, "Modeling of strained quantum-well lasers with spin-orbit coupling", *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 1995.
- [22] M. Yamanishi, "Comment on Polarization Dependent Momentum Matrix Elements in Quantum Well Lasers", *Japan. J. Appl. Phys.* 23, L35-L36, 1984.
- [23] V. Kladko, A. Kuchuk, A. Naumov, N. Safriuk, O. Kolomys, S. Kryvyi, H. Stanchu,

- A. Belyaev, V. Strelchuk, B. Yavich, Yu.I. Mazur, M.E. Ware, G.J. Salamo, "Effect of strain-polarization fields on optical transitions in AlGaIn/GaN multi-quantum well structures", *Physica E* 76 140–145, 2016.
- [24] G. Bastard, "Wave mechanics applied to semiconductor heterostructure. Les Éditions de Physique", Les Ulis, France, 1988.
- [25] J.M. Luttinger and W. Kohn. "Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields", *Physical Review*, Vol. 97, N° 4, pp. 869-883, 1955.
- [26] G.L. Bir and G.E. Pikus, "Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors", Wiley, New-York, 1974.
- [27] G. Bastard and J.A. Brum, "Electronic states in semiconductor heterostructures". *IEEE, Journal of Quantum Electronics*, Vol. 22, N° 9, pp. 1625 – 1644, 1986.
- [28] D.A. Broido and L.J. Sham, "Effective masses of holes at GaAs-AlGaAs heterojunctions", *Physical Review B*, 31(2), 1985.
- [29] A Twardowski, C Hermann, "Variational calculation of polarization of quantum-well photoluminescence", *Physical review. B, Condensed matter* 35(15):8144-8153, 1987.
- [30] M. Yamada, Anisotropy and broadening of optical gain in a GaAs/AlGaAs multi quantum-well laser, *IEEE J. Quantum Electron.* 21, 640-645 (1985)
- [31] V. Lysak, Determination of the Optical Gain of III-V Group Compounds for Simulation of Laser Dynamic Characteristics Over a Wide Range of Radiation Frequency, *Telecommunications and Radio Engineering.* 58, 142-147 (2002)
- [32] H.K. Nirmal, S.G. Anjumb, Pyare Lal, Amit Rathi, S. Dalela, M.J. Siddiqui, P.A. Alvi, Field effective band alignment and optical gain in type-I Al_{0.45}Ga_{0.55}As/GaAs_{0.84}P_{0.16} nano-heterostructures, *Optik* 127 7274–7282 (2016)
- [33] E.L. Albuquerque a, U.L. Fulco, M.S. Vasconcelos , P.W. Mauriz, Optical gain spectra of unstrained graded GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum well laser, *Physics Letters A* 377 582–586 (2013)
- [34] I. Sukhoivanov, Nonlinear gain model and its application for numerical investigation of semiconductor lasers, *Microwave & Optical Technol. Lett.* 21, 474 - 477 (1999)

Chapitre IV
ETUDE DE LA STRUCTURE
ZnSe/Mg_{0.08}Zn_{0.92}Se
EMETTANT A 0.430μm

Chapitre : IV

ETUDE DE LA STRUCTURE $ZnSe/Mg_{0.08}Zn_{0.92}Se$ EMETTANT A $0.430\mu m$

V.1. Introduction

Bien que le gain optique des lasers à puits quantiques à base de $ZnSe$ a été fortement étudié [1-6], peu d'études ont été menées sur le gain optique des puits quantiques à base du matériau ternaire $MgZnSe$ qui émet dans le visible et qui fait donc des systèmes à base de $Zn_{1-y}Mg_ySe / Zn_{1-x}Mg_xSe$ un candidat prometteur dans le développement des applications basées sur ces structures.

L'objet de ce chapitre est de calculer le gain optique d'une structure à puits quantique $Zn_{1-y}Mg_ySe / Zn_{1-x}Mg_xSe$ en fonction de la longueur d'onde d'émission pour différentes largeur du puits quantique, différentes concentration des porteurs de charge ainsi que le courant de seuil et la puissance émise. Une attention particulière sera portée à l'effet de la contrainte sur la discontinuité des bandes et les différentes caractéristiques de la structure $Zn_{1-y}Mg_ySe / Zn_{1-x}Mg_xSe$.

Les structures optoélectroniques d'une diode laser à puits quantique sont généralement constituées de quatre parties :

- d'une couche active, elle même constituée de plusieurs couches de taille quantique (de l'ordre du nanomètre);
- de couches de confinement optique de manière à éventuellement guider un mode optique pour optimiser l'interaction lumière-matière;
- de couches de contact permettant l'injection de porteurs;
- d'empilements macroscopiques extérieurs à ces trois éléments pour mieux évacuer la chaleur que nous ne considérerons pas dans la présente analyse.

Le gain optique concerne particulièrement la couche active, nous nous intéresserons essentiellement au cas des structures à puits quantiques. Ce problème a déjà fait l'objet de nombreuses études publiées [7-12].

V.2. Bande interdite

Pour obtenir les discontinuités des bandes de conduction et de valence dans le puits et calculer par la suite la quantification des niveaux d'énergie des électrons dans la bande de conduction et les trous dans la bande de valence, il faut connaître les bandes interdites des alliages semiconducteurs qui composent la structure et leurs évolutions en fonction de la température T et la fraction molaire x .

Dans le cas des matériaux binaires $ZnSe$ et $MgSe$, leur bande interdite est connue (voir le tableau 1), pour le matériau ternaire $Mg_xZn_{1-x}Se$, nous avons calculé la bande interdite en fonction de la fraction molaire du magnésium au chapitre II de notre thèse.

Tableau 2. Les paramètres physiques des matériaux binaires $ZnSe$ et $MgSe$

paramètres	ZnSe	MgSe	Refs
a_0 (Å)	0.566	0.589	13, 14
m_e^*	0.147	0.23	15,16
m_{hh}^*	0.96	0.78	16
m_{lh}^*	0.27	0.33	16
E_g (Γ) (eV)	2.82	4.1	17
Paramètres de Luttinger $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$	2.45 , 0.61 , 1.11		
Elastic stiffness c_{11}, c_{12} (GPa)	82.6 , 49.8	63.1 , 61.8	19,14
Potentiel de déformation a_v, b_v (eV)	-4.25 , -1.2	-4.79 , -1.39	18,19

V.2.1. L'effet de la température sur le gap

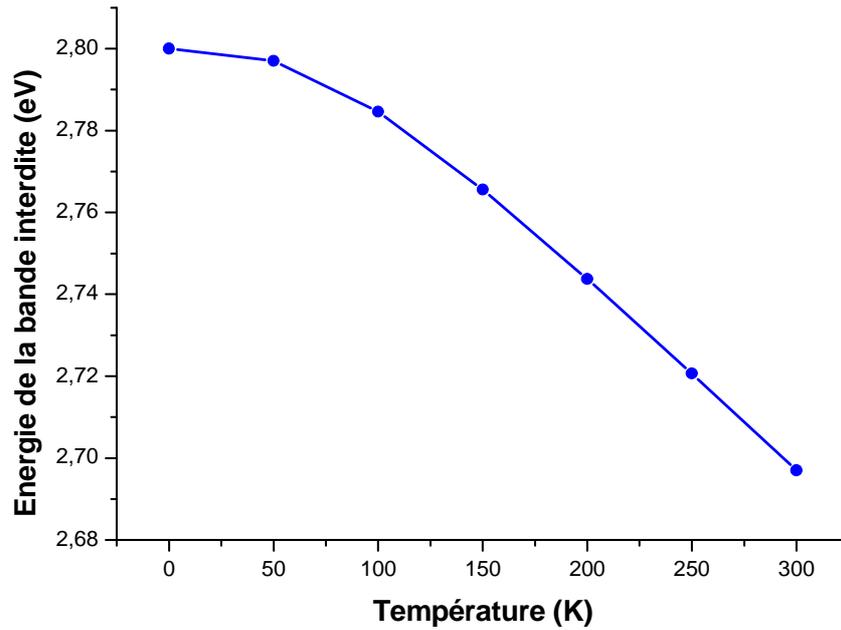
Il est indispensable de calculer la variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la température, dans notre travail, nous avons utilisé la formule de Passler [20] qui estime que lorsque la température augmente, l'énergie de la bande interdite décroît suivant approximativement la relation empirique (figure 4.1):

$$E_g(T) = E(0) - \frac{\alpha \Theta_p}{2} \left[\sqrt{1 + \left(\frac{2T}{\Theta_p} \right)^p} - 1 \right] \quad (4.1)$$

Où $E(0)$ est l'énergie de la bande interdite à $0 K$, Θ_p est la température à laquelle la variation commence à devenir linéaire, α est la pente de la section linéaire à haute température, p est le paramètre de Passler. Les paramètres de Passler utilisés dans notre travail sont donnés dans le tableau 3.

Tableau 3. Les paramètres de Passler utilisés dans ce travail

paramètres	ZnSe	MgSe	Ref
P	2.62	2.90	14,15
$\alpha(\text{meV/K})$	0.599	0.21	14,15
$\theta(\text{K})$	586	590	14,15

**Figure 4.1.** Variation du gap en fonction de la température

V.3. L'effet de la contrainte sur la structure de bandes

L'effet de la contrainte sur la structure de bandes au voisinage du centre de la première zone de Brillouin est qualitativement illustré par la figure 4.2. Les directions sont définies comme suit k_{\perp} direction de croissance, $k_{//}$ plan de croissance .

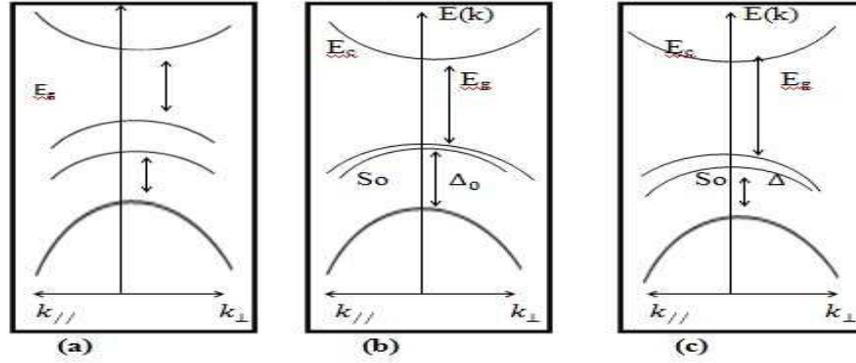


Figure 4.2. Structure de bande pour un semi-conducteur cubique autour de $K = 0$, a) compression biaxiale b) non contraint c) tension biaxiale

L'effet de la contrainte sur les extrémas des bandes a été calculé suivant le modèle décrit par T.Y Wang et String. Comme nous l'avons évoqué au chapitre III, la croissance épitaxiale de couches de matériaux ayant des paramètres de maille légèrement différents induit une contrainte biaxiale dans le plan xoy [21].

