

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE & POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR & DE LA  
RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE DJILLALI LIABES  
FACULTE DE GENIE ELECTRIQUE  
SIDI BEL ABBÈS



# THESE DE DOCTORAT

*Présentée par*  
**TALEB Soufyane**

**Spécialité : Electronique**

**Option : Matériaux et composants optoélectroniques**

## Intitulé

**Etude et simulation des propriétés électroniques  
et optiques d'un laser à boîte quantique à base  
de ZnO et ses alliages**

*Thèse soutenue le:*

*Devant le jury composé de :*

**ANANI Maâchou**

Professeur

UDL de Sidi Bel-Abbès

*Président*

**SOUDINI Bel-Abbes**

Professeur

UDL de Sidi Bel-Abbès

*Directeur de thèse*

**SAHNOUN Mohammed**

Professeur

Université de Mascara

*Examineur*

**ARBOUCHE Omar**

Professeur

Université de Saida

*Examineur*

**ABID Hamza**

Professeur

UDL de Sidi Bel-Abbès

*Invité*

*Année universitaire : 2021/2022*

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

# Dédicaces

---

*DÉDICACES*

*À TOUTE MA FAMILLE*

*À MES AMIS*

*À TOUS CEUX QUI ME SONT CHERS*

# Remerciements

---

## ***REMERCIEMENTS***

**Je remercie en premier lieu Dieu le tout puissant de nous avoir accordé la puissance et la volonté pour terminer ce travail.**

J'exprime ma profonde gratitude au directeur de cette thèse, Monsieur **SOUDINI Bel-Abèss**, Professeur à l'Université Djilali Liabès de Sidi Bel-Abbès, qui m'a permis de réaliser ce travail, pour son suivi permanent, ses conseils, ses lectures attentives ainsi que l'esprit de recherche qu'il a su me transmettre.

Le travail présenté dans cette thèse a été réalisé au laboratoire des matériaux appliqués (AML) de l'Université de Sidi Bel Abbès, à cette occasion j'adresse mes remerciements à tous les membres de ce laboratoire, dirigé par le Professeur **ABID Hamza**, qui m'a permis de réaliser mon travail dans les meilleures conditions possibles dans l'AML.

Je remercie également Monsieur **ANANI Maâchou**, Professeur à l'Université Djilali Liabès de Sidi Bel-ABBES d'avoir accepté de présider le jury de cette thèse.

Mes vifs remerciements vont aussi à Messieurs **SAHNOUN Mohammed**, Professeur à l'Université de Mascara, et **ARBOUCHE Omar**, Professeur à l'Université de Saida, et **ABID Hamza**, Professeur à l'Université Djilali Liabès de Sidi Bel-ABBES pour avoir accepté d'évaluer et juger ce travail.

Sincères remerciements à tous les membres de l'Université Djilali Liabès de Sidi Bel-Abbès, enseignants, étudiants et travailleurs.

Enfin, je remercie l'ensemble de ma famille et mes amis.

### ملخص:

حظيت النقاط الكمومية لأشباه الموصلات (QDs) باهتمام كبير في العقود الأخيرة نظرًا لخصائصها الرائعة ، حيث تكون حاملات الشحن محصورة في جميع الاتجاهات الثلاثة في الفضاء. في QDs ، تكون مستويات الطاقة منفصلة والانتقالات بين الإلكترونات والثقوب قابلة للمقارنة مع التحولات بين المستويات المنفصلة للذرات المفردة. لذلك ، توصف النقاط الكمومية أحيانًا بأنها ذرات اصطناعية. أظهر استخدام هذه الهياكل في الأجهزة الإلكترونية الضوئية الحصول على أداء أعلى.

من بين أشباه الموصلات واسعة الفجوة ، حظي أكسيد الزنك (ZnO) وسبائكه الثلاثية باهتمام متزايد في السنوات الأخيرة بسبب مزاياها المحتملة على نيتريد III-V ، مثل توفر الركيزة ، وتقنيات النمو والمعالجة الأبسط نسبيًا ، وربط الأكسيتون الأكبر الطاقة (60 ملي إلكترون فولت مقابل 25 ملي إلكترون فولت من أجل نيتريد الغاليوم GaN). فجوة الطاقة الكبيرة لـ ZnO (3.4 إلكترون فولت) والإمكانات الهندسية ذات فجوة الحزمة التي تقدمها CdZnO (للفجوة الضيقة) و MgZnO (للفجوة الأوسع) تجعل نظام مادة ZnO منافسًا واعدًا في مجال الإلكترونيات الضوئية.

