



République Algérienne Démocratique & Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



Université Ammar Telidji – Laghouat

Faculté des Sciences

Département des Sciences de la Matière

N° d'Ordre :

**INVESTIGATION THÉORIQUE DES
RÉFLECTEURS DE BRAGG DISTRIBUÉS À
BASE DE SEMICONDUCTEURS III-V ET II-VI**

Thèse présentée par

Naima FAKROUN

Pour l'obtention du grade de

Doctorat en Sciences

en : Physique des Matériaux

Soutenu le : devant la commission d'examen :

Prof. Lafkaier Ibnkhalidoun	Président	Université de Laghouat
Prof. Ahmed Gueddin	Directeur de Thèse	Université de Djelfa
Prof. Djamel Guibadj	Co- directeur de Thèse	Université de Laghouat
Prof. Benghia Ali	Examineur	Université de Laghouat
Dr Abdelkrim Naas	Examineur	Université de Djelfa
Dr Djamel Rahou	Examineur	Université de Djelfa

REMERCIEMENTS

Je tiens tout particulièrement à remercier M. Ahmed GUEDDIM et Djamel GUIBADJ, mes directeur et co-directeur de thèse, pour toutes les informations qu'ils m'ont apportées, pour les conseils qu'il m'ont donnés, pour leur suivi, patience et l'intérêt porté à mon travail.

Je remercie également tous le personnel de l'université de Laghouat pour leur accueil chaleureux, leur gentillesse, leur patience et leur bonne humeur générale, j'ai eu un grand plaisir à travailler au sein de cette université.

DEDICACES

A tous ceux que j'aime

ABSTRACT

The feasibility of a distributed Bragg reflector (DBR) based on wide band gap II-VI semiconducting alloys is reported. The reflectivity spectra of a $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ DBR are calculated within the stratified medium theory using matrix representation. Both ternary alloys $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Se}$ and $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ are studied using the empirical pseudopotential method for composition x in the range 0-1. This study is mainly focused on the different energy band gaps, the valence band width, the electron and heavy hole effective masses, the static and high frequency dielectric constants and the refractive index. For the DBR under load, the composition x for each alloy is taken in such a manner to obtain a convenient difference between the respective refractive indices of each constituent material. Both normal and oblique incidence are considered. For both cases the effect of the number of pairs has been studied. We found out that the reflectivity maximum is enhanced as the number of pairs increases. The DBR bandwidth is found to be dependent on the refractive indices difference. The reflectivity spectrum is shifted towards smaller wavelengths, and the Bragg wavelength is diminished as the angle of incidence is augmented.

Résumé

La faisabilité d'un réflecteur de Bragg distribué (DBR) basé sur des alliages semi-conducteurs II-VI à large bande interdite est rapportée. Les spectres de réflectivité d'un DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ sont calculés dans le cadre de la théorie des milieux stratifiés en utilisant une représentation matricielle. Les deux alliages ternaires $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Se}$ et $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ sont étudiés à l'aide de la méthode empirique du pseudopotentiel pour une composition x comprise entre 0 et 1. Cette étude se concentre principalement sur les différents gaps d'énergie, la largeur de bande de valence, les masses efficaces des électrons et des trous lourds, les constantes diélectriques statique et de haute fréquence et l'indice de réfraction. Pour le DBR sous charge, la composition x pour chaque alliage est prise de manière à obtenir une différence adéquate entre les indices de réfraction respectifs de chaque matériau constitutif. L'incidence normale et oblique sont toutes deux étudiées. Pour les deux cas, l'effet du nombre de paires a été étudié. Nous avons trouvé que la réflectivité maximale augmente à mesure que le nombre de paires augmente. La bande passante du DBR dépend de la différence des indices de réfraction. Le spectre de réflectivité est décalé vers des longueurs d'onde plus petites et la longueur d'onde de Bragg diminue à mesure que l'angle d'incidence augmente.

ملخص

قمنا في هذه الأطروحة باستكشاف إمكانية تحقيق عاكس براغ موزع بالاعتماد على السبائك شبه الموصلة II-VI ذات الفواصل الطاقوية العريضة. تم حساب أطياف الانعكاسية لعاكس براغ موزع $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se/Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$ في إطار نظرية الوسائط المتراصة باستخدام التمثيل المصفوفي. كما درسنا السبائك الثلاثيتين $Zn_{1-x}Cd_xSe$ و $Zn_{1-x}Mg_xSe$ باستخدام طريقة الكمون الكاذب التجريبي لأجل تركيز x في المجال 0-1. و قد ركزنا على دراسة الفواصل الطاقوية المختلفة واتساع عصابات التكافؤ والكتل الفعالة للإلكترونات و الفجوات وثابتي العزل السكوني وعالي التردد وقرينة الانكسار.

بالنسبة لعاكس براغ المدروس، تم تحديد تركيز السبائك x بحيث يمكن الحصول على فرق مناسب بين قرينتي انكسارهما. و قد تمت الدراسة لأجل ورود شاقولي و مائل، و في الحالتين فحصنا أثر عدد أزواج الطبقات ووجدنا أن الانعكاسية الأعظمية ترتفع كلما ارتفع عدد أزواج الطبقات، وأن مجال التمير لعاكس براغ يتعلق بالفرق بين قرينتي الانكسار، كما ينزاح طيف الانعكاسية نحو الأطوال الموجية الأصغر ويتناقص طول موجة براغ كلما ارتفعت قيمة زاوية الورد.

Tables des matières

Remerciement	i
Dédicaces	ii
Abstract	iii
Résumé	iv
Table des matières	v
Liste des figures	x
Liste des tableaux	xiii
Introduction générale	1

Chapitre 1 : Notions fondamentales sur les semiconducteurs

1.1. Introduction.....	7
1.2. Définition des semiconducteurs.....	7
1.2.1. Différents types des Semiconducteurs	8
1.2.1.1 Semiconducteur élémentaire.....	8
1.2.1.2 Semiconducteurs composés.....	8
1.2.1.3. Semiconducteur intrinsèque.....	9
1.2.1.4. Semiconducteur extrinsèque.....	9
1.3. Matériaux semiconducteurs II-VI.....	9
1.3.1. Propriétés structurales	10
1.3.1.1. Structure zinc-blende.....	10
1.3.1.2. Structure würtzite.....	10
1.3.2. Propriétés électroniques.....	11
1.3.3. Propriétés optiques.....	12
1.4. Propriétés physiques des semiconducteurs ZnMgSe et ZnCdSe.....	13
1.4.1. Propriétés du ZnSe.....	13
1.4.1.1. Propriétés structurales.....	13
1.4.1.2. Propriétés optiques.....	13
1.4.1.3. Propriétés électroniques.....	13
1.4.2. Propriétés du MgSe.....	15
1.4.2.1. Propriétés structurales.....	15
1.4.2.2. Propriétés optiques.....	17
1.4.2.3. Propriétés électroniques.....	18

1.4.3. Propriétés du CdSe	18
1.4.3.1. Propriétés structurales.....	18
1.4.3.2. Propriétés optiques	18
1.4.3.3. Configuration électronique	18
1.4.4. Propriétés du $Zn_{1-x}Mg_xSe$	18
1.4.4.1. Propriétés structurales.....	18
1.4.4.2. Propriétés optiques	18
1.4.4.3. Propriétés électroniques	18
1.4.5. Propriétés de l'alliage ternaire $Zn_{1-x}Cd_xSe$	19
1.4.5.1. Propriétés structurales.....	19
1.4.5.2. Propriétés optiques	20
1.4.5.3. Propriétés électroniques	20
1.5. Applications des semiconducteurs	20
1.5.1. Sources de la lumière	20
1.5.1.1. Diodes électroluminescentes.....	20
1.5.1.2. Lasers.....	20
1.5.2. Cellules photovoltaïques.....	21
1.5.3. Biologie	21
1.6. Conclusion	22

Chapitre 2 : Principes de base du laser

2.1. Introduction.....	25
2.2. Niveaux d'énergie et transitions	25
2.2.1. Dualité onde-corpuscule	25
2.2.2. Modèle idéalisé de l'absorption et de l'émission.....	27
2.2.3. Mécanismes des transitions réelles	29
2.3. Poids de la thermodynamique.....	32
2.3.1. Équilibre thermique d'une population d'atomes.....	32
2.3.2. Le coup de génie de l'émission stimulée.....	33
2.3.3. Inversion de population	35
2.4. Modes de pompage	37
2.4.1. Pompage optique	37
2.4.2. Pompage électronique	38
2.4.3. Pompage chimique	39

2.5. Amplification optique.....	40
2.6. Raies d'émissions réelles.....	43
2.6.1. Trains d'onde et longueur de cohérence.....	43
2.6.2. Raies naturelles et élargissement.....	45
2.7. Rôle de la cavité optique.....	46
2.7.1. Oscillateur laser.....	46
2.7.2. Modes de résonance longitudinaux.....	46
2.7.3. Modes de résonance transversaux.....	50
2.8. Propriétés du faisceau laser.....	53
2.8.1. Cohérence spatiale et divergence.....	53
2.8.2. Propagation en mode gaussien.....	53
2.9. Conclusion.....	55

Chapitre 3 : Modélisation optique

3.1. Introduction.....	58
3.2. Milieu homogène.....	59
3.2.1. Ondes planes progressives.....	59
3.2.2. Réflexion à l'interface de deux milieux homogènes.....	60
3.3. Systèmes multicouches.....	62
3.3.1. Description du modèle proposé.....	63
3.3.2. Calcul des propriétés optiques des milieux stratifiés.....	64
3.4. Conclusion.....	68

Chapitre 4 : Propriétés optoélectroniques des alliages ternaires ZnMgSe et ZnCdSe

4.1. Introduction.....	71
4.2. Propriétés électroniques et optiques.....	71
4.2.1. Gaps d'énergie.....	71
4.2.2. Largeur de la bande de valence.....	73
4.2.3. Gap antisymétrique.....	74
4.2.4. Masses effectives des porteurs.....	74
4.2.5. Indice de réfraction.....	77
4.2.6. Constantes diélectriques.....	78
4.3. Propriétés électroniques et optiques.....	80
4.3.1. Gaps d'énergie.....	81

4.3.2. Gap antisymétrique	82
4.3.4. Masses effectives des porteurs.....	83
4.3.5. Indice de réfraction.....	85
4.3.6. Constante diélectrique	85
4.4. Conclusion	86

Chapitre 5 : Etude du miroir de Bragg ZnMgSe/ZnCdSe

5.1. Introduction.....	88
5.2. Méthode de calcul	88
5.3. Résultats et discussion.....	90
5.3.1. Incidence normale	90
5.3.2. Incidence oblique	92
5.4. Conclusion	100
Conclusion Général.....	103

Table des Figures

Figure 1.1	La structure cristalline zinc-blende et projection de la structure sur le plan (001).	10
Figure 1.2	La structure würtzite et projection de la maille élémentaire de la structure sur le plan [0001].	11
Figure 1.3	Bande interdite des semiconducteurs II-VI en fonction du paramètre de maille.	12
Figure 1.4	Transitions interbandes : a) Gap direct, b) Gap indirect.	15
Figure 1.5	Structure rocksalt (NaCl).	16
Figure 1.6	Première zone de Brillouin.	16
Figure 2.1	Modèle idéalisé des transitions entre deux niveaux d'énergie d'un atome : absorption ou émission d'un photon d'énergie.	29
Figure 2.2	Transition électronique et niveaux moléculaires.	32
Figure 2.3	Émission stimulée ou induite.	36
Figure 2.4	Principe de l'inversion de population.	37
Figure 2.5	Principe de l'amplification optique : après émission stimulée, le nombre de photons de même fréquence présent dans le milieu a augmenté.	43
Figure 2.6	Bilan schématisé de l'évolution d'une population en état d'inversion.	43
Figure 2.7	Train d'onde et spectre.	45
Figure 2.8	Oscillateur laser.	48
Figure 2.9	Modes de résonance longitudinaux d'une cavité optique : évolution du gain G_c .	48
Figure 2.10	Sélection d'un groupe de modes de résonance longitudinaux à l'intérieur de la raie du milieu émissif (ici, raie Doppler d'un gaz, de largeur $\Delta\nu_D$ à mi-hauteur).	51

Figure 2.11	Géométrie des modes de résonance transversaux.	53
Figure 2.12	Les configurations de cavités résonnantes (courbures fortement exagérées).	53
Figure 2.13	Propagation en mode gaussien (TEM_{00}). Exemple d'une cavité concave symétrique.	55
Figure 3.1	Schéma d'une cavité laser à émission verticale.	58
Figure 3.2	Réflexion d'une onde sur une surface (chaque flèche représente un vecteur d'onde). Les amplitudes des champs électriques associés sont indiquées près de chaque flèche.	60
Figure 3.3	Empilement de N couches utilisées comme revêtement anti réfléchissant.	63
Figure 4.1	Variation des gaps direct $E_{\Gamma-\Gamma}$ et indirects $E_{\Gamma-X}$ et $E_{\Gamma-L}$ en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.	72
Figure 4.2	Variation des gaps E_{X-X} et E_{L-L} en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.	73
Figure 4.3	Variation de la largeur de la bande de valence en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.	73
Figure 4.4	Variation du gap antisymétrique en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.	74
Figure 4.5	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.	76
Figure 4.6	Variation de la masse effective des trous lourds (en unité de m_0) en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.	77
Figure 4.7	Variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.	78
Figure 4.8	Variation des constants diélectriques statiques et de haute fréquence en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.	80
Figure 4.9	Gaps d'énergie direct $E_{\Gamma-\Gamma}$ et indirects $E_{\Gamma-X}$ et $E_{\Gamma-L}$ du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.	81
Figure 4.10	Gaps E_{X-X} et E_{L-L} du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.	81

Figure 4.11	Gap antisymétrique du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.	82
Figure 4.12	Largeur de la bande de valence du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.	83
Figure 4.13	Masse effective des électrons du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Te.	84
Figure 4.14	Masse effective des trous lourds du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.	84
Figure 4.15	Indice de réfraction du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Te.	85
Figure 4.16	Constantes diélectriques statique ϵ_0 et de haute fréquence ϵ_∞ du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.	86
Figure 5.1	Spectre de la réflectivité pour le DBR $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se/Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$ avec 20, 30, 40, 60 paires sous incidence normale.	91
Figure 5.2	Indice de réfractons des alliages $Zn_{1-x}Mg_xSe$ et $Zn_{1-x}Cd_xSe$ en fonction de la composition x .	91
Figure 5.3	Spectre de la réflectivité pour le DBR $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se/Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 20^\circ$.	93
Figure 5.4	Spectre de la réflectivité pour le DBR $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se/Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$ avec 40 paires sous incidence oblique $\theta = 20^\circ, 40^\circ, 60^\circ, 80^\circ$.	94
Figure 5.5	Longueur d'onde de Bragg λ_B en fonction de l'angle d'incidence pour $N=40$ paires.	95
Figure 5.6	Spectre de la réflectivité pour le DBR $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se/Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 30^\circ$.	96
Figure 5.7	Spectre de la réflectivité pour le DBR $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se/Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 40^\circ$.	96
Figure 5.8	Spectre de la réflectivité pour le DBR $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se/Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 50^\circ$.	97
Figure 5.9	Spectre de la réflectivité pour le DBR $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se/Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 60^\circ$.	97

Figure 5.10	Spectre de la réflectivité pour le DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 70^\circ$.	98
Figure 5.11	Spectre de la réflectivité pour le DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 80^\circ$.	98
Figure 5.12	Spectre de la réflectivité pour le DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ avec 30 paires sous incidence oblique $\theta = 20^\circ, 40^\circ, 60^\circ, 80^\circ$.	99

Liste des Tableaux

Table 1.1	Différents types des semiconducteurs.	8
Table 1.2	Partie du tableau périodique montrant les éléments de notre étude (en rouge: éléments II et VI) [9].	9
Table 1.3	Paramètres physiques des différents composés semiconducteurs Cd-VI et Zn-VI , dans la phase cubique et würtzite .	11
Table 2.1	Caractéristiques du fonctionnement multi-mode longitudinal.	50

INTRODUCTION

Les miroirs de Bragg ou réflecteurs de Bragg distribués (DBR : Distributed Bragg Reflectors) jouent un rôle principal dans la conception et la fabrication des lasers de haute performance [1,3]. En effet, les lasers à cavité verticale et à émission par la surface (VCELS : vertical cavity surface-emitting lasers) constitue un domaine de recherche dont l'intérêt et l'activité vont en grandissant [4]. Ceci revient à ce qu'ils joignent un coût modéré, une haute efficacité et une largeur de bande convenable [5-13]. Ces composants sont en fait des éléments clés de plusieurs systèmes de communications optiques [1]. Cependant, un DBR à haute réflectivité est nécessaire pour des lasers à puits quantiques présentant de faibles densités de courant de seuil [8].

L'efficacité d'un DBR dépend principalement de sa réflectivité et de sa largeur de bande qui dépendent à leur tour des indices de réfraction des matériaux dont est fabriqué le DBR [7]. Bon nombre de DBR avec des réflectivités maximales dépassant les 95% ont été rapportés dans la littérature [8]. En outre, si les matériaux constituant le DBR possèdent des paramètres de maille commensurables, la croissance épitaxiale par jets moléculaires (MBE: molecular beam epitaxy) du DBR avec la région active du laser devient possible [9]. Plusieurs DBRs ont été réalisés par MBE en utilisant des semiconducteurs III-V comme AlAs/GaAs, InP/InGaAsP, and GaAsSb/AlAsSb, AlAsP/GaAsSb, InGaAsP/InP [10-16]. Ces matériaux III-V sont pratiquement en accord de paramètre de maille et possèdent une différence élevée des indices de réfraction [14]. Pour les semiconducteurs II-VI, la situation semble un peu différente. Il est difficile de trouver des combinaisons de matériaux semiconducteurs II-VI qui seraient prometteurs pour l'obtention de DBRs performants avec un nombre acceptable de périodes (paires de couches). Ceci est dû au fait

qu'il n'est pas facile d'obtenir une différence adéquate des indices de réfraction des matériaux formant le DBR. Cependant, certains DBRs à base de semiconducteurs II-VI ont été fabriqués tels que les DBRs ZnSSe/ZnMnSSe and ZnSSe/ZnMgSSe présentant des réflectivités au voisinage de 80%. Cependant le nombre de périodes dans ces DBRs est élevé vu que la différence des indices de réfraction des alliages constituant ces DBRs est faible.

Les alliages ternaires semiconducteurs ZnMgSe sont très attractifs pour les applications optoélectroniques [18-19] notamment la région bleue du spectre électromagnétique [17]. Ces matériaux ont été introduits par Okuyama et al. En 1991 [18]. Ils ont fait l'objet d'études intensives tant sur le plan théorique que sur le plan expérimental [16]. En outre, ces matériaux ont un fort impact technologique qui provient de leurs applications variées et étendues [20]. Ils sont potentiellement recommandés comme revêtements de protection à cause de leur haute dureté, haute conductivité thermique, point de fusion élevé et module de compression important [21,22].

Le système ZnCdSe couvre des longueurs d'onde qui vont du visible à l'ultraviolet. Il peut être utilisé pour produire des dispositifs optoélectroniques émettant dans le bleu et le proche ultraviolet pour le stockage des informations ainsi que dans le visible pour la réalisation des applications d'affichage [23]. D'autres applications sont aussi possibles. Elles incluent entre autres les cellules solaires photovoltaïques à haut rendement [23,24].

Les deux matériaux ZnMgSe et ZnCdSe sont aussi des candidats très attractifs pour la fabrication des miroirs de Bragg [25-27] à cause de leurs propriétés optoélectroniques très convenables.

Dans le présent travail de thèse, nous intéressons à montrer la possibilité de fabriquer des DBR constitués à partir de périodes $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se/Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$. Le choix des concentrations de magnésium et de cadmium est conditionné par les indices de réfraction des deux alliages mis en œuvre pour la réalisation du DBR étudié. Nous nous sommes intéressés à déterminer le spectre de réflectivité de notre DBR sous incidence normale et oblique. Nous avons examiné l'effet du nombre de périodes sur la réflectivité. Le nombre optimal de périodes résultant à la meilleure réflectivité a été ainsi déterminé. Nos simulations ont été conduites dans le cadre de la méthode des milieux stratifiés dans sa représentation matricielle [5,28,29]. Nous avons étudié aussi l'effet de l'angle d'incidence dans le cas de l'incidence oblique sur la réflectivité, la longueur d'onde de Bragg λ_B et la largeur de la bande du DBR.

Les propriétés optoélectroniques des deux alliages ZnMgSe et ZnCdSe qui sont utilisés pour la fabrication du DBR sont explorées moyennant la méthode empirique du pseudopotentiel [30,31]. Les propriétés investies sont : les gaps d'énergie direct et indirects, la largeur de la bande de valence, le gap antisymétrique et les masses effectives des électrons et des trous. Ont été également examinés l'indice de refraction, la constante diélectrique statique ainsi que la constante diélectrique de haute fréquence.

Les calculs de simulation de notre DBR sont conduits dans le cadre de la théorie des milieux stratifiés connue pour sa simple formulation mathématique et sa grande flexibilité [27,28].

La présente thèse est composée de cinq chapitres :

Dans le premier chapitre, on introduit les notions fondamentales sur semiconducteurs et plus spécialement les semiconducteurs II-VI, leurs structures cristallines ainsi que leurs différentes propriétés physiques. Un intérêt particulier a été porté aux alliages ternaires $Zn_{1-x}Mg_xSe$ et $Zn_{1-x}Cd_xSe$. Le chapitre 2 est consacré à la présentation des principes de base du laser. Nous nous sommes intéressés aux niveaux d'énergie et transitions, à l'équilibre d'une population atomique et l'inversion de population, aux modes de pompages optique, électronique et chimique, à l'amplification optique, au rôle de la cavité optique et aux propriétés du faisceau laser. La modélisation optique a été l'objet du chapitre 3 où nous exposons la méthode des milieux stratifiés sous sa forme matricielle. Ceci nous permettrait de déterminer le spectre de réflectivité de notre DBR sous différentes conditions d'incidence et de nombre de périodes. Les propriétés optoélectroniques des deux alliages formant notre DBR $Zn_{1-x}Mg_xSe$ et $Zn_{1-x}Cd_xSe$ sont exposées dans le chapitre 4. Nous présentons en particulier les différents gaps d'énergie, les masses effectives des porteurs ainsi que l'indice de réfraction. C'est ce dernier qui conditionne entre autres le comportement et la forme du spectre de la réflectivité de notre miroir de Bragg. Enfin, dans le chapitre 5, nous présentons les propriétés du DBR sous investigation sous incidence normale où nous examinons l'effet du nombre de périodes constituant le DBR, puis sous incidence oblique où nous explorons l'effet de l'angle d'incidence ainsi que celui du nombre de périodes sur la réflectivité et la longueur d'onde de Bragg λ_B du DBR sous investigation.

Références

- [1] O. Maksimov, S.P. Guo, L. Zeng, M.C. Tamargo, F.C. Peiris, J.K. Furdyna, Distributed Bragg reflectors based on (Zn, Cd, Mg)Se for use in the visible spectral, *J. Appl. Phys.* 89(4), (2001) 2202-2207.
- [2] J.L. Jewell, J.P. Harbison, A. Scherer, Y.H. Lee, T. Florez, Vertical-cavity surface-emitting lasers: design, growth, fabrication, characterization, *IEEE J. Quantum Electron.* 27(6), (1991) 1332-1346.
- [3] Abe, Y. Igor, et al. "Inverse Design of Distributed Bragg Reflector Targeting a Sharp Reflectivity Spectrum." *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications* (2023): 101183.
- [4] Zhang, Yuchao, Shang, Kun, GU, Jianfei, et al. A Cost Effective FBG Sensor System Based on Narrow Band DBR Laser and FPGA Demodulation Technology. 23rd International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON). IEEE, 2023. p. 1-4.
- [5] A. Gueddim, N. Bouarissa, Alloy composition dependence of 1.55 μm $\text{GaP}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaP}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}$, *Phys. Scr.* 81, (2010) 035703.
- [6] H. Shimomura, T. Anan, S. Sugou, Growth of AlPSb and GaPSb on InP by gas-source molecular beam epitaxy, *J. Cryst. Growth* 162(3-4), (1996) 121-125.
- [7] T. Anan, H. Shimomura, S. Sugou, Improved reflectivity of AlPSb/GaPSb Bragg reflector for 1.55 μm wavelength, *Electron. Lett.* 30, (1994) 2138-2139.
- [8] A. Convertino, A. Valentini, T. Ligonza, R. Cingolani, Organicinorganic dielectric multilayer systems as high reflectivity distributed Bragg reflectors, *Appl. Phys. Lett.* 71(6), (1997) 732-734.
- [9] MCCARTHY, Robert F., ROWELL, David, WIBOWO, Andree, *et al.* Inverted metamorphic photovoltaics for space applications utilizing a distributed Bragg reflector compatible with epitaxial lift-off. *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 62(2023) 1042.
- [10] V. Bardinal, R. Legros, C. Fontaine, Precision Bragg reflectors obtained by

- molecular beam epitaxy under in situ tunable dynamic reflectometry control, *Appl. Phys. Lett.* 67(23), (1995) 3390-3392.
- [11] K. Tai, S. McCall, S.N.G. Chu, W.T. Tsang, Chemical beam epitaxially grown InP/InGaAsP interference mirror for use near 1.55 μm wavelength, *Appl. Phys. Lett.* 51(11), (1989) 826-827.
- [12] O. Blum, M.J. Hafch, J.F. Klem, K.L. Lear, S.N.G. Chu, Electrical and optical characteristics of AlAsSb/GaAsSb distributed Bragg reflectors for surface emitting lasers, *Appl. Phys. Lett.* 67(22), (1995) 3233-3235.
- [13] K. Tai, R.J. Fisher, A.Y. Chao, K.K. Huang, High-reflectivity AlAs_{0.52}Sb_{0.48}/GaInAs(P) distributed Bragg mirror on InP substrate for 1.3-1.55 μm wavelengths, *Electron. Lett.* 25(17), (1989) 1159-1169.
- [14] A. Gueddim, 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(17), (2007) 7336-7341.
- [15] H. Okuyama, K. Nakano, T. Miyajima, K. Akimoto, Epitaxial growth of ZnMgSSe on GaAs substrate by molecular beam epitaxy, *J. Appl. Phys.* 30, (1991) L1620-L1623.
- [16] B. Jobst, D. Hommel, U. Lunz, T. Gerhard, G. Landwehr, E₀ band-gap energy and lattice constant of ternary Zn_{1-x}Mg_xSe as functions of composition, *Appl. Phys. Lett.* 69(1), (1996) 97-99.
- [17] S. A. Park, H. J. Song, W. T. Kim, H.G. Kim, M. S. Jin, C. D. Kim, C. S. Yoon, Photoluminescence properties of Mg_xZn_{1-x}Se single crystals, *J. Appl. Phys.* 83(6), (1998) 3429-3431.
- [18] D. Wolverson, D.M. Bird, C. Bradford, K.A. Prior, B.C. Cavenett, Lattice dynamics and elastic properties of zinc-blende MgS, *Phys. Rev. B* 64(11), (2001) 113203.
- [19] M.A. Hasse, J. Qiu, J.M. Depuydt, H. Cheng, Blue-green laser diodes, *Appl. Phys. Lett.* 59(11), (1991) 1272-1274.
- [20] H. Algarni, A. Gueddim, N. Bouarissa, *et al.* Crystal structure and electronic properties of wurtzite Mg_xZn_{1-x}O: Ab initio study. *Results in Physics*, vol.15, (2019)102694.
- [21] S. Albin, J.D. Satira, D.L. Livingston, T.A. Shull, Stimulated electronic transition concept for an erasable optical memory, *Jpn. J. Appl. Phys. Part*

- 1(31), (1992) 715-720.
- [22] S.J. Pearton, Processing of Wide Band Gap Semiconductors, ed. William Andrew, Norwich, 2000.
- [23] A.V. Nurmikko, R.L. Gunshor, Optical physics and laser devices in II-VI quantum confined heterostructures, Phys. B 185(1-4), (1993) 16-26.
- [24] S. Klemmt, H. Dartsch, M. Anastasescu, M. Gartner, C. Kruse, High-reflectivity II-VI-based distributed Bragg reflectors for the blue-violet spectral range, Appl. Phys. Lett. 99(15), (2011) 151101.
- [25] F.C. Peiris, U. Bindley, J.K. Furdyna, Determination of the indices of refraction of molecular-beam-epitaxy-grown ZnSe/ZnCdSe multiple-quantum-well structures, J. Vac. Sci. Technol., B 19(4), (2001)1497-1500.
- [26] S.P. Guo, O. Maksimov, M.C. Tamargo, F.C. Peiris, J.K. Furdyna, Distributed Bragg reflectors for visible range applications based on (Zn, Cd, Mg)Se lattice matched to InP, Appl. Phys. Lett. 77(25), (2000)4107-4109.
- [27] P. Nubile, Analytical design of antireflection coatings for silicon photovoltaic devices, Thin Solid Films 342(1-2), (1999)257-261.
- [28] M. Born, E. Wolf, Principles of Optics, ed. Pergamon, Oxford, 1970.
- [29] H. Okuyama, K. Nakano, T. Miyajima, K. Akimoto, Epitaxial growth of ZnMgSSe on GaAs substrate by molecular beam epitaxy, Jpn. J. Appl. Phys. 30, (1991) L1620-L1623.
- [30] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky, Electronic Structure and Optical Properties of semiconductors, Springer, Berlin, 1988.
- [31] D. Rahou, H. Bekhouche, E.A. Ghezal, A. Gueddim, N. Bouarissa, H. Ziani Electronic and optical properties of InSb quantum dots from pseudopotential calculation Chinese Journal of Physics 66 (2020) 206-213.

Chapitre 1

NOTIONS FONDAMENTALES SUR LES SEMICONDUCTEURS

1.1. Introduction

Les alliages semiconducteurs II-VI sont utilisés dans les dispositifs optoélectroniques couvrant la région spectrale allant du bleu au proche ultraviolet du spectre électromagnétique [1]. En outre, les matériaux semiconducteurs II-VI à large gaps contenant Mg sont intéressants pour les dispositifs optoélectroniques dans l'ensemble du domaine visible [2]. Les chalcogénures de magnésium sont des semiconducteurs à large gap, ils ont un fort impact technologique dû à leurs applications variées en optoélectronique [3] et dans les dispositifs luminescents [4]. De même, ces semiconducteurs sont potentiellement un très bon choix comme revêtements protecteurs en raison de leur dureté, de leur haute conductivité thermique, de leur haut point de fusion et leur module de compressibilité élevé [5,6]. Les composés semiconducteurs à base de zinc ont suscité un intérêt considérable tant théoriquement qu'expérimentalement au vu de leur vaste champ d'applications. Ils sont utilisés comme matériaux de base dans les diodes lasers, les détecteurs infrarouges, et les dispositifs photovoltaïques [7,8]. Dans ce travail, nous nous intéressons aux propriétés électroniques et optiques des alliages ternaires II-VI $Zn_{1-x}Mg_xSe$ et $Zn_{1-x}Cd_xSe$. Comme préalable à cela, nous avons choisi dans une première étape de rapporter quelques notions fondamentales se rapportant aux semiconducteurs en général et plus spécialement aux semiconducteurs II-VI.