Dans le plan de la couche active :

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_s - a_c}{a_c} \quad (4.2)$$

Dans la direction de croissance :

$$\varepsilon_{zz} = \frac{c_{\perp} - c_c}{c_c}$$

Où a_s désigne le paramètre de maille dans le plan du substrat, a_c celui du matériau. Si $a_c > a_s$, la couche épitaxiale est en compression. Dans le cas contraire, la couche est en tension. Si $a_c = a_s$, la couche est en accord de maille. Si les déformations sont faibles, les composantes du tenseur de contraintes sont liées à celles du tenseur des déformations par la loi de Hooke.

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \end{bmatrix}$$

Si la surface est libre de contrainte, l'équilibre statique entraîne l'annulation du terme σ_{zz} , et :

$$\sigma_{zz} = 2c_{13}\varepsilon_{xx} + c_{33}\varepsilon_{zz} = 0 \quad (4.3)$$

On peut alors écrire la déformation suivant l'axe de croissance en fonction de la déformation dans le plan :

$$\varepsilon_{zz} = \frac{-2c_{13}}{c_{33}} \varepsilon_{xx} \quad (4.4)$$

Pour une contrainte biaxiale, la combinaison de relations et permet d'écrire les composantes non nulles du tenseur des contraintes comme suit:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \left(c_{11} + c_{12} - \frac{2c_{13}^2}{c_{11}} \right) \varepsilon_{xx} \quad (4.5)$$

La nullité des ε_{ij} pour $i \neq j$ entraîne : $\sigma_{xy} = \sigma_{yz} = \sigma_{zx} = 0$.

V.3.1. Energie de déformation

L'énergie élastique stockée dans la couche contrainte par unité de volume est :

$$W = \frac{1}{2} \varepsilon_{ij} \sigma_{ij} = \left(C_{11} + C_{12} - 2 \frac{C_{12}^2}{C_{11}} \right) \varepsilon_{//}^2 \quad (4.6)$$

Si l'épaisseur de la couche déposée est L , l'énergie de déformation élastique par unité de surface s'écrit :

$$E_{st} = WL = \left(C_{11} + C_{12} - 2 \frac{C_{12}^2}{C_{11}} \right) \varepsilon_{//}^2 \cdot L \quad (4.7)$$

Cette quantité est une fonction linéaire croissant de l'épaisseur et elle est proportionnelle au carré de la déformation planaire $\varepsilon_{//}$

La moyenne pondérée des deux sous bandes trous lourds et trous légers est choisie comme référence des niveaux d'énergie E_{moy} . Les décalages d'énergies des bandes E_{moy} et la bande de conduction E_c induits par la composante hydrostatique de la contrainte sont donnés respectivement par :

$$\Delta E_{moy} = a_v \frac{\Delta V}{V} \quad (4.8)$$

$$\Delta E_c = a_c \frac{\Delta V}{V} \quad (4.9)$$

Où a_v et a_c sont les potentiels de déformation hydrostatique des bandes de conduction et de valence et $\frac{\Delta V}{V}$ le volume fractionnel qui, pour des faibles contraintes dans la direction [100] est donnée par :

$$\frac{\Delta V}{V} = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} \quad (4.10)$$

La composante de cisaillement provoque la levée de dégénérescence au centre de la première zone de Brillouin, il en résulte un décalage d'énergie des sous bandes et des trous légers et trous lourds par rapport à l'énergie moyenne E_{moy} . Ce décalage d'énergie est donné par les relations suivantes :

$$\Delta E_{v2} = \left(\frac{\Delta_0}{3} - \frac{\delta E_{100}}{2} \right) \quad (4.11)$$

$$\Delta E_{v2} = -\frac{\Delta_0}{6} + \frac{\delta E_{100}}{4} + \frac{1}{2} \sqrt{\Delta_0^2 + \Delta_0 \cdot \delta E_{100} + \frac{9}{4} (\delta E_{100})^2} \quad (4.12)$$

Où Δ_0 est le décalage d'énergie entre la bande de valence et la bande spin-orbite dans le matériau $Mg_x Zn_{1-x} Se$ non contraint.

Avec :

$$\delta E_{100} = 2b(\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{zz})$$

b étant le potentiel de déformation de cisaillement pour une contrainte de symétrie tétragonale. Pour le cas non contraint, alors les expressions s'écrivent :

$$\Delta E_{v1} = \Delta E_{v2} = \frac{\Delta_0}{3} \quad (4.13)$$

Pour $Mg_x Zn_{1-x} Se$ tétragonal :

$$E_{vi} = E_{moy} + a_v \frac{\Delta V}{V} + \Delta E_{vi} \quad (4.14)$$

$$E_c = E_{moy} + \frac{\Delta_0}{3} + a_c \frac{\Delta V}{V} + E_{g0} \quad (4.15)$$

E_{g0} est le gap non contraint est déterminé dans le chapitre II.

Pour la structure cubique :

$$E_c = E_v + E_g \quad (4.16)$$

$$E_v = E_{moy} + \frac{\Delta_0}{3} \quad (4.17)$$

Donc le décalage d'énergie s'écrit :

$$\Delta E_{vi} = E_{vi} - E_v(Mg_xZn_{1-x}Se) \quad (4.18)$$

$$\Delta E_c = E_c(Mg_xZn_{1-x}Se) - E_c \quad (4.19)$$

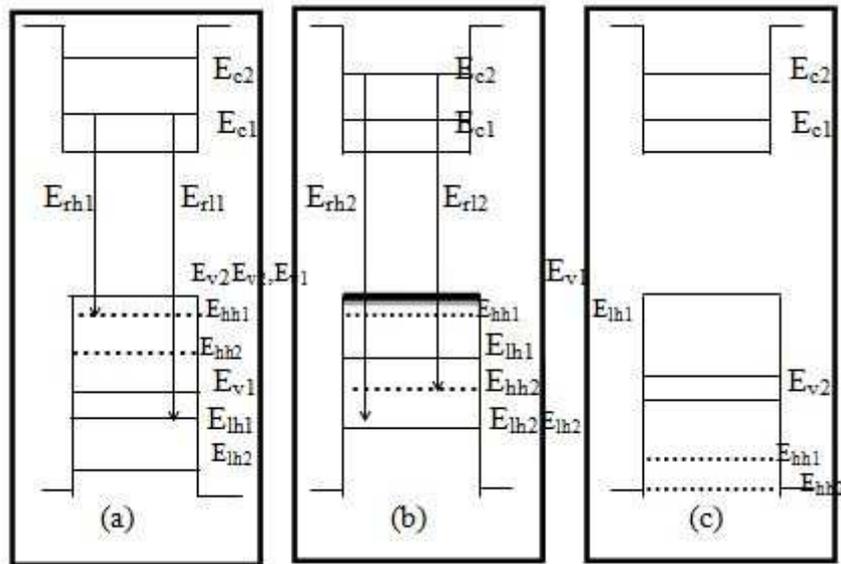


Figure 4.3. La variation de la structure énergétique du puits suivant la concentration x

La figure 4.3 montre La variation de la structure énergétique du puits suivant la concentration x avec :

1. E_{v1} = sommet de la bande des trous légers
1. E_{v2} = sommet de la bande des trous lourds
2. E_{hh1} = première niveau de quantification pour les trous lourds
3. E_{hh2} = deuxième niveau de quantification pour les trous lourds
4. E_{lh1} = première niveau de quantification pour les trous légers
5. E_{lh2} = deuxième niveau de quantification pour les trous légers
6. E_{c1} = première niveau de quantification pour les électrons

7. E_{c2} = deuxième niveau de quantification pour les électrons
8. E_{rhn} = énergie de recombinaison (électrons – trous lourds)
9. E_{rln} = énergie de recombinaison (électrons – trous légers)

La bande interdite E_g en fonction de la composition x du magnésium est calculée dans le chapitre II. En tenant compte de la contrainte nous aurons les bandes interdites effectives :

$$E_{ghh}(x) = Eg_0(x) + 2a_v \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon - b_v \left(1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon \quad (4.20)$$

$$E_{glh}(x) = Eg_0(x) + 2a_v \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon + b_v \left(1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon \quad (4.21)$$

Avec

$$\varepsilon = (a_0 - a(x))/a_0 \quad (4.22)$$

Ou a_0 est le paramètre de la maille $ZnSe$. $a(x)$ est le paramètre de la maille du $Mg_x Zn_{1-x} Se$.

La figure 4.4 représente les variations de l'énergie de la bande interdite du matériau $Mg_x Zn_{1-x} Se$ non contraint $Eg_0(x)$ et les bandes interdites effectives (sous la contrainte) $E_{ghh}(x)$, $E_{glh}(x)$ avec le taux de magnésium.

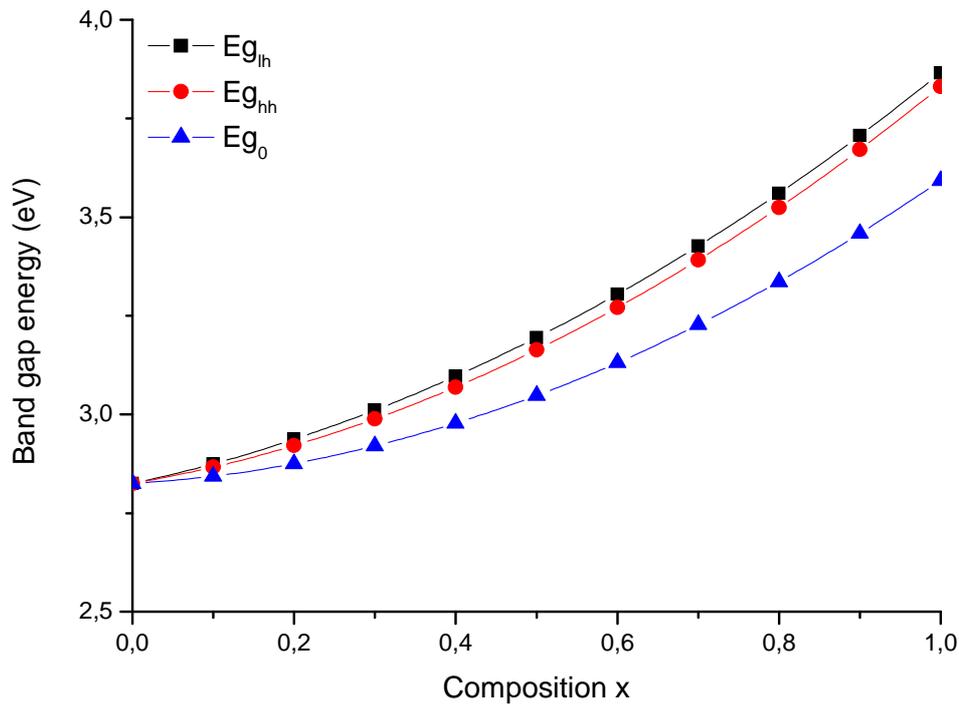


Figure 4.4. Variation de l'énergie de la bande interdite en fonction de la composition du magnésium

On note que les gaps $E_{g_0}(x)$, $E_{g_{hh}}(x)$ et $E_{g_{lh}}(x)$ augmentent de façon monotone lorsque la composition du magnésium croît de 0 à 1.