في ضوء ما سبق، فإن الهدف الرئيسي من أطروحتنا هو إظهار أهمية الاستخدام المزدوج لـ ZnO وسبائكه مع QDs كوسائط نشطة في ثنائيات الليزر. نسعى لتحسين أداء وخصائص الليزر من النمذجة والمحاكاة العددية لهياكل ليزر QD بناءً على ZnO وسبائكه مثل MgZnO و CdZnO.

نتائجنا التي تم الحصول عليها مماثلة بشكل عام لتلك الموجودة في الأدبيات الموجودة في مجال ليزر QD، مما يعطينا مؤشرًا واضحًا على أهمية ZnO وسبائكه ، والكفاءة العالية لنموذجنا المستخدم لإبراز خصائص هذا النوع من المركبات الكهروضوئية.

**الكلمات المفتاحية:** ليزر أشباه الموصلات، نقطة الكم، أكسيد الزنك، السبائك، معادلات الميزانية، المحاكاة.

# Résumé

---

## **Résumé :**

Les boîtes quantiques (BQ) semi-conductrices ont reçu une attention considérable au cours des dernières décennies en raison de leurs propriétés remarquables, où les porteurs de charge sont confinés dans les trois directions de l'espace. Dans les BQs, les niveaux d'énergie sont discrets et les transitions entre les électrons et les trous sont comparables aux transitions entre les niveaux discrets des atomes simples. Les BQs sont donc parfois décrits comme des atomes artificiels. Ces structures ont été avantageuses dans les dispositifs optoélectroniques où leur utilisation permet d'obtenir des performances plus élevées.

Parmi les semi-conducteurs à large bande interdite, l'oxyde de zinc (ZnO) et ses alliages ternaires ont fait l'objet d'une attention croissante ces dernières années en raison de leurs avantages potentiels par rapport aux nitrures III-V, tels que la disponibilité du substrat, des technologies de croissance et de traitement comparativement plus simples et une énergie de liaison des excitons plus élevée (60 meV contre 25 meV pour le GaN). La grande bande interdite du ZnO ( $E_g=3,4$  eV) et les possibilités d'ingénierie de la bande interdite offertes par le CdZnO (pour une bande interdite plus étroite) et le MgZnO (pour une bande interdite plus large) font du système de matériaux ZnO un concurrent prometteur dans le domaine optoélectronique.

À la lumière de ce qui précède, l'objectif principal de notre thèse est de montrer l'importance de la double utilisation du ZnO et ses alliages avec les BQs comme des milieux actifs dans les diodes laser. On cherche à améliorer les performances et les propriétés des lasers à partir de modélisation et simulation numérique des structures laser à BQ à base de ZnO et ses alliages tel que MgZnO et CdZnO.

Nos résultats obtenus sont similaire globalement avec ceux de la littérature existante de domaine du laser à BQs, ce qui nous donne une indication claire de l'importance de ZnO et ses alliages, et de la grande efficacité de notre modèle utilisé pour mettre en évidence les propriétés de ce type de composés optoélectroniques.

**Mots clés :** laser de semi-conducteur, boîte quantique, ZnO, alliages, équations du bilan, simulation.

# Abstract

---

## **Abstract:**

Semiconductor quantum dots (QDs) have received considerable attention in recent decades due to their remarkable properties, where charge carriers are confined in all three directions in space. In QDs, the energy levels are discrete and the transitions between electrons and holes are comparable with transitions between discrete levels of single atoms. So, quantum dots are sometimes described as artificial atoms. These structures have been advantageous in optoelectronic devices where their use allows obtaining higher performances.

Among wide-gap semiconductors, zinc oxide (ZnO) and its ternary alloys have received growing attention in the last years due to their potential advantages over III–V nitrides, such as substrate availability, comparatively simpler growth and processing technologies, and larger exciton binding energy (60 meV against 25 meV for GaN). The large energy gap of ZnO ( $E_g=3.4$  eV) and the bandgap engineering possibilities offered by CdZnO (for narrower gap) and MgZnO (for wider gap) make the ZnO material system a promising contender in the optoelectronics field.