1.2. Définition des semiconducteurs

Un semiconducteur est une substance dont les caractéristiques sont intermédiaires entre celles d'un conducteur qui conduit l'électricité comme le métal et un isolant à travers lequel l'électricité circule à peine. La facilité avec laquelle l'électricité circule est liée à

l'ampleur de la résistance électrique de la substance. Si la résistance électrique est élevée, le courant circule à peine, et si la résistance électrique est faible, le courant électrique circule facilement.

1.2.1. Différents types des Semiconducteurs

1.2.1.1 Semiconducteur élémentaire

Le silicium (Si) et le germanium (Ge) sont des matériaux semiconducteurs élémentaires. Quand ils sont des cristaux purs (semiconducteurs intrinsèques), ces substances sont proches des isolants, mais le dopage à une petite quantité de dopant fait chuter fortement leur résistance électrique et les transformer en conducteurs.

1.2.1.2 Semiconducteurs composés

Les semiconducteurs composés sont constitués de plusieurs éléments par opposition à ceux constitués d'un seul élément tels que le silicium. On peut combiner les éléments du groupe III et ceux du groupe V du tableau périodique, ou encore les éléments du groupe II et du groupe VI, pour obtenir des composés dits III-V et II-VI par exemple.

Tableau 1.1. Différents types des semiconducteurs.

Type	Matériaux
Semiconducteurs élémentaires	Groupe IV: Si, Ge
Semiconducteurs composés	Groupe IV: - Composés binaires : SiC, SiGe.
	Groupe II-VI: - Composés binaires: ZnSe, CdTe, ZnS. - Composés ternaires : CdZnTe, HgCdTe, HgZnTe.
	Groupe III-V: - Composés binaires: GaAs, GaN, InP - Composés ternaires: $Al_xGa_{1-x}As$, $In_xGa_{1-x}As$, $Al_xGa_{1-x}N$ - Composés quaternaires: AlGaInP, InAlGaP, InGaAlP - Composés quinaires: GaInNAsSb, GaInAsSbP

	Groupe IV-IV: <ul style="list-style-type: none"> - Composés binaires: PbSe, GaSe, PbTe - Composés ternaires: PbSnTe, Tl₂SnTe₅
--	--

1.2.1.3. Semiconducteur intrinsèque

Un semiconducteur est dit intrinsèque s'il est pur, sans impuretés ni défauts et loin de toute perturbation thermique et/ou radiative. Dans un tel matériau, le nombre d'électrons est égal au nombre de trous. Le taux d'impuretés ne pouvant être nul ; il est très faible (moins d'un atome pour 10^{13} atomes de l'élément semiconducteur).

1.2.1.4. Semiconducteur extrinsèque

Un semiconducteur est dit extrinsèque s'il comporte un taux d'impuretés très grand par rapport à celui du semiconducteur intrinsèque (un atome pour 10^5 atomes de l'élément semiconducteur). Selon la nature des impuretés il existe 2 types des semiconducteurs : type n et type p [9].

1.3. Matériaux semiconducteurs II-VI

Le semiconducteur dans cette recherche est de type II-VI, c'est-à-dire qu'il est constitué d'un élément de la colonne II et d'un élément de la colonne VI de la classification périodique de Mendeleïev. Ils sont des matériaux utilisés pour la fabrication des dispositifs électroniques et optoélectroniques. Dans le Tableau 1.1 est rapportée une partie du tableau périodique.

Tableau 1.2. Partie du tableau périodique montrant les éléments de notre étude (en rouge: éléments II et VI) [9].

I-A-B	II-A-B	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB
Li ³	Be ⁴	B ⁵	C ⁶	N ⁷	O ⁸	F ⁹
Na ¹¹	Mg ¹²	Al ¹³	Si ¹⁴	P ¹⁵	S ¹⁶	Cl ¹⁷
Cu ²⁹	Ca ²⁰	Ga ³¹	Ge ³²	As ³³	Se ³⁴	Br ³⁵
Ag ⁴⁷	Zn ³⁰	In ⁴⁹	Sn ⁵⁰	Sb ⁵¹	Te ⁵²	I ⁵³
Au ⁷⁹	Cd ⁴⁸	Tl ⁸¹	Pb ⁸²	Bi ⁸³	Po ⁸⁴	At ⁸⁵
	Hg ⁸⁰					

1.3.1. Propriétés structurales

Les composés II-VI cristallisent, soit dans la phase cubique zinc-blende où encore dans la phase hexagonale würtzite.

1.3.1.1. Structure zinc-blende

La structure cubique se compose des deux réseaux cubiques à faces centrées, formés respectivement des atomes de la colonne II et VI décalés l'un de l'autre du quart d'une diagonale égale $\frac{a\sqrt{3}}{4}$. Le taux de remplissage de cette structure égale 0.34. Cette structure est décrite par un réseau cubique à face centrée et d'un empilement de type ABCABC dans la direction [111] avec la base formée de deux atomes en (000) et $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$. La maille de Bravais contient 4 atomes du groupe II (Zn, Cd, Hg) de coordonnée $(0, 0, 0)$; $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$; $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$; $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ et quatre atomes du groupe VI (O, S, Se, Te) dans les positions $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$; $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$; $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$; $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$. Chaque atome se trouve ainsi au centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un atome de l'autre espèce et chaque atome de (Zn, Cd) est entouré de quatre atomes de (Te, Se, S).

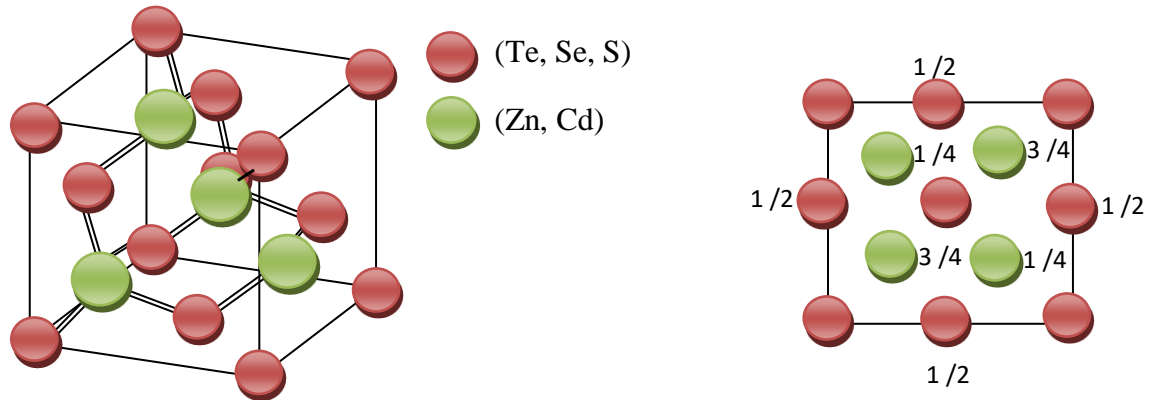


Figure 1.1. La structure cristalline zinc-blende et projection de la structure sur le plan (001).

1.3.1.2. Structure würtzite

La structure hexagonale est constituée de deux réseaux hexagonaux décalés l'un par rapport à l'autre de $\frac{3}{8}$ du paramètre c . La maille élémentaire est constituée de deux atomes du groupe II occupant les sites $(0, 0, \frac{5}{8})$ et $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{8})$ et deux atomes du groupe VI occupant les sites $(0, 0, 0)$ et $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$. Par conséquent un atome du type II est entouré de quatre atomes du type VI disposés aux sommets d'un tétraèdre régulier. La structure würtzite possède un empilement de type ABABAB dans la direction [0001].

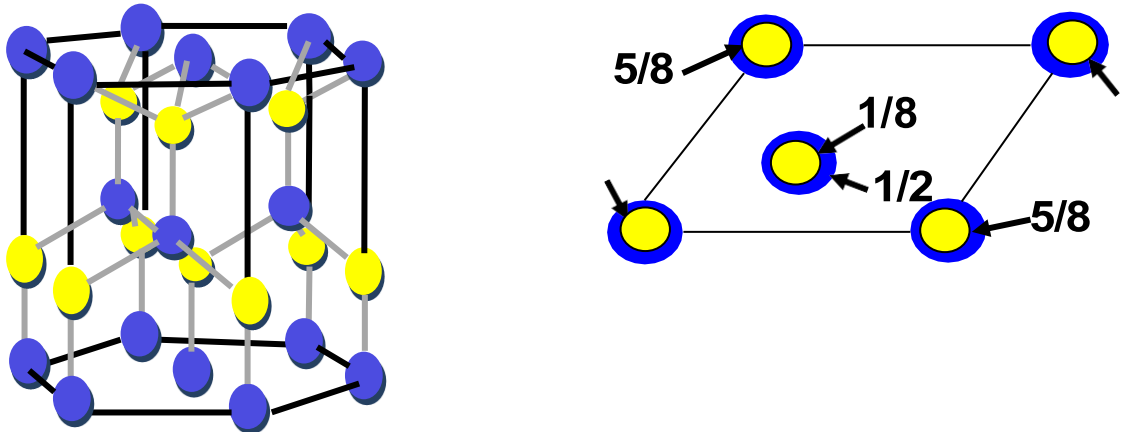


Figure 1.2. La structure würtzite et projection de la maille élémentaire de la structure sur le plan [0001] [5].

Les différents paramètres des binaire sont regroupées dans le tableau 1.3.

Tableau 1.3. Paramètres physiques des différents composés semiconducteurs Cd-VI et Zn-VI , dans la phase cubique et würtzite .

Composé	Zinc-blende		Würtzite	
	a (Å)	E _g (eV)	a (Å)	c (Å)
ZnS	5.410 ^[4]	3.741 ^[4]	3.823 ^[3]	6.253 ^[3]
ZnSe	5.573 ^[3]	2.721 ^[6]	3.886 ^[3]	6.625 ^[3]
ZnTe	6.101 ^[3]	2.283 ^[7]	4.314 ^[3]	7.044 ^[3]
CdS	5.832 ^[3]	2.42 ^[9]	4.583 ^[3]	7.484 ^[3]
CdSe	6.050 ^[3]	1.70 ^[9]	4.301 ^[3]	6.007 ^[3]
CdTe	6.479 ^[8]	1.525 ^[9]	4.583 ^[3]	7.484 ^[3]

Dans notre étude nous allons nous limiter à la structure zinc-blende.

1.3.2. Propriétés électroniques

Les semiconducteurs II-VI à base de cadmium et de zinc sont caractérisés par une grande largeur de bande interdite, correspondant à des longueurs d'onde situées dans le domaine du visible jusqu'à l'ultraviolet. Ces matériaux semiconducteurs possèdent un gap

direct varie de 3.741 eV (ZnS [3]) à 1.525 eV (CdTe [7]). Le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouve au centre de la zone de Brillouin (voir Figure 1.3).

1.3.3. Propriétés optiques

Les propriétés optiques des semiconducteurs dépendent de leur structure électronique car elles mettent en jeu des transitions entre différents états électroniques. Cette transition peut se faire sans changement de vecteur d'onde dans les semiconducteurs à gap direct, ce qui permet l'absorption et l'émission de lumière de façon beaucoup plus efficace que dans les matériaux à gap indirect. Selon ces propriétés, le choix des matériaux se fait pour les différentes applications désirées.

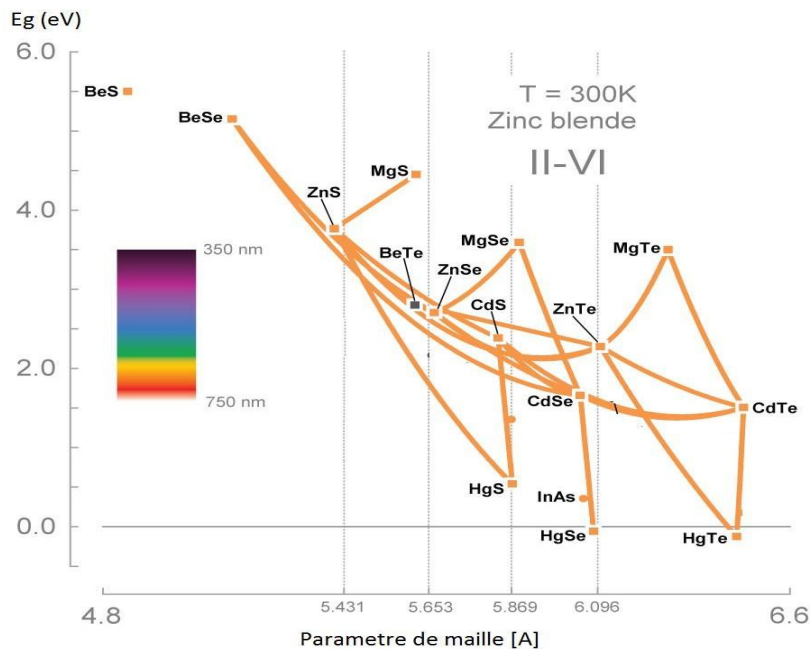


Figure 1.3. Bande interdite des semiconducteurs II-VI en fonction du paramètre de maille [10].

La Figure 1.3 montre que la principale utilisation des matériaux II-VI à base de zinc et cadmium, est la réalisation des dispositifs fonctionnant dans le domaine du visible jusqu'à l'ultraviolet, tels que les diodes électroluminescentes, les diodes lasers ou les détecteurs [9]. Nous remarquons aussi que l'incorporation de mercure permet de diminuer considérablement le gap pour réaliser des dispositifs qui fonctionnent dans l'infrarouge moyen jusqu'à l'infrarouge lointain. Ces matériaux sont très utilisés pour des applications militaires.

1.4. Propriétés physiques des semiconducteurs ZnMgSe et ZnCdSe

1.4.1. Propriétés du ZnSe

1.4.1.1. Propriétés structurales

Le composé binaire semiconducteur ZnSe cristallise dans un arrangement zinc-blende (Figure 1.1) ou avec une structure wurtzite (Figure 1.2). La structure wurtzite est hexagonale. La structure zinc-blende est une structure d'origine cubique appartenant au groupe spatial $F\bar{4}3m$, présentant un environnement tétraédrique et une même hybridation sp^3 , avec un taux de compacité de l'ordre de 0.34. La maille élémentaire de cette structure est presque identique à celle du diamant à la seule différence, que chaque atome d'un élément donné est entouré, dans un environnement tétraédrique, par quatre atomes de l'espèce opposée [11]. Le paramètre de maille du ZnSe est $a = 5.668$ nm, sa masse molaire est de 144.35 g/mol et sa densité volumique est égale à 5.27 g/cm³.

1.4.1.2. Propriétés optiques

Les propriétés optiques des semiconducteurs dépendent de leur structure électronique car elles mettent en jeu des transitions entre différents états électroniques. Cette transition peut se faire sans changement de vecteur d'onde \vec{k} dans les semiconducteurs à gap direct, ce qui permet l'absorption et l'émission de lumière de manière beaucoup plus efficace que dans les matériaux à gap indirect. Cette différence oriente le choix des matériaux pour les différentes applications désirées.

Le ZnSe est l'un des candidats les plus prometteurs dans le domaine de l'optoélectronique. De ce fait, il a mobilisé des efforts considérables de la part de la communauté scientifique. Outre son gap direct, il possède un coefficient d'absorption optique élevé. Fort de son grand gap (2.7 eV à une température de 300 K, soit une longueur d'onde de 460 nm) et de son indice de réfraction 2.67 (550nm) et 2.40 (10.6 μ m), ZnSe a été utilisé dans la réalisation de dispositifs optoélectroniques opérants dans le domaine du bleu [10]. Aussi, peut-il être envisagé pour des applications prometteuses dans l'affichage sur les écrans plats, les sondes et les lasers. Cette technologie a été vite compromise; la durée de vie de ces dispositifs n'était pas suffisante pour pouvoir les mettre sur un marché .

1.4.1.3. Propriétés électroniques

L'atome de zinc étant de type II, il possède deux électrons de valence sur une orbitale s, et l'atome de sélénium possède six électrons de valence sur des orbitales s et p.

. Structures de bande électronique

La structure des bandes est la relation entre l'énergie de la particule et son vecteur d'onde \vec{k} dans les directions de hautes symétries dans la première zone de Brillouin. Elle se décompose en bandes de valence, de conduction et interdite [12]. Le gap est la largeur de la bande interdite. C'est l'énergie nécessaire au système pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction. Par définition, le gap est la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence. Dans les semiconducteurs à gap direct, le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles. Les semiconducteurs à gap indirect, leur bande de conduction correspond à des électrons de grande masse effective, donc ayant une faible mobilité [13].

. Gap direct et gap indirect

Pour un cristal semiconducteur, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont caractérisés par une énergie E et un vecteur d'onde \vec{k} dans l'espace réciproque. Si ce maximum et ce minimum correspondent à la même valeur de \vec{k} : on dit que le semiconducteur est à gap direct. Dans le cas contraire, on dit que le semiconducteur est à gap indirect. Cette distinction entre les semiconducteurs à gap direct ou indirect est importante pour les différentes applications des matériaux.

La largeur du gap varie en fonction de la température. En général, les semiconducteurs ont un gap d'énergie entre 0 et 4 eV et une résistivité variant entre $10^{-3}\Omega cm$ et $10^9\Omega cm$. L'effet de la température sur le gap est décrit par l'équation de Varshni [14]:

$$Eg(T) = Eg(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (1.1)$$

Où $Eg(0)$ est l'énergie du gap à $T=0$ K, α et β sont des paramètres servant à décrire la variation de la bande interdite en fonction de la température.

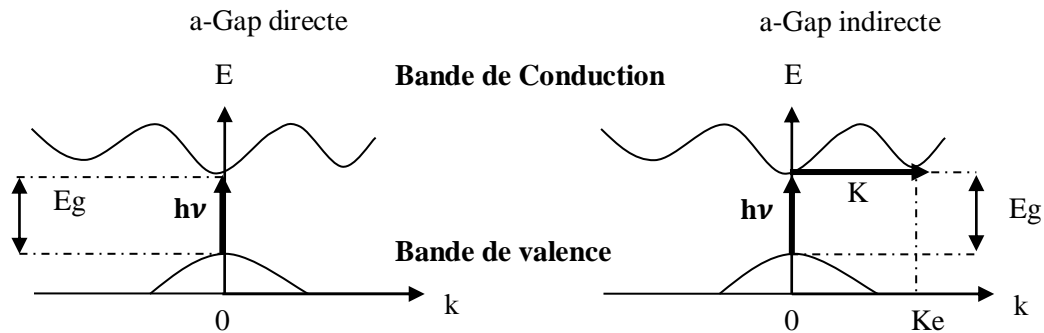


Figure 1.4. Transitions interbandes : a) Gap direct, b) Gap indirect [15].

1.4.2. Propriétés du MgSe

1.4.2.1. Propriétés structurales

Les chalcogénures de magnésium (MgSe entre autres) sont des matériaux à large bande interdite. Ils sont préconisés dans diverses applications en optoélectronique [16] et pour les dispositifs luminescents [17]. Ces composés binaires peuvent cristalliser dans la structure cubique zinc-blende : Les atomes de zinc et les atomes de magnésiums, forment deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la grande diagonale principale du cube. Ils existent également dans la structure rocksalt (NaCl). Cette dernière structure a une base diatomique : l'atome de Cl et l'atome de Na et consiste en un treillis de CFC comme le montre la Figure 1.4.

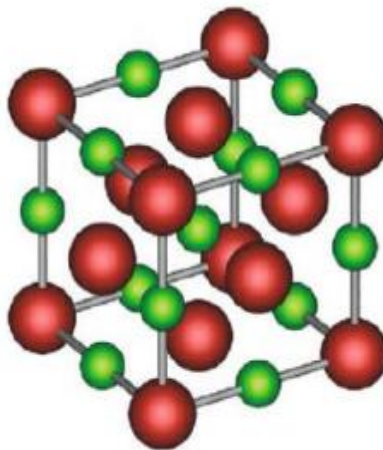


Figure 1.5. Structure rocksalt (NaCl) [18].

. Première zone de Brillouin

La première zone de Brillouin pour la structure zinc-blende à la forme d'un octaèdre tronqué comme le montre la Figure 1.5.

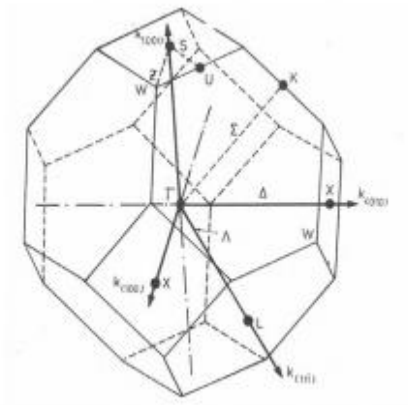


Figure 1.6. Première zone de Brillouin [18].

a. Les points de haute symétrie

Γ : ce point est le centre de la première zone de Brillouin avec les coordonnées $k_{\Gamma}(0,0,0)$.

X : ce point est le centre d'une face carrée de l'octaèdre qui appartient à l'un des axes k_x , k_y ou k_z avec l'une des faces carrées. Nous avons donc :

$$k_x = \frac{2\pi}{a} (\pm 1, 0, 0)$$

$$k_y = \frac{2\pi}{a} (0, \pm 1, 0)$$

$$k_z = \frac{2\pi}{a} (0, 0, \pm 1)$$

L : ce point est le centre d'une face hexagonale de l'octaèdre dont les coordonnées sont :

$$k_L = \frac{2\pi}{a} (1, 1, 1).$$

W : ce point se trouve sur l'un des sommets des faces carrées. Les coordonnées sont :

$$k_W = \frac{2\pi}{a} \left(0, \frac{1}{2}, 1 \right).$$

Z : ce point est situé sur la ligne qui joint le centre d'une face carrée à l'un des coins de l'octaèdre avec les coordonnées :

$$k_Z = \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{1}{2}, 1 \right).$$

b. Les lignes de haute symétrie

Δ : cette ligne représente la direction $\langle 100 \rangle$. Elle relie le centre Γ au point X.

Σ : c'est un point appartenant au plan de symétrie $k_x = k_y$ ou $k_y = k_z$ ou $k_x = k_z$.

Λ : cette ligne est la direction $\langle 100 \rangle$. Elle relie le centre de la zone (Γ) au centre d'une face hexagonale qui est le point L de l'octaèdre [11].

1.4.2.2. Propriétés optiques

Les propriétés optiques sont d'une importance fondamentale, car elles concernent non seulement les parties occupées et inoccupées de la structure électronique mais aussi un large spectre de propriétés. L'énergie du gap (calculée) du MgSe est de 2.825 eV (zinc-blende) et 1.952 eV (NaCl). Les valeurs expérimentales sont respectivement de 3.6 [19] et 2.47 [20]. Les propriétés optiques des semiconducteurs se manifestent sous forme d'interaction du rayonnement avec les électrons qui sont interprétés selon trois processus : (absorption fondamentale, émission spontanée et émission stimulée).

Cette propriété importante (absorption et diffusion) d'un matériau est décrite par les parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique, l'indice de réfraction, le coefficient d'extinction et la réflectivité. Par exemple les caractéristiques optiques des matériaux sont : Le coefficient de réflexion R [21]:

$$R = \frac{(n-1)^2 + \kappa^2}{(n+1)^2 + \kappa^2} \quad (1.2)$$

Où κ est le coefficient d'extinction et le coefficient de transmission T [21]:

$$T = \frac{4n}{(n+1)^2 + \kappa^2} \quad (1.3)$$

Où n est l'indice de réfraction. En générale, l'indice de réfraction est lié à la constante diélectrique par la relation [18] :

$$n \approx \sqrt{\epsilon_r} \quad (1.4)$$

1.4.2.3. Propriétés électroniques

La configuration électronique du Mg est $(1s^2 2s^2)$. Celle du Se est $(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6)$. Pour la structure de bandes du MgSe dans les deux phases (zinc-blende et rocksalt), on s'attend à avoir une bande interdite directe dans la structure zinc-blende et une bande interdite indirecte dans la structure rock-salt.

1.4.3. Propriétés du CdSe

1.4.3.1. Propriétés structurales

Le sélénure de cadmium possède une structure zinc-blende avec un paramètre de maille $a=0.608 \text{ \AA}$ et une densité de l'ordre de 5.664 g.cm^{-3} sachant que le composé CdSe est plus stable dans la phase wurtzite avec les paramètres de maille $a=0.430 \text{ \AA}$ et $c=0.702 \text{ \AA}$ et une densité de l'ordre de 5.6615 g.cm^{-3} [21].

1.4.3.2. Propriétés optiques

La principale propriété étant le gap avec sa nature et sa grandeur. L'énergie du gap (calculée) du CdSe est de 1.675 eV dans la phase zinc-blende [21].

1.4.3.3. Configuration électronique

La configuration électronique du Cd est $([\text{Kr}] 4d^{10}5s^2)$. Celle du Se est $(1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6)$. Pour la structure de bandes du CdSe dans les deux phases (zinc-blende et rocksalt), on s'attend à avoir une bande interdite directe.

1.4.4. Propriétés du $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Se}$

1.4.4.1. Propriétés structurales

Les propriétés structurales des alliages ternaires $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Se}$ dépendent de la concentration x qui varie de 0 à 1. Rappelons que dans notre étude, on se limite à la structure zinc-blende. Le paramètre de maille de notre alliage ternaire $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Se}$ est donné simplement par la loi de Vegard [13]:

$$a = (1 - x)a_{\text{ZnSe}} + xa_{\text{MgSe}} \quad (1.5)$$

Dans notre travail nous avons adopté la relation utilisée par Jobst et al. [22] :

$$a = a_{ZnSe} + (a_{MgSe} - a_{ZnSe} + 0.07)x - 0.07x^2 \quad (1.6)$$

1.4.4.2. Propriétés optiques

Les alliages semiconducteurs $Zn_{1-x}Mg_xSe$ ont des applications dans les dispositifs optiques dans la région bleue [23]. 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 [24,25] 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 utilisée pour des dispositifs émetteurs de lumière de courte longueur d'onde [24]. 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 [26,27].

1.4.4.3. Propriétés électroniques

Les semiconducteurs II-VI à base de zinc sont caractérisés par une grande largeur de bande interdite, correspondant à des longueurs d'onde situées dans le domaine du visible jusqu'à l'ultraviolet. Ces matériaux semiconducteurs possèdent un gap direct. Le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouve au centre de la zone de Brillouin.

La variation de l'énergie du gap de l'alliage $Zn_{1-x}Mg_xSe$ est donnée par [12] :

$$Eg(Zn_{1-x}Mg_xSe) = xEg(MgSe) + (1 - x)Eg(ZnSe) - x(1 - x)b \quad (1.7)$$

Où b est le paramètre de courbure (bowing parameter).

1.4.5. Propriétés de l'alliage ternaire $Zn_{1-x}Cd_xSe$

1.4.5.1. Propriétés structurales

Notre alliage $Zn_{1-x}Cd_xSe$ cristallise dans la structure zinc-blende. Son paramètre de maille varie entre 5.676 et 6.072 Å pour une composition de cadmium comprise entre 0 et 1 [28]. La variation du paramètre de maille du $Cd_{1-x}Zn_xS$ suit la loi de Vegard [13].

$$a(\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}) = (1-x)a_{\text{ZnSe}} + xa_{\text{CdSe}} \quad (1.8)$$

1.4.5.2. Propriétés optiques

Les propriétés optiques de notre alliage $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ dépendent fortement de sa structure de bandes et de la grandeur et la nature de son gap d'énergie entre autres. Ceci détermine dans une large mesure les applications potentielles de ce système.

1.4.5.3. Propriétés électroniques

La variation de l'énergie du gap de l'alliage $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Se}$ est donnée par [12] :

$$E_g(\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}) = xE_g(\text{CdSe}) + (1-x)E_g(\text{ZnSe}) - x(1-x)b \quad (1.9)$$

$$E_g(\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}) = 1.658x + 2.721(1-x) - x(1-x)0.33 \quad (1.10)$$

1.5. Applications des semiconducteurs

Les semiconducteurs possèdent un domaine d'application très important allant des dispositifs optoélectroniques, les cellules photovoltaïque, photonique à l'analyse biologique et le diagnostic médical. Alors que le système d'alliage pour les composées ZnSe , MgSe , ZnSe , $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Se}$ et $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ est très important pour ses applications dans les dispositifs optoélectroniques.

1.5.1. Sources de la lumière

1.5.1.1. Diodes électroluminescentes

Les propriétés de luminescence des semiconducteurs ouvrent de nouvelles voies dans le domaine de l'optoélectronique. Ils sont susceptibles d'être à la base des diodes électroluminescentes. Ils ont la possibilité d'être incorporés dans des structures mixtes pour réaliser des matériaux organiques/inorganiques.

1.5.1.2. Lasers

Pour réaliser des composants optoélectroniques efficaces, il faut favoriser certains phénomènes par rapport aux autres, par exemple, favoriser les recombinaisons radiatives, pour avoir soit absorption ou émission spontanée. En utilisant le phénomène de l'émission en le stimulant, on a pu créer des lasers qui sont d'une très large utilisation et dans tous les domaines [27]. La diode Laser, encore appelée laser à semiconducteurs, laser

à injection, laser à jonction, laser à hétérojonctions, laser à puits quantiques est une diode à semiconducteur, précisément une diode électroluminescente, conçue et utilisée de façon à exploiter l'effet laser. Le principe du laser est de convertir l'énergie de pompage en énergie lumineuse par un amplificateur optique intégré dans une cavité résonante [29]. La lumière laser est intense et cohérente [29].

1.5.2. Cellules photovoltaïques

Les cellules photovoltaïques convertissent la lumière en électricité avec l'exploitation de l'effet photovoltaïque. La découverte de l'effet photovoltaïque remonte à l'année 1839 quand le physicien français Edmond Becquerel [30] observa le changement de la tension d'une électrode de platine sous l'effet de l'illumination par la lumière. L'exploitation de cet effet a commencé à partir de 1950, lorsque les chercheurs de Bell Laboratoires aux Etats-Unis fabriquèrent la première cellule photovoltaïque au silicium cristallin. Les cellules solaires restant trop chères pour avoir une exploitation à grande échelle, le défi est aujourd'hui, de concevoir des matériaux moins onéreux. Dans ce contexte, une équipe de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne a développé un nouveau type de cellules basées sur des films semiconducteurs nanocristallins [31].