V.3.2. Energie de transition

La variation des énergies de transition $E_{tr(e-hh)}$ et $E_{tr(e-lh)}$ en fonction de la largeur du puits quantique Lp pour $x=0.08$ est illustrée sur la figure 4.5. On remarque que les énergies de transition diminuent avec l'augmentation de la largeur du puits. On interprète cette diminution par le resserrement des bandes quantifiées.

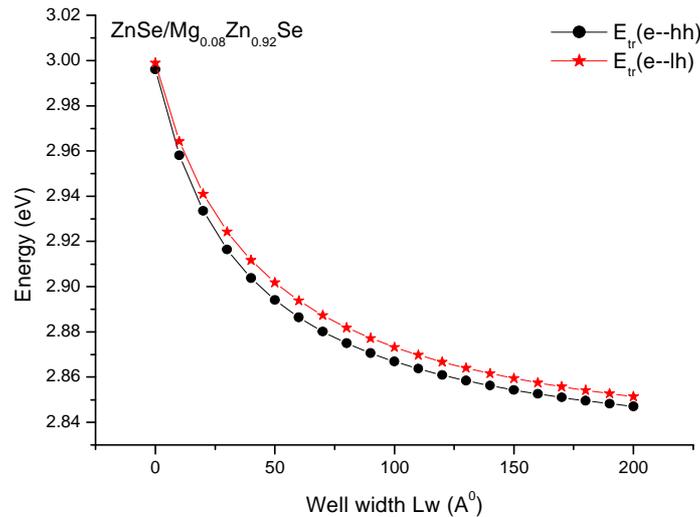


Figure 4.5. Variation de l'énergie de transition en fonction de la largeur du puits quantique

La largeur du puits quantique L_p et la composition x ont une influence importante sur le processus de transition dans le puits que ce soit les transitions entre des électrons du premier niveau E_{e1} avec les trous du niveau E_{hh1} ou avec ceux du niveau E_{lh1}

V.4. Etude de la discontinuité des bandes

Les discontinuités de bandes $\Delta E_v, \Delta E_c$ constituent en fait un paramètre essentiel qui régit le comportement des systèmes à puits quantique [22,23]. Elles jouent le rôle de barrières de potentiel qui agissent fortement sur Les déplacements des électrons et des trous. Ceci permet de disposer, pour la conception de système à semiconducteurs, d'un nouveau moyen de contrôler les distributions et flux de porteurs. La connaissance du $\Delta E_v, \Delta E_c$ est donc essentielle pour la conception de nouveaux dispositifs plus performants. Nous avons utilisé la méthode empirique pseudopotentiel. La mise au point du calcul a été effectuée sur le cas général qui est l'interface $Mg_yZn_{1-y}Se/Mg_xZn_{1-x}Se$ [001]. Nous présentons les résultats obtenus pour cette hétéro-interface.

V.4.1. Discontinuités des bandes de conduction

Les discontinuités des bandes de conduction (*CBO: Conduction Band Offsets*) de l'hétérointerface $Zn_{1-x}Mg_xSe/Zn_{1-y}Mg_ySe$ pour différentes compositions de magnésium variant de 0 à 1 ont été calculées et représentées sur la Figure 4.6 (a et b). Ces discontinuités de bandes sont de signe négatif lorsque la concentration de magnésium dans la couche supérieure

est inférieure à la concentration de magnésium dans le substrat (i.e. $x < y$) et changent de signe dans le cas contraire.

Dans le Tableau 1 sont rassemblées les données nécessaires pour le calcul des discontinuités des bandes de conduction et de valence.

Tableau 4. Données nécessaires pour le calcul des discontinuités des bandes de conduction et de valence au niveau de l'hétérointerface $Zn_{1-x}Mg_xSe/Zn_{1-y}Mg_ySe$. Toutes les données sont en eV [24,25].

Composé	Δ_0	$E_{v,av}$	a_v	a_c	B
ZnSe	0.43	-8.37	1.65	4.17	-1.2
MgSe	0.40	-7.60	1.0	4.79	-1.39

Dans ce Tableau,

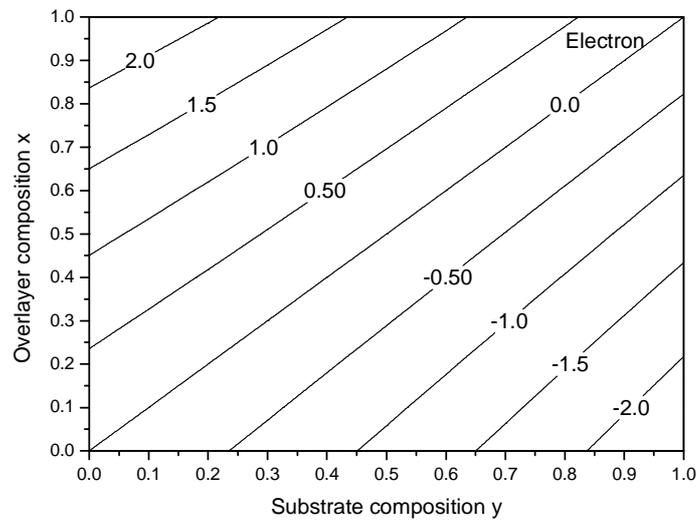
Δ_0 est le *splitting spin-orbite*,

$E_{v,av}$ est l'énergie moyenne des bandes de valence.

a_v est le potentiel de déformation hydrostatique pour les bandes de valence.

a_c est le potentiel de déformation hydrostatique pour les bandes de conduction.

et b est le potentiel de déformation uniaxiale.



a.

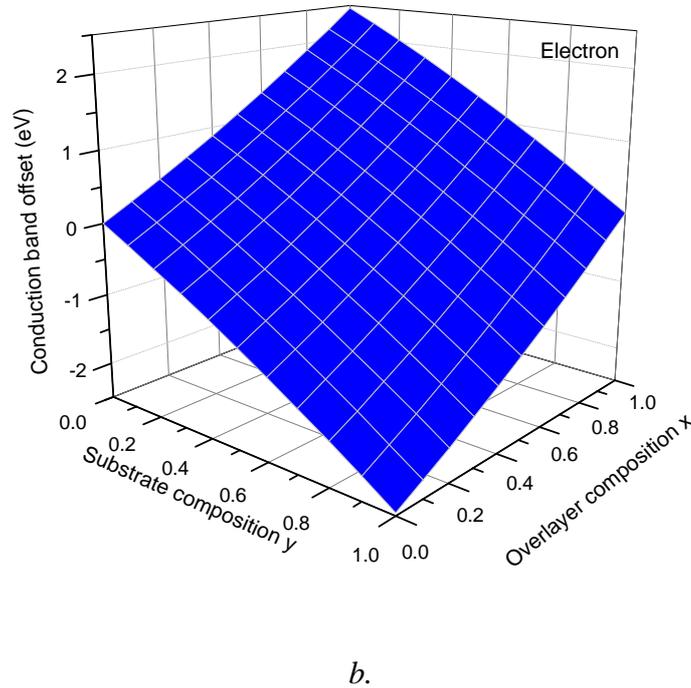
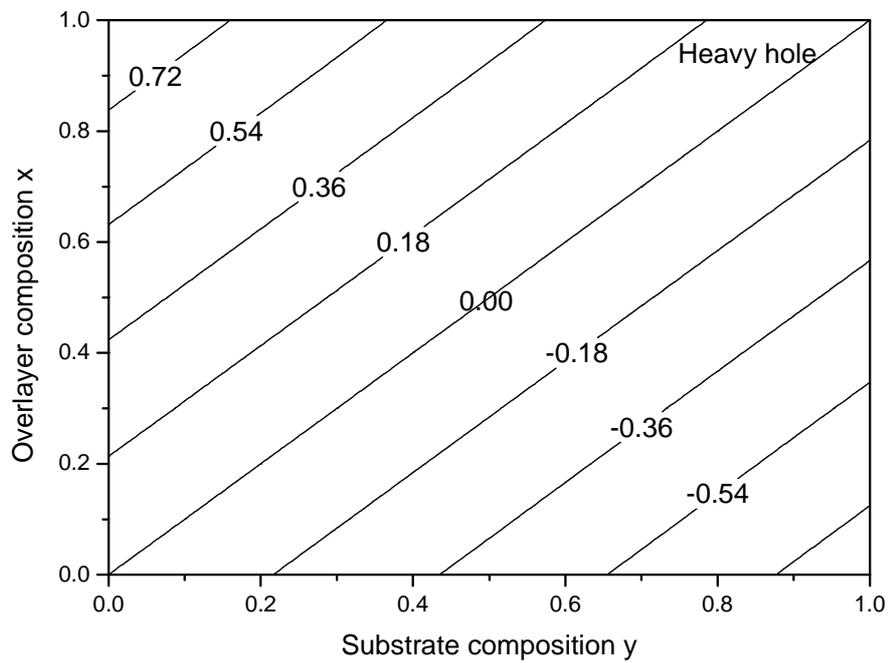


Figure 4.6. Discontinuités des bandes de conduction en fonction de la concentration de magnésium dans le substrat (y) et dans la couche supérieure (x) (a. sous forme de contour, b. en représentation tridimensionnelle).