In light of the above, the main objective of our thesis is to show the importance of the dual use of ZnO and its alloys with QDs as active media in laser diodes. We seek to improve the performance and properties of lasers from modeling and numerical simulation of QD laser structures based on ZnO and its alloys such as MgZnO and CdZnO.

Our results are globally similar with those of the existing literature in the field of Qd lasers, which gives us a clear indication of the importance of ZnO and its alloys, and of the high efficiency of our model used to highlight the properties of this type of optoelectronic compounds.

**Keywords:** Semiconductor laser, Quantum dot, ZnO, Alloys, Balance sheet equations, Simulation.

## Table des matières

<i>Dédicaces</i> .....	I
<i>Remerciements</i> .....	II
<i>Résumé</i> .....	III
<i>Table des matières</i> .....	VI
<i>Liste des figures</i> .....	X
<i>Liste des tableaux</i> .....	XIV
<i>Nomenclature</i> .....	XV

### Introduction Générale

Introduction Générale.....	2
----------------------------	---

### Chapitre I : Généralités sur les boîtes quantiques

I.1. Introduction.....	7
I.2. Les hétéro-structures semi-conductrices.....	7
I.2.1. Les puits quantiques.....	10
I.2.1.1. Notion d'exciton 2D.....	11
I.2.2. Les boîtes quantiques (0D).....	11
I.3. Intérêt des boîtes quantiques.....	12
I.4. Dynamique de porteurs dans une boîte quantique.....	13
I.4.1. Emission activée thermiquement.....	14
I.4.2. Emission Poole-Frenkel, Tunnel pur et Tunnel Activée thermiquement.....	14
I.5. Propriétés de base des boîtes quantiques.....	16
I.5.1. Propriétés électroniques.....	17
I.5.1.1. Confinement de porteurs.....	17
I.5.1.2. Etats électroniques et niveaux d'énergie.....	17
I.5.2. Propriétés optiques.....	19
I.5.2.1. Luminescence d'un ensemble de boîtes quantiques.....	19
I.5.2.2. Luminescence d'une boîte quantique unique.....	20
I.5.3. Propriétés structurales.....	20
I.5.3.1. Dimensions caractéristiques.....	20

# Table des matières

I.5.3.2. Défauts.....	21
I.6. Caractéristiques physiques des boîtes quantiques.....	22
I.6.1. Croissance auto-organisée des BQs.....	22
I.6.1.1. Modes de croissance.....	22
I.6.1.2. Contrainte dans les structures de boites quantiques.....	23
I.6.1.3. La couche de mouillage.....	25
I.6.2. Méthodes de réalisation des boîtes quantiques.....	25
I.6.2.1. L'épitaxie par jets moléculaires.....	25
I.6.2.2. Epitaxie en phase vapeur aux organo-métalliques.....	26
I.7. Les applications des boites quantiques dans l'optoélectronique et la photonique.....	27
I.8. Conclusion.....	28
Référence.....	29

## **Chapitre II : Etat de l'art des propriétés d'Oxide de Zinc**

### **(ZnO)**

II.1. Introduction.....	34
II.2. Historique de ZnO.....	34
II.3. Les propriétés de ZnO massif.....	36
II.3.1. La structure cristalline.....	36
II.3.2. Le paramètres de maille.....	39
II.3.3. La structure de bande.....	40
II.3.4. Propriétés électriques.....	42
II.3.5. Propriétés optiques.....	43
II.3.6. Propriétés thermiques.....	45
II.3.6.1. Coefficients de dilatation thermique.....	45
II.3.6.2. Conductivité thermique.....	46
II.3.6.3. Chaleur spécifique.....	47
II.4. Les différents alliages à base de ZnO.....	47

# Table des matières

II.4.1. L'alliage $Mg_x Zn_{1-x} O$ .....	48
II.4.2. L'alliage $Be_z Zn_{1-z} O$ .....	50
II.4.3. L'alliage $Cd_y Zn_{1-y} O$ .....	51
II.5. Conclusion.....	52
Référence.....	54