1.5.3. Biologie

En biologie, les semiconducteurs sont utilisés comme des sondes fluorescentes pour sonder les propriétés des molécules biologiques [32]. À cause de la nature cristalline des points quantiques ils présentent un avantage supplémentaire par rapport aux fluorophores organiques. Ces molécules sont capables d'émettre par fluorescence de la lumière à des longueurs d'onde plus élevées. L'intérêt particulier de l'application des points quantiques en biologie vient du fait qu'ils sont préparés dans un milieu aqueux qui leur donne la capacité de s'accrocher sur des molécules biologiques, telles que les protéines et les acides nucléiques (ADN, ARN). Cette aptitude provient des ligands qui servent à faire des ponts entre les points quantiques et le milieu environnant. À cause de la nature cristalline des points quantiques ils présentent un avantage supplémentaire par rapport aux fluorophores organiques. Ces molécules sont capables d'émettre par fluorescence de la lumière à des longueurs d'onde plus élevées, cependant ils sont sensibles au phénomène de photo destruction [33].

1.6. Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous avons rappelé les propriétés fondamentales essentielles des matériaux semiconducteurs (binaires et ternaires) qui nous intéressent du fait qu'ils constituent les miroirs de Bragg auxquels est consacrée notre étude. Nous avons revu principalement les propriétés structurales, électroniques et optiques de ces matériaux. En fin, nous avons présenté quelques applications majeures des matériaux en question.

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** (1991) 1272-1274.
- [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 InGaN/GaN quantum well structures with strain relaxation effects, Superlattices and Microstructures **86** (2015) 531-535.
- [6] J. H. Davies and A. R. Long, ed. 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** (1999) :R53.
- [9] S. Peter, Jr. Zory, Quantum well lasers, Academic Press. Inc, 1993.
- [10] T. Chungy, J. H. Ohz, S. Leey, J. Jeongy and K. J. Changy, Optical properties of ZnSSe/ZnMgSSe quantum wells, Semicond. Sci. Technol (1997) 701-707.
- [11] M.A. Ghebouli, H. Choutri, N. Bouarissa, Band structure, structural properties and stability of $\text{Ca}_x\text{Mg}_{1-x}\text{S}$ alloys, Phys. Scr 87 (2013) 015701.
- [12] J. Piprek, Optoelectronic devices advanced simulation and analysis, Springer Science+Business Media, Inc, 2005.
- [13] L. Vegard, Die Konstitution der Mischkristalle und die Raumfüllung der Atome, Zeitschrift für Physik. 5 n°1 (1921) 17-26.
- [14] H. Mariette, J. Chevalier, P. Leroux-Hugon, Local-Environment Effect on the Nitrogen Bound State in $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ Alloys : Experiments and Coherent-Potential Approximation, Theory Phys. Rev. B 21(1980) 5706.

- [15] 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 (1995) 2783.
- [16] S.H. Wei, A.Zunger, Disorder Effects on the Density of States of the II-VI Semiconductor Alloys $\text{Hg}_{0.5}\text{Cd}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{Te}$ and $\text{Hg}_{0.5}\text{Zn}_{0.5}\text{Te}$, *Phys. Rev. B* 43(1991) 1662.
- [17] 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.
- [18] W. P. Risk, T. R. Gosnell, A. V. Nurmikko, Compact blue-green lasers, Cambridge University Press, 2003
- [19] H. Okuyama, Y. Kishita and A. Ishibashi, *Phys. Rev. B* 57 (1998)2257.
- [20] X. Liu, U. Bindley, Y. Sasaki and J.K. Furdyna, *J. Appl. Phys.* 91 (2002) 2859.
- [21] S.Adachi, Properties of group-IV, III-V and II-VI semiconductors, J.Wiley and Sons, England, 2005.
- [22] B. jobst, D.Hommel, U.Lunz, T.Gerhard, G.Landwehr, *Appl. Phys. Lett.* 69 (1996) 97.
- [23] S. Taniguchi, T. Hino, S. Itoh, K. Nakano, N. Nakayama, A. Ishibashi and M. Ikeda, *Electron. Lett.* 32 (1996) 552.
- [24] Z.Charifi, H. Baaziz, N. Bouarissa, Predicted electronic properties of zinc-blende $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Se}$ alloys *Mater. Chem. Phys.* 84(2004) 273.
- [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(1998) 3429.
- [26] J.R.Chelikowsky, T.J.Wagner, A.Jin, et 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 (1995) 723.
- [28] D.R. Rao and R. Islam Materials Science Centre, Indian Institute of Technology, Kharagpur 721302 (India).
- [29] N.Bouarissa, Substrate effect on the electronic structure in $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{GaSb}$ and $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{InAs}$, *Infrared Phys. Technol.* 10 (1999) 423 and references cited therein.
- [30] A.Bechiri, N.Bouarissa, Energy band gaps for the $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ alloys lattice matched to different substrates, *Superlatt. Microstruct.* 39 (2006) 478 and references cited therein.

- [31] W.Nakwaski, Effective masses of electrons and heavy holes in GaAs, InAs, AlAs and their ternary compounds, *Physica* (1995) B 210.
- [32] P.J.L. Herve, L.K.J. Vandamme, General relation between refractive index and energy gap in semiconductors, *Infrared Phys. Technol* 35 (1994) 609.
- [33] 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 (1993) 4413,

Chapitre 2

PRINCIPES DE BASE DU LASER

2.1. 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 [1-7].

L'un des avantages décisifs des lasers est la possibilité d'obtention d'émission de rayonnements à la fois très directs, monochromatiques et cohérents : 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 [8].

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 lasers à semiconducteur notamment les lasers à puits quantique.

2.2. Niveaux d'énergie et transitions

2.2.1. Dualité onde-corpuscule

Le but de ce paragraphe n'est pas de répondre en détail à la question complexe «Qu'est-ce que la lumière ?» Il est toutefois difficile de parler de laser sans évoquer le problème de la nature du rayonnement. Celui-ci est-il plutôt une onde ou plutôt constitué de corpuscules ? Le débat agita déjà les esprits des plus illustres philosophes grecs (Aristote avait « pressenti » la nature ondulatoire, Empédocle et Pythagore, la nature corpusculaire). Après des siècles de réflexion, de recherche et de polémique, la science moderne répond aujourd'hui par une formule qui peut paraître ambiguë mais qui, en fait,

résume bien l'état de nos connaissances : la lumière se comporte tantôt comme une onde, tantôt comme des corpuscules.

C'est au début du 20^{ème} siècle (1900) que Max Planck, dans le but de résoudre l'énigme du rayonnement du corps noir, a formulé une hypothèse hardie, à l'origine d'une véritable révolution : les échanges d'énergie entre matière et rayonnement ne pourraient s'effectuer que par quantités discrètes, multiples entiers d'une énergie élémentaire de valeur $E = hv$ baptisée quantum. v étant la fréquence du rayonnement concerné et h constante de Planck.

Pour la première fois, une approche quantique de l'énergie apparaissait, alors que les monuments de la Physique (thermodynamique, théorie électromagnétique de Maxwell) n'envisageaient que des variations strictement continues. Cinq ans plus tard, les confirmations expérimentales de la théorie de Planck ne permettant plus le doute, Albert Einstein, aux prises avec une autre énigme (l'effet photoélectrique), reprenait l'idée quantique et résolvait son problème spécifique en assimilant le rayonnement à un ensemble de quanta (ou paquets) d'énergie électromagnétique de valeur hv , baptisés photons et présentant un comportement corpusculaire (le terme de « grains » d'énergie est parfois utilisé, mais il évoque des particules dotées de masse et prête ainsi à confusion). Cette approche, révolutionnaire et efficace, ne règle cependant pas tous les problèmes ; le comportement ondulatoire de la lumière, indéniable dans les expériences d'interférences, de diffraction ou de polarisation, et génialement mis en équation par Maxwell, n'est pas pour autant rayé de la carte. Il faut seulement se rendre à l'évidence : le rayonnement présente un comportement soit ondulatoire, soit corpusculaire, suivant le type d'expérience considéré ; ce comportement à double visage est baptisé dualité onde-corpuscule.

Ces deux aspects d'un même phénomène peuvent apparaître contradictoires, voire inconciliables. En réalité, une approche statistique (ou probabiliste) permet de montrer qu'ils sont complémentaires : il suffit d'admettre que l'intensité de l'onde associée à un photon, est directement liée à la probabilité de présence du corpuscule en un point, ou encore, au nombre moyen de photons passant en ce point. Une probabilité de présence nulle traduit alors l'absence de rayonnement ; cette approche permet notamment d'interpréter les expériences d'interférence, typiquement de nature ondulatoire, par l'existence de photons.

Ainsi réconciliées, les deux théories reçoivent de plus le soutien d'une autre théorie universelle, celle de l'indétermination d'Heisenberg. Celle-ci nous enseigne que pour certains phénomènes, en particulier dans le monde de l'infiniment petit, on peut trouver

certaines couples de grandeurs caractéristiques ne pouvant jamais, par principe, être connues parfaitement les deux à la fois ; les relations liant les incertitudes avec lesquelles on peut les connaître simultanément portent le nom de relations d'indétermination de Heisenberg. Un calcul de quelques pages [9] montre que l'incertitude Δn sur le nombre n de photons mis en jeu dans une expérience et celle $\Delta\phi$ sur la phase ϕ de l'onde associée, sont liées par l'inégalité.

$$\Delta n \cdot \Delta\phi \geq 2\pi \quad (2.1)$$

- Si l'on souhaite individualiser un photon, il faut pouvoir déterminer n (ici $n = 1$) avec une erreur Δn nulle ; on a alors indétermination totale de la phase de l'onde associée car $\Delta\phi \rightarrow \infty$.
- Si l'on veut connaître ϕ avec précision $\Delta\phi \rightarrow 0$, il faut tolérer que Δn tende vers l'infini ; on perd alors l'aspect corpusculaire.

Ce raisonnement est l'un des plus convaincants pour illustrer la complémentarité entre les deux comportements du rayonnement, notamment dans le domaine qui nous concerne ici : celui de la lumière visible et des deux zones voisines du spectre (infrarouge et ultraviolet) qui correspond au L (light) de laser.

2.2.2. Modèle idéalisé de l'absorption et de l'émission

La description du fonctionnement d'un laser passe par la compréhension des phénomènes d'absorption et d'émission, constituant la base de la théorie de l'interaction lumière-matière. Le modèle le plus adapté est de type énergétique, issu des hypothèses de Niels Bohr (1913) sur les états d'énergie des atomes. Ces derniers présentent des états énergétiques stables et discrets, concrétisés par des niveaux quantifiés, le passage de l'un à l'autre correspondant à une transition. Dans le modèle idéalisé, chaque niveau est parfaitement défini, la représentation graphique traditionnelle étant celle de la Figure 2.1 pour le cas simplifié d'un couple de niveaux.

Par ailleurs, une transition peut se produire par absorption de lumière de fréquence ν (l'atome passe alors à un état d'énergie supérieur, dit « excité ») ou par émission de lumière de même fréquence, s'il est excité (il retrouve alors son état d'origine). Ce modèle est parfaitement en accord avec la quantification de l'énergie et la dualité onde-corpuscule si l'on suppose que le photon absorbé ou émis, correspondant à une onde de fréquence ν , présente une énergie égale à la différence entre les deux niveaux E_1 et E_2 .

$$E_2 - E_1 = h\nu \quad (2.2)$$

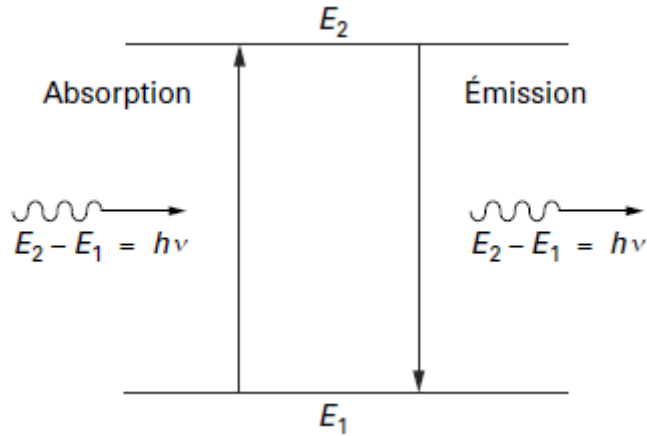


Figure 2.1. Modèle idéalisé des transitions entre deux niveaux d'énergie d'un atome : absorption ou émission d'un photon d'énergie.

Chaque atome présentant un couple (E_1, E_2) est donc susceptible d'absorber ou d'émettre un rayonnement de fréquence $\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$.

Ce modèle a été précisé par Einstein, sur une base probabiliste, que l'on peut résumer ainsi: pour une population de N atomes en présence de rayonnement de fréquences variées, dont N_1 sont dans l'état d'énergie E_1 (état dit fondamental, si l'atome est en situation naturelle de « repos ») et N_2 sont dans l'état excité E_2 , le nombre élémentaire de transitions par absorption, pendant un temps élémentaire dt peut s'écrire :

$$dN_1 = B_{12}N_1\rho(\nu)dt \quad (2.3)$$

Avec

B_{12} probabilité d'absorption entre les niveaux E_1 et E_2 ,

N_1 atomes susceptibles d'absorber des photons,

$\rho(\nu)$ densité spectrale du rayonnement ambiant.

Inversement, pour les atomes excités, le nombre élémentaire de transitions par émission pendant le même temps élémentaire peut s'écrire :

$$dN_2 = A_{21}N_2dt \quad (2.4)$$

avec un signe - pour tenir compte de la diminution de N_2 ,
 A_{21} probabilité d'émission entre les niveaux E_2 et E_1 ,
 N_2 atomes susceptibles d'émettre des photons.

On reconnaît la formulation différentielle classique d'une décroissance exponentielle de N_2 .

$$N_2(t) = N_2(0)e^{-A_{21}t} \text{ ou } N_2(0)e^{-t/\tau} \quad (2.5)$$

τ est la constante de temps qui traduit la vitesse de retour à l'état fondamental ; elle caractérise donc la durée de vie moyenne de l'état excité. Les deux probabilités B_{12} et A_{21} sont liées aux propriétés intrinsèques de l'atome considéré et portent le nom de coefficients d'Einstein.

Le phénomène d'émission se produisant naturellement, comme tout retour à l'équilibre d'un système physique possédant un excès d'énergie, reçoit le nom d'**émission spontanée**. Aucune hypothèse n'étant formulée sur la direction de propagation des photons ou sur leurs phases respectives, ce mode d'émission est baptisé **incohérent spatialement** : en d'autres termes, les directions de propagation des photons et leurs phases sont aléatoires. Ce modèle représente une description simplifiée de l'émission lumineuse rencontrée dans les lampes à incandescence par exemple à un détail près, mais d'importance : dans ces sources incohérentes, les niveaux d'énergie discrets idéalisés n'existent pas.

2.2.3. Mécanismes des transitions réelles

Plusieurs générations de physiciens se sont patiemment efforcées d'établir un catalogue des niveaux d'énergie présents dans les atomes et les molécules. Les plus acharnés furent les spectroscopistes qui traquèrent les innombrables raies d'émission pour en déduire la constitution fine de la matière : « les raies d'émission sont le langage des atomes » disaient-ils.

Le cas d'un atome isolé est le plus confortable à modéliser car il n'interagit pas avec d'autres « confrères ». Il en va tout autrement dans les cristaux et les molécules, qui sont constitués d'assemblages plus ou moins complexes d'atomes interagissant entre eux. Il est donc prévisible qu'un gaz, constitué d'atomes en mouvement, relativement éloignés les uns des autres, ne présentera pas les mêmes niveaux d'énergie qu'un cristal aux atomes

proches et fortement liés entre eux. D'une façon générale, lorsque la masse volumique des corps augmente, il en résulte un élargissement des raies qui peut conduire à l'observation de **bandes** de niveaux difficiles à séparer (non résolubles) même à l'aide de systèmes dispersifs très résolvents.

Des lois complexes de la physique quantique, nous pouvons extraire deux conclusions :

- Dans les cristaux, les interactions entre atomes compliquent le jeu en multipliant considérablement le nombre de niveaux d'énergie à prendre en compte, ces niveaux pouvant présenter une **dégénérescence** en bandes quasi-continues. Il existe, heureusement pour le laser, des exceptions importantes : certaines raies, associées à la présence de quelques atomes d'impuretés (en réalité des ions), demeurent très fines.

Pour obtenir une émission très monochromatique, le physicien devra faire preuve de beaucoup d'ingéniosité pour trouver la bonne impureté, insérée dans le bon cristal [10];

- En outre, les « édifices » moléculaires ne sont jamais figés ; en première approximation, avec notre approche macroscopique du monde microscopique, nous pouvons modéliser leurs mouvements à partir des concepts classiques de la Mécanique sous forme de rotations et vibrations. La Mécanique quantique en donne une représentation plus abstraite, mais basée sur la même idée : les mouvements de rotation et de vibration se traduisent, dans les molécules, par une forte multiplication des niveaux d'énergie.

Ces quelques éléments simplifiés permettent d'imaginer pourquoi la recherche d'une émission lumineuse très monochromatique représentait un pari non gagné d'avance. En pratique, les physiciens ont retenu quelques mécanismes de transitions qui se sont révélés porteurs et que nous retrouverons dans les lasers actuels [10].

Les **transitions électroniques**, dans lesquelles les changements de niveaux d'énergie s'effectuent par « sauts » des électrons d'une orbite à l'autre dans une population d'atomes non ionisés : lors de la montée des électrons dans l'échelle énergétique, ceux-ci ne peuvent pas quitter leurs atomes d'origine. C'est le modèle le plus simple à appréhender avec une approche mécanistique, c'est donc le plus répandu dans les ouvrages de vulgarisation (Figure 2.2).

Les **transitions ioniques**, ou électroniques avec ionisation, dans lesquelles le mécanisme de base reste identique, mais avec un apport d'énergie extérieure suffisant pour que certains électrons soient arrachés à leurs atomes d'origine, transformant ceux-ci en ions. Ce mode d'excitation, rencontré dans certains gaz (argon) soumis à une décharge électrique, est moins sélectif, mais aussi plus « brutal » car les électrons devenus libres

véhiculent dans le milieu un surplus d'énergie sous forme cinétique, qu'il faudra évacuer [10].

Les **transitions moléculaires**, dans lesquelles les changements d'énergie s'effectuent par une modification globale de l'état de vibration (distance variable entre deux atomes constitutifs par exemple), ou de rotation des molécules. Ce mécanisme est typique des gaz moléculaires, tel que le dioxyde de carbone (Figure 2.2).

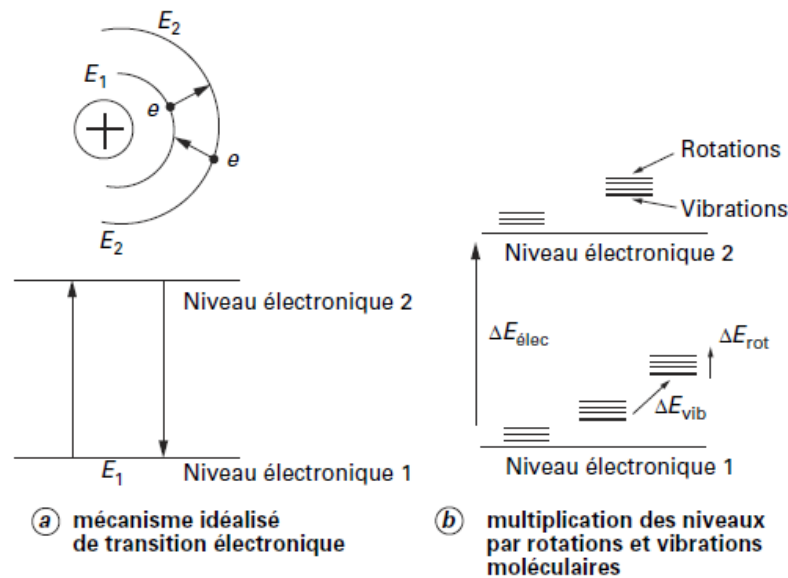


Figure 2.2. Transition électronique et niveaux moléculaires.

Les physiciens connaissant bien les ordres de grandeur des énergies à mettre en jeu dans ces différents modes de transition, la formule de Planck permet aisément de prévoir les domaines de fréquences, donc de longueurs d'onde concernée :

$$E_2 - E_1 = \Delta E = h\nu = h c/\lambda \quad (2.6)$$

avec $h = 6.63 \times 10^{-34}$ J.s.

$C = 3 \times 10^8$ m/s.

- transitions électroniques : ΔE_{elec} ;
- transitions moléculaires : ΔE_{vib} (vibrations) ;

ΔE_{rot} (rotations).

La hiérarchie énergétique étant bien établie ($\Delta E_{elec} > \Delta E_{vib} > \Delta E_{rot}$), les valeurs de ΔE conduisent à la prévision synthétique suivante :

- raies de rotation pure : $\lambda \approx 25 \mu\text{m}$; émission dans l'infrarouge lointain ;
- raies de rotation-vibration couplées : $\lambda \approx 1 \mu\text{m}$; émission dans l'infrarouge proche;

- raies d'origine électronique (ou ionique) : $\lambda < 1 \mu\text{m}$; émission dans le visible et vers la limite infrarouge.

2.3. Poids de la thermodynamique

2.3.1. Équilibre thermique d'une population d'atomes

L'obligation de raisonner sur une population d'atomes ou de molécules impose d'envisager l'équilibre thermodynamique d'un tel ensemble. Dès 1917, A. Einstein, après avoir modélisé les phénomènes d'absorption et d'émission, a cherché à corréler ses hypothèses avec l'incontournable loi statistique de Boltzmann, qui prévoit la répartition naturelle de l'énergie d'un système physique en fonction de la température thermodynamique T : une population de N_2 atomes excités (énergie E_2) cohabitant avec N_1 atomes à l'état inférieur E_1 , doit obéir à la relation d'équilibre :

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right) \quad (2.7)$$

Où k est la constante de Boltzmann ($k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$).

Cette relation permettant de déterminer l'ordre de grandeur des populations pouvant coexister sur deux niveaux d'énergie E_1 et E_2 , on est amené naturellement à regarder quelle est la situation à température ambiante : $T = 300 \text{ K}$ donnant $kT \approx 0.025 \text{ eV}$, un écart d'énergie $E_2 - E_1$ de cette même valeur conduit à :

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-1} = 0.36 \quad (2.8)$$

36 % des atomes peuvent être naturellement sur le niveau excité E_2 et 64 % « au repos ».

D'après la formulation de Planck $\Delta E = h\nu$, ce domaine d'énergie correspond à des transitions dont les longueurs d'onde sont situées dans l'infrarouge lointain ($\lambda \approx 50 \mu\text{m}$). Si l'on recherche une émission au centre du spectre visible ($\lambda \approx 0.5 \mu\text{m}$), l'écart d'énergie doit être proche de 2.5 eV, soit :

$$\frac{N_2}{N_1} = e^{-100} \approx 10^{-40} \quad (2.9)$$

Pas de chance pour l'optique : il faudra chercher une solution pour inverser cette tendance, puisque les niveaux excités semblent désespérément vides. De plus, Einstein a recherché tout naturellement comment pouvait s'établir l'équilibre absorption-émission à partir de la relation :

$$\frac{dN_1}{dt} = \frac{dN_2}{dt} \quad (2.10)$$

(équations (2.3) et (2.4)) qui conduit à :

$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{B_{12}}{A_{21}} \rho(\nu) \quad (2.11)$$

Or, cette relation est en contradiction avec la théorie de Boltzmann ; ne souhaitant pas remettre en cause la thermodynamique, dont les principes fondamentaux étaient universellement vérifiés, Einstein décida judicieusement d'affiner son modèle.

2.3.2. Le coup de génie de l'émission stimulée

Pour sortir de l'impasse thermodynamique, il fallait admettre l'existence d'une autre forme d'émission coexistant avec l'émission spontanée. Une fois de plus, l'intuition d'Einstein fut la bonne ; il proposa le mécanisme suivant : lorsqu'un atome à l'état excité E_2 interagit avec un photon incident d'énergie $h\nu$, et si cette énergie correspond à une différence de niveau intrinsèque $E_2 - E_1$ de valeur identique, l'atome retourne au niveau E_1 en émettant un photon de même fréquence ; cette émission « déclenchée » par le photon incident constitue un exemple de transition provoquée à partir d'un état métastable vers un état stable : elle a donc été baptisée **stimulée** ou **induite**. Pour compléter le modèle, Einstein a émis l'hypothèse que ce phénomène était instantané, donc que le photon induit était en phase avec le photon incident, et enfin, que sa direction était également celle du photon incident (Figure 2.3). En reprenant le raisonnement développé pour quantifier le phénomène d'absorption, provoqué lui aussi par un photon incident, la variation du nombre d'atomes excités due à l'émission stimulée s'écrit :

$$dN_2 = -B_{21}N_2\rho(\nu) dt \quad (2.12)$$

avec B_{21} probabilité d'émission stimulée entre les niveaux E_1 et E_2
 N_2 « vivier » d'atomes susceptibles d'émettre.

En combinant les trois termes dN (équations (2.3), (2.4) et (2.12) : absorption, émissions stimulée et spontanée), l'accord avec la théorie de Boltzmann est retrouvé à condition de poser :

$B_{12} = B_{21} = B$ symétrie des phénomènes d'absorption et d'émission stimulée
 et

$$\frac{A_{21}}{B_{12}} = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \rho(\nu) \quad (2.13)$$

avec c la célérité de la lumière.

Ces deux conditions permettent en effet de retrouver la célèbre formule de Planck, exprimant la densité spectrale de rayonnement $\rho(\nu)$ pour une température donnée T , celle-là même qui a justifié l'hypothèse quantique pour expliquer le rayonnement du corps noir :

$$\rho(\nu) = \frac{8 \pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp(h\nu/kT) - 1} \quad (2.14)$$

Le mécanisme de l'émission stimulée permet donc de retrouver la cohérence de l'ensemble des phénomènes physiques. Par contre, un calcul des ordres de grandeur met en évidence une nouvelle fois le handicap de l'optique : dans le rapport A_{21}/B_{21} qui exprime la probabilité d'émission spontanée par rapport à l'émission stimulée, la fréquence du rayonnement apparaît à la puissance 3 (équation (2.13)). Un rapide calcul numérique indique que, dans le spectre visible, l'émission stimulée reste négligeable devant l'émission spontanée, elle-même déjà peu probable (voir calcul de N_2 à partir de l'expression (6)). Ce phénomène ne fait qu'empirer dans l'ultraviolet et a fortiori dans le cas des rayons X. Au contraire, la faible fréquence de la radioélectricité donne une chance à l'émission stimulée, ce qui explique pourquoi les ondes « radio » cohérentes ont été maîtrisées bien avant la lumière cohérente.

2.3.3. Inversion de population

L'émission stimulée exige donc de peupler le niveau d'énergie supérieure, l'idéal étant de maintenir la condition $N_2 > N_1$ afin de disposer d'une réserve permanente d'atomes excités susceptibles d'émettre : cette condition constitue une **inversion de population** (Figure 2.4) puisqu'à l'équilibre thermodynamique « naturel » nous avons vérifié que N_2 restait très inférieur à N_1 , du moins à température raisonnable. Tout processus artificiel permettant d'obtenir une inversion de population est appelé **pompage** ; c'est une **opération hors équilibre**, puisqu'à l'équilibre, la thermodynamique continue de dicter sa loi, sous la forme de la répartition statistique de Boltzmann (équation (2.7)).

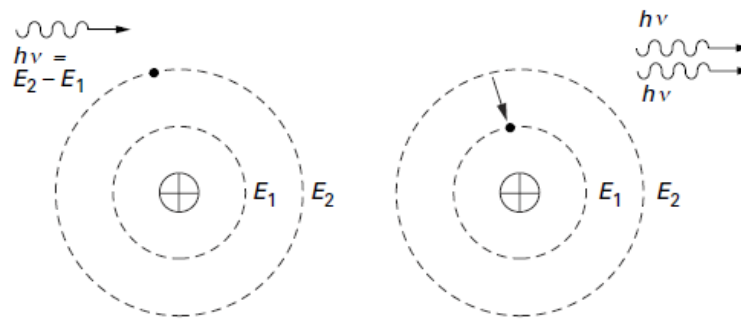
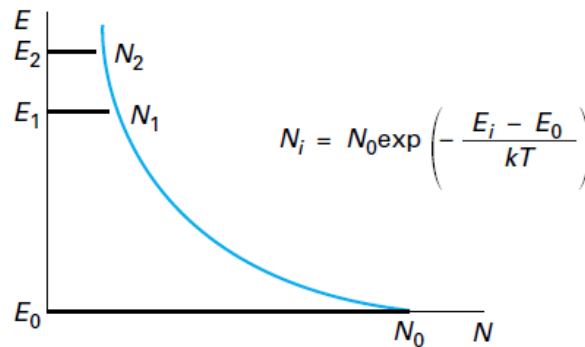
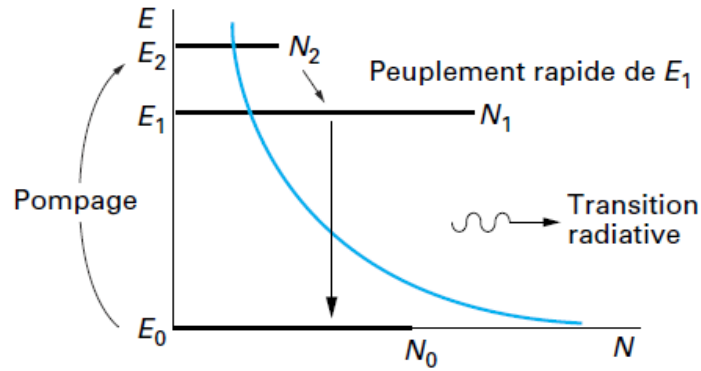


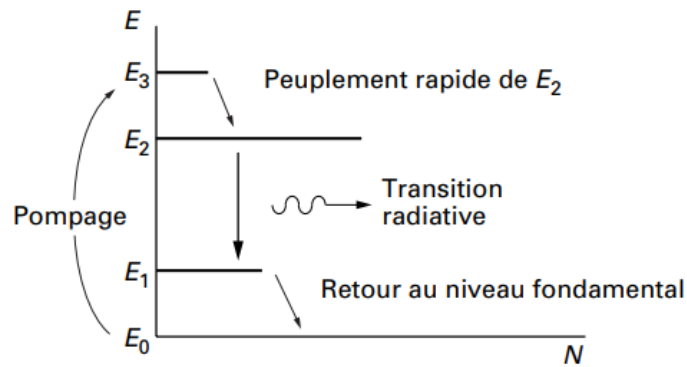
Figure 2.3. Émission stimulée ou induite.



Ⓐ exemple de 3 niveaux, à l'équilibre thermodynamique, sans pompage



(b) pompage et inversion de population à 3 niveaux



(c) pompage et inversion de population à 4 niveaux

Figure 2.4. Principe de l'inversion de population.

Une analyse fine des possibilités d'inversion, en particulier l'examen des durées de vie probables de chaque niveau (équation (2.5)), a conduit les opticiens à abandonner le pompage à deux niveaux, pour se concentrer sur les processus à trois ou quatre niveaux.