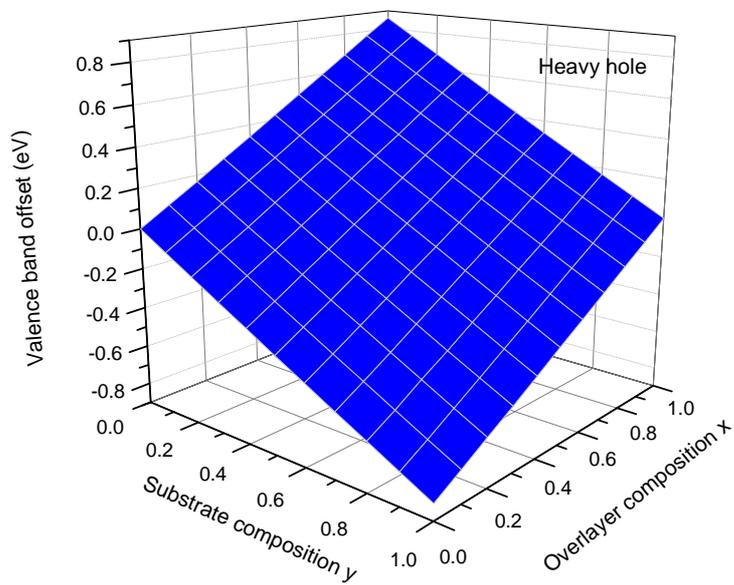
V.4.2. Discontinuités des bandes de valence

Les discontinuités des bandes de valence (*VBO: Valence Band Offsets*), des trous lourds et des trous légers, ont été calculées en utilisant les données du Tableau 3.1 comme données d'entrées et sont représentées sur les Figures 4.7 (a et b) et 4.8 (a et b) respectivement pour les trous lourds et légers. Tout comme les discontinuités des bandes de conduction, les *VBOs* restent négatives tant que la concentration de magnésium dans la couche supérieure est inférieure à celle dans la couche formant le substrat (*i.e. x < y*) et deviennent positives dans le cas contraire.

On note que le *gap* de la couche supérieure $Zn_{1-x}Mg_xSe$ n'est pas contenu dans le *gap* du substrat $Zn_{1-y}Mg_ySe$ et l'inverse est vrai aussi. L'alignement des bandes est alors de type II (*staggered*) pour $x < y$. Si $x > y$ l'alignement reste toujours de type II. L'on peut conclure par conséquent que quelque soient les compositions du magnésium dans la couche supérieure et dans le substrat, l'alignement est toujours de type II.



a.



b.

Figure 4.7. Discontinuités des bandes de valence des trous légers en fonction de la composition de magnésium dans le substrat (y) et dans la couche supérieure (x) (a. sous forme de contour, b. en représentation tridimensionnelle).

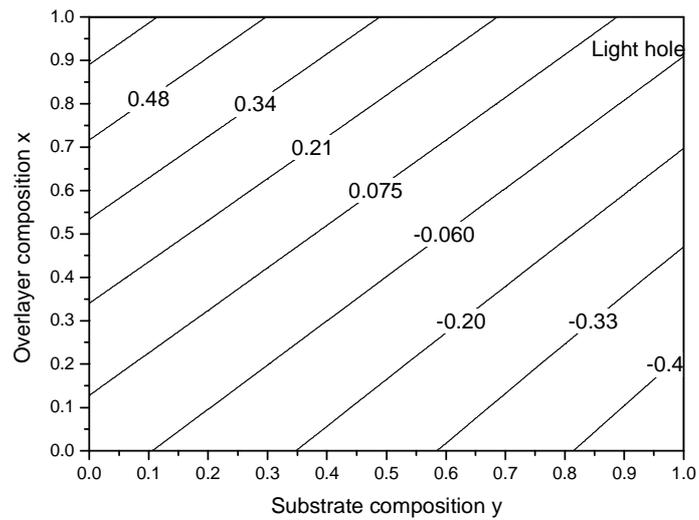
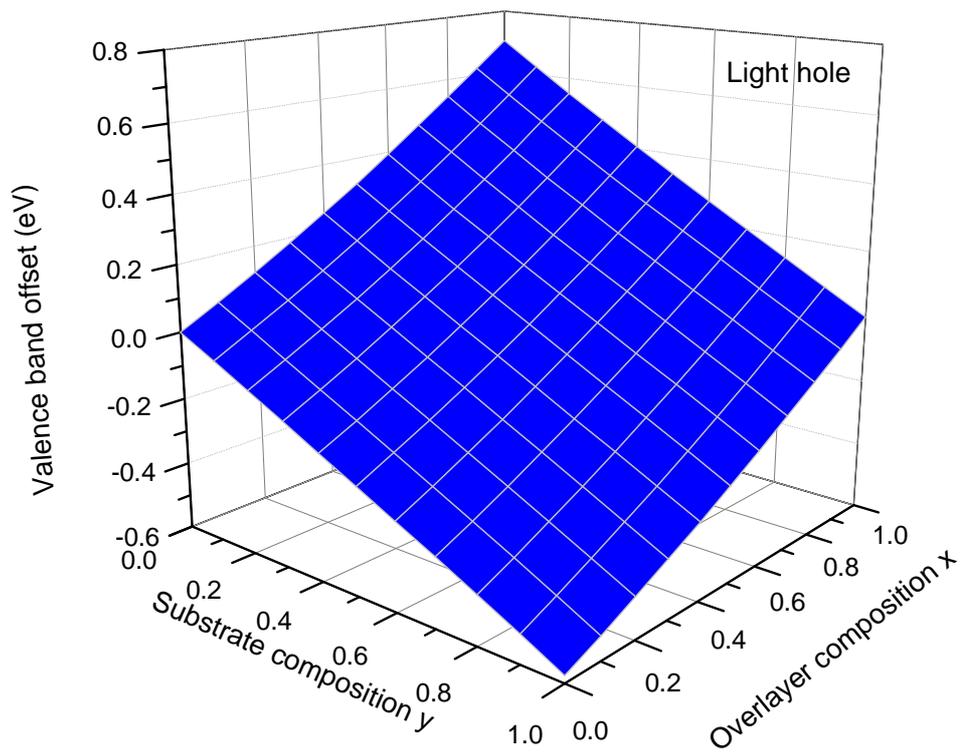
*a.**b.*

Figure 4.8. Discontinuités des bandes de valence des trous lourds en fonction de la composition de magnésium dans le substrat (y) et dans la couche supérieure (x) (a. sous forme de contour, b. en représentation tridimensionnelle).

V.4.3. Gaps énergétiques relaxé et contraints

La Figure 4.9 montre le *gap* énergétique du matériau $Zn_{1-x}Mg_xSe$ relaxé et ceux contraints du $Zn_{1-x}Mg_xSe/Zn_{1-y}Mg_ySe$ pour $x=0$ à 0.3 et $y=0$ à 1 . On peut noter que tous les gaps relaxés et contraints calculés augmentent non-linéairement lorsque la composition y augmente de 0 à 1 . Pour $x=0.2$ et $x=0.3$, le *gap* contraint est plus faible que le *gap* relaxé pour toutes les valeurs de y . Par contre pour $x=0$ et $x=0.1$, le *gap* contraint est supérieur au *gap* relaxé jusqu'à ce qu' y devienne égale respectivement à 0.92 et 0.35 , valeurs au-delà desquelles le *gap* contraint devient inférieur au *gap* du matériau non-contraint. Nos gaps énergétiques contraints peuvent être respectivement fittés par :

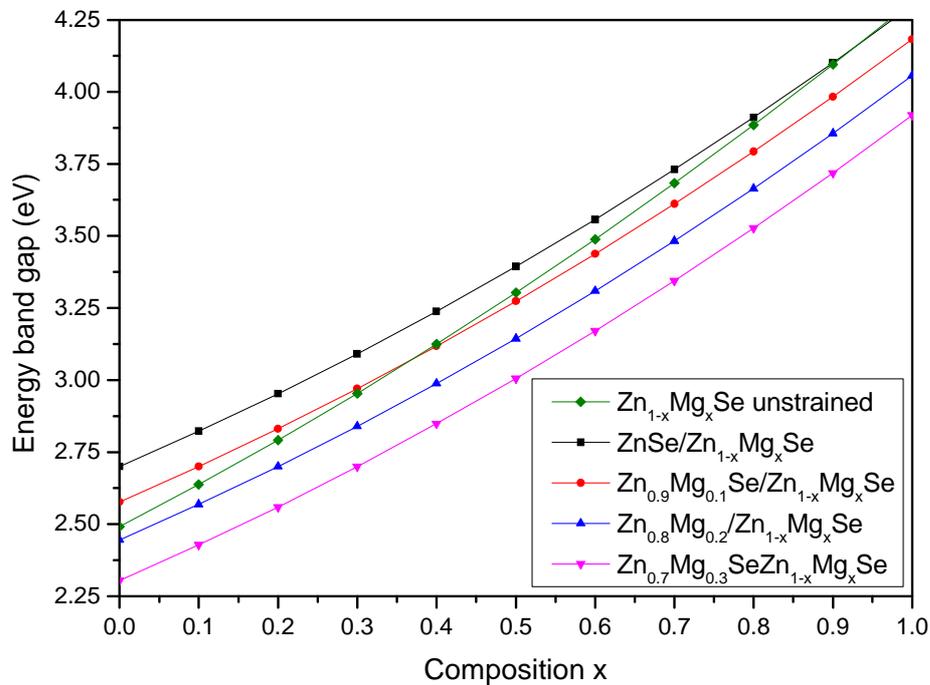


Figure 4.9. Gaps énergétiques du matériau $Zn_{1-x}Mg_xSe$ relaxé puis contraint $Zn_{1-x}Mg_xSe/Zn_{1-y}Mg_ySe$ en fonction de la concentration de magnésium.

V.5. Gain optique

Les figures 4.10, 4.11, 4.12, 4.13 et 4.14 présentent l'évolution du gain optique du puits quantique en fonction de la longueur d'onde pour différentes densités de porteurs et des largeurs de puits $L_p=7$ nm, 8 nm, 9 nm, 10 nm et 12 nm, nous observons un très faible décalage du maximum de gain vers les courtes longueurs d'ondes, lorsque la densité de porteurs augmente et que le maximum de gain augmente avec l'augmentation de la

concentration des porteurs de charge avec toutefois une diminution de la longueur d'onde correspondante. Ce phénomène est lié au remplissage des états de plus en plus élevés dans les bandes de valence et de conduction au fur et à mesure de l'augmentation du nombre de porteurs.

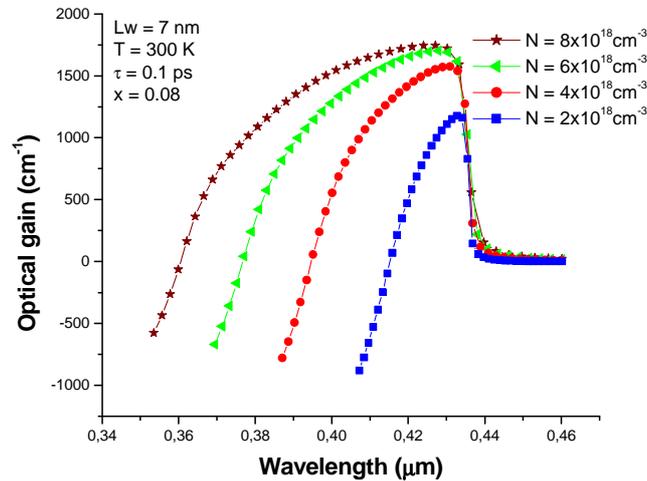


Figure 4.10. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition $x=0.08$ et une largeur de puits quantique de 7 nm

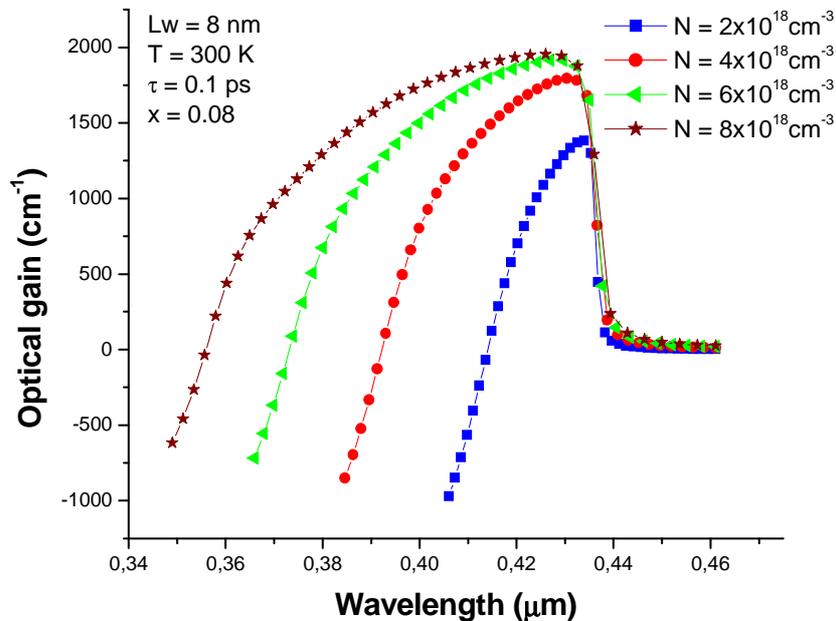


Figure 4.11. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition $x=0.08$ et une largeur de puits quantique de 8 nm

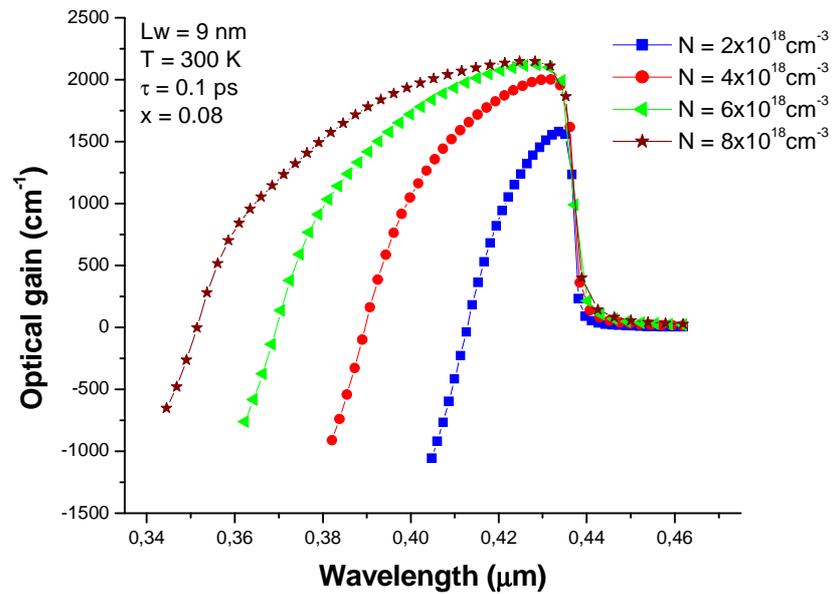


Figure 4.12. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition $x=0.08$ et une largeur de puits quantique de 9 nm

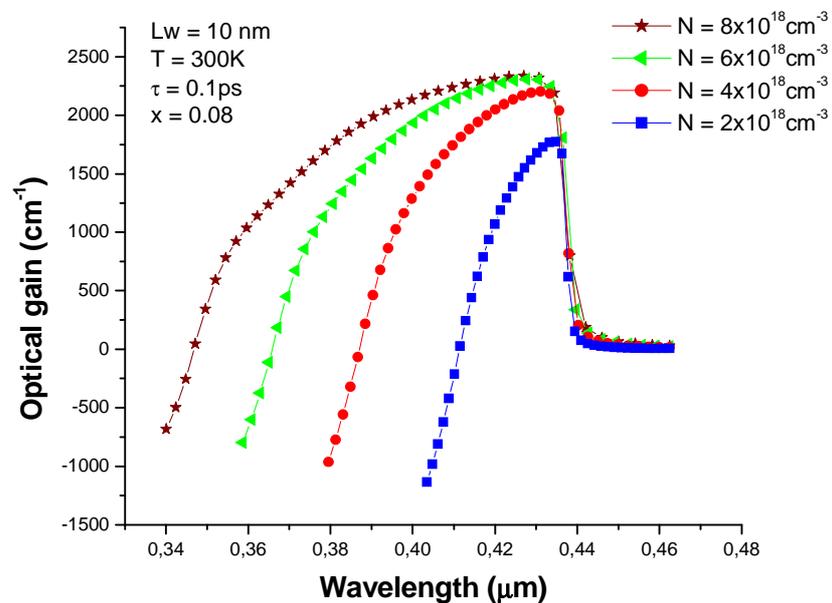


Figure 4.13. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition $x=0.08$ et une largeur de puits quantique de 10 nm

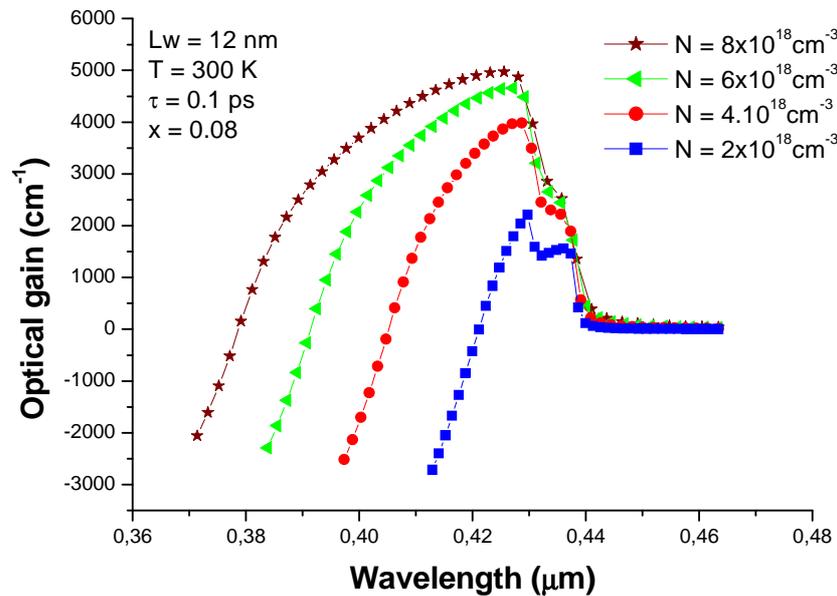


Figure 4.14. Variation du gain optique en fonction de la longueur d'onde pour une composition $x=0.08$ et une largeur de puits quantique de 12 nm

En peut résumer la variation du gain optique pour plusieurs valeurs de la largeur du puits quantique sur la figure 4.15.

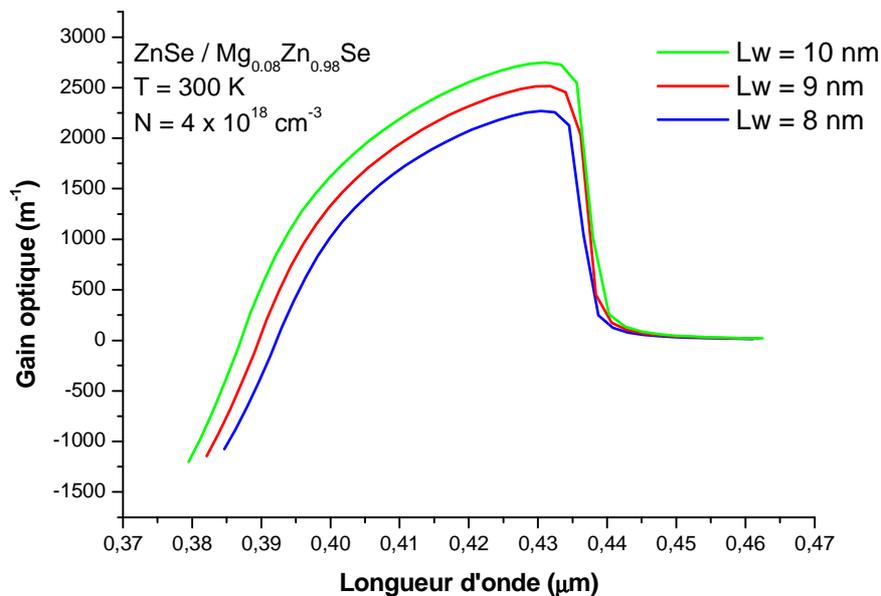


Figure 4.15. La variation du gain optique pour plusieurs valeurs de la largeur du puits quantique

V.5.1. Evolution du gain maximum en fonction de l'injection

La figure 4.16 représente les variations du gain maximum G_{max} en fonction de l'injection N , pour différentes valeurs de la largeur du puits L_p . Ces courbes ont été obtenues à partir des courbes de la figure 4.14, pour différentes injections N . On constate que le gain maximum croît lorsqu'on fait augmenter l'injection des porteurs. A partir du gain maximum on peut déterminer le gain au seuil et le courant de seuil de la diode laser à puits quantique contraint de cette structure.