Le **pompage à trois niveaux** alimente, à partir du niveau fondamental un niveau supérieur qui doit présenter une durée de vie courte (état instable), afin de peupler rapidement «par le haut» le niveau intermédiaire ; celui-ci doit, au contraire, être de type métastable, c'est-à-dire de durée de vie supérieure, afin de servir de réservoir. La transition radiative a lieu par retour à l'état fondamental (Figure 2.4b).

Le **pompage à quatre niveaux** alimente, dans les mêmes conditions, le niveau intermédiaire métastable E_2 , mais la transition radiative se produit vers un autre niveau intermédiaire E_1 , instable, depuis lequel s'effectue le retour au niveau fondamental ; ce

dernier peut demeurer plus fortement peuplé que dans le pompage à 3 niveaux (Figure 2.4-c).

D'autres mécanismes plus complexes existent : nombre de niveaux supérieur à 4, utilisation de bandes de niveaux dans des cristaux, etc. Toutefois, certains peuvent être évoqués lors de la description des différentes familles de laser, en raison de leurs aspects spécifiques : c'est le cas notamment du mode d'inversion utilisant le transfert d'excitation (laser hélium-néon) et de mécanismes particuliers rencontrés dans les semiconducteurs [10].

2.4. Modes de pompage

2.4.1. Pompage optique

Mis au point en 1950 sur le plan théorique par l'équipe de A. Kastler, le pompage optique fut le premier à provoquer l'effet laser dans le rubis (T.H. Maiman, 1960) ; il est toujours utilisé aujourd'hui : une lampe à décharge impulsionnelle puissante délivre un intense flash de lumière dans un large spectre (lumière blanche et ultraviolette). Le plus souvent, le processus est répétitif avec une fréquence de quelques hertz à quelques dizaines de hertz, imposée par le fonctionnement de la lampe elle-même et par les phénomènes thermiques. Le mécanisme simplifié des systèmes à 3 ou 4 niveaux, présenté ci-dessus, exige un pompage très sélectif pour alimenter le niveau E_2 (figure 2.4 b) ou E_3 (figure 2.4 c). La fréquence correspondante étant prélevée dans le spectre large du flash, le rendement de l'opération serait très faible et conduirait à des lampes de puissance prohibitive. En réalité, on peut mettre à profit l'existence de larges bandes d'absorption, quasi-continues, situées dans l'échelle énergétique au-dessus de E_2 ou E_3 : ces bandes se peuplent abondamment en prélevant l'énergie du flash sur une large partie de son spectre ; une série de désexcitations rapides alimente ensuite le niveau supérieur du processus à 3 ou 4 niveaux. Les matériaux adaptés à ce mode de pompage sont en fait des cristaux, dont la maille recèle des impuretés possédant les niveaux d'énergie spécifiques qui permettent d'obtenir la bonne configuration globale. C'est le cas notamment de l'ion chrome (Cr^{3+}) qui permet de constituer le cristal de rubis, en l'insérant dans une maille d'alumine Al_2O_3 [10].

Le rendement de ce type de pompage reste cependant faible en raison de la dispersion spatiale de la lumière du flash, de la présence dans cette lumière de longueurs

d'onde inutiles et bien sûr des transitions non radiatives qui ne font que céder de l'énergie thermique au milieu émissif et l'échauffent.

La dispersion spatiale peut-être combattue par les configurations particulières des réflecteurs associés aux lampes flash et les pertes thermiques exigent, le plus souvent, un refroidissement forcé du milieu émissif. Enfin, la mauvaise sélectivité du pompage en lumière blanche a amené récemment la naissance du pompage en lumière monochromatique : en clair, un laser peut en pomper un autre [10].

2.4.2. Pompage électronique

Le pompage optique n'est pas adapté pour exciter un gaz qui présente des raies d'absorption plus étroites en raison de la faible interaction entre atomes. La sélectivité évoquée précédemment conduit à une impasse : les sources de lumière présentant des raies intenses adaptées aux gaz susceptibles de produire une émission stimulée restent introuvables. Les lampes flash, même puissantes, fournissent une énergie beaucoup trop faible dans des domaines aussi étroits de longueurs d'onde.

La solution est apportée par le pompage électronique : les électrons fortement accélérés d'une décharge électrique cèdent une partie de leur énergie cinétique aux atomes ou molécules d'un gaz sous pression réduite. Ce transfert d'énergie, complexe et variable d'un gaz à l'autre, peut être schématisé par trois processus simplifiés :

- excitation de certains niveaux d'énergie : niveaux électroniques si le gaz concerné est atomique ; et niveaux de rotation et vibration si le gaz est moléculaire ;
- ionisation éventuelle des atomes ;
- accroissement de l'énergie cinétique moyenne des atomes ou des molécules.

Dans le cas où le milieu émissif reste sous forme d'atomes excités, le laser correspondant est de **type atomique**. C'est le cas notamment du laser hélium-néon ; mais le mélange de gaz fait appel à un processus de pompage plus complexe dans lequel l'un des gaz excités, transfère une partie de son énergie vers l'autre gaz [10].

Dans le cas où le milieu émissif devient essentiellement ionisé, ce sont les niveaux d'énergie des ions ainsi formés qui interviennent dans le processus d'émission stimulée ; ils peuvent être sensiblement différents de ceux de l'atome à l'état neutre. Le laser correspondant est alors de **type ionique** (ou à gaz ionisé) ; c'est le cas du laser à argon [10].

Par ailleurs, des procédés complémentaires peuvent être mis en œuvre afin d'améliorer le rendement du pompage électronique : un champ électromagnétique haute

fréquence peut venir renforcer l'effet cinétique des électrons de la décharge et un champ magnétique statique peut «guider» cette décharge par le classique effet de striction : les trajectoires électroniques sont confinées par les forces magnétiques qui amènent les électrons à suivre des mouvements hélicoïdaux dont les rayons de courbures diminuent si le champ appliqué augmente.

Une variante du pompage électronique est également utilisée dans les semi-conducteurs : le déplacement d'électrons libres n'est pas envisageable dans les cristaux, qui constituent de bons isolants ; par contre, un semiconducteur dopé est le siège de phénomènes de conduction bien maîtrisés. Les vitesses moyennes de transit des électrons (et de leurs associés les « trous ») sont totalement différentes de celles rencontrées dans les décharges en milieu gazeux ; leurs faibles valeurs interdisent l'exploitation d'effets cinétiques importants. Cependant, les jonctions de deux semiconducteurs différents sont le siège de phénomènes énergétiques non négligeables lorsqu'elles sont traversées par un courant électrique. L'excitation de bandes de niveaux d'énergie (conduction et valence) séparées par une bande interdite peut conduire à un phénomène d'inversion de population qui sera analysé ultérieurement.

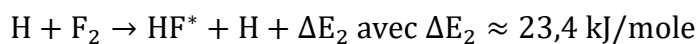
Le terme de pompage électronique désigne donc un ensemble de processus variés, la majorité d'entre eux concernant les gaz en interaction avec une décharge électrique qui les maintient en état de conduction ; le seul cas d'utilisation dans les solides est celui des semi-conducteurs.

2.4.3. Pompage chimique

Le stockage d'énergie sous forme de réactifs chimiques est très répandu ; il présente l'avantage de pouvoir libérer rapidement, et dans un volume réduit, une énergie élevée. Or, les réactions chimiques exothermiques peuvent aussi provoquer l'excitation des molécules; ce procédé, dénommé **pompage chimique**, est utilisé pour exciter les niveaux d'énergie vibrationnels et rotationnels de molécules, essentiellement diatomiques : le domaine d'émission concerné est par conséquent celui de l'infrarouge.

En pratique, peu de réactions conduisent à une inversion de population et à une émission stimulée exploitable ; on peut citer l'exemple du fluorure d'hydrogène HF, qui peut être produit sous forme excitée HF* par l'intermédiaire de deux réactions :





Souvent schématisées par :



En fait, le rôle du fluor sous sa forme atomique F est prépondérant ; ce dernier doit donc être généré en quantité suffisante avant réaction avec l'hydrogène. Deux voies sont possibles :

- dissociation de la molécule F_2 par réaction à haute température avec un réactif A :



- ou, le plus souvent, dissociation de la molécule d'hexafluorure de soufre SF_6 par décharge électrique à haute tension :



Les raies d'émission de la molécule excitée HF^* se situent dans la bande infrarouge 2.6 à 3.3 μm , zone de forte absorption atmosphérique. Pour faciliter la transmission à grande distance, un décalage de longueur d'onde vers la fenêtre spectrale atmosphérique 3.5-4.2 μm est possible, en remplaçant les atomes d'hydrogène H par des atomes de deutérium D ; la formulation des réactions (équations (2.15)) reste identique, mais le prix de revient est fortement accru en raison de la rareté du deutérium.

D'une façon générale, le pompage chimique est peu utilisé en raison de sa complexité : chambre primaire de génération du réactif, chambre principale de mélange et de réaction, évacuation des gaz par pompe à vide, etc. Cependant, il est incontournable pour obtenir de très hautes puissances en régime continu, domaine de prédilection des militaires.

2.5. Amplification optique

Le pompage et l'inversion de population étant maîtrisés, l'émission stimulée est définitivement admise afin de respecter les lois fondamentales de la Physique, l'analyse

d'une population d'atomes excités conduit à un constat intéressant, schématisé sur la Figure 2.5. Si n photons incidents (ici $n = 5$) éclairent une population d'atomes en état d'inversion, certains vont provoquer des émissions stimulées par interaction avec des atomes excités (3 sur la figure). Certains ne connaîtront pas d'interaction (1 dans la configuration choisie ici). En moyenne, le nombre de photons présents peut augmenter puisque le nombre d'atomes excités N_2 est au départ supérieur à N_1 , nombre d'atomes à l'équilibre : dans ce cas, il y a **amplification optique**.

Einstein a poussé le raisonnement plus loin en envisageant des photons incidents unidirectionnels : avec les hypothèses de l'émission stimulée, les photons émis sous l'effet de ces photons incidents vont conserver la même direction et les mêmes phases. Par contre, ceux qui sont libérés par émission spontanée présenteront des directions aléatoires et se répartiront dans tout l'espace. Dans la direction spécifique des photons incidents (Figure 2.6), la lumière d'origine stimulée sera donc largement prépondérante. La lumière émergente sera donc le résultat de la balance entre absorption et émission stimulée suivant cet axe. La variation d'énergie entre l'amont et l'aval peut donc se calculer à partir de l'évolution des populations N_1 et N_2 (équations (2.3) et (2.12)) qui permettent de dénombrer respectivement les deux types de transitions:

$$dE(\nu) = h\nu \cdot (dN_2 - dN_1)$$

$h\nu$: Energie élémentaire de chaque transition

dN_1 : Dynamique du milieu émissif

Par unité de temps, la variation de puissance correspondante s'exprime aisément en fonction de N_1 et N_2 :

$$\frac{dE(\nu)}{dt} = h\nu \cdot \left(\frac{dN_2}{dt} - \frac{dN_1}{dt} \right) = h\nu \cdot \rho(\nu) \cdot B (N_2 - N_1) \quad (2.19)$$

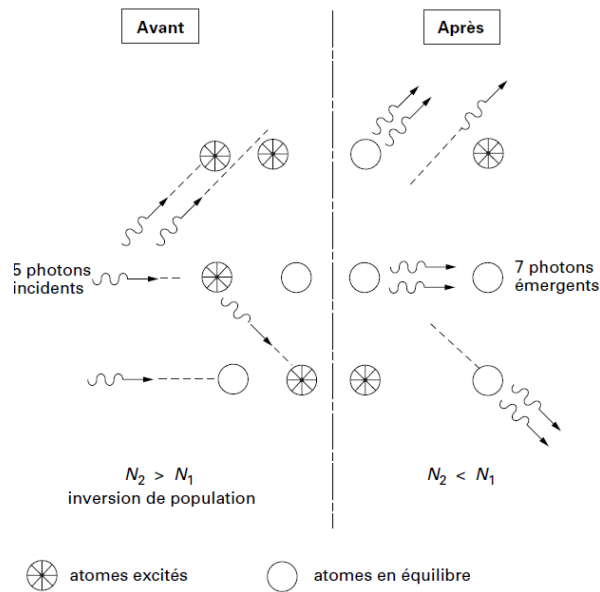


Figure 2.5. Principe de l'amplification optique : après émission stimulée, le nombre de photons de même fréquence présent dans le milieu a augmenté.

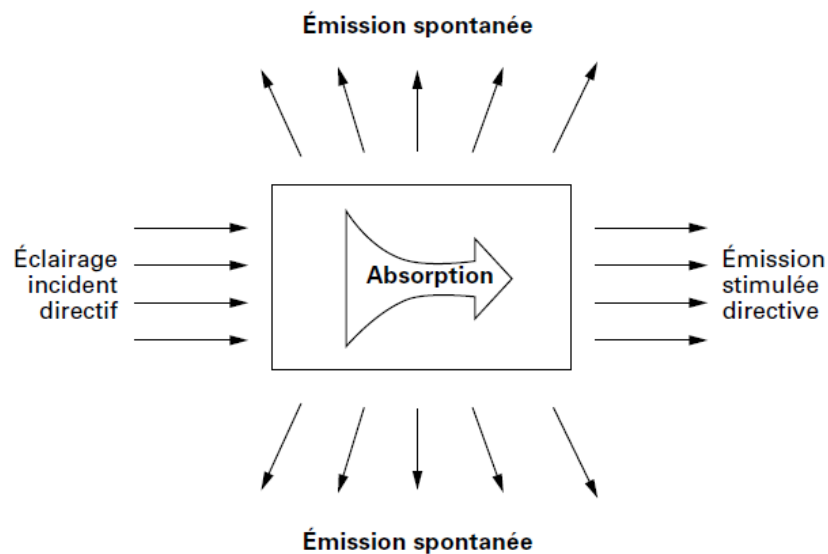


Figure 2.6. Bilan schématisé de l'évolution d'une population en état d'inversion.

Il est alors évident qu'une amplification optique ($dE/dt > 0$) exige $N_2 > N_1$, condition de l'inversion de population. Le milieu devient amplificateur (ou superradiant), alors qu'à l'équilibre thermodynamique ($N_1 > N_2$) il est naturellement absorbant. Pour les milieux émissifs classiques, les ordres de grandeur de l'amplification limitent l'enthousiasme : pour un passage unique de l'onde incidente directive, le coefficient amplificateur reste faible. En utilisant la formulation traditionnelle de l'amplification linéaire et progressive par un

milieu homogène de longueur L , la puissance à la sortie $P(\nu, L)$ s'écrit en fonction de la puissance d'entrée $P(\nu, 0)$:

$$\frac{dE(\nu)}{dt} P(\nu, L) = P(\nu, 0) \cdot e^{(\alpha(\nu) \cdot L)} \quad (2.20)$$

Le coefficient amplificateur α , déterminé au centre du spectre visible, atteint environ 5% par centimètre pour un cristal et reste inférieur à 1% par centimètre pour un gaz ; l'écart important de performance est dû naturellement à la différence du nombre de centres émissifs, liée au nombre d'atomes présents par unité de volume. On peut donc prévoir, qu'à puissance égale, un laser à gaz sera plus long qu'un laser à cristal.

2.6. Raies d'émissions réelles

2.6.1. Trains d'onde et longueur de cohérence

La notion de longueur de cohérence peut être abordée de façon très pragmatique en considérant que la lumière émise lors d'une transition est constituée d'un train d'onde de durée finie τ , comportant une fréquence unique si la transition est idéalisée (Figure 2.1). Deux trains d'onde de ce type, décalés dans le temps d'un intervalle Δt , peuvent interférer si $\Delta t < \tau$. Par contre, si $\Delta t \geq \tau$, ils ne peuvent générer de phénomènes d'interférence car ils ne sont plus corrélés temporellement ; le paramètre τ est appelé **durée de cohérence**, identifié dans ce cas à la durée de vie, et la distance parcourue avec la célérité c , pendant la durée τ , constitue la **longueur de cohérence** $\ell = c\tau$. Une bonne image de ce concept est donnée, en pratique, par un interféromètre réglé sur une différence de marche δ voisine de ℓ : si $\delta > \ell$, les deux trains d'onde issus des deux bras de l'interféromètre ne se superposent jamais et les franges d'interférence disparaissent.

Ce modèle en tout-ou-rien peut être avantageusement remplacé par un concept plus représentatif de la réalité, car la disparition des franges observée sur un interféromètre est en fait progressive en fonction de l'accroissement de δ . Si le train d'onde élémentaire est considéré comme amorti exponentiellement (amplitude décroissante en $e^{(-t/\tau)}$), la constante de temps τ permet d'évaluer sa durée de vie réelle : au temps τ , son amplitude est divisée par e , donc son intensité par $e^2 (\approx 7.4)$; deux trains d'onde, décalés d'un intervalle τ , interfèrent donc encore faiblement. Dans le formalisme désormais traditionnel de l'analyse spectrale, il est équivalent de dire qu'un train d'onde est de durée infinie ou que son spectre est infiniment étroit. Dans le langage des opticiens, on dira que ce train

d'onde présente une **cohérence temporelle** parfaite ou que l'émission est parfaitement **monochromatique**. De même, un train d'onde de durée finie correspondra à un élargissement de son domaine spectral autour de la fréquence fondamentale (Figure 2.7). En termes mathématiques, la relation entre le domaine temporel et le domaine spectral est bien représentée par une transformation de Fourier : le spectre d'énergie (importance énergétique relative des différentes fréquences) d'un signal $x(t)$ s'exprime par le carré du module de la transformée de Fourier de $x(t)$ [11].

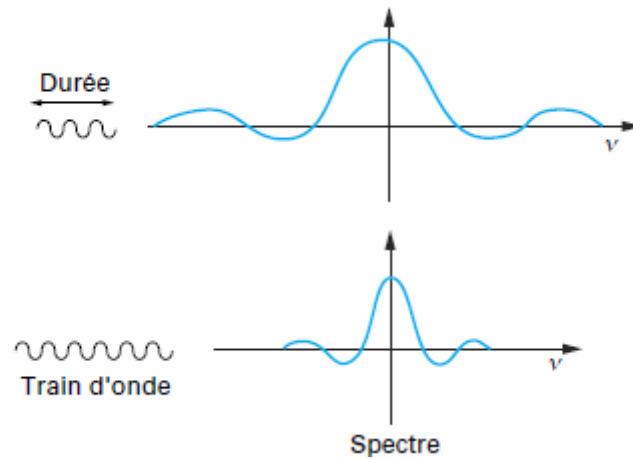


Figure 2.7. Train d'onde et spectre.

Si l'on applique cet outil mathématique au train d'onde amorti exponentiellement, on observe un spectre en cloche, centré sur la fréquence de l'onde et de demi-largeur à mi-hauteur $\Delta\nu = 1/2\pi\tau$. La longueur de cohérence ℓ peut alors être définie comme la distance parcourue par le train d'onde pendant la durée τ , $\ell = c\tau$; elle est inversement proportionnelle à la largeur du spectre :

$$\ell = \frac{c}{2\pi} \cdot \frac{1}{\Delta\nu} \quad (2.21)$$

Les deux grandeurs ℓ et $\Delta\nu$ sont complémentaires : elles permettent toutes les deux de quantifier la cohérence temporelle des ondes lumineuses. Cette définition conduit à des ordres de grandeur très variables suivant la finesse du spectre : ℓ varie d'une fraction de millimètre à plusieurs mètres pour certains lasers. À titre d'exemple, une longueur de cohérence de 1 cm pour une lumière émise au centre du spectre visible ($\lambda = 0.5 \mu\text{m}$ et $\nu = 6 \cdot 10^{14} \text{Hz}$) correspond à une largeur spectrale $\Delta\nu = c/2\pi\ell = 4.8 \text{GHz}$, soit en valeur

relative $\Delta\nu/\nu = 8.10^{-6}$, ce qui traduit déjà une grande finesse (ces chiffres sont ceux de l'argon ionisé [10]).

2.6.2. Raies naturelles et élargissement

Mais finalement, quelle largeur de raie doit-on prendre en compte ? Nous sommes déjà passés de raies idéalisées, caractéristiques d'atomes isolés, à des raies élargies par les interactions interatomiques dans les molécules ou les cristaux. Nous avons montré la nécessité de l'inversion de population et détaillé les modes de pompage ; ceux-ci, en plus de leur effet principal d'excitation du milieu émissif, apportent de l'énergie thermique à ce dernier, augmentant ainsi son agitation. Cet effet incontournable est une cause supplémentaire d'élargissement des raies d'émission. Il peut être minimisé par un refroidissement forcé, mais jamais totalement supprimé. Les conséquences sont particulièrement sensibles pour les gaz, en raison de la forte indépendance des atomes ou des molécules et de la valeur élevée de leur libre parcours moyen, surtout aux pressions réduites utilisées pour le pompage électrique. La vitesse moyenne des centres émissifs est suffisamment grande pour que l'effet Doppler-Fizeau devienne significatif ; la répartition statistique de ces vitesses couvrant un domaine assez large, la répartition des fréquences observées s'élargit donc fortement. Ce phénomène est le plus souvent résumé par le terme *élargissement Doppler*, alors que c'est Fizeau qui a généralisé aux ondes lumineuses l'effet sonore observé par Doppler. La raie ainsi modifiée prend le nom de *raie Doppler* du gaz : la raie rouge ($\lambda = 0.6328\mu\text{m}$) du néon, dans les conditions de fonctionnement courant du mélange hélium-néon, présente par exemple une largeur totale à mi-hauteur voisine de 1.5 GHz ($\Delta\lambda = 2 \times 10^{-3} \text{ nm}$).

Pour les cristaux, le phénomène d'élargissement dû à l'agitation thermique est présent bien que moins intense ; on parle d'*élargissement thermique* de la *raie de fluorescence*. Mais, comme les raies naturelles sont plus larges pour les solides, en raison des fortes interactions dans les réseaux cristallins, le bilan final reste favorable aux gaz : pour le rubis, la largeur de raie globale à prendre en compte pour la raie rouge ($\Delta\lambda = 0.6943 \mu\text{m}$) est de 330 GHz ($\Delta\lambda = 0.53 \text{ nm}$) pour une température de 300 K, portée à 490 GHz pour une température de 350 K.

2.7. Rôle de la cavité optique

2.7.1. Oscillateur laser

Toutes les parties du dispositifs semblent en place : choix du milieu émissif, mode de pompage, connaissance des raies d'émission. Cependant, nous savons que le simple passage d'une onde incidente déclenche une émission stimulée produisant un effet amplificateur limité. De plus, l'hypothèse de calcul impose un effet unidirectionnel (Figure 2.6). Si le milieu émissif est placé entre deux miroirs plans et parallèles, ces deux restrictions disparaissent : l'amplificateur devient périodique et la directivité est assurée puisque la seule direction de propagation privilégiée est la normale aux deux miroirs ; toute lumière ne se propageant pas strictement suivant cet axe est rapidement perdue par réflexions multiples et ne participe plus à l'effet amplificateur. Les deux miroirs constituent une *cavité optique*, multipliant les amplifications de lumière dans le milieu émissif, à condition toutefois que l'inversion de population y soit maintenue pendant un temps suffisant. L'ensemble milieu émissif amplificateur système de pompage-cavité optique, constitue un *oscillateur laser* (Figure 2.8). Naturellement, l'extraction d'une énergie exploitable à l'extérieur de la cavité exige la présence d'un miroir non totalement réfléchissant.

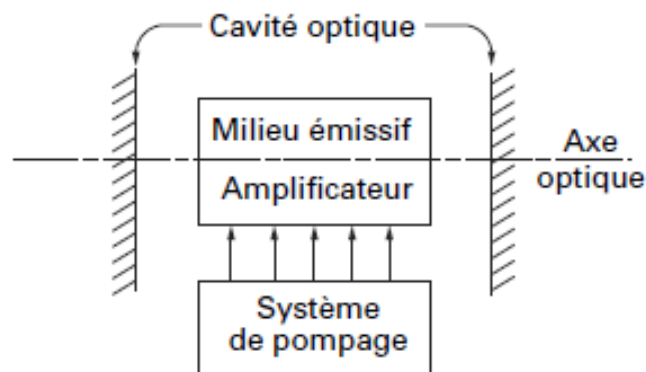


Figure 2.8. Oscillateur laser.

2.7.2. Modes de résonance longitudinaux

L'analyse du fonctionnement de la cavité optique débouche, comme pour tout oscillateur, sur la notion de résonance. Si l'on admet l'existence, en un point de la cavité, à un instant appelé initial, d'une émission d'amplitude a_0 , spontanée par exemple, il est facile d'écrire l'expression de l'amplitude émergente sur l'axe optique après N allers-retours, en tenant compte du coefficient d'amplification $\alpha(\nu)$ du milieu (équation (2.20)),

de la longueur L de la cavité et des facteurs de réflexion (r_1, r_2) et de transmission (t_1, t_2) en amplitude, des miroirs. Chaque aller ou retour produit :

- une amplification en amplitude de valeur g , sur la fréquence ν , avec :

$$G = g^2 = e^{[\alpha(\nu) \cdot L]} \quad (2.22)$$

- un déphasage $\varphi = \frac{2\pi}{\lambda} nL$ où n est l'indice de réfraction du milieu émissif, milieu supposé ici de même longueur que la cavité.

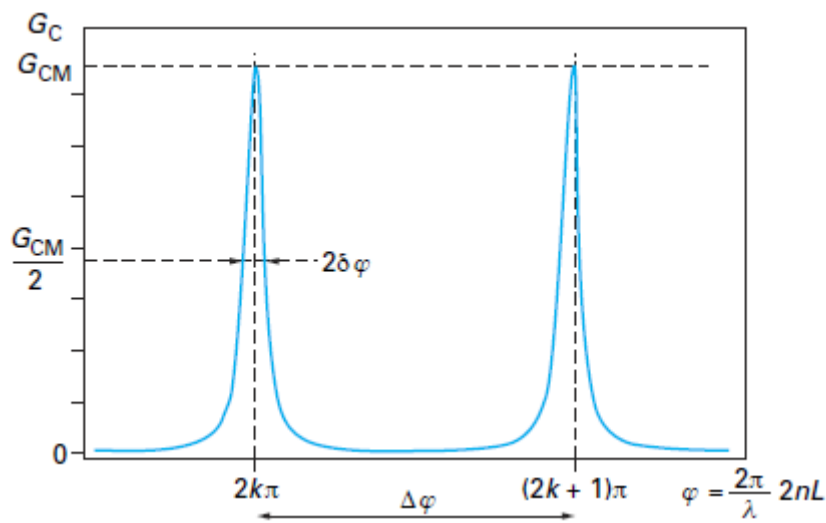


Figure 2.9. Modes de résonance longitudinaux d'une cavité optique : évolution du gain G_C .

La superposition des amplitudes a_N des ondes, amplifiées par g , atténuées par t en transmission et par r en réflexion, et déphasées de $2N\varphi$, conduit à une série classique convergente donnant l'amplitude totale $A = \sum_{N=1}^{\infty} a_N$.

L'intensité émergente correspondante s'écrit :

$$I = A \cdot A^* = a_0^2 \frac{t_2^2 G}{(1 - Gr_1 r_2)^2 + 4Gr_1 r_2 \sin(\varphi/2)^2} \quad (2.23)$$

Le rapport $G_c = I/a_0^2$ représente le gain global de la cavité (gain en intensité de l'oscillateur) ; il peut être tracé en fonction de ν , de λ , de φ ou de la longueur optique nL .

(Figure 2.9). On constate que la cavité va privilégier les fréquences correspondant aux pics de résonance centrés sur ν_k et séparés de $\Delta\nu$:

$$\begin{aligned}\nu_k &= k \frac{c}{2nL} \\ \Delta\nu &= \frac{c}{2nL}\end{aligned}\tag{2.24}$$

La largeur à mi-hauteur de ces pics se calcule aisément à partir de l'équation (2.23), avec la règle d'approximation des petits angles pour $\sin(\varphi/2)$, car les raies de résonance restent fines :

$$2\delta\nu = \frac{c}{2\pi nL} \cdot \frac{1 - Gr_1r_2}{\sqrt{Gr_1r_2}}\tag{2.25}$$

Chaque pic de résonance constitue un *mode longitudinal*. Sa largeur est fortement dépendante de la valeur du gain du milieu émissif, surtout pour des coefficients de réflexion élevés qui permettent une grande concentration d'énergie dans la cavité.

L'apparition de l'effet amplificateur, couplé avec une cavité fortement réfléchive, provoque une résonance aiguë, caractérisée par des raies très affinées. La tentation, intuitive, d'abaisser la valeur de r pour le miroir chargé d'extraire la lumière de la cavité (miroir de sortie), doit être limitée sous peine de perdre la qualité de la sélectivité : pour un gain identique $G = 1.01$, une baisse du coefficient de réflexion r_2^2 à la valeur 0.98, provoque un élargissement de la raie de résonance à la valeur $2\delta\nu = 247 \text{ kHz}$, se rapprochant de la situation correspondant à un gain voisin de l'unité et $r_2^2 = 0.99$.

Si l'on compare ces largeurs avec celles des raies naturelles après élargissement, on constate que la finesse de ces derniers est loin d'atteindre celle des raies de résonance d'une cavité très sélective. Le couplage milieu amplificateur-cavité conduit donc à une sélection dans la raie élargie du milieu émissif, d'un groupe de modes étroits de la cavité (Figure 2.10), le nombre de ces modes sélectionnés dépendant de la longueur de cavité L qui fixe leur écartement $\Delta\nu = c/2nL$ (Equation (2.24)). Dans l'exemple précédent ($L=1\text{m}$, $n=1$), si le gaz émissif est le classique mélange hélium-néon, la largeur de raie à prendre en compte est celle du néon, élargie par effet Doppler, $\Delta\nu_D = 1.5 \text{ GHz}$ (§ 5.2) ; l'intervalle $\Delta\nu$ entre modes longitudinaux étant de 150 MHz, leur nombre atteint la dizaine

dans la bande $\Delta\nu_D$ (précisément 11 si la cavité est centrée sur la raie Doppler). Le nombre total exact de modes présents dépend du *seuil* de l'effet laser, c'est-à-dire de l'accrochage de l'oscillateur ; ce seuil résulte d'un subtil équilibre entre les conditions de pompage et la qualité de la cavité résonnante. Sa présence induit, par définition, une réduction de la bande globale d'émission de la cavité, grâce à la limitation du nombre de modes présents (Figure 2.10). Ce type de fonctionnement, le plus classique, est dénommé *multi-mode longitudinal* ; les ordres de grandeur caractéristiques sont résumés par le Tableau 2.1.

Le moyen le plus tentant pour ne sélectionner que quelques modes, voire un seul, afin d'obtenir une monochromaticité exceptionnelle, semble être la réduction de la longueur de cavité, qui accroît l'intervalle entre modes. Concrétisée dans les lasers à semiconducteur, par leur nature très miniaturisée [10], cette idée ne peut être généralisée car le volume émissif trop faible limite alors l'effet amplificateur dans la plupart des autres milieux utilisés. Toutefois, une variante de ce concept peut procurer d'intéressantes performances de cohérence temporelle, au détriment de la puissance totale émise : une cavité de faible épaisseur et de très grande sélectivité (coefficients de réflexion r_1^2 et r_2^2 très élevés) est couplée à la cavité émissive qui fournit l'énergie. La première joue le rôle d'un filtre spectral qui élimine la plupart des modes longitudinaux de la seconde.