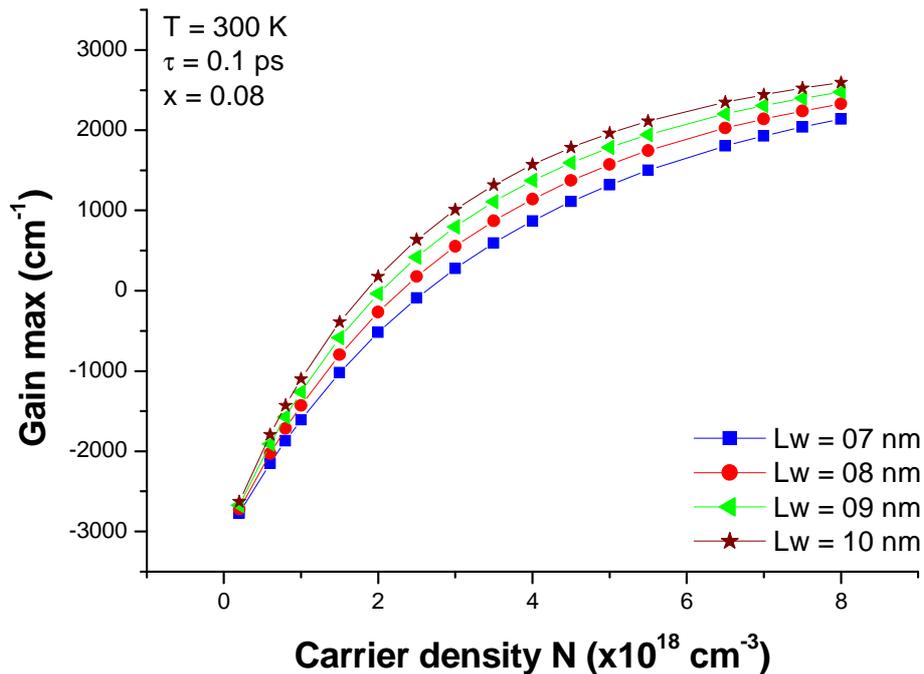


Figure 4.16. Variation du gain maximum en fonction de l'injection N

V.5.2. Dépendance de la polarisation

Des équations (3.18) et (3.21) dans le chapitre III, l'énergie propre des trous lourds est plus petit et sa densité d'états est plus grande comparant par rapport à celle des trous léger, cela veut dire que la majorité des transitions sont les transitions électron-trou lourd, qui contribue à l'amplification des ondes TE et non pas aux ondes TM comme il est montré dans le calcul de la matrice optique dans le chapitre III.

La figure 4.17 montre que le gain optique de la polarisation TE est plus grand que celui de la polarisation TM ce qui signifie que la transition entre les électrons et les trous lourds sont

majoritaires par rapport à la transition entre les électrons et les trous léger car la contribution des transitions (e---hh) dans la polarisation TM est négligeable au centre de la zone de Brillouin ($k=0$) [26,27].

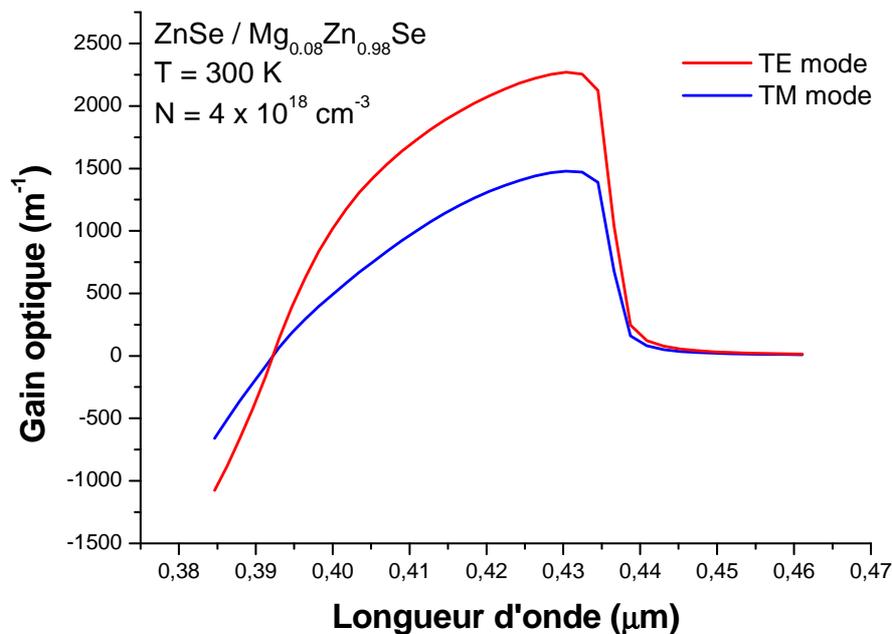


Figure 4.17. TE et TM mode du gain optique en fonction de la longueur d'onde

V.6. Courant de seuil

Le courant de seuil, courant minimal à injecter pour obtenir l'effet laser, est une des principales caractéristiques du laser que l'on cherche absolument à minimiser. Le courant de seuil marque la séparation entre un fonctionnement dominé par l'émission spontanée et un fonctionnement dominé par l'émission stimulée. La densité d'électrons N_s pour laquelle le gain compense toutes les pertes de la cavité se situe autour de $1.6 \times 10^{18}\text{ cm}^{-3}$. La densité de courant J_s nécessaire pour atteindre le seuil laser dans un puits quantique est liée à la densité d'électrons N_s . Pour des lasers de type "large contact", la notion de densité de courant de seuil J_s (courant de seuil par unité de surface de la zone active) est généralement plus utilisée :

$$j_s = \frac{I_s}{WL} \quad (4.23)$$

avec W est la largeur du puits et L est la longueur de la cavité qui sont généralement exprimées en cm. La densité du courant de seuil est souvent donnée en $KA.cm^{-2}$.

V.6.1. Les origines du courant de seuil

Différents phénomènes physiques contribuent à l'augmentation du courant de seuil. Par souci de simplification de langage, nous parlerons indifféremment dans ce paragraphe de densité de courant ou de courant sachant que ces deux grandeurs, d'après la relation (2.30), sont définies à une constante multiplicative près. Pour tenir compte de ces différents phénomènes, il est possible de décomposer le courant de seuil en une somme de différents termes [28]:

$$J_s \propto J_{pièges/surf} + J_{spon} + J_{auger} + J_{fuite}$$

$J_{pièges/surf}$ est le courant lié à la présence de pièges et aux recombinaisons non radiatives en surface

J_{spon} est le courant lié aux recombinaisons radiatives spontanées

J_{auger} est le courant lié aux recombinaisons non radiatives Auger

J_{fuite} est le courant lié à la fuite des porteurs aux hétérointerfaces

Nous allons maintenant étudier plus en détail chacune de ces contributions.

Courant lié à la présence de pièges et aux recombinaisons non radiatives en surface.

Le courant lié à la présence de pièges et aux recombinaisons non radiatives en surface se décompose en deux contributions :

$$J_{pièges/surf} = J_{piège} + J_{surf}$$

où $J_{pièges}$ représente le courant lié à la présence de pièges ou de défauts et J_{surf} le courant lié aux recombinaisons de surface. Les défauts ou pièges dans la zone active, contribuant au courant $J_{pièges}$ se créent principalement lors de la croissance épitaxiale des matériaux. Ils se présentent sous la forme d'un continuum d'états localisés sur lequel les électrons et les trous,

lors de la diffusion, vont se recombiner de manière non radiative. Le courant $J_{pièges}$ s'exprime par [29]:

$$J_{pièges} = qL_p A_{nr} N_s \quad (4.24)$$

avec q la charge élémentaire

L_p largeur du puits d'une structure MQW

N_s la densité de porteurs au seuil

$$A_{nr} = \sigma v N_t$$

où σ est la section de capture des pièges

v la vitesse des porteurs considérés

N_t la densité de pièges

Les surfaces en contact avec l'air, telles que les facettes clivées d'un laser, contribuent au courant J_{surf} . Elles constituent de fortes perturbations pour le paramètre de maille du cristal qui se traduisent par la formation des liaisons pendantes sensibles aux impuretés extérieures. Il en résulte une accumulation sur ces surfaces de défauts en grande concentration, défauts qui se comportent comme des centres de recombinaisons non radiatives. Ils participent donc à l'augmentation du courant de seuil. Les interfaces d'une hétérostructure constituent également une autre source possible de recombinaisons non radiatives. Le courant J_{surf} est donné par [29]:

$$J_{surf} = qL_p A S N_s \quad (4.25)$$

Avec S le coefficient de recombinaisons en surface exprimé en terme de vitesse de recombinaisons de surface A : aire de la surface où s'effectuent les recombinaisons non radiatives.

Le courant lié aux recombinaisons radiatives spontanées est donné par [30]:

$$J_{spon} = qL_p B(T) N_s^2 \quad (4.26)$$

où $B(T)$ représente le coefficient de recombinaisons radiatives spontanées dépendant de la température T .

Le courant de fuite J_{fuite} est lié à la diffusion et à la dérive des porteurs au niveau des hétérointerfaces. Dans une structure laser à multi-puits quantiques, il correspond à la fuite des porteurs vers les barrières et/ou vers les couches de confinement résultant d'une faible discontinuité de bande de conduction. La contribution du courant de fuite des porteurs au courant de seuil s'exprime par [31]:

$$J_{fuite} = qL_p \frac{N_b}{\tau_b} \quad (4.27)$$

où N_b est le nombre de barrières

τ_b le temps de vie "phénoménologique" des porteurs injectés dans les barrières. Le courant de fuite est très sensible à la température. Il suit une loi du type [29]:

$$J_{fuite}(T) \propto (kT)^{3/2} \exp\left(\frac{-\Delta E_c}{kT}\right)$$

avec k la constante de Boltzmann

ΔE_c la discontinuité de bande de conduction.

Plus la discontinuité de bande de conduction ΔE_c est grande, plus le courant de fuite diminue.

Le courant lié aux recombinaisons non radiatives Auger est défini par [29]:

$$J_{auger} \propto qL_p C(T) N_s^3$$

où $C(T)$ représente le coefficient Auger dépendant de la température T . Ce coefficient varie suivant le type de recombinaisons non radiatives Auger; elles se présentent sous plusieurs formes, recombinaisons bande à bande et recombinaisons assistées par phonons.

Dans les recombinaisons non radiatives bande à bande, on distingue 3 types de mécanismes notés CHCC, CHHS et CHHL et décrits dans la figure 4.18. La lettre C signifie qu'il s'agit de la bande de Conduction, et H, L, S correspondent respectivement aux sous bandes de trous lourds ("Heavy holes"), trous légers ("Light holes") et de "Split-off" de la bande de valence.

Le principe de l'effet Auger est fondé sur l'interaction coulombienne entre deux électrons de la bande de conduction notés 1 et 2. Comme décrit sur la figure 4.18, dans le mécanisme CHCC,

l'électron 1 se recombine avec le trou 1' et l'excès d'énergie est transféré à un électron 2 qui est excité dans un niveau supérieur 2'. Les deux autres processus, CHHS et CHHL, sont fondés sur le même principe mais les particules qui vont gagner de l'énergie à la suite des recombinaisons ne sont plus des électrons mais, comme le montrent les figures 4.18 (b) et 4.18 (c), des trous des sous bandes de valence et de la bande de "split-off". Sous des conditions de forte injection comme lors de la polarisation d'un laser, ces 3 types de recombinaisons bande à bande non radiative interviennent.

Sachant que ces transitions Auger doivent satisfaire les lois de conservation de l'énergie et du moment pour les 4 particules impliquées, le coefficient Auger varie, si l'on se place dans le cadre d'une structure de bande parabolique et dans la statistique de Boltzmann, par la relation suivante [32]:

$$C(T) = C_0 \exp\left(\frac{-E_a}{kT}\right) \quad (4.28)$$

avec E_a l'énergie d'activation de l'effet Auger.

Cette énergie, dépendant du type de recombinaisons bande à bande, est définie par les relations suivantes :

$$E_a(CHCC) = m_c^* E_g / (m_c^* + m_{hh}^*) \quad (4.29)$$

$$E_a(CHCC) = m_{so}^* (E_g - E_{so}) / (2m_{hh}^* + m_c^* - m_{so}^*) \quad (4.30)$$

où m_c^* , m_{hh}^* et m_{so}^* sont les masses effectives respectivement des extrema des bandes de conduction, des sous-bandes de valence de trous lourds et de "Split-off". E_g et E_{so} sont les énergies de bande interdite et de "Split-off"

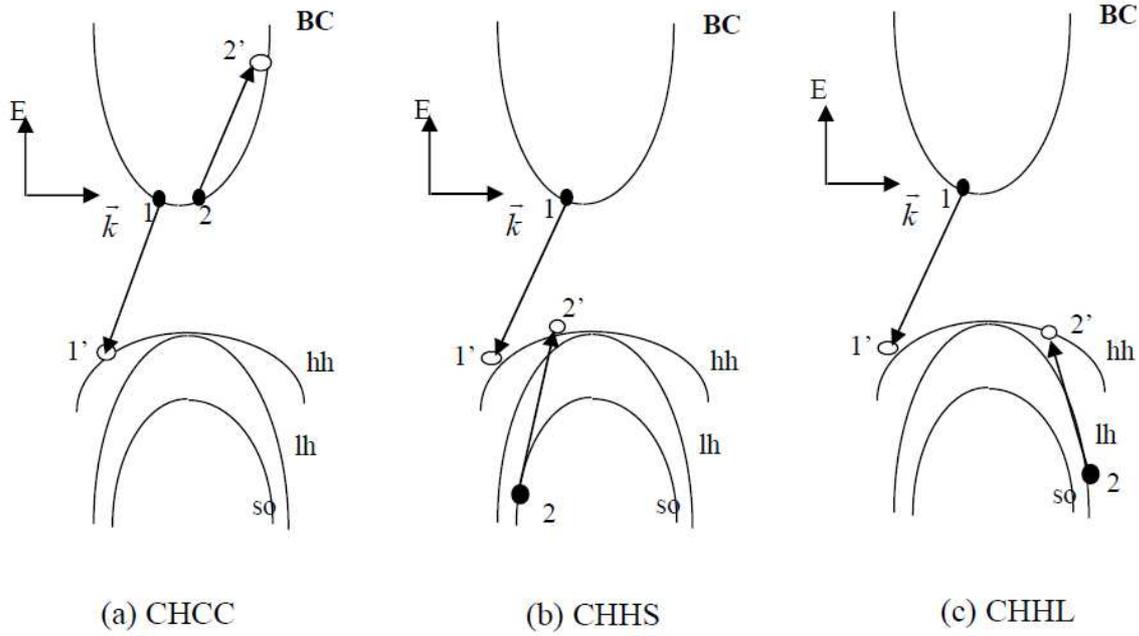


Figure 4.18. Description des différentes recombinaisons non radiatives Auger bande à bande

V.6.2. Relation courant de seuil et température

L'évolution du courant de seuil I_s en fonction de la température T est caractérisée expérimentalement par l'intermédiaire de la température caractéristique notée T_0 . La relation entre ces deux paramètres est donnée par [33]:

$$I_s(T) = I_0 \exp\left(\frac{T}{T_0}\right) \quad (4.31)$$

où I_0 est une constante. T_0 traduit la sensibilité en température du courant de seuil. Une faible valeur de T_0 exprime une forte augmentation du courant de seuil avec la température.

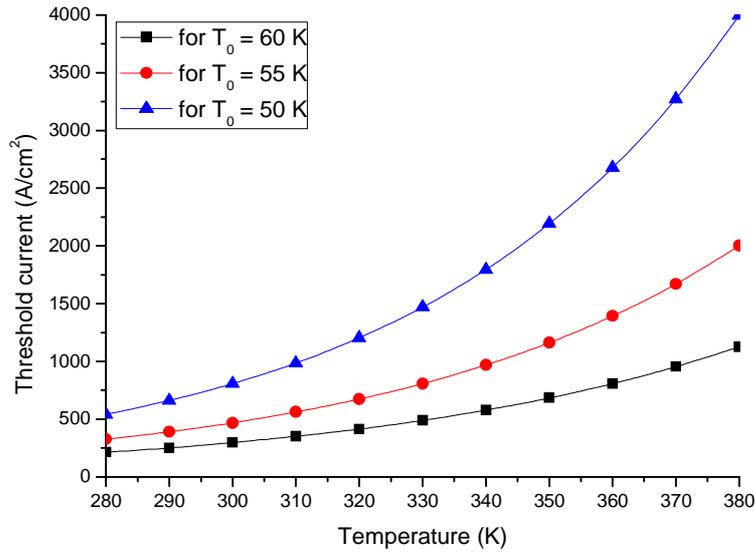


Figure 4.19. Courant de seuil en fonction de la température

V.7. Puissance émise

La puissance émise par le laser est donnée par l'énergie de l'ensemble des photons de la cavité (c'est à dire $n_w V$) divisée par le temps de vie des photons dans la cavité en l'absence de milieu à gain, soit τ_m . En effet, l'inverse de ce temps de vie représente bien le taux auquel les photons quittent la cavité par transmission à travers des miroirs. Ce taux multiplié par l'énergie des photons représente donc bien la puissance émise par le laser.

$$P = \left[\begin{array}{l} \text{énergie} \\ \text{du photon} \end{array} \right] \left[\begin{array}{l} \text{densité} \\ \text{de photons} \end{array} \right] \left[\begin{array}{l} \text{volume effectif} \\ \text{du mode} \end{array} \right] \left[\begin{array}{l} \text{taux d'échappement} \\ \text{des photons} \end{array} \right]$$

$$P = \hbar\omega n_w V \alpha_m \nu \quad (4.32)$$

$$\alpha_m = \ln(1/R)/L \quad (4.33)$$

où ν est la vitesse des photons.

En adoptant pour n_w sa valeur correspondant à la solution oscillante et en exprimant τ_p en fonction de $\alpha_{cav} = \alpha_m + \alpha_i$, nous pouvons écrire P comme indiqué ci-dessous :

$$n_{\omega} = \frac{\tau_p}{eV} (I - I_s) \quad (4.34)$$

$$P = \frac{\hbar\omega}{e} \frac{\alpha_m}{\alpha_m + \alpha_i} (I - I_s) \quad (4.35)$$

$$\tau_p = \frac{1}{\alpha_{cav}v} \quad (4.36)$$

où τ_p est la durée de vie moyenne des photons dans la cavité.

La courbe ci-dessous, illustre la variation de la puissance émise en fonction du courant d'excitation de la jonction. Bien entendu, la puissance lumineuse ne devient non nulle qu'au delà du courant de seuil. La pente de la droite donnant la croissance linéaire de la puissance en fonction du courant définit le rendement différentiel du laser. C'est une quantité essentielle dans la mesure où l'on a toujours intérêt à avoir un rendement différentiel le plus élevé possible pour atteindre une puissance lumineuse donnée avec un minimum de courant (figure 4.20).

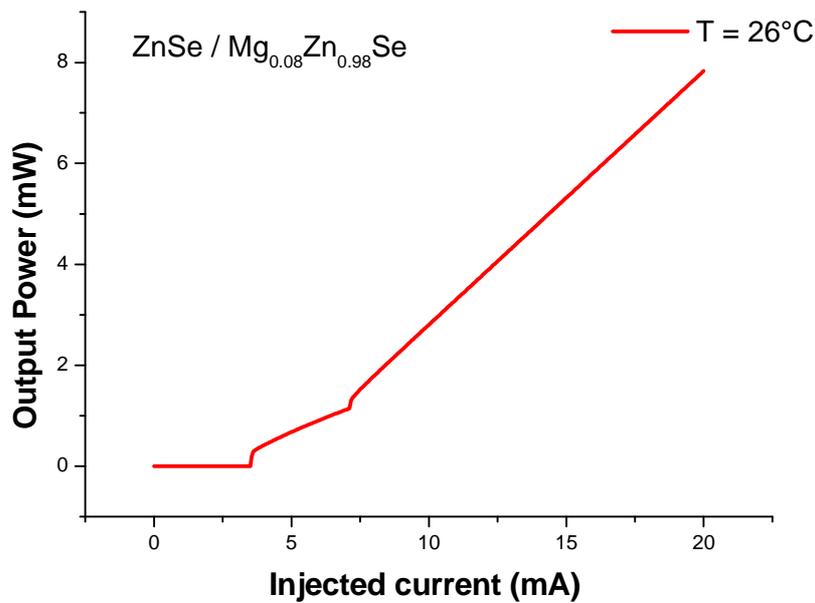


Figure 4.20. Evolution de la puissance optique en fonction du courant d'injection

V.8. Conclusion

La discontinuité des bandes de conduction et de valence dans la présence de la contrainte ainsi que le gain optique d'un laser à puits quantique contraint $ZnSe / Mg_{0.08}Zn_{0.92}Se$ a été calculé pour différentes largeur du puits $Lw=7$, $Lw=8$, $Lw=9$ et $Lw=10$ nm et $Lw=12$ nm avec la variation de la concentration des porteurs de charge. L'on a remarqué que le type de la structure est le type II et le gain optique maximal de ce système augmente avec la concentration des porteurs sans grande influence sur la longueur d'onde émise $0.43 \mu m$.