Tableau 2.1. Caractéristiques du fonctionnement multi-mode longitudinal.

Milieu émissif amplificateur	Largeur de raie à mi-hauteur GHz	Longueur de cavité (m)	Intervalle entre deux modes longitudinaux (GHz)	Nombre de modes présents
Gaz : hélium-néon	1.5	1	0.150	≈ 10
Cristal : rubis	330	0.1	1.5	≈ 220
Semiconducteur	1 200	0.001	150	≈ 8

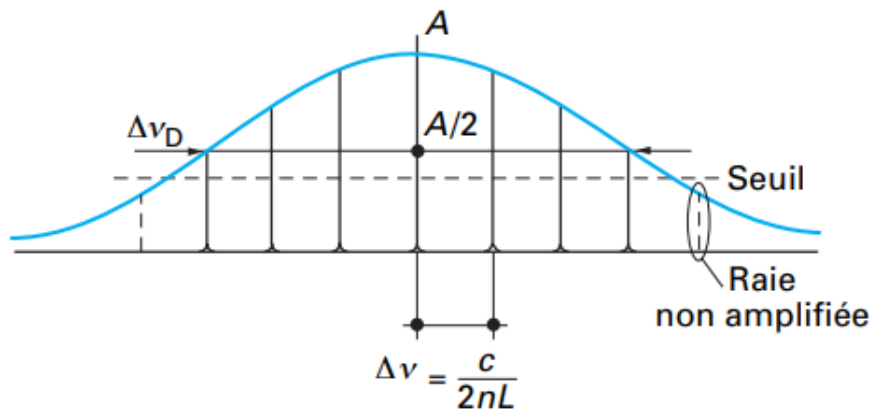


Figure 2.10. Sélection d'un groupe de modes de résonance longitudinaux à l'intérieur de la raie du milieu émissif (ici, raie Doppler d'un gaz, de largeur $\Delta\nu_D$ à mi-hauteur).

Ce filtre, bien connu des opticiens sous le nom d'interféromètre de Fabry-Perot [12,13] reçoit le plus souvent le nom d'*étalon de fréquence* dans le monde des lasers. Placé à l'intérieur de la cavité principale d'un laser à gaz, cet étalon conduit, s'il est bien adapté, à l'émission d'une raie unique d'une très grande finesse ; la longueur de cohérence ℓ peut atteindre des dizaines de mètres et la finesse relative très faible ($\ell = 10m$ correspond à $\delta\nu / \nu = 0.8 \times 10^{-8}$ pour $\lambda = 0.5 \mu m$) est alors totalement à la hauteur de la réputation du laser en tant que source très monochromatique : le fonctionnement est alors de type *monomode longitudinal*.

2.7.3. Modes de résonance transversaux

Dans le paragraphe précédent, nous avons considéré la cavité optique comme monodimensionnelle en ne prenant en compte que les résonances suivant l'axe optique. En réalité, les cavités fonctionnent en volume et les modes de résonance font intervenir les trois dimensions de l'espace [14,12]. Dans le cas général, en présence de surfaces latérales réfléchissantes, ces modes sont nombreux : on les repère par la notation TEM_{mnq} : TEM (Transverse ElectroMagnétique) car les champs électriques et magnétiques constitutifs des ondes lumineuses sont orthogonaux à la direction de propagation ; m et n désignent les ordres des modes résonnants non parallèles à l'axe principal de la cavité ; q désigne l'ordre des modes longitudinaux (le plus souvent non indiqué).

Dans le cas d'un laser, les faces latérales de la cavité étant très peu réfléchissantes, le nombre de modes transversaux demeure très faible ; m et n sont limités à quelques unités.

Effectivement, toute résonance présentant une légère obliquité par rapport à l'axe principal de la cavité sera caractérisée par des pertes importantes (le raisonnement élémentaire et intuitif de l'optique géométrique suggère d'ailleurs facilement qu'après de nombreuses réflexions obliques sur les miroirs avant et arrière, la lumière quittera la cavité par les parois latérales). Contrairement aux modes longitudinaux, les modes transversaux sont directement observables en étalant le faisceau issu de la cavité par une lentille convergente de courte focale : la tache lumineuse ainsi observée sur un écran ne présente une symétrie circulaire que pour le mode TEM_{00} , dans lequel les résonances obliques ne sont pas présentes (Figure 2.11). Ce cas est celui d'une cavité plane idéale, parfaitement réglée, de longueur importante par rapport au diamètre de ses miroirs et pratiquement dépourvue de réflexions sur ses parois latérales ; les lasers à hélium-néon sont, par exemple, très proches de cette configuration [10]. Lorsqu'un mode transversal apparaît, la répartition de lumière observée se dédouble (Figure 2.11) : exemple du mode TEM_{01}). Lorsque les deux dimensions transversales présentent des résonances (m et $n \neq 0$), la répartition se dédouble suivant les deux axes (Figure 2.11 : exemple du mode TEM_{11}). Un moyen simple de faire disparaître ces modes transversaux lorsqu'ils apparaissent consiste à diaphragmer la cavité afin de rendre négligeable son diamètre par rapport à sa longueur ; le volume émissif réel étant alors réduit, la puissance émise est obligatoirement diminuée.

L'ensemble des concepts présentés jusqu'ici, concerne des cavités planes ; en réalité, les configurations retenues sont souvent un peu plus complexes : en effet, toujours en faisant référence aux lois élémentaires et intuitives de l'optique géométrique, il est naturel de proposer l'utilisation de miroirs légèrement concaves, afin de limiter les pertes latérales en confinant mieux l'énergie dans la cavité. Ce raisonnement a donné naissance à de nombreuses géométries qui se distinguent les unes des autres par un subtil compromis entre efficacité, facilité de réglage et stabilité [13] ; quelques exemples, faisant référence à des miroirs sphériques, sont présentés sur la Figure 2.12. Bien que le calcul des cavités de ce type se révèle plus complexe (il fait largement appel à la résolution des équations de Maxwell) [15], retenons que les résultats pratiques restent de même nature, notamment la description de modes sous la forme TEM_{mnq} .

La conclusion la plus importante concerne le mode TEM_{00} : celui-ci est toujours caractérisé par une répartition de lumière axisymétrique, dont le profil radial en intensité (densité de puissance par unité de surface) obéit à une loi gaussienne [16] (Figure 2.11) :

$$I(w) = I_0 e^{-2w^2/w_0^2} \quad (2.26)$$

Le rayon caractéristique w_0 du faisceau, pour lequel l'intensité est divisée par e^2 (≈ 7.4) par rapport au centre, est appelé par convention *rayon à $1/e^2$* . Une intégration élémentaire de la fonction $I(w)$ entre 0 et w_0 montre que la puissance présente dans cette section caractéristique (*section à $1/e^2$*) représente 86.5% de la puissance totale du faisceau.

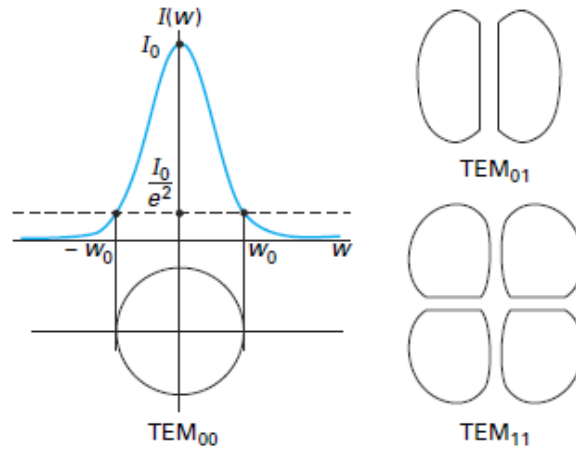


Figure 2.11. Géométrie des modes de résonance transversaux.

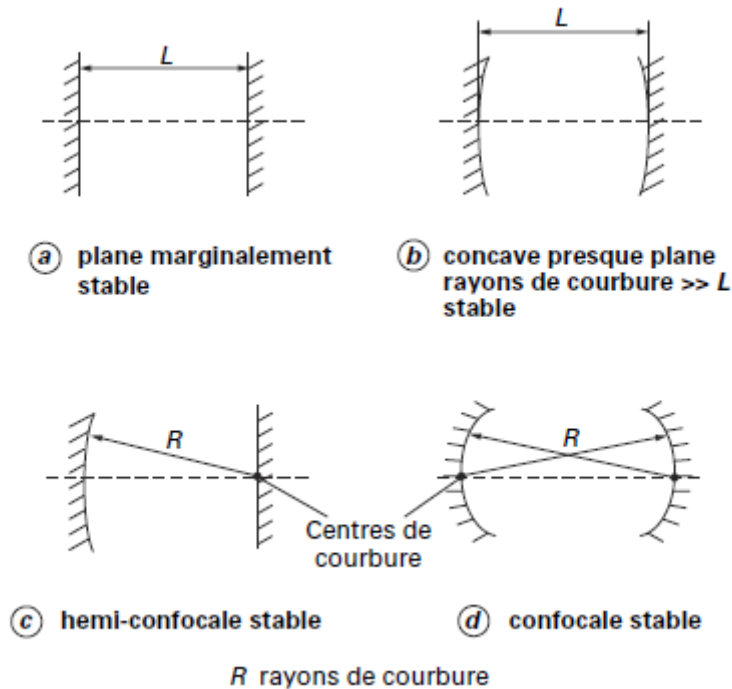


Figure 2.12. Les configurations de cavités résonnantes (courbures fortement exagérées).

2.8. Propriétés du faisceau laser

2.8.1. Cohérence spatiale et divergence

Le concept de cohérence spatiale, présent implicitement dans la description du processus d'émission stimulée peut être précisé de façon très pragmatique : les photons induits sont en phase avec les photons incidents et la direction de propagation est conservée ; de plus, la cavité résonnante impose une directivité de l'émission.

En première approximation, notamment en négligeant les effets de diffraction, on peut donc estimer que le faisceau de lumière émergent est parallèle et que l'onde émise est plane si les miroirs sont eux-mêmes plans ; dans toute section droite de faisceau, on admet alors que la phase de l'onde est identique, cette homogénéité se conservant en aval lors de la propagation. L'image évocatrice de cette propriété, souvent présentée dans la littérature de vulgarisation, est celle d'un régiment de militaires marchant soigneusement au pas et en rangs parfaits, les photons associés à une onde plane jouant le rôle de soldats disciplinés lorsque la propagation est cohérente spatialement. Les photons générés par émission spontanée dans les sources incohérentes spatialement (lampes à incandescence, tubes fluorescents) se présentent au contraire comme une foule déambulant de façon aléatoire sur une place publique ou un marché.

La simple observation d'un faisceau laser à grande distance montre que cette image souffre toutefois d'un petit défaut : l'élargissement du faisceau est la preuve que le parallélisme n'est pas parfait. Une croissance du diamètre généralement voisine de 1 mm/m, indique un angle de divergence proche de 1 mrad. La diffraction d'une onde plane par un diaphragme circulaire dont le diamètre est du même ordre de grandeur que le faisceau en sortie de cavité conduit à un chiffre voisin. L'existence de cette pupille de sortie des lasers est donc rassurante pour la validité des hypothèses simplificatrices de la propagation en ondes quasi-planes.

2.8.2. Propagation en mode gaussien

Une analyse plus fine, menée sur le mode d'émission TEM_{00} , donc à profil gaussien, conduit à une théorie plus élaborée, vérifiée expérimentalement avec une bonne précision pour les lasers actuels [15,16]. Pour une cavité concave ou plan-concave, la lumière est confinée dans un volume présentant une zone de section minimale appelée *cercle de gorge* (Beam Waist ou Cavity Waist). Le rayon de ce cercle est bien sûr le rayon caractéristique à $1/e^2$ défini dans le paragraphe précédent et d'une façon générale, toute limite de faisceau

matérialisée sur un schéma est en fait une courbe caractérisée par l'atténuation de l'intensité à $1/e^2$ (Figure 2.13).

Si l'origine est choisie au centre de ce cercle de gorge, le rayon du faisceau à la distance z s'écrit :

$$w_0^2(z) = w_0^2(0) \left\{ 1 + \left[\frac{\lambda z}{\pi w_0^2(0)} \right]^2 \right\} \quad (2.27)$$

Au voisinage de la cavité, la limite du faisceau n'est donc pas rectiligne. Par ailleurs, le rayon de courbure du front d'onde varie également en fonction de z :

$$R(z) = z \left\{ 1 + \left[\frac{\pi w_0^2(0)}{\lambda z} \right]^2 \right\} \quad (2.28)$$

Dans tout l'espace intra ou extra-cavité, la propagation s'effectue donc sous forme d'ondes sphériques dont le rayon de courbure évolue ; l'onde plane n'existe strictement que dans le plan du cercle de gorge puisque $R(0) \rightarrow \infty$.

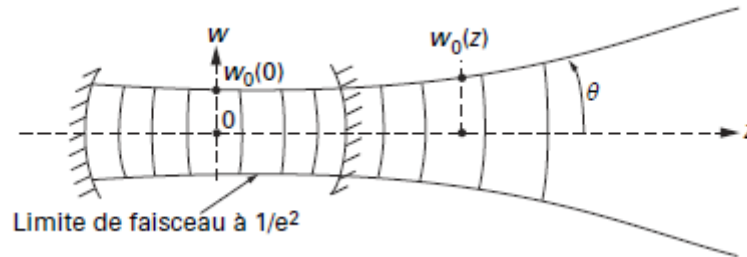


Figure 2.13. Propagation en mode gaussien (TEM_{00}). Exemple d'une cavité concave symétrique.

En pratique, il est intéressant de considérer le champ lointain, caractérisé par les valeurs de z très supérieures à $z_R = \pi w_0^2(0)/\lambda$, appelée *distance de Rayleigh*. Dans ce cas, la limite de faisceau devient rectiligne, puisque $w_0(z)$ évolue suivant une loi linéaire en fonction de z :

$$w_0(z) \approx w_0(0) \frac{z}{z_R} \quad (2.29)$$

Le demi-angle de divergence q est alors déduit simplement de la relation :

$$\tan \theta \approx \frac{w_0(0)}{z_R} \approx \frac{\lambda}{\pi w_0(0)} \quad (2.30)$$

Par ailleurs, l'expression du rayon de courbure du front d'onde se réduit à $R(z) \approx z$, indiquant que le centre de courbure est alors confondu avec le centre du cercle de gorge. Ces deux résultats en champ lointain ne sont pas contradictoires avec ceux de la propagation en ondes quasi-planes, présentés plus haut : l'ordre de grandeur du demi-angle de divergence reste le même et le rayon de courbure de l'onde sphérique étant élevé par définition puisque la condition $z \gg z_R$ est imposée, le front d'onde est peu différent d'un plan. Le domaine d'application stricte de la propagation en mode gaussien, c'est-à-dire sous forme d'ondes sphériques à rayon variable $R(z)$, reste celui du *champ proche* ($z \approx z_R$ ou $z < z_R$). Ce cas n'est pas marginal, puisqu'il correspond souvent à celui de la focalisation du faisceau par un composant optique convergent placé au voisinage de la cavité. Dans de nombreuses applications, le calcul exact de la position et du diamètre de la zone de focalisation (cercle de gorge focalisé) doit prendre en compte les propriétés de l'onde. La connaissance du rayon $w_0(0)$ du cercle de gorge intra-cavité, ainsi que sa position par rapport au miroir de sortie est alors indispensable.

À titre d'exemple, et pour préciser les notions de champ proche et lointain, une cavité émettant au centre du spectre visible ($\lambda = 0.514 \mu\text{m}$ raie verte de l'argon), présentant un rayon $w_0(0)$ de 0.6 mm est caractérisée par une distance de Rayleigh z_R de 2.2 m ; on peut donc admettre que son champ lointain commence au-delà d'une vingtaine de mètres, ce que certains opticiens résument par l'expression suivante : pour une telle cavité, l'infini est au bout du couloir.

2.9. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les principes de base se rapportant au laser et à son fonctionnement. Nous introduit et discuté les niveaux d'énergie de transition, les différents modes de pompages : optique, électronique et chimique, la cavité et l'amplification optiques ainsi que les diverses propriétés du faisceau laser telles que la cohérence, la divergence et la propagation gaussienne. La modélisation mathématique des miroirs de Bragg faisant partie de la cavité optique des lasers fera l'objet du chapitre suivant

Références

- [1] A. Einstein, Zur Quanten Theorie der Strahlung. Phys, Zeit, 18 p. (1917) 121-128.
- [2] F.Bitter, Phys. Rev., (1949)76.
- [3] A. Kastler, J. Phys. Rad.11, (1950)255.
- [4] J.P. Gordon, H.J. Zeiger et C.H. Townes, Phys. rev. 95, (1954)282.
- [5] A.L. Schawlow et C.H. Townes, Infrared and optical masers. Phys. Rev. 112, (1958) 1940- 1949.
- [6] T.H. Maiman, Stimulated optical radiation in ruby, Nature 187, (1960)493-494.
- [7] A.L. Schawlow, Advances in optical masers. Scientific American, 34-35, July 1963.
- [8] N. W. Ashcrof, N. D.Mermin, Physique des solides, Les Ulis, première ed, 2002.
- [9] P. Jacquinot, Optique quantique. Hermant, 63-69, 1966.
- [10] A.Hirth, R. Joecklé, Lasers à gaz et à solides, H 3 271 Traité Sciences fondamentales.
- [11] F. De Coulon, Théorie et traitement des signaux. Ed. Dunod, 1984.
- [12] D.C. O'shea, W.R. Callen et W.T. Rhodes, Introduction aux lasers et à leurs applications, ed. Eyrolles, 1980.
- [13] P.W. Milonni, J.H. Eberly, Lasers, ed. John Wileyand and sons, 1988.
- [14] A. Orszag, Les lasers, ed. Masson, 1968.
- [15] Yu Ananev, Laser resonators and the beam divergence problem. Ed. Adam Hilger, 1992.
- [16] H. Kogelnik, T. Li, Laser Beams and Resonators, Appl. Optics, vol. 5, n° 10, (1966) 1550-67.

Chapitre 3

MODELISATION OPTIQUE

3.1. Introduction

Les miroirs de Bragg sont des structures multicouches particulières. Leur principale propriété est de présenter un facteur de réflexion élevé, pouvant atteindre 100%, sans absorption dans un certain domaine de longueur d'onde. Cette zone de grande réflexion est centrée sur une longueur d'onde du miroir appelée longueur d'onde de Bragg λ_B . Cette propriété est une conséquence de la géométrie de la structure : ce système multicouches est un empilement périodique de couches alternées de deux matériaux, transparents dans la gamme spectral d'intérêt, d'indices différents. Le motif périodique est constitué de deux couches consécutives.

L'empilement est appelée miroir de Bragg lorsque l'épaisseur optique du motif est demi d'onde ou quart d'onde [1].

Ces miroirs peuvent être utilisés pour la fabrication des lasers à émission verticale qui ont de nombreux avantages : leur faisceau est peu divergent, leur intégration sur des dispositifs électroniques est plus facile, leur compacité permet de les utiliser dans des microsystemes [2]. La figure (3.1) représente une cavité laser à émission verticale limitée par deux miroirs de Bragg [3].

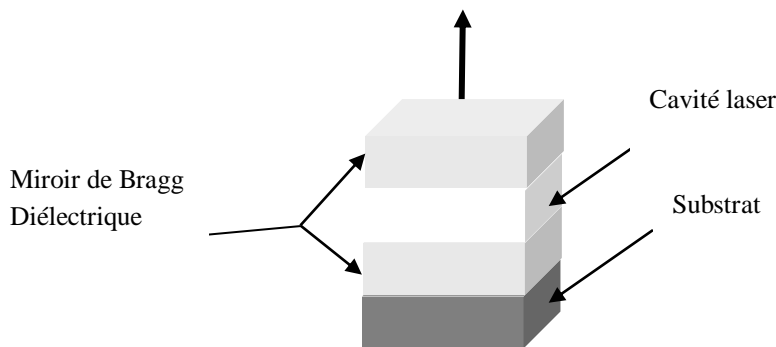


Figure 3.1. Schéma d'une cavité laser à émission verticale.

Dans ce chapitre, on cherche à modéliser le phénomène de réflexion des miroirs de Bragg utilisées dans des diodes laser à émission verticale, dans le but d'avoir une réflexion totale de la lumière incidente i.e. un facteur de réflexion qui tend vers les 100%.

Pour ce faire, nous avons opté pour l'utilisation de la méthode des matrices caractéristiques. La méthode traditionnelle pour obtenir des fonctions optiques particulières consiste à empiler des couches d'indices de réfraction différents avec des épaisseurs adaptées. Ceci est aussi possible par l'utilisation de films inhomogènes d'indice de réfraction variable en fonction de l'épaisseur [4,5].

Nous rappelons dans ce chapitre les principes de base qui gouvernent la propagation des ondes électromagnétiques dans les milieux stratifiés. Nous décrivons d'une part un modèle qui permet le calcul des propriétés optiques des milieux stratifiés et d'autre part, nous présentons une méthode approximative qui permet la détermination de la loi de dispersion des milieux inhomogènes. Cela permettrait de simuler le comportement optique des films inhomogènes pour différents profils d'indice correspondant au cas où nos matériaux contiendraient des points quantiques (quantum dots).

3.2. Milieu homogène

3.2.1. Ondes planes progressives

Comme tout phénomène électromagnétique en général, les ondes lumineuses sont gouvernées par les quatre équations de Maxwell [6]. Dans un milieu homogène, isotrope, non magnétique, de constante diélectrique complexe ϵ_r et en l'absence de sources, elles s'écrivent en unité SI [7].

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E} &= \mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, & \nabla \cdot \mathbf{E} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{H} &= \epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, & \nabla \cdot \mathbf{H} &= 0 \end{aligned} \quad (3.1)$$

où l'on désigne par \mathbf{E} et \mathbf{H} les champs électrique et magnétique, et où ϵ_0 et μ_0 représentent la permittivité électrique et la perméabilité magnétique du vide.

Nous nous bornerons à exprimer les relations à venir en fonction du champ électrique, dont l'équation d'onde (résulte de la combinaison des équations (3.1))

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu_0 \epsilon_0 \epsilon_r \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (3.2)$$

qui admet comme solutions des ondes planes de la forme [8] :

$$E(\mathbf{r}, t) = E \exp [i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)] \quad (3.3)$$

de longueur d'onde dans le vide $\lambda = 2\pi c/\omega$, de fréquence $\nu = \omega/2\pi$, et dont le vecteur d'onde \mathbf{k} dirigé suivant la direction de propagation est défini de telle sorte que (E, H, \mathbf{k}) soit un trièdre direct. \mathbf{k} est lié à ω par la relation :

$$\mathbf{k} = n \frac{\omega}{c} \quad (3.4)$$

où $n = \sqrt{\epsilon_r}$ et $c = 1/\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}$, n étant l'indice de réfraction.

Les ondes planes revêtent une importance particulière dans la mesure où elles constituent une base commode sur laquelle peut être développée toute onde électromagnétique. En outre, les équations qui régissent leur comportement à l'interface de deux milieux sont simples et peuvent être résolues rigoureusement [7].

3.2.2. Réflexion à l'interface de deux milieux homogènes

Considérons l'interface entre deux milieux semi-infinis: le milieu ambiant d'indice \tilde{n}_1 et un matériau isotrope d'indice complexe \tilde{n}_2 tel qu'il est représenté par la Figure (3.1). L'indice optique est défini par sa partie réelle n_2 et sa partie imaginaire k_2 , respectivement appelées indice de réfraction et coefficient d'extinction.

$$\tilde{n}_2 = n_2 - i k_2 \quad (3.5)$$

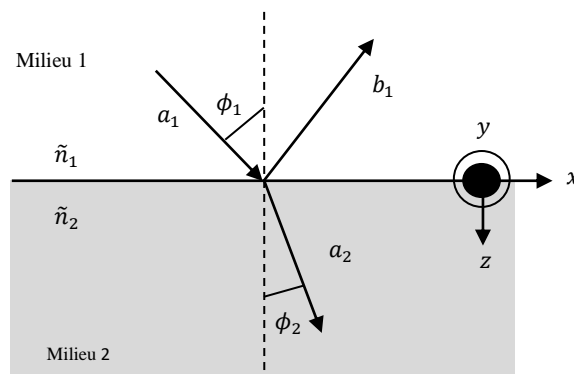


Figure 3.2. Réflexion d'une onde sur une surface (chaque flèche représente un vecteur d'onde). Les amplitudes des champs électriques associés sont indiquées près de chaque flèche.

ϕ_1 est l'angle d'incidence et ϕ_2 est l'angle de réfraction. Ces angles sont repérés par rapport à la normale à la surface. La loi de Snell-Descartes relie les angles et les indices entre eux :

$$\tilde{n}_1 \sin \phi_1 = \tilde{n}_2 \sin \phi_2 \quad (3.6)$$

Le plan d'incidence est défini par l'axe de propagation de l'onde incidente et la normale à la surface du matériau. Les composantes du vecteur champ électrique (E) sont définies par rapport à ce plan. Les composantes parallèle et perpendiculaire au plan sont indicées respectivement par TE (Transverse Electrique) lorsque E est le long de y et TM (Transverse Magnétique) lorsque E est dans le plan (x,z) . L'état de polarisation d'une onde TE ou TM n'est pas modifié après réflexion.

Dans la mesure où notre système est invariant selon les deux directions x et y , les conditions aux limites doivent être satisfaites à tout instant et sur toute l'interface. Ceci impose les mêmes variations spatiale et temporelle du champ électrique en tout point du plan (x,y) , donc la conservation des composantes tangentielles des vecteurs d'onde [9]. Aussi, nous pouvons écrire l'amplitude du champ électrique sous la forme $E(r,t) = E(z) \exp[i(k_x x + k_y y - \omega t)]$, et dans chaque milieu i , $E(z)$ peut s'écrire comme la somme de deux ondes se propageant dans le sens positif $+z$ (\uparrow) ou négatif $-z$ (\downarrow), selon

$$E_i(z) = E_{i\uparrow} \exp(+ik_{z,i}z) + E_{i\downarrow} \exp(-ik_{z,i}z) = \begin{pmatrix} E_{i\uparrow} \\ E_{i\downarrow} \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Les conditions de continuité des champs électromagnétiques permettent de relier les valeurs des amplitudes de part et d'autre de l'interface.

- En polarisation TE

$$\begin{aligned} (E_{1\uparrow} + E_{1\downarrow}) &= (E_{2\uparrow} + E_{2\downarrow}), \\ k_{z,1}(E_{1\uparrow} + E_{1\downarrow}) &= (E_{2\uparrow} + E_{2\downarrow})k_{z,2} \end{aligned} \quad (3.8)$$

• En polarisation TM

$$\begin{aligned} (E_{1\uparrow} + E_{1\downarrow})k_{z,1}/k_1 &= (E_{2\uparrow} + E_{2\downarrow})k_{z,2}/k_2 \\ k_1(E_{1\uparrow} + E_{1\downarrow}) &= (E_{2\uparrow} + E_{2\downarrow})k_2 \end{aligned} \quad (3.9)$$

Le coefficient de réflexion en amplitude est égal au rapport du champ réfléchi sur le champ incident :

$$r = \frac{E_{1\downarrow}}{E_{1\uparrow}} \quad (3.10)$$

A partir des équations (3. 8) et (3. 9) ce coefficient de réflexion est égal pour la polarisation TE et TM respectivement à :

$$\begin{aligned} r_{12TE} &= \frac{\tilde{n}_2 \cos \Phi_1 - \tilde{n}_1 \cos \Phi_2}{\tilde{n}_2 \cos \Phi_1 + \tilde{n}_1 \cos \Phi_2} \\ r_{12TM} &= \frac{\tilde{n}_1 \cos \Phi_1 - \tilde{n}_2 \cos \Phi_2}{\tilde{n}_1 \cos \Phi_1 + \tilde{n}_2 \cos \Phi_2} \end{aligned} \quad (3.11)$$

3.3. Systèmes multicouches

Le principe de fonctionnement des systèmes multicouches est basé sur les interférences multiples qu'une onde subit quand elle est réfléchiée par différentes interfaces [10]. Ceci permet à ces systèmes de présenter des propriétés optiques très différentes selon le type d'empilement [11].

Dans ce qui suit, nous allons décrire le formalisme permettant de calculer les propriétés optiques d'une structure donnée. Plus particulièrement, nous nous intéressons à la détermination du facteur de réflexion dans la gamme des longueurs d'onde utiles, sous incidence normale et oblique. Ces calculs sont fondés sur la résolution des équations de Maxwell dans le cadre d'un formalisme matriciel. Ils peuvent être effectués par l'une des deux méthodes dont la différence se situe dans la description des champs [12]:

- La méthode ellipsométrique : elle exprime l'amplitude du champ réfléchi en fonction du champ incident, en distinguant la propagation à travers les interfaces et la propagation dans les couches (matrice interface et matrice propagation).
- La méthode des matrices caractéristiques: elle considère l'évolution des champs électromagnétiques E et H en fonction de leur position dans la structure. La propagation est appréhendée globalement dans la couche : elle est représentée par une seule matrice appelée matrice caractéristique. Le champ réfléchi est ensuite calculé à partir du champ global.

Dans nos calculs, nous avons utilisé cette dernière méthode en raison de la simplicité des formules qu'elle propose. En outre, cette méthode est classique et fréquemment utilisée dans la littérature [13-15]. Nous rappelons par ailleurs qu'une comparaison entre les deux méthodes pour des cas simples a été faite par Callard [12].

3.3.1. Description du modèle proposé

Pour la détermination du comportement des couches à gradient d'indice de réfraction, la couche est divisée en sous couches homogènes paramétrées par un indice de réfraction et une épaisseur [5,16-18]. Par conséquent, une couche à gradient d'indice est équivalente à un empilement multicouche. De ce fait, la théorie optique des milieux stratifiés est utilisée pour le calcul du facteur de réflexion des films à gradient d'indice de réfraction.

La théorie optique des milieux stratifiés suppose que la structure étudiée est composée d'un empilement de couches homogènes, isotropes à face planes et parallèles (Figure 3.3).

Dans ce qui suit, on indiquera par j , la $j^{\text{ième}}$ couche à partir de la surface. Le substrat est considéré comme un milieu semi-infini dont l'indice est connu et noté \tilde{n}_S .