References

- [1] D. Ahn, "Theoretical aspects of blue-green II-VI strained quantum well Lasers", *Physica B* 191 140-155, 1993.
- [2] J. Ding, M. Hagerott p. Kelkar, A.V. Nurmikko, D.C. Grillo, Li He, J. Han, R.L. Gunshor, "Gain and dynamics in ZnSe-based quantum wells", *Journal of Crystal Growth* 138 719-726, 1994.
- [3] I. Suemune, K. Nakanishi, Y. Fujii, Y. Kuroda, M. Fujimoto and M. Yamanishi, "Photopumped ZnSe/ZnSSe blue semiconductor lasers and a theoretical calculation of the optical gain", *Journal of Crystal Growth* 1171068—1072, 1992.
- [4] H. ChangeJeon, SeungJooLee,n, Seoung-HwanPark, TaeWonKang, DoyeolAhn, G.Ihm, "Enhancement of optical gain in Li: CdZnO/ZnMgO quantum well lasers", *Physica E* 42 2652–2654, 2010.
- [5] M. Sugawara, "Optical gain process in wide-gap semiconductors: possibilities of blue-light bi-exciton lasing in quantum-well and quantum-dot lasers", *Journal of Crystal Growth* 189/190 585D592, 1998.
- [6] F.P. Loguea, P. Rees, C. Jordan, J.F. Donegana, J. Hegarty, F. Hiei, S. Taniguchi, T. Hino, K. Nakano, A. Ishibashi, "Optical gain in (Zn,Cd)Se-Zn(S,Se) quantum wells as a function of temperature", *Journal of Crystal Growth* 184/185 623-626, 1998.
- [7] G. Bastard. "Wave mechanics applied to semiconductor heterostructure". Les Éditions de Physique", Les Ulis, France, 1988.
- [8] M. Altarelli, "Electronic structure and semiconductor-semimetal transition in InAs-GaSb superlattices", *Physical Review B*, 28(2), july 1983.
- [9] M. Asada, A. Kameyama, and Y. Suematsu, "Gain and Intervalence Band Absorption in Quantum-Well Lasers", *IEEE Journal of Quantum Electronics*, QE-20(7), july 1984.
- [10] U. Eckenberg and M. Altarelli, "Calculation of hole subbands at the GaAs-AlxGa1-xAs interface", *Physical Review B*, 30(6), september 1984.
- [11] D.A. Broido and L.J. Sham, "Effective masses of holes at GaAs-AlGaAs heterojunctions", *Physical Review B*, 31(2), january 1985.
- [12] T. Ando, "Hole Subbands at GaAs/AlGaAs Heterojunctions and Quantum Wells", *Journal of the Physical Society of Japan*, 54(4), april 1985.
- [13] K. Shahzad, D. J. Olego, and C. G. Van de Walle, Optical characterization and band offsets in ZnSe-ZnSxSe1-x strained-layer superlattices, *Phys. Rev. B* 38, 1417, 1988.
- [14] D. Rached, N. Benkhetou, B. Soudini, B. Abbar, N. Sekkal, and M. Driz, "Electronic structure calculationsof magnesium chalcogenides MgS and MgSe", *Phys. Status Solidi B* 240, 565, 2003.
- [15] H. W. Holscher, A. Nothe, and C. Uihlein, "Investigation of band masses and g values of ZnSe by two-photon magnetoabsorption", *Phys. Rev. B* 31, 2379, 1985.
- [16] K. L. Teo, Y. P. Feng, M. F. Li, T. C. Chong, and J. B. Xia, "Band structure of $Mg_{1-x}Zn_xS_ySe_{1-y}$ ", *Semicond. Sci. Tech.* 9, 349, 1994.
- [17] J. Puls, M. Rabe, A. Siarkos, and F. Henneberger, "Excitonic properties of ZnSe/(Zn,Mg)Se quantum wells: A model study of the tensile-strain situation", *Phys. Rev. B* 57, 14749, 1998.
- [18] H. J. Lozykowski and V. K. Shastri, "Excitonic and Raman properties of ZnSe/Zn1-x Cd_xSe strained-layer quantum wells", *J. Appl. Phys.* 69, 3235, 1991.
- [20] R. Passler, "Alternative Analytical Descriptions of the Temperature Dependence of the Energy Gap in Cadmium Sulfide", *phys. stat. sol. (b)*. 193, 135-144, 1996.
- [21] A. Asgari, S. Dashti, Optimization of optical gain in AlxGa1-xN/GaN/AlxGa1-xN

- strained quantum well laser, *Optik* 123 1546–1549 (2012)
- [22] A.J. Ekpunobi, A.O.E. Animalu, "Theory of valence and conduction band offsets in Si/Si_{1-y}C_yheterostructures", *Superlatt. Microstruct*, 31 247, 2002
- [23] H.U' nlu' , *Phys. Stat. Sol. (b)* 223 (2001) 195, and references cited therein.
- [24] A. Pawlis, T. Berstermann, C. Brüggemann, M. Bombeck, D. Dunker, D. R. Yakovlev, N. A. Gippius, K. Lischka, and M. Bayer, "Exciton states in shallow ZnSe/(Zn,Mg)Se quantum wells: Interaction of confined and continuum electron and hole states", *Phys. Rev. B* 83 (2011) 115302 and references cited therein
- [25] M. Lahoual, A.Gueddim, N. Bouarissa, A. Attaf, "Modeling of ZnSe/Zn_{1-x}Mg_xSe quantum well laser properties", *J. Optic* 127 3676, 2016.
- [26] Seung-Hwan Park, "Optical gain characteristics of AlGaIn/AlN quantum well structures grown on GaN substrate for ultraviolet TM light source", *Physica B* 437 67–70, 2014
- [27] Po-Yuan Dang and Yuh-Renn Wu, "Optical polarization anisotropy of tensile strained InGaIn/AlInN quantum wells for TM mode lasers", *J. Appl. Phys.* 108, 083108, 2010.
- [28] L.F. Tiemeijer; S. Walczyk; A.J.M. Verboven; G.N. van den Hoven; P.J.A. Thijs; T. van Dongen; J.J.M. Binsma; E.J. Jansen, "High-gain 1310 nm semiconductor optical amplifier modules with a built-in amplified signal monitor for optical gain control", *Photonics Technology Letters, IEEE*, Vol. 9, N° 3, pp. 309 – 311, 1997.
- [29] N. K. Dutta, "Power penalty due to timing jitter for lasers modulated without prebias", *Applied Physics Lett.*, Vol. 67, N° 22, pp. 3230-3232, 1995.
- [30] T. Higashi, S.J. Sweeney, A.F. Phillips, A.R. Adams, E.P. Reilly, T. Uchida, "Experimental analysis of temperature dependence in 1.3- μm AlGaInAs-InP strained MQW lasers", *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* V. 5, Issue: 3, May/June 1999
- [31] P. S. Zory, "Quantum Well Lasers", Jr. (Ed.) Orlando, FL: Academic, 1993.
- [32] R. I. Taylor, R. A. Abram, M. G. Burt, and C. Smith, "Auger recombination in a quantum well heterostructure", *IEE Proc. J. Optoelectron.* vol. 132, pp. 364-370, 1985.
- [33] J. Barrau, G. Bacquet, F. Hassen, N. Lauret, T. Amand and M. Brousseau, "Superlattices and Microstructures", Vol 14, N°27,1993.

CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

Après avoir rappelé les principes de base du laser, les propriétés d'émission et d'absorption dans un puits quantique dont nous nous sommes intéressés plus particulièrement à l'émission stimulée et les types de laser.

Nous avons tout d'abord calculé les propriétés physiques (structurale, électronique et optique) du matériau ternaire $Mg_xZn_{1-x}Se$ du puits quantique d'un système de couche mince formé du matériau ternaire $Mg_xZn_{1-x}Se$ avec $x=0$ comme puits et le matériau ternaire $Mg_xZn_{1-x}Se$ comme barrière. On note que le gap direct $E_{\Gamma-\Gamma}$ augmente de façon monotone lorsque la composition x augmente de 0 à 1. Les gaps indirects $E_{\Gamma-X}$ et $E_{\Gamma-L}$ augmente d'abord respectivement jusqu'à $x \approx 0.4$ et $x \approx 0.5$, puis ils diminuent. Notre matériau $Mg_xZn_{1-x}Se$ reste à gap direct sur toute la plage des compositions x (0 à 1). La masse effective des électrons au point Γ augmente d'abord pour x variant de 0 à 0.5 puis diminue au-delà de $x=0.5$. La masse effective des trous lourds au centre de la zone de Brillouin a été examinée et représentée. Cette masse effective augmente d'abord pour x entre 0 et 0.2 puis diminue pour x entre 0.2 et 1. On peut donc affirmer que toute augmentation de la composition x de l'alliage réduit considérablement l'indice de réfraction. Lorsque la concentration du magnésium varie de 0 à 1. On note que la constante diélectrique statique augmente de façon monotone avec la composition x alors que la constante diélectrique de haute fréquence diminue quasi-linéairement.

Les propriétés élastiques jouent un rôle primordial dans l'étude de l'effet des contraintes (*strain*) sur les propriétés électroniques et dans la détermination des discontinuités de bandes. C'est ainsi que les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} de notre alliage $Zn_{1-x}Mg_xSe$ ont été déterminées pour diverses concentrations de magnésium dans la gamme 0-1. L'accord entre nos résultats et ceux expérimentaux est généralement satisfaisant. Vu la non disponibilité de données pour toutes les compositions du $Zn_{1-x}Mg_xSe$, nos résultats peuvent servir de référence.

Les discontinuités des bandes de conduction (*CBO: Conduction Band Offsets*) et de valence (*VBO: Valence Band Offsets*) de l'hétérointerface $Zn_{1-x}Mg_xSe/Zn_{1-y}Mg_ySe$ pour différentes compositions de magnésium variant de 0 à 1 ont été calculées, les discontinuités de bandes de conduction sont de signe négatif lorsque la concentration de magnésium dans la couche supérieure est inférieure à la concentration de magnésium dans le substrat (i.e. $x < y$) et changent de signe dans le cas contraire pour les *VBOs* restent négatives tant que la concentration de magnésium dans la couche supérieure est inférieure à celle dans la couche formant le substrat (i.e. $x < y$) et deviennent positives dans le cas contraire.

Nous avons étudié par la suite les pseudo-niveaux de Fermi dans les bandes de conduction et de valence et la densité des transitions optique radiative afin de calculer le gain optique d'un laser à puits quantique contraint $ZnSe/Mg_xZn_{1-x}Se$ pour différentes largeur du puits $L_w=7, L_w=8, L_w=9$ et $L_w=10$ nm avec la variation de la concentration des porteurs de charge. L'on a remarqué que le gain optique maximal de ce système augmente avec la concentration des porteurs sans influence sur la longueur d'onde émise $0.43 \mu m$ qui valide l'utilisation du puits quantique $ZnSe/Mg_xZn_{1-x}Se$ en tant qu'un laser bleu.