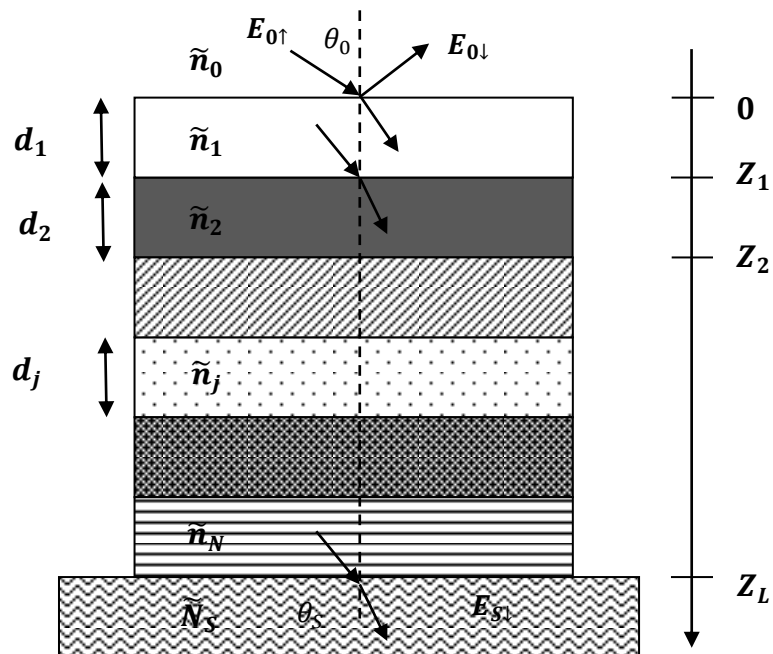


Figure 3.3. Empilement de N couches utilisées comme revêtement anti-réfléchissant.

Dans ces conditions, deux paramètres sont suffisants pour définir les propriétés optiques d'une couche : son indice complexe de réfraction \tilde{n}_j (donné par l'équation (3.5)) et son épaisseur d_j .

Quand les matériaux sont dispersifs et absorbants \tilde{n}_j dépend de la longueur d'onde λ . Cette dépendance devra être prise en compte dans le calcul des propriétés optiques de la structure multicouche.

De tels systèmes sont caractérisés par leur facteur de réflexion $R(\lambda)$, leur facteur de transmission $T(\lambda)$ et leur facteur d'absorption $A(\lambda)$. Ces facteurs font intervenir des rapports d'énergie et vont dépendre de la longueur d'onde de la lumière incidente sur la structure. La lumière incidente est représentée par une onde plane électromagnétique caractérisée par le champ électrique de l'équation (3.3) ou le champ physique est constitué par sa partie réelle soit :

$$\vec{E} = \vec{E}_0 \cos(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r}) \text{ avec } \vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda} \tilde{n}_0 \vec{e}_z \text{ ou :}$$

- ω est la pulsation de l'onde ;
- λ est la longueur d'onde dans le vide ;
- \vec{k} est le vecteur d'onde dans le milieu ambiant ;
- \vec{e}_z est le vecteur unitaire dans la direction de propagation ;
- \vec{E}_0 est un vecteur perpendiculaire à la direction de propagation ;
- \tilde{n}_0 est l'indice du milieu ambiant.

L'axe de propagation est défini par l'axe z . L'origine des coordonnées, $z = 0$, est à la surface de la structure. Chaque interface entre la couche j et $j+1$ est repérée par l'abscisse z_j .

Notre objectif est de calculer le facteur de réflexion de nos miroirs de Bragg sous incidence normale et oblique.

3.3.2. Calcul des propriétés optiques des milieux stratifiés

A la surface d'une structure stratifiée, la lumière réfléchi est le résultat de l'interférence entre toutes les ondes réfléchies à chaque interface de la structure.

La méthode de calcul est fondée sur la théorie de la propagation dans les milieux stratifiés [19]. Elle exprime le champ électrique E et le champ magnétique H à la surface de la structure ($z = 0$) en fonction des champs E et H à l'interface structure/substrat ($z = z_N$).

Dans le cas d'une onde se propageant dans un milieu matériel d'indice \tilde{n}_1 . La résolution des équations de Maxwell montre que les relations entre les champs à la cote $z = 0$ et les champs à la cote z_1 peut être représentée matriciellement par :

$$\begin{pmatrix} E(0) \\ Z_0 H(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \delta & -ip^{-1} \sin \delta \\ -ip \sin \delta & \cos \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(z) \\ Z_0 H(z) \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

où Z_0 est l'impédance du vide donnée par :

$$Z_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \quad (3.13)$$

δ est le déphasage de l'onde dû à la traversée de la couche.

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} \tilde{n}_1 z_1 \cos \phi \quad (3.14)$$

p est l'admittance optique, si le champ électrique est dans le plan d'incidence (polarisation TE).

$$p = \tilde{n} \cos \phi \quad (3.15)$$

Lorsqu'il est perpendiculaire au plan d'incidence (polarisation TM), cette polarisation est égale à :

$$p = \frac{\tilde{n}}{\cos \phi} \quad (3.16)$$

La matrice (2x2) de l'équation (3.12) est appelée matrice caractéristique du milieu, $M(z)$:

$$M(z) = \begin{pmatrix} \cos \delta & -ip^{-1} \sin \delta \\ -ip \sin \delta & \cos \delta \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Dans le cas de deux milieux matériels adjacents s'étendant respectivement de $z = 0$ à $z = z_1$, et de $z = z_1$ à $z = z_2$, d'indice \tilde{n}_1 et \tilde{n}_2 , les relations entre les champs sont données par :

$$\begin{pmatrix} E(0) \\ Z_0 H(0) \end{pmatrix} = M(z_1) \begin{pmatrix} E(z_1) \\ Z_0 H(z_1) \end{pmatrix} \text{ et } \begin{pmatrix} E(z_1) \\ Z_0 H(z_1) \end{pmatrix} = M(z_2 - z_1) \begin{pmatrix} E(z_2) \\ Z_0 H(z_2) \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

Les champs E et H sont tangents aux interfaces, et donc continus lors de la traversée des interfaces. Il est alors possible d'écrire la relation entre les champs sous la forme :

$$\begin{pmatrix} E(0) \\ Z_0 H(0) \end{pmatrix} = M(z_1) M(z_2 - z_1) \begin{pmatrix} E(z_2) \\ Z_0 H(z_2) \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

En ce qui concerne, la structure définie par la Figure 3.2, chaque couche peut être représentée par une matrice M_j (d_j) et la relation entre les champs à la surface de la structure ($z = 0$) et à l'interface structure/substrat est la suivante :

$$\begin{pmatrix} E(0) \\ Z_0 H(0) \end{pmatrix} = \prod_{j=1}^N \begin{pmatrix} \cos \delta_j & -ip_j^{-1} \sin \delta_j \\ -ip_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(z_N) \\ Z_0 H(z_N) \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

avec

$$\delta_j = \frac{2\pi}{\lambda} \tilde{n}_j d_j \cos \phi_j$$

tel que ϕ_j et ϕ_0 sont liés par la loi de Snell-Descartes : $\tilde{n}_0 \cos \phi_0 = \tilde{n}_j \sin \phi_j$ et

$$p_j = \begin{cases} \tilde{n}_j \cos \phi_j & \text{en polarisation TE} \\ \frac{\tilde{n}_j}{\cos \phi_j} & \text{en polarisation TM} \end{cases}$$

L'équation (3.20) permet de calculer le facteur de réflexion de l'empilement. Le calcul fait intervenir le rapport des amplitudes du champ incident et du champ réfléchi. Chaque champ $E(z_j)$ et $H(z_j)$ peut être interprété comme la superposition dans le $j^{\text{ième}}$ milieu d'un champ

incident noté $E_{j\uparrow}$ et d'un champ réfléchi noté $E_{j\downarrow}$. En rappelant que, d'après les équations de Maxwell :

$$H = \frac{p}{Z_0} \vec{e}_z \wedge E \quad (3.21)$$

et en appliquant les conditions de continuités des champs tangents aux interfaces, on obtient :

$$\begin{cases} E_{j\uparrow} + E_{j\downarrow} = E(Z_j) \\ E_{j\uparrow} - E_{j\downarrow} = \frac{Z_0}{p} H(Z_j) \end{cases} \quad (3.22)$$

L'équation (3.22) peut s'écrire sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} E_{j\downarrow} \\ E_{j\uparrow} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{p_j} \\ 1 & \frac{1}{p_j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(Z_j) \\ Z_0 H(Z_j) \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

A la surface ($z = 0$) le champ incident et le champ réfléchi vérifient la relation (3.23)

$$\begin{pmatrix} E_{0\downarrow} \\ E_{0\uparrow} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{p_0} \\ 1 & \frac{1}{p_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(0) \\ Z_0 H(0) \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

Le coefficient de réflexion en amplitude tel qu'il était déjà défini au paragraphe 3.2.2 est égal au rapport du champ réfléchi sur le champ incident (voir équation 3.10). Ce champ peut être calculé en combinant les équations 3.20 et 3.24.

$$\begin{pmatrix} E_{0\downarrow} \\ E_{0\uparrow} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{p_0} \\ 1 & \frac{1}{p_0} \end{pmatrix} \prod_{j=1}^N \begin{pmatrix} \cos \delta_j & -ip_j^{-1} \sin \delta_j \\ -ip_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(z_N) \\ Z_0 H(z_N) \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

Or, d'après l'équation (3.21), H est relié à E dans le substrat ($z = z_N$) par :

$$Z_0 H(z_N) = p_s E(z_N)$$

L'équation (3.25) devient alors :

$$\begin{pmatrix} E_{0\downarrow} \\ E_{0\uparrow} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{p_0} \\ 1 & \frac{1}{p_0} \end{pmatrix} \prod_{j=1}^N \begin{pmatrix} \cos \delta_j & -ip_j^{-1} \sin \delta_j \\ -ip_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E(z_N) \\ p_s E(z_N) \end{pmatrix} \quad (3.26)$$

Le rapport des champs $E_{0\downarrow}$ et $E_{0\uparrow}$ de l'équation (3.26) permet de calculer aisément r le coefficient de réflexion en amplitude. Le facteur de réflexion polarisée se calcule directement par la relation :

$$\mathfrak{R} = r r^* \quad (3.27)$$

\mathfrak{R} est différent pour la polarisation TE et TM, respectivement, sous incidence oblique. Dans le cas d'une lumière non polarisée, le facteur de réflexion total R est donc à moitié dû à la polarisation TE et à moitié dû à la polarisation TM.

$$R = 0.5 \mathfrak{R}_{TE} + 0.5 \mathfrak{R}_{TM} \quad (3.28)$$

3.4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons dérivé les modèles mathématiques permettant de décrire le coefficient de réflexion ou réflectivité dans le cas des milieux homogènes où nous avons déterminé la réflectivité à l'interface entre ces milieux, puis dans le cas des milieux stratifiés qui correspondent au cas des miroirs de Bragg auxquelles nous nous intéressons dans le présent travail. Nos miroirs de Bragg étant constitués d'empilements périodiques de matériaux ZnMgSe/ZnCdSe, nous présenterons dans le chapitre suivant les propriétés de ces matériaux avant de passer à celles de nos miroirs de Bragg.

Références

- [1] Hand book of Optical constants of solids, éd E.D.Palik, academic press Handbook Series, Orlando, (1985).
- [2] F.Lakhdari, Monte Carlo simulation and study of the ionic implantation, Mémoire de Magister, ENSEP Oran, 2000.
- [3] P.Surmely, la fibre optique technologie et applications ”, éd. Masson 1995.
- [4] P. Fauchet, Porous polycrystalline silicon thin film solar cells, Subcontractor Report, NREL, Octobre 2003.
- [5] J. Rivory, Characterization of inhomogeneous dielectric films by spectroscopic ellipsometry, Thin solid films n° 313-314, (1998) 333-340.
- [6] R.M.A. Azzam, N.M. Bashara, Ellipsometry and polarized light, North-Holland, Amsterdam, 1989.
- [7] P. Ferrand, Structure guidantes à bande interdite photonique à base de silicium nanoporeux, Thèse de Doctorat, Université de Grenoble France, 2001.
- [8] J.P. Faroux, J. Renault, Optique, ed. Dunod, 1998.
- [9] Waves in media <http://web.umn.edu/~hale/courses/423/Chapter2.pdf>
- [10] S. Setzu, Réalisation et étude de structures à modulation d’indice optique en silicium poreux, Thèse de Doctorat, Université de Grenoble France, 1999.
- [11] E. Pelletier, La réalisation des systèmes optiques de surface, Systèmes optiques, Ecole d’été – Institut d’études scientifiques de Cargèse – France, Vol. I, 1991.
- [12] A.S. Callard, Elaboration et caractérisation de couches diélectriques pour l’optique, Thèse de Doctorat, Ecole Centrale de Lyon France, 1996.
- [13] M. Orgeret, Les piles solaires - le composant et ses applications, ed. Masson, 1985.
- [14] J. Zhao, M.A. Green, Optimized antireflection coatings for high-efficiency solar cells, IEEE Trans. Elect. Dev, Vol.38, N°8, (1991)1925-1934.
- [15] P.Nubile, Analytical design of antireflection coatings for silicon photovoltaic devices, Thin solid films N° 342, (1999)257-261.
- [16] K.Chopra, Solar selective coatings, 3rd work shop on thin films physics and technology proceeding, New Delhi – Inde, 1999.
- [17] P. G. Snyder, Y. Xiong, A. Woollam, G. A. Al-Jumaily and F. J. Gagliardi, Greded refractive index silicon oxynitride thin film characterized by spectroscopic

- ellipsometry , J. Vac. Sci. Technol. A, Vol.10, N° 4, (1992)1462-1466.
- [18] H. Bartzsch, S. Lange, P. Frach and K. Goedicke, Graded refractive index layer systems for antireflective coatings and rugate filters deposited by reactive pulse magnetron sputtering , Surf. Coat. Techn. N° 180-181, (2004)616-620.
- [19] M.Born and E.Wolf, Principles of optics, Pergamon Press, 1970.

Chapitre 4

PROPRIETES OPTOELECTRONIQUES DES ALLIAGES TERNAIRES ZnMgSe ET CdMgSe

4.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous allons présenter l'essentiel de nos résultats de simulation des propriétés électroniques et optiques des alliages semiconducteurs ternaires $Zn_{1-x}Mg_xSe$ et $Cd_{1-x}Mg_xSe$ dans la phase zinc blende, en fonction de la concentration x . Ces résultats sont obtenus en utilisant la méthode empirique du pseudopotentiel (EPM) [1] connue pour sa grande précision et son faible coût computationnel. Notre objectif principal est de montrer comment vont varier les différentes grandeurs étudiées en fonction de la concentration x du prise dans l'intervalle 0-1. Nous rappelons que contrairement à la majorité des études entreprises sur les alliages semiconducteurs où le paramètre de maille de l'alliage est calculé comme étant la moyenne linéaire de ceux correspondant aux composés parents, notre étude prend l'effet du bowing du paramètre de maille du $Zn_{1-x}Mg_xSe$. Ceci confère à nos résultats une qualité meilleure. Pour le $Zn_{1-x}Cd_xSe$ l'interpolation linéaire est mise en œuvre pour la détermination du paramètre de maille.

4.2. Propriétés électroniques et optiques

4.2.1. 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 4.1. 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

$x \leq 0.5$, 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. [2,3].

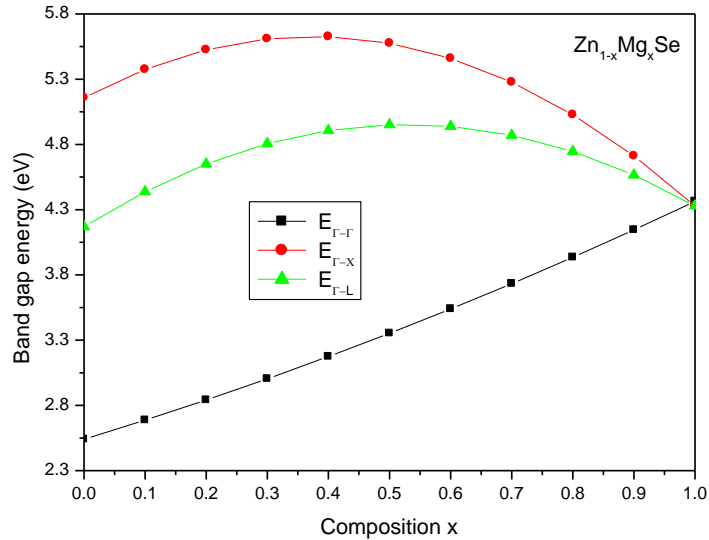


Figure 4.1. Variation des gaps direct $E_{\Gamma-\Gamma}$ et indirects $E_{\Gamma-X}$ et $E_{\Gamma-L}$ en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.

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 4.2. 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.

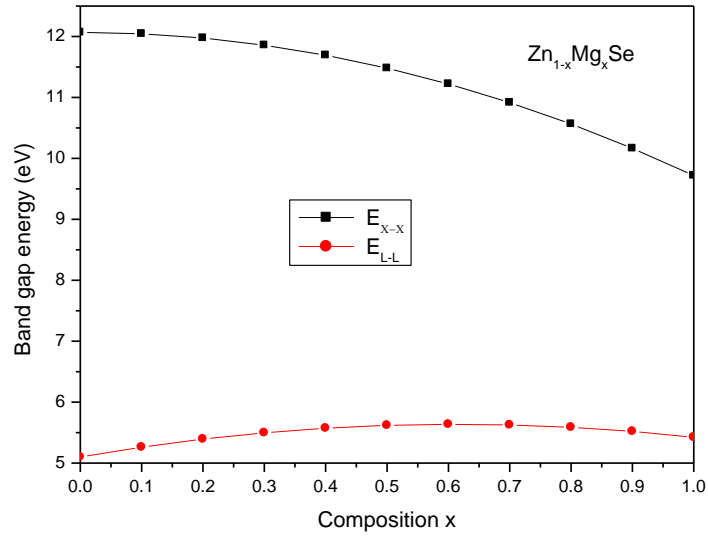


Figure 4.2. Variation des gaps E_{X-X} et E_{L-L} en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.

4.2.2. 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 4.3. 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.

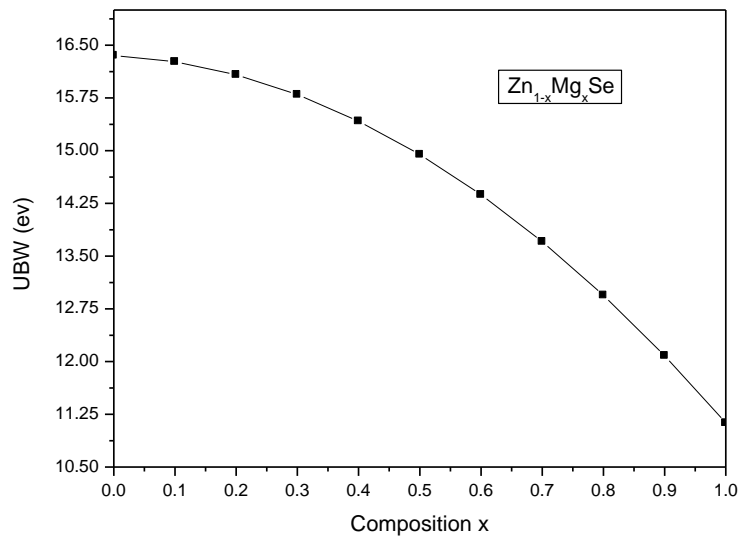


Figure 4.3. Variation de la largeur de la bande de valence en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.

4.2.3. 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. [4] comme une mesure qualitative de l'ionicté du cristal. En effet, il augmente avec la croissance de l'ionicté ou du transfert de charge. Ceci a été confirmé pour plusieurs semiconducteurs IV-IV, III-V et II-VI [5-7].

La Figure 4.4 montre que ce gap antisymétrique dans le $Zn_{1-x}Mg_xSe$ diminue à mesure que la composition x augmente indiquant par conséquent une diminution de l'ionicté de notre matériau. Ce résultat a pu être prédit à partir du comportement de la largeur de la bande de valence.

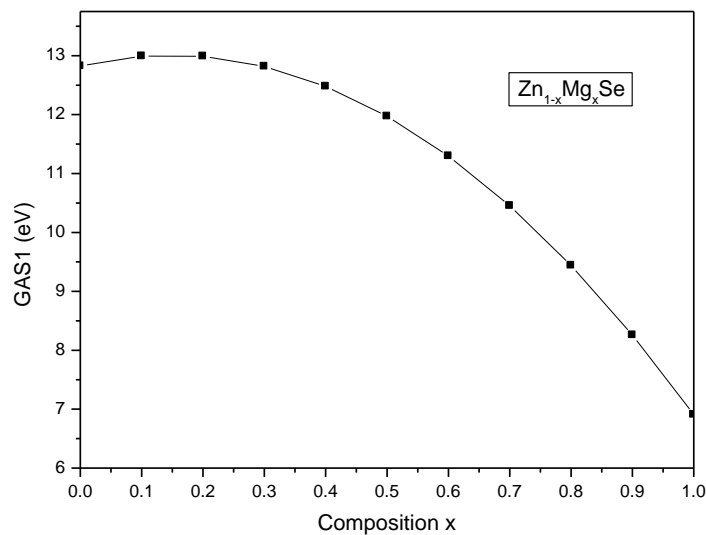


Figure 4.4. Variation du gap antisymétrique en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.

4.2.4. 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.

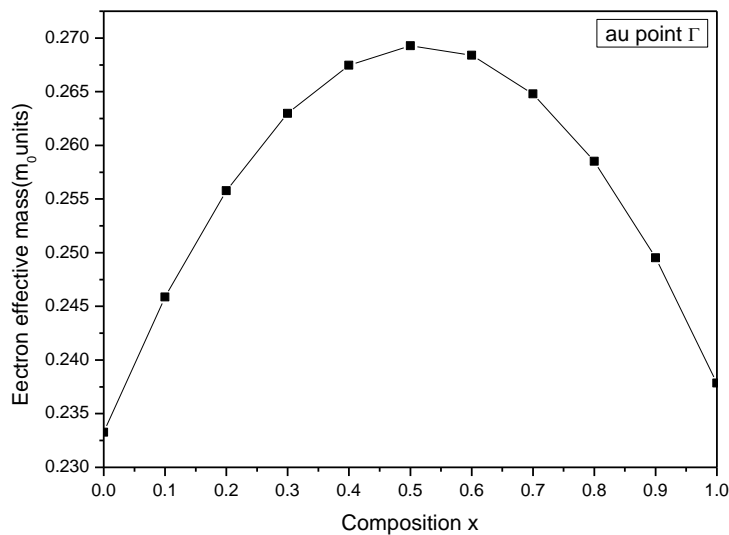
Théoriquement la masse effective est généralement un tenseur de rang 2 et dépend donc de la direction. Cependant, si l'on considère l'approximation des bandes paraboliques,

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 [8] :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{4\pi}{h^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \quad (4.1)$$

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 4.5. 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.



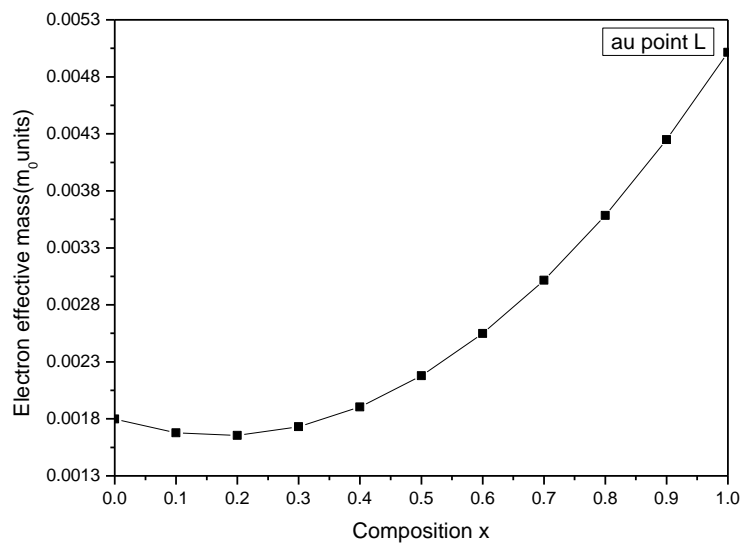
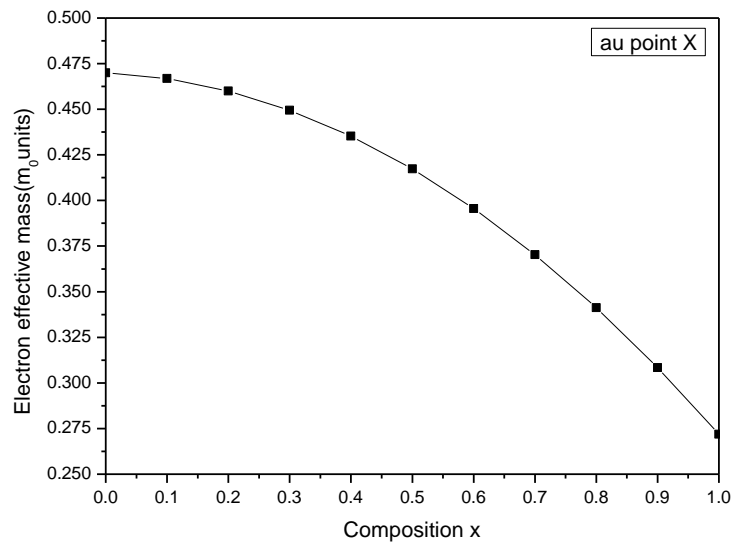


Figure 4.5. Variation de la masse effective des électrons (en unité de m_0) en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$ aux points de haute symétrie Γ , X et L.

La masse effective des trous lourds au centre de la zone de Brillouin a été examinée et représentée sur la Figure 4.6. Cette masse effective augmente d'abord pour x entre 0 et 0.2 puis diminue pour x entre 0.2 et 1.

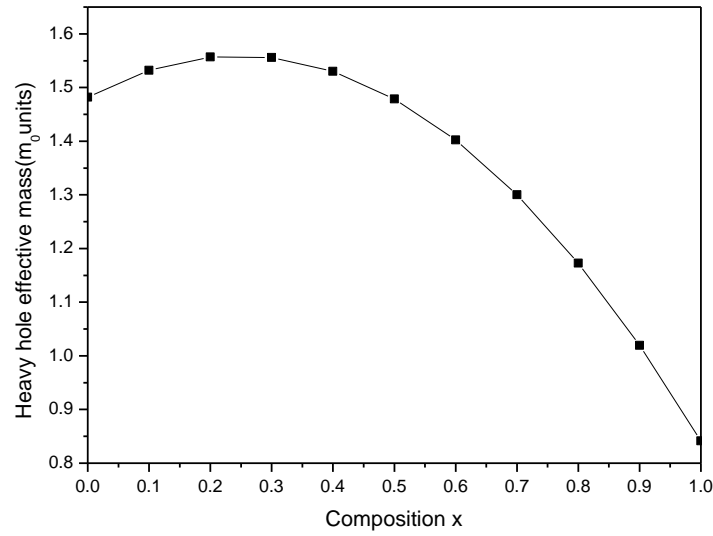


Figure 4.6. Variation de la masse effective des trous lourds (en unité de m_0) en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.

4.2.5. 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 [9] :

$$n = \sqrt{1 + \left(\frac{A}{E_g + B} \right)^2} \quad (4.2)$$

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 [10,11].

La Figure 4.7 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.

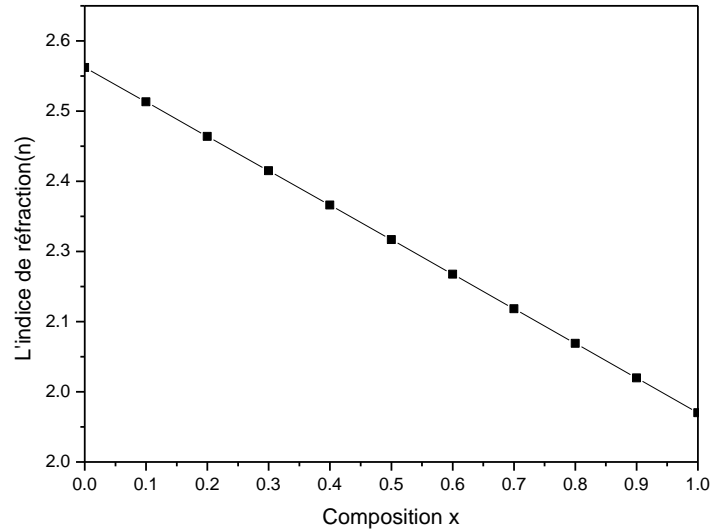


Figure 4.7. Variation de l'indice de réfraction en fonction de la composition x du $Zn_{1-x}Mg_xSe$.

4.2.6. 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 [12] :

$$\epsilon_\infty = n^2 \tag{4.3}$$

Quant à la constante diélectrique statique ϵ_0 , elle est reliée à celle de haute fréquence à travers le modèle de Harrison [12] :

$$\frac{\epsilon_0 - 1}{\epsilon_\infty - 1} = 1 + \nu \tag{4.4}$$

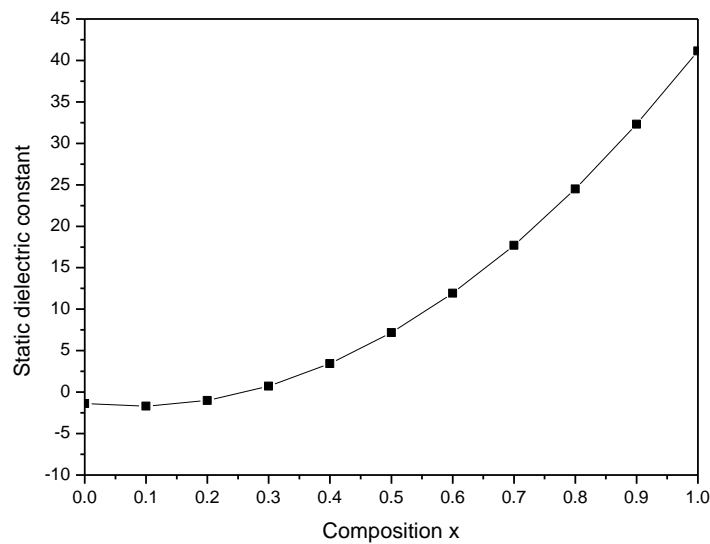
Où

$$\nu = \frac{\alpha_p^2(1+2\alpha_c^2)}{2\alpha_c^4} \quad (4.5)$$

α_p et α_c étant respectivement la polarité et la covalencité du matériau reliées par [12] :

$$\alpha_c^2 = 1 - \alpha_p^2 \quad (4.6)$$

La Figure 4.8 illustre le comportement des constantes diélectrique statique 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.



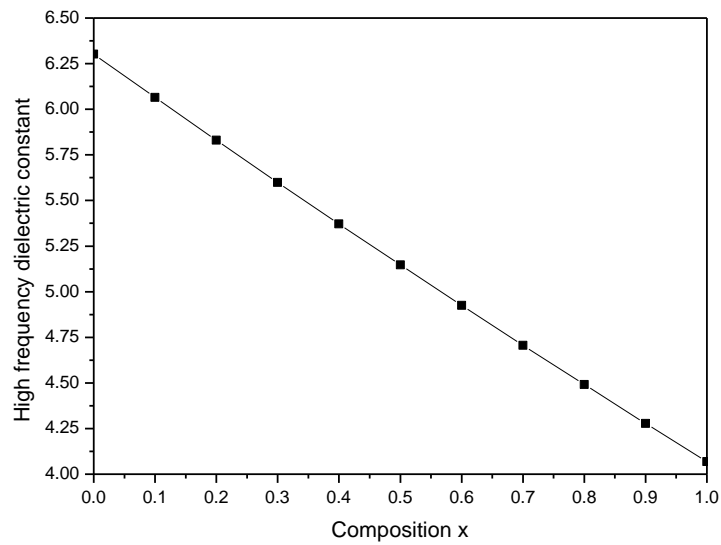


Figure. 4.8. Variation des constantes diélectriques statiques et de haute fréquence en fonction de la composition x du $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Se}$.

4.3. Propriétés électroniques et optiques

4.3.1. Gaps d'énergie

Le gap direct $E_{\Gamma-\Gamma}$ de l'alliage ternaire $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ diminue lorsque la concentration x de Cd augmente de 0 à 1. Par contre les gaps indirects $E_{\Gamma-X}$ et $E_{\Gamma-L}$ augmentent à mesure que la concentration x augmente. La Figure 4.9. montre l'évolution des gaps considérés pour des concentrations de Cd variant de 0 à 1. Notre alliage est à gap direct pour les concentrations $0 \leq x \leq 1$. Pour $x=0$, i.e. pour le ZnSe, on obtient $E_{\Gamma-\Gamma} = 2.71$ eV, $E_{\Gamma-X}=3.17$ eV et $E_{\Gamma-L}=3.79$ eV en très bon accord avec les valeurs expérimentales 2.70 eV, 3.18 eV et 3.31 eV [13,14]. Pour le CdSe, on obtient $E_{\Gamma-\Gamma} = 1.69$ eV, $E_{\Gamma-X}=3.87$ eV et $E_{\Gamma-L}=3.61$ eV en très bon accord avec les valeurs expérimentales 1.69 eV, 3.87 eV, et 3.61 eV [15,16].

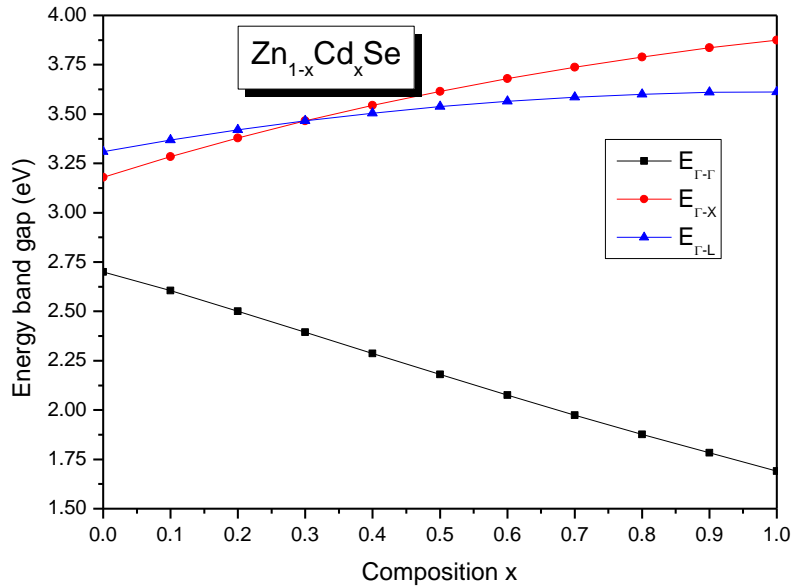


Figure 4.9. Gaps d'énergie direct $E_{\Gamma-\Gamma}$ et indirects $E_{\Gamma-X}$ et $E_{\Gamma-L}$ du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.

La Figure 4.10 montre la variation des gaps E_{X-X} et E_{L-L} de l'alliage $Zn_{1-x}Cd_xSe$ en fonction de la composition x variant elle-même de 0 à 1. Ces deux gaps augmentent non-linéairement lorsque la composition x augmente de 0 à 1.

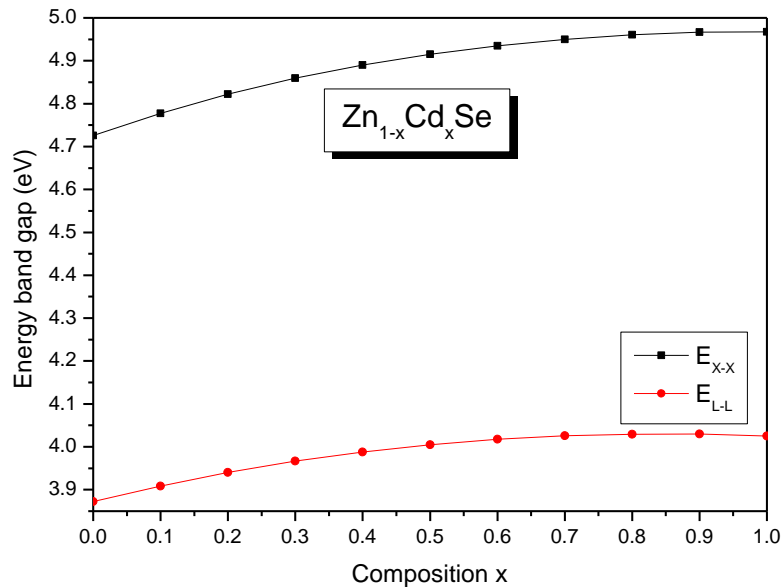


Figure 4.10. Gaps E_{X-X} et E_{L-L} du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.

4.3.2. Gap antisymétrique

Le gap antisymétrique antisymétrique a été calculé pour notre alliage $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende et tracé en fonction de la composition de Cd allant de 0 à 1 dans la Figure 4.11. Ce gap augmente de façon monotone à mesure que la composition x augmente de 0 à 1. L'on peut déduire alors que l'ionicité de notre alliage augmente à mesure que l'on s'éloigne du ZnSe vers CdSe.

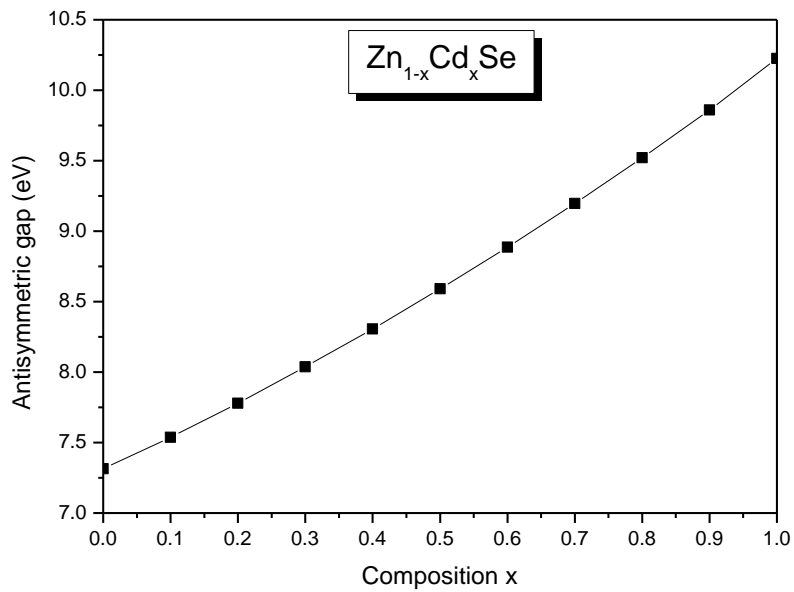


Figure 4.11. Gap antisymétrique du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.

4.3.3. Largeur de la bande de valence

La variation de la largeur de la bande de valence de notre matériau avec la composition x de Cd est illustrée par la Figure 4.12. Elle augmente de façon monotone avec l'augmentation de la composition x de 0 à 1.

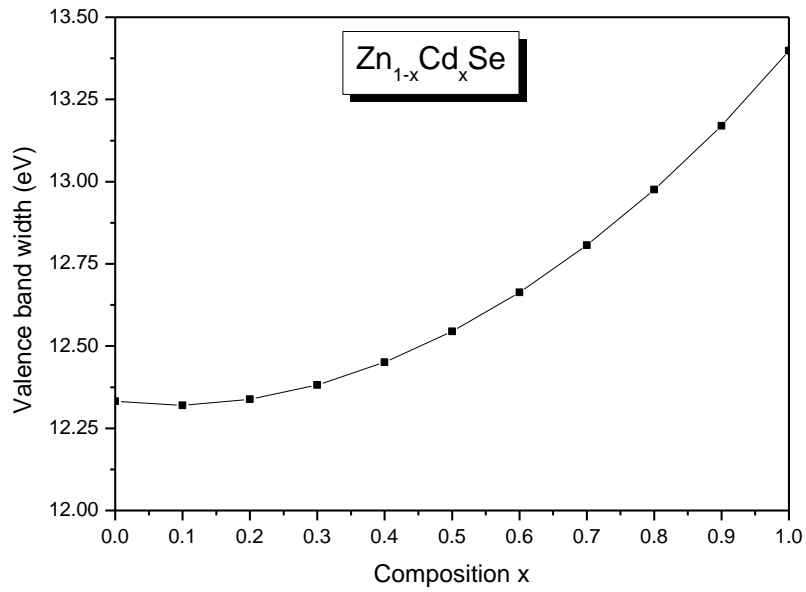


Figure 4.12. Largeur de la bande de valence du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.

4.3.4. Masses effectives des porteurs

Les masses effectives des électrons et des trous lourds dont l'évolution en fonction de la composition x de l'alliage est représentée respectivement sur les Figures 4.13 et 4.14 diminue (pour les électrons) et augmente (pour les trous lourds) de façon monotone autant on incorpore davantage d'atomes de Cd dans le ZnSe.

Il est à noter que la masse effective des trous lourds varie quasi-linéairement avec la composition x alors que la masse effective des électrons augmente selon une loi quadratique.

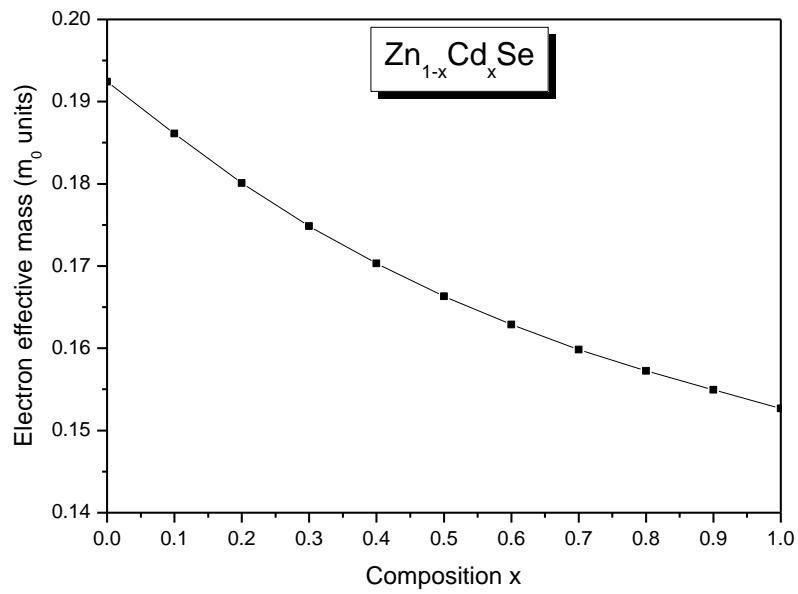


Figure 4.13. Masse effective des électrons du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.

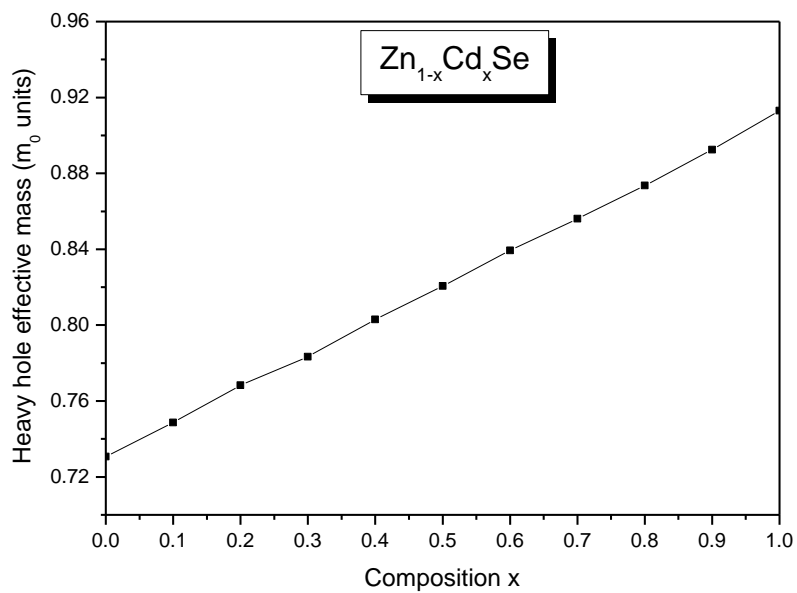


Figure 4.14. Masse effective des trous lourds du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.

4.3.5. Indice de réfraction

L'indice de réfraction de notre matériau $Zn_{1-x}Cd_xSe$ a été calculé et est représenté sur la Figure 3.8. Il augmente de façon monotone pour x entre 0 et 1. Ce comportement de l'indice de réfraction était prévisible du fait du comportement décrit plus haut du gap fondamental de notre matériau.

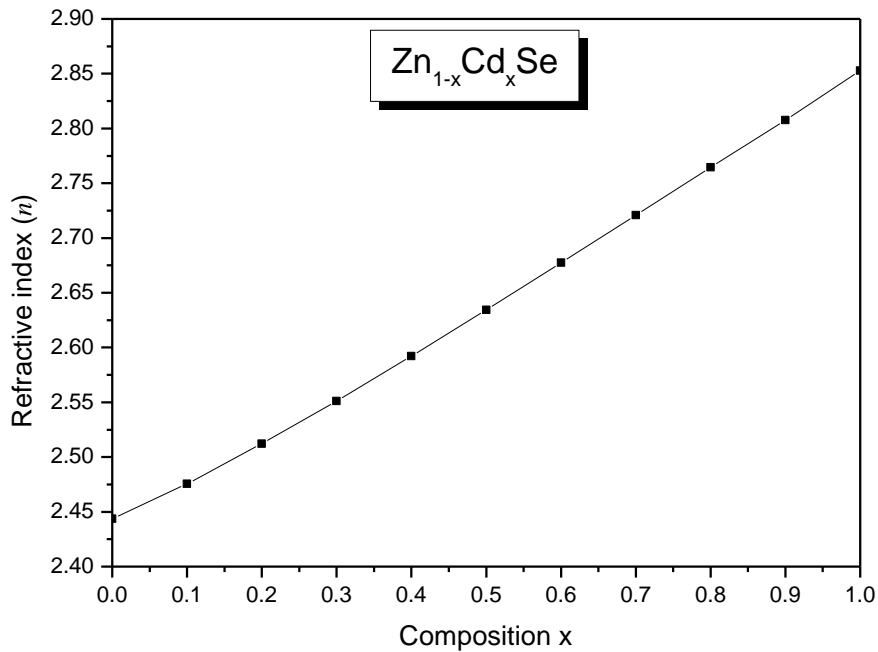


Figure 4.15. Indice de réfraction du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.

4.3.6. Constante diélectrique

Tout comme l'indice de réfraction, les constantes diélectriques statique ϵ_0 et de haute fréquence ϵ_∞ croît d'une manière monotone pour toutes les compositions $0 \leq x \leq 1$ comme le montre la Figure 3.9.

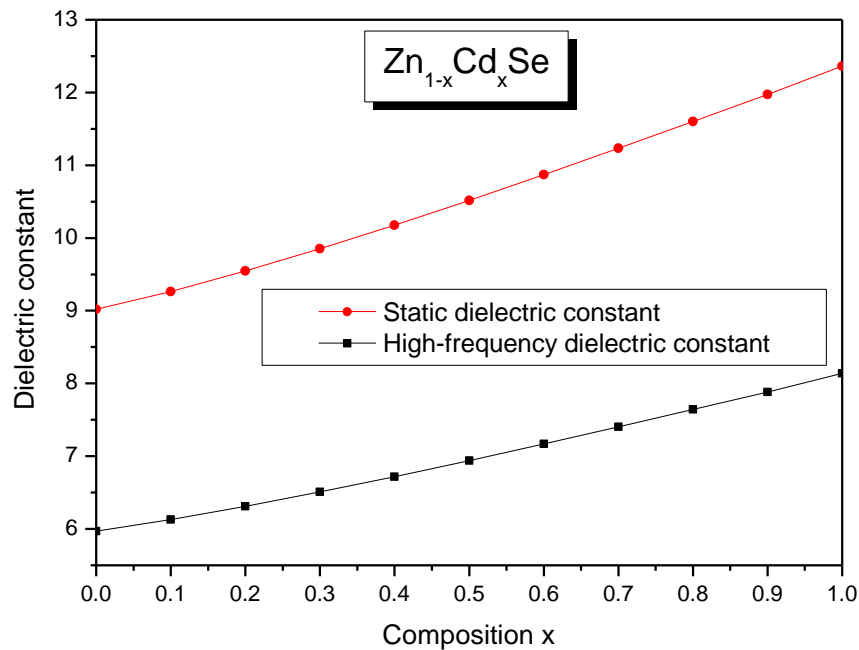


Figure 4.16. Constantes diélectriques statique ϵ_0 et de haute fréquence ϵ_∞ du $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ dans la phase zinc-blende en fonction de la composition x de Cd.

4.4. Conclusion

Dans ce chapitre, ont été présentées les propriétés électroniques et optiques des deux alliages ternaires $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Se}$ et $\text{Cd}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Se}$ comme les gaps d'énergie direct et indirects, le gap antisymétrique, la largeur de la bande de valence, les masses effectives des électrons et des trous aux points de haute symétrie Γ , X et L de la première zone de Brillouin. La dépendance de toutes ces grandeurs de la composition x de l'alliage a été examinée. Ces résultats ont été déterminées dans le cadre de la méthode empirique du pseudopotentiel.

Références

- [1] M. L. Cohen, J.R. Chelikowsky, *Electronic Structure and Optical Properties of semiconductors*, Springer, Berlin, 1988.
- [2] Z.Charifi, H.Baaziz, N.Bouarissa, *Mater. Chem. Phys.* 84 (2004) 273.
- [3] 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.
- [4] J.R.Chelikowsky, T.J.Wagner, A.Jin, and J.H.Weaver, *Phys. Rev. B* 40 (1989) 9644.
- [5] N.Bouarissa, R.N.West, and H.Aourag, *Phys. Stat. Sol. (b)* 188 (1995) 723.
- [6] N.Bouarissa, *Infrared Phys. Technol.* 10 (1999) 423 and references cited therein.
- [7] A.Bechiri, N.Bouarissa, *Superlatt. Microstruct.* 39 (2006) 478 and references cited therein.
- [8] W.Nakwaski, *Physica B* 210 (1995) 1 and references cited therein.
- [9] P.J.L.Herve, L.K.J.Vandamme, *Infrared Phys. Technol.* 35 (1994) 609.
- [10] S.Sakai, Y.Ueta, and Y.Terauchi, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 1* 32 (1993) 4413.
- [11] M.Kondow, K.Uomi, K.Hosomi, and T.Mozume, *Jpn. J. Appl. Phys.* 33 (1994) L1056.
- [12] G.A.Samara, *Phys. Rev. B* 27 (1983) 3494.
- [13] O.Madelung (Ed.), *Semiconductors – Basic Data*, Springer, Berlin, 1996.
- [14] G.-D. Lee, M.H. Lee, J. Ihm, *Phys. Rev. B* 52 (1995) 1459.
- [15] K. Ishinio, Y.-H. Wu, Y. Kawakami, S. Fujita, *J. Cryst. Growth* 117 (1992) 527.
- [16] L.W.Wang, A. Zunger, *Phys. Rev. B* 51 (1995) 17398.

Chapitre 5

ETUDE DU MIROIR DE BRAGG ZnMgSe/ZnCdSe

5.1. Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation de nos résultats de simulation du miroir de Bragg (DBR : Distributed Bragg Reflector) ZnMgSe/ZnCdSe obtenus moyennant la théorie des milieux stratifiés sous sa représentation matricielle. Nous présenterons dans un premier temps l'effet du nombre de périodes ZnMgSe/ZnCdSe constituant le DBR sur la réflectivité de notre DBR en incidence normale. Ensuite nous montrerons l'effet de l'angle d'incidence avec le nombre de périodes dans le cas de l'incidence oblique sur le spectre de réflectivité, la longueur d'onde de Bragg λ_B et la largeur de bande du DBR.

5.2. Méthode de calcul

Le calcul de la réflectivité du DBR étudié est effectué en utilisant la méthode des milieux stratifiés. Notons que cette approche est connue pour son simple formalisme et sa grande flexibilité. Des détails supplémentaires sur cette méthode sont donnés par Nubile et Born [1,2]. Dans cette technique, le milieu inhomogène est divisé en N couches inhomogènes avec un indice de réfraction \tilde{N}_j . Chaque couche est représentée par une matrice caractéristique complexe M_j . Les matrices M_0 et M_s correspondent respectivement au milieu ambiant et au substrat considérés comme étant semi-infinis comme détaillé par Born et al. [2].

L'on peut écrire la relation simplifiée

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = M_0 \left(\prod_{j=1}^N M_j \right) M_s \quad (5.1)$$

Plus explicitement, on a :

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_0^{+1} \\ p_0^{-1} \end{bmatrix} \prod_{j=1}^N \begin{bmatrix} \cos \delta_j & p_j^{-1} \sin \delta_j \\ i p_j \sin \delta_j & \cos \delta_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ p_s \end{bmatrix} \quad (5.2)$$

Où δ_j est le déphasage introduit par le couche j ,

$$\delta_j = \frac{2\pi}{\lambda} \tilde{N}_j d_j \cos \theta_j \quad (5.3)$$

et θ_j est déterminé à partir de l'angle d'incidence θ_0 suivant la loi de Snell-Descartes

$$\tilde{N}_j \sin \theta_j = \tilde{N}_0 \sin \theta_0 \quad (5.4)$$

Pour une polarisation électrique transverse (TE), $p_j = \tilde{N}_j \cos \theta_j$, et pour une polarisation magnétique transverse (TM), $p_j = \tilde{N}_j / \cos \theta_j$, les coefficients de Fresnel sont calculés pour les deux polarisations et pour chaque longueur d'onde en utilisant les relations :

$$R_{TE} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_{TE} \text{ et } R_{TM} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}_{TM} \quad (5.5)$$

La réflectivité est alors exprimée comme :

$$R = \frac{1}{2} (R_{TE} R_{TE}^* + R_{TM} R_{TM}^*) \quad (5.6)$$

5.3. Résultats et discussion

5.3.1. Incidence normale

Sur la Figure 5.1 est représenté le spectre de la réflectivité calculée pour notre DBR $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se/Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$ avec respectivement 20, 30, 40 et 60 paires sous incidence normale. En inspectant cette figure, on peut noter que :

1. Chaque spectre est centré sur la longueur d'onde d'intérêt soit 634 nm.
2. Le maximum de réflectivité est amélioré lorsque le nombre de paires constituant le DBR augmente. L'on note que ce fait est généralement rencontré et a été reporté pour plusieurs DBRs faits avec différents matériaux [3-5,6,7]. Maximov et al. [8] ont rapporté sur la fabrication de DBRs à base de (Zn,Mg,Cd)Se en utilisant l'épitaxie par jets moléculaires (MBE : Molecular Beam Epitaxy) et ont trouvé que la réflectivité du DBR est améliorée à mesure que le nombre de paires constituant le DBR est augmenté. Il est à rappeler que la réflectivité du DBR dépend de la différence des indices de réfraction des matériaux dont sont faites les couches alternées pour former le miroir de Bragg. En accord avec Maximov et al., F.C. Peiris et al. ont trouvé la même tendance concernant l'effet du nombre de paires sur la réflectivité des DBRs $ZnMgSe/ZnCdSe$ et $ZnMgSe/ZnSeTe$) obtenus par MBE et contrôlés par la technique du coupleur optique [9].
3. la largeur de bande du DBR et par conséquent la largeur du canal de transmission dépendent essentiellement de la différence entre les indices de réfraction des alliages ternaires $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se$ et $Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$ qui forment le DBR. Nous rappelons dans la Figure 5.2 la dépendance des indices de réfraction des deux matériaux $Zn_{1-x}Mg_xSe$ et $Zn_{1-x}Cd_xSe$ calculés dans le chapitre précédent. L'on note que ces indices de réfraction ont été calculés en utilisant la même démarche que celle rapporté dans [10-12]. On remarque que l'indice de réfraction du $Zn_{1-x}Mg_xSe$ diminue lorsque la concentration x du magnésium augmente de 0 à 1 alors que celui du $Zn_{1-x}Cd_xSe$ augmente avec l'augmentation de la concentration du cadmium. Les deux indices de réfraction représentés sur la Figure 5.2 peuvent être fittés par les expressions suivantes :

$$n_{ZnMgSe} = 2.512 - 0.489x - 0.003x^2 \quad (5.7)$$

$$n_{ZnCdSe} = 2.440 + 0.359x + 0.054x^2 \quad (5.8)$$

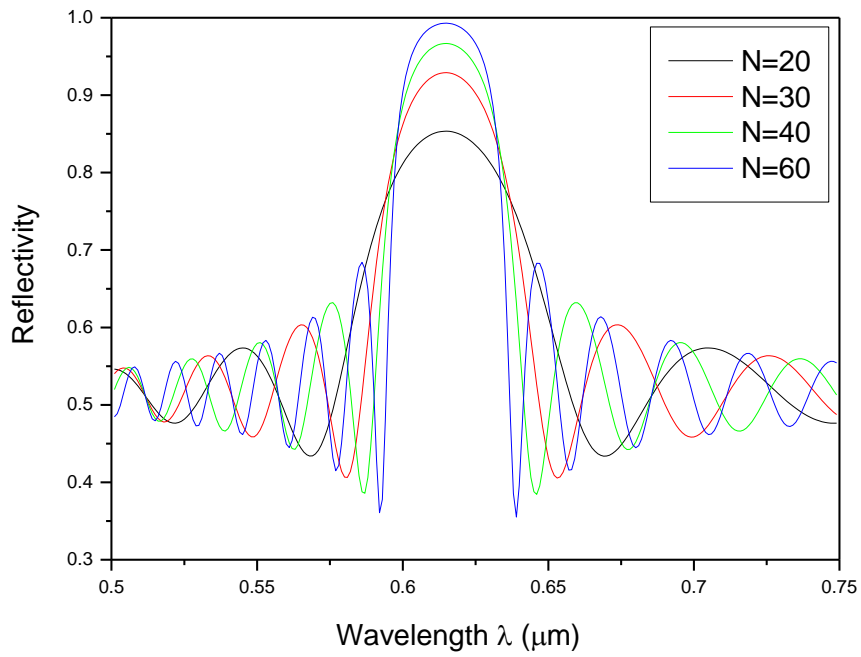


Figure 5.1. Spectre de la réflectivité pour le DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ avec 20, 30, 40, 60 paires sous incidence normale.

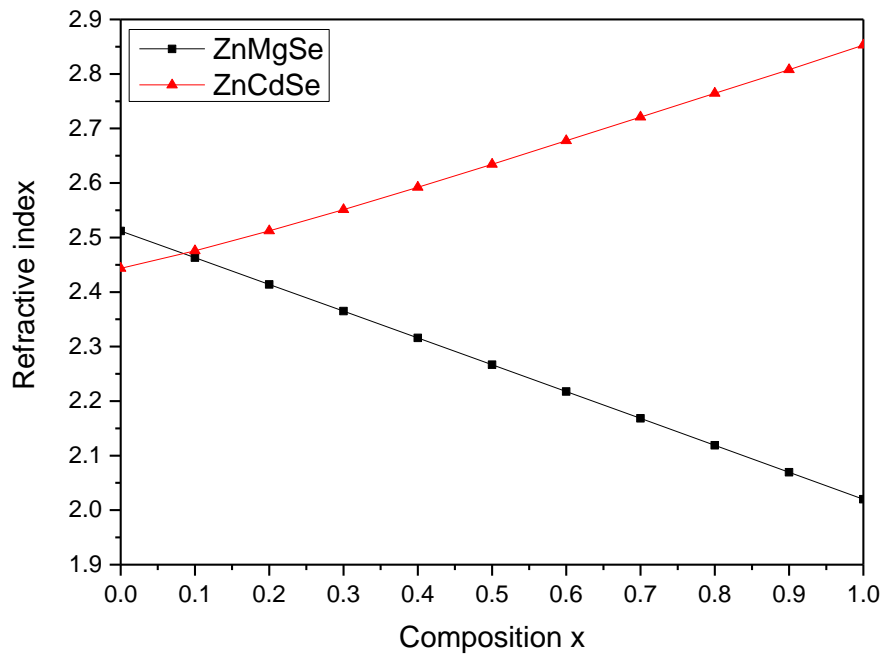


Figure 5.2. Indice de réfractifs des alliages $\text{Zn}_{1-x}\text{Mg}_x\text{Se}$ et $\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Se}$ en fonction de la composition x.

Pour nos deux matériaux $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}$ et $\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$, l'indice de réfraction vaut respectivement 2.345 et 2.537. La différence entre les deux valeurs est de 0.19.

5.3.2. Incidence oblique

Nous intéressons dans ce qui suit à l'effet de l'angle d'incidence sur la réflectivité du miroir de Bragg $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ sous investigation. On note que le nombre de paires dans l'empilement constituant le DBR est choisi de manière à rendre maximale la réflectivité de l'empilement sans pour autant introduire de contraintes ou difficultés quant à la réalisation technologique du DBR. Nous commençons d'abord par déterminer le nombre optimal de paires pour un angle d'incidence de 20° . La réflectivité obtenue dans ce cas est représenté sur la Figure 5.3. Comme on l'a remarqué déjà pour l'incidence normale, la réflectivité de notre DBR est améliorée à mesure que le nombre de paires croit de 20 à 60. L'on note cependant que cette amélioration de la réflectivité est plus importante en allant de 20 à 30 paires que lorsqu'on passe de 40 à 60 paires. Pour cela, nous allons fixer le nombre de paires à 40 et examiner l'effet de l'angle d'incidence sur le spectre de la réflectivité du DBR considéré. Cet effet est visible sur la Figure 5.4 qui montre que lorsque l'angle d'incidence augmente de 20° à 80° , le spectre de réflectivité est décalé vers les plus faibles longueurs d'onde. La longueur d'onde de Bragg λ_B qui correspond à la longueur d'onde centrale diminue quant l'angle d'incidence devient plus grand. Ce comportement est qualitativement similaire à celui rapporté pour le DBR de configuration $\text{GaP}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaP}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}$ [3] ainsi qu'à celui décrit dans la Réf. [13] pour des DBRs à base de matériaux diélectriques. En outre, en accord avec ce que rapporte la Réf. [3], le maximum de réflectivité diminue légèrement avec l'augmentation de l'angle d'incidence.

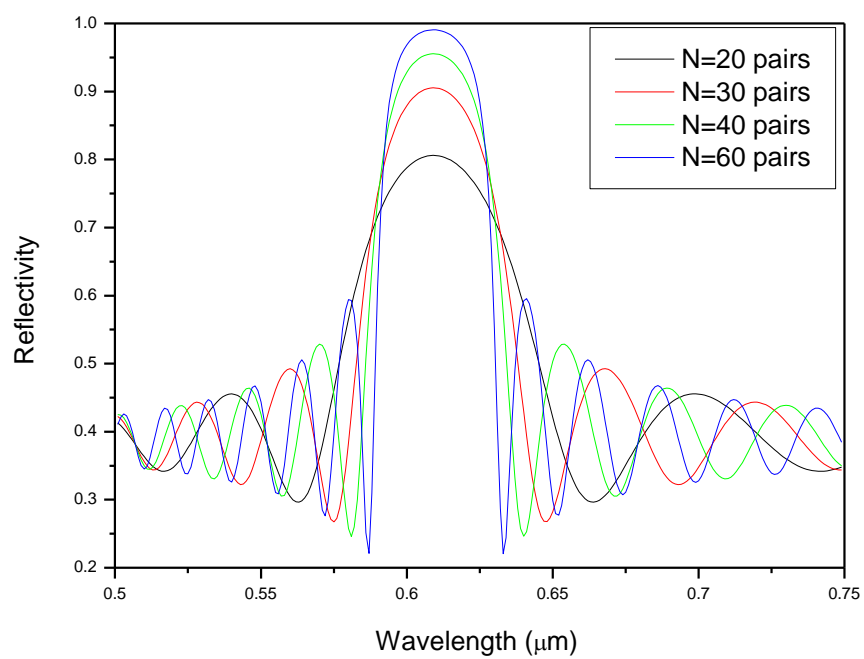


Figure 5.3. Spectre de la réflectivité pour le DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 20^\circ$.

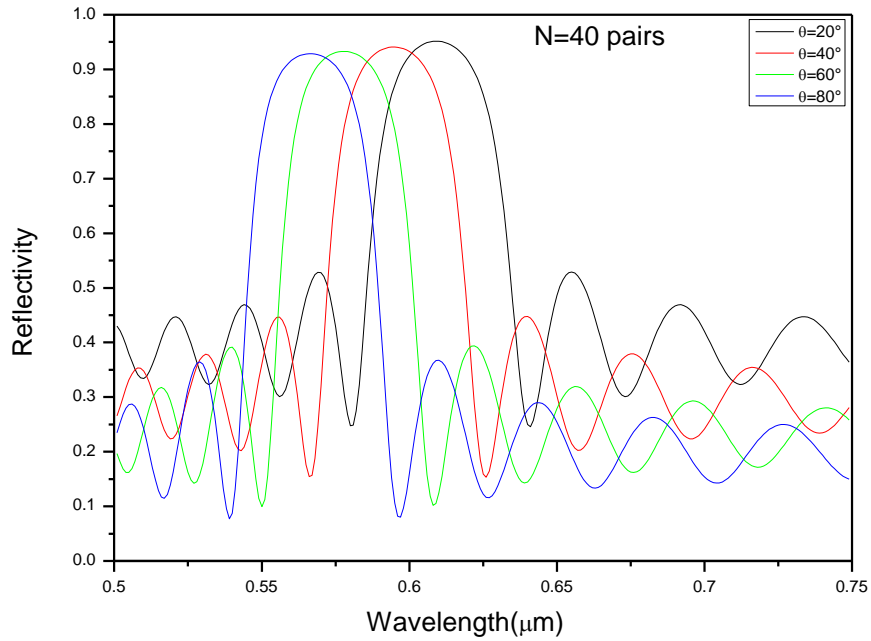


Figure 5.4. Spectre de la réflectivité pour le DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ avec 40 paires sous incidence oblique $\theta = 20^\circ, 40^\circ, 60^\circ, 80^\circ$.

La variation de la longueur d'onde de Bragg λ_B avec l'angle d'incidence θ pris dans l'intervalle 0° - 80° est montrée sur la Figure 5.5 pour un nombre de paires de 40. Il apparaît clairement que λ_B diminue de $0.615 \mu\text{m}$ valeur correspondant à une incidence normale, à $0.566 \mu\text{m}$ obtenue pour un angle d'incidence $\theta = 80^\circ$. Une telle situation a été reporté pour un DBR $\text{GaP}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaP}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}$. La variation relative est autour de 7.9% alors que pour le DBR $\text{GaP}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaP}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}$, la variation relative obtenue était de 5.8%. Un fit quadratique de λ_B donne :

$$\lambda_B(\mu\text{m}) = 0.615 - 5.417 \times 10^{-5}\theta - 1.281 \times 10^{-5}\theta^2 + 1.042 \times 10^{-8}\theta^3 + 7.8122 \times 10^{-10}\theta^4$$

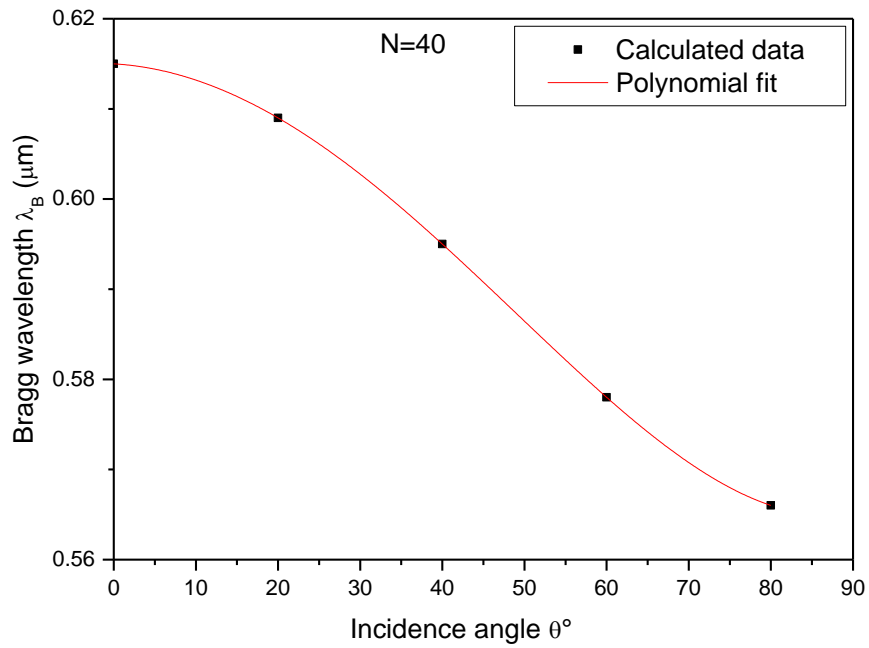


Figure 5.5. Longueur d'onde de Bragg λ_B en fonction de l'angle d'incidence pour $N=40$ paires.

On peut procéder de la même manière pour des angles d'incidence de 30°, 40°, 50°, 60°, 70° et 80°. Les spectres de réflectivité correspondants sont donnés dans les Figures 5.6-5.11.

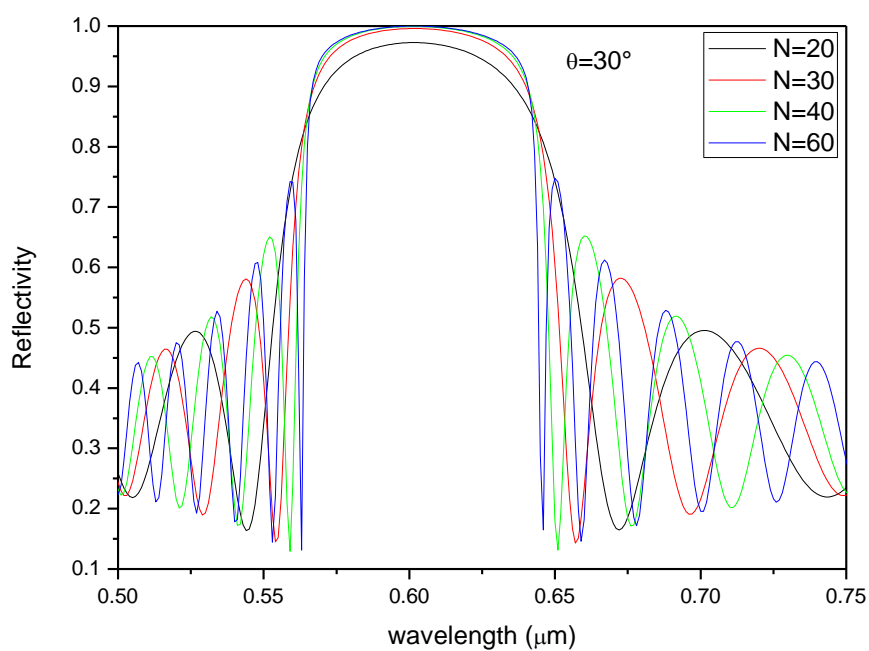


Figure 5.6. Spectre de la réflectivité pour le DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 30^\circ$.

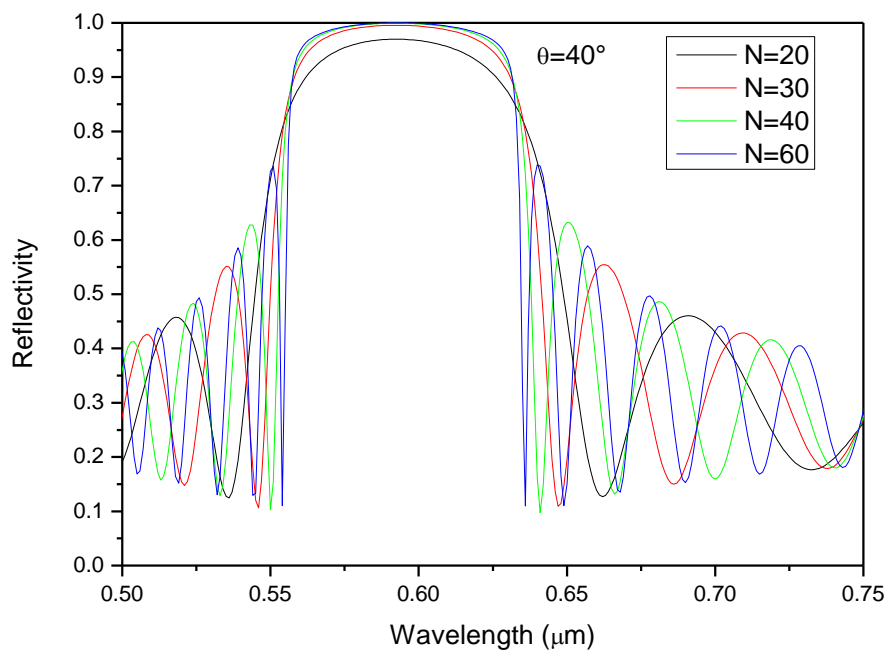


Figure 5.7. Spectre de la réflectivité pour le DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 40^\circ$.

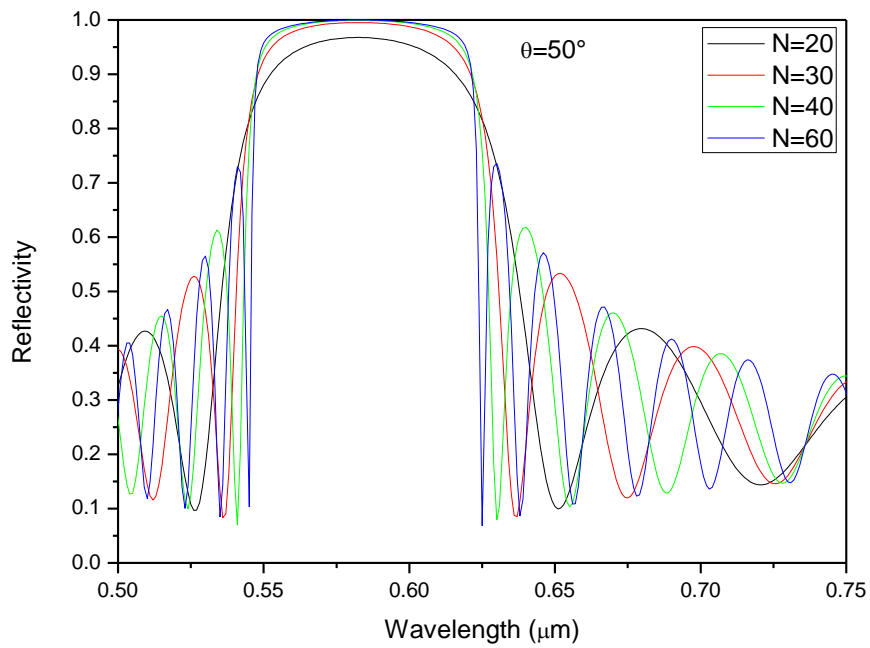


Figure 5.8. Spectre de la réflectivité pour le DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 50^\circ$.

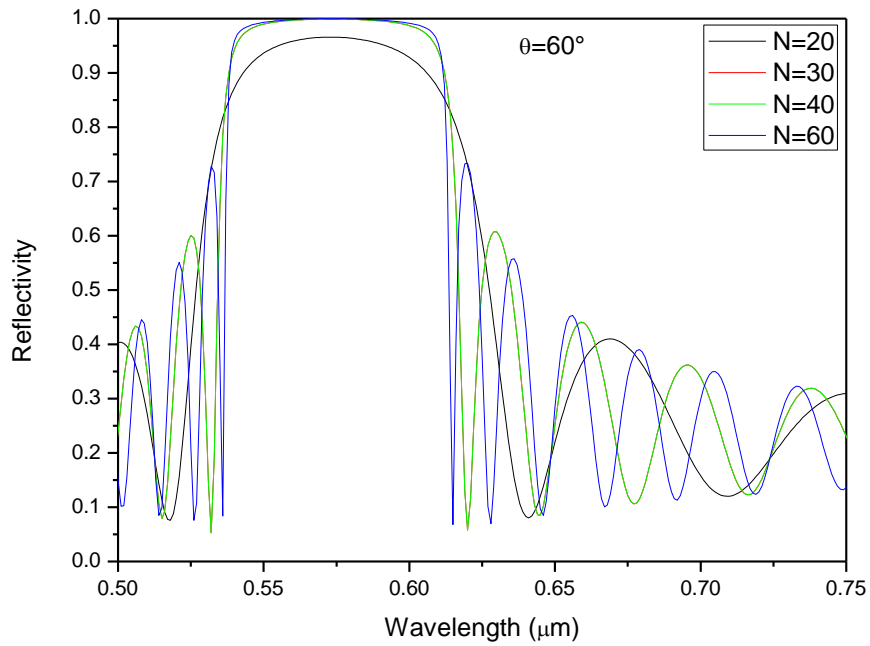


Figure 5.9. Spectre de la réflectivité pour le DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 60^\circ$.

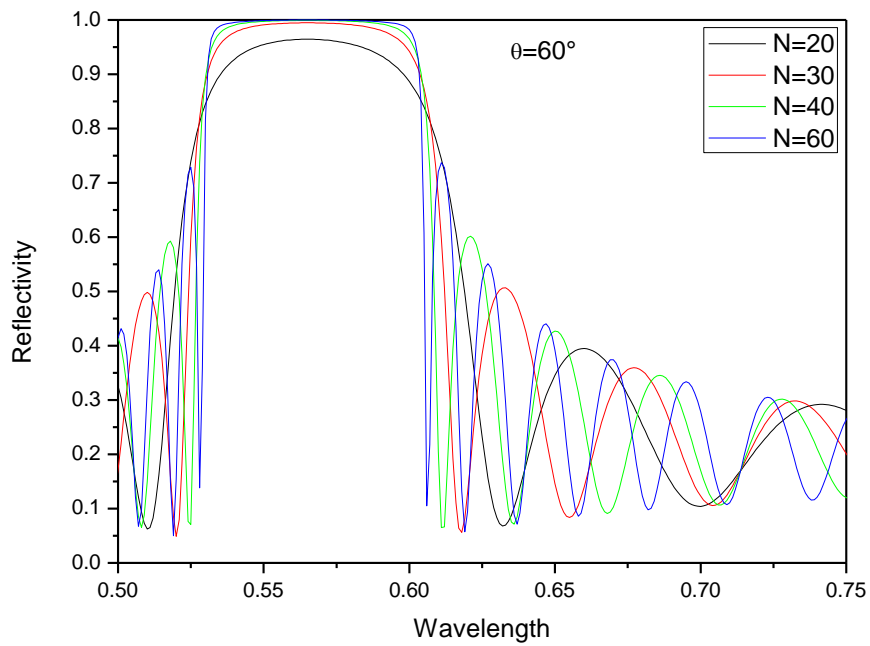


Figure 5.10. Spectre de la réflectivité pour le DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 70^\circ$.

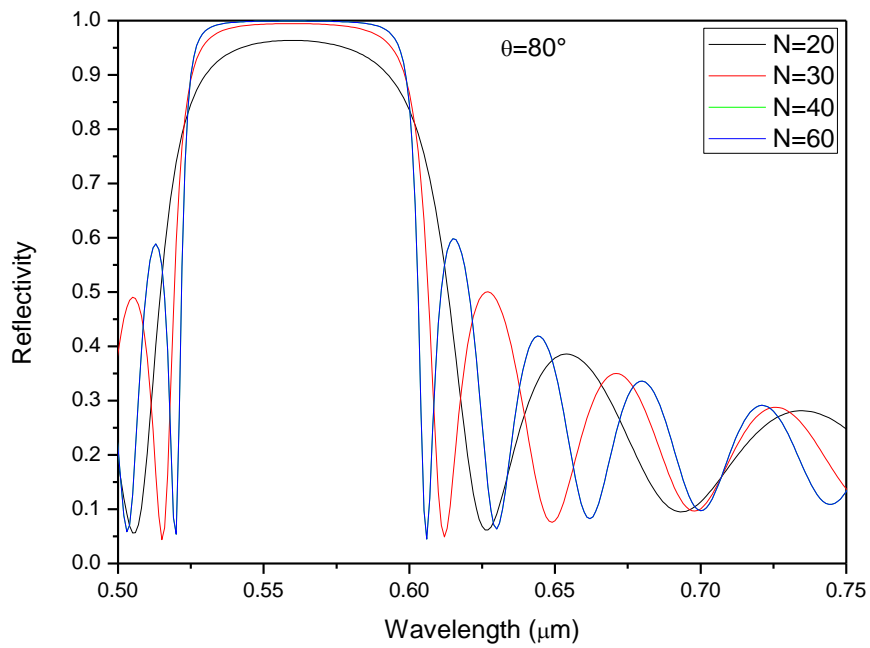


Figure 5.11. Spectre de la réflectivité pour le DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ avec 20, 30, 40, 60 paires pour un angle d'incidence $\theta = 80^\circ$.

Une inspection des Figures 5.6-5.11 permet de faire ressortir les remarques suivantes :

La réflectivité de notre DBR est améliorée à mesure que le nombre de paires croît de 20 à 60. Notons toutefois que le meilleur compris correspond à choisir un nombre de périodes de 30 ou 40.

Lorsque l'angle d'incidence croît tout en en maintenant le nombre de périodes à 30, le spectre de la réflectivité est décalé vers des longueurs d'ondes de plus basses valeurs comme montré sur la Figure 5.12.

La longueur d'onde de Bragg λ_B diminue.

La largeur de chaque spectre de réflectivité diminue également.

La variation de la longueur d'onde de Bragg λ_B peut être donnée analytiquement par la relation :

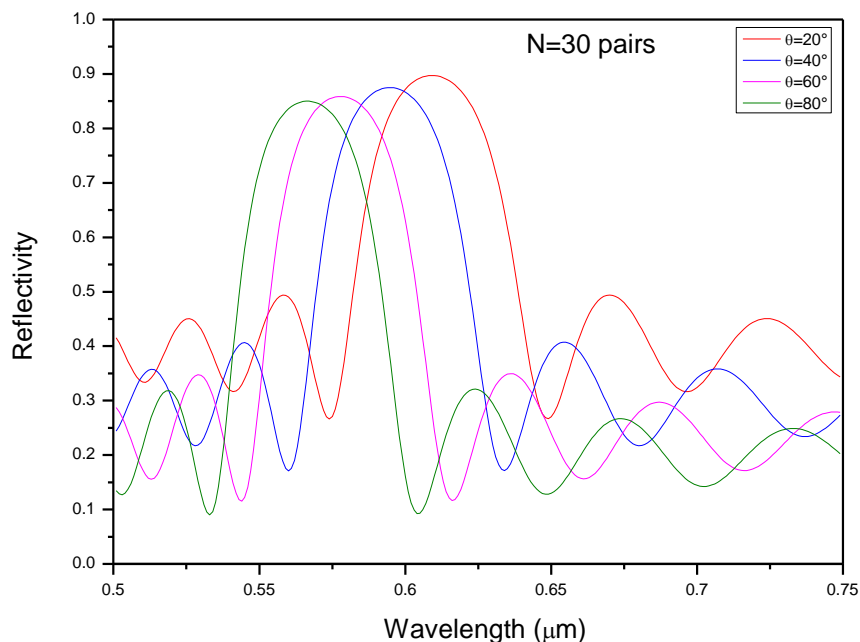


Figure 5.12. Spectre de la réflectivité pour le DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ avec 30 paires sous incidence oblique $\theta = 20^\circ, 40^\circ, 60^\circ, 80^\circ$.

5.4. Conclusion

Le spectre de réflectivité du DBR $\text{Zn}_{0.66}\text{Mg}_{0.34}\text{Se}/\text{Zn}_{0.74}\text{Cd}_{0.26}\text{Se}$ est déterminé pour les deux incidences normale et oblique. Pour l'incidence oblique nous avons considéré une série d'angle de 20° à 80° par un pas de 10° . Pour les deux types d'incidences, nous avons considéré l'effet du nombre de périodes constituant le DBR. Le maximum de réflectivité est amélioré par l'augmentation du nombre de périodes. Ce dernier est dépend des contraintes technologiques de fabrication des exigences relatives aux pertes optiques qui dépendent de l'épaisseur du DBR. La largeur de bande du DBR est conditionnée essentiellement de la différence des indices de réfraction des matériaux constituant le miroir de Bragg. Le spectre de la réflectivité est décalé vers les longueurs d'ondes de valeurs inférieures ainsi que la longueur d'onde de Bragg lorsque l'angle d'incidence augmente.

Références

- [1] P. Nubile, Analytical design of antireflection coatings for silicon photovoltaic devices. *Thin Solid Films* 342(1-2), (1999)257-261.
- [2] M. Born, E. Wolf, *Principles of Optics*, Pergamon, Oxford, 1970.
- [3] A. Gueddim, N. Bouarissa, Alloy composition dependence of 1.55 μm $\text{GaP}_{1-x}\text{Sb}_x/\text{GaP}_{0.2}\text{Sb}_{0.8}$, *Phys. Scr.* 81, (2010)035703.
- [4] H. Shimomura, T. Anan, S. Sugou, Growth of AlPSb and GaPSb on InP by gas-source molecular beam epitaxy. *J. Cryst. Growth* 162(3-4), (1996)121-125.
- [5] T. Anan, H. Shimomura, S. Sugou, Improved reflectivity of AlPSb/GaPSb Bragg reflector for 1.55 μm wavelength. *Electron. Lett.* 30, (1994)2138-2139.
- [6] R. Grange, S. Zeller, M. Haiml, O. Ostenilli, E. Gini, S. Shön, U. Keller, Antimonide semiconductor saturable absorber for passive mode locking of a 1.5- μm Er:Yb:glass laser at 10 GHz, *IEEE Photonics Technol. Lett.* 18(7), (2006)805-807.
- [7] O. Blum, I.J. Fritz, L.R. Dawson, A.J. Howard, T.J. Headley, J.F. Klem, T.J. Drummond, Highly reflective, long wavelength AlAsSb/GaAsSb distributed Bragg reflector grown by molecular beam epitaxy on InP substrates. *Appl. Phys. Lett.* 66(3), (1995)329-331.
- [8] O. Maksimov, S.P. Guo, L. Zeng, M.C. Tamargo, F.C. Peiris, J.K. Furdyna, Distributed Bragg reflectors based on (Zn, Cd, Mg)Se for use in the visible spectral. *J. Appl. Phys.* 89(4), (2001)2202-2207.
- [9] F.C. Peiris, S. Lee, U. Bindley, J.K. Furdyna, ZnMgSe/ZnCdSe and ZnMgSe/ZnSeTe distributed Bragg reflectors grown by molecular beam epitaxy. *J. Appl. Phys.* 86(2), (1999)719-724.
- [10] A. Gueddim, N. Bouarissa, R. Zerdoum, Dependence of electronic properties on nitrogen concentration in $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ dilute alloys. *J. Phys. Chem. Solids* 67(8), (2004)1618-1622.
- [11] A. Gueddim, N. Bouarissa, R. Zerdoum, Alloy composition and optoelectronic properties of dilute $\text{GaSb}_{1-x}\text{N}_x$ by pseudopotential calculations. *Phys. B Condens. Matter* 389(2), (2006)335-342.

- [12] A. Gueddim, N. Bouarissa, Electronic structure and optical properties of dilute $\text{InAs}_{1-x}\text{N}_x$: pseudopotential calculations, Phys. Scr. 80(1), (2009)015701.
- [13] S. Callard, PhD Thesis INSA, Lyon, France 1996.

CONCLUSION

Les objectifs que nous étions fixés dans le cadre de cette thèse étaient l'exploration dans une première étape, en fonction de la composition x des propriétés électroniques et optiques des alliages ternaires semiconducteurs $Zn_{1-x}Mg_xSe$ et $Zn_{1-x}Cd_xSe$ dans la phase zinc-blende, en prenant en considération l'effet de la non-linéarité du paramètre de maille du premier alliage. Cette étude a été menée dans le cadre de la méthode empirique du pseudopotentiel (EPM). Dans une seconde étape, nous nous sommes principalement intéressé à l'étude du miroir de Bragg (DBR : Distributed Bragg reflector) constitué de l'empilement de périodes $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se/Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$ sous incidences normale et oblique. Nous avons examiné l'effet du nombre de périodes ainsi que l'effet de l'angle d'incidence sur la caractéristique principale de notre DBR qui est la spectre de réflectivité.

Les principaux résultats obtenus peuvent être résumés comme suit :

Etude de l'alliage ternaire $Zn_{1-x}Mg_xSe$

- Le gap direct $E_{\Gamma-\Gamma}$ augmente de façon monotone lorsque la composition x augmente de 0 à
- 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 reste à gap direct sur toute la plage des compositions x (0 à 1).
- 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.
- La largeur de la bande de valence du $Zn_{1-x}Mg_xSe$ diminue de façon monotone lorsque la composition x augmente de 0 à 1.
- Le gap antisymétrique dans le $Zn_{1-x}Mg_xSe$ diminue à mesure que la composition x augmente indiquant par conséquent une augmentation de l'ionicité de notre matériau.
- Les masses effectives des électrons aux points de haute symétrie Γ , X et L ont été calculées. 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.

- La masse effective des trous lourds augmente d'abord pour x entre 0 et 0.2 puis diminue pour x entre 0.2 et 1.

L'indice de réfraction diminue d'une manière monotone lorsque la composition x augmente de 0 à 1.

- La constante diélectrique statique augmente de façon monotone avec la composition x alors que la constante diélectrique de haute fréquence diminue quasi-linéairement.

Etude de l'alliage ternaire $Zn_{1-x}Cd_xSe$

- Le gap direct $E_{\Gamma-\Gamma}$ de l'alliage $Zn_{1-x}Cd_xSe$ diminue lorsque la concentration de Cd augmente de 0 à 1.
- Les gaps indirects $E_{\Gamma-X}$ et $E_{\Gamma-L}$ augmentent à mesure que x augmente.
- Notre alliage est à gap direct pour toutes les concentrations $0 \leq x \leq 1$.
- Le gap antisymétrique augmente de façon monotone à mesure que la composition x augmente de 0 à 1. L'on peut déduire alors que l'ionicité de notre alliage augmente également à mesure que l'on incorpore davantage d'atomes Cd dans le ZnSe.
- La largeur de la bande de valence augmente de façon monotone avec l'augmentation de la composition x de 0 à 1.
- La masse effective des électrons diminue non-linéairement alors que celle des trous lourd augmente quasi-linéairement avec la composition de Cd.
- L'indice de réfraction augmente de façon monotone pour x entre 0 et 1.
- Les constantes diélectriques statique ϵ_0 et de haute fréquence ϵ_∞ croissent d'une manière monotone pour toutes les compositions $0 \leq x \leq 1$.

Miroir de Bragg

Incidence normale

Le spectre de la réflectivité a été calculée pour notre DBR $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se/Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$ avec respectivement 20, 30, 40 et 60 paires sous incidence normale. Il en ressort que :

- Chaque spectre est centré sur la longueur d'onde d'intérêt soit 634 nm.
- Le maximum de réflectivité est amélioré lorsque le nombre de paires constituant le DBR augmente.
- La largeur de bande du DBR et par conséquent la largeur du canal de transmission dépendent essentiellement de la différence entre les indices de réfraction des alliages ternaires $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se$ et $Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$ qui forment le DBR.
- Pour nos deux matériaux $Zn_{0.66}Mg_{0.34}Se$ et $Zn_{0.74}Cd_{0.26}Se$, l'indice de réfraction vaut respectivement 2.345 et 2.537. La différence entre les deux valeurs est de 0.19.

Incidence oblique

Dans ce cas, le nombre de paires dans l'empilement constituant le DBR est choisi de manière à rendre maximale la réflectivité de l'empilement sans pour autant introduire de contraintes ou difficultés quant à la réalisation technologique du DBR.

- La réflectivité de notre DBR est améliorée à mesure que le nombre de paires croît de 20 à 60.
- L'on note cependant que cette amélioration de la réflectivité est plus importante en allant de 20 à 30 paires que lorsqu'on passe de 40 à 60 paires.
- Lorsque l'angle d'incidence augmente de 20° à 80° , le spectre de réflectivité est décalé vers les plus faibles longueurs d'onde.
- La longueur d'onde de Bragg λ_B quant l'angle d'incidence devient plus grand.
- Le maximum de réflectivité diminue légèrement avec l'augmentation de l'angle d'incidence.
- La longueur d'onde de Bragg λ_B diminue de $0.615 \mu m$ valeur correspondant à une incidence normale, à $0.566 \mu m$ obtenue pour un angle d'incidence $\theta = 80^\circ$.
- La largeur du spectre de la réflectivité diminue également.

Comme perspectives de ce travail, on peut citer :

- L'effet de l'absorption des couches constituant l'empilement du DBR.
- L'introduction dans le DBR de matériaux de basse dimensionnalité de dimension 0 et 2 qui conduiraient à un meilleur contrôle des indices de réfraction et par conséquent de la réflectivité du DBR.