## **Chapitre III : Lasers et lasers à BO propriétés fondamentales**

III.1. Introduction.....	59
III.2. Laser.....	59
III.3. L'histoire ultra-courte des lasers.....	59
III.4. Principes de base du laser.....	60
III.5. Interaction de la lumière et des atomes.....	61
III.5.1. Absorption.....	62
III.5.2. Émission spontanée.....	63
III.5.3. Émission stimulée.....	63
III.5.4. Taux d'absorption et d'émission.....	63
III.6. Laser à semi-conducteur.....	65
III.6.1. Fonctionnement d'un laser à semi-conducteur.....	66
III.6.2. Types de laser.....	67
III.6.2.1. Laser Fabry-Pérot.....	67
III.6.2.2. Lasers Distributed Bragg Reflector.....	68
III.6.2.3. Lasers Distributed Feedback.....	68
III.7. Laser à boîte quantique.....	70
III.7.1. Notions fondamentales sur les lasers à boîtes quantiques.....	70
III.7.1.1. Structure électronique boîte quantique et processus de diffusion des porteurs.....	71
III.7.1.2. Gain, indice de réfraction et facteur d'amélioration de la largeur de ligne.....	75
III.7.1.3. Élargissements homogènes et inhomogènes.....	77

# Table des matières

---

III.8. Conclusion.....	80
Référence.....	81
<b><u>Chapitre VI : Résultats et discussions</u></b>	
IV.1. Introduction .....	86
IV.2. Structure I .....	86
IV.2.1. Modèle physique .....	87
IV.2.2. Modèle théorique et équations du bilan .....	88
IV.2.3. Résultats de simulation et discussion .....	94
IV.2.4. Puissance de sortie .....	96
IV.2.5. Gain optique .....	97
IV.2.6. Résumé I .....	99
IV.3. Structure II.....	99
IV.3.1. Modèle physique .....	100
IV.3.2. Modèle théorique et Equations du bilan .....	100
IV.3.3. Résultats de la simulation et discussion .....	103
IV.3.4. Puissance de sortie .....	106
IV.3.5. Gain optique .....	109
IV.3.6. Résumé II .....	110
IV.4. Conclusion .....	111
Référence.....	112
Conclusion générale.....	115

# Liste des figures

## Liste des figures :

### Chapitre I : Généralités sur les boîtes quantiques

<b>Figure (I.1)</b>	Schéma de principe de la structure de bande (a) d'un puits quantique (b) d'une BQ.....	8
<b>Figure (I.2)</b>	Représentation de la densité d'états des porteurs de charges associées respectivement à un matériau massif (3D): $\frac{d\rho}{dE} \propto E^{1/2}$ , un puits quantique (2D): $\frac{d\rho}{dE} \propto \text{const}$ , un fil quantique (1D): $\frac{d\rho}{dE} \propto E^{-1/2}$ et une BQ (0D): $\frac{d\rho}{dE} \propto \delta(E)$ .....	13
<b>Figure (I.3)</b>	Différents mécanismes d'émission de porteurs dans la BQ.....	13
<b>Figure (I.4)</b>	Emission tunnel des porteurs du niveau fondamental de BQ vers la bande de conduction de la couche matrice.....	15
<b>Figure (I.5)</b>	Schéma de la densité d'états électronique et morphologie d'une structure à boîtes BQs InAs/GaAs. Les flèches en pointillé symbolisent les transitions optiques permises dans les boîtes [38].....	18
<b>Figure (I.6)</b>	Niveaux d'énergie dans les BQs. Le confinement en énergie des porteurs varie selon les dimensions des boîtes. Plus la boîte est petite, plus le confinement est fort et donc plus les niveaux d'énergie sont éloignés du fond du puits (comme pour un puits à une dimension). [38].....	19
<b>Figure (I.7)</b>	Spectre de photoluminescence d'une structure à boîte quantique InAs/GaAs à la température ambiante. [38].....	20
<b>Figure (I.8)</b>	Spectre de photoluminescence à basse température a) d'une dizaine de BQs InAs/GaAs. b) d'une BQ unique InAs/GaAs. [38].....	21
<b>Figure (I.9)</b>	Modes de croissance : a) Volmer-Weber (VW), b) Frank-Van der Merwe (FVdM) et c) Stranski-Krastanov (SK) [54].....	22
<b>Figure (I.10)</b>	Etapes de la méthode de croissance Stranski-Krastanov.....	23
<b>Figure (I.11)</b>	Spectres XRD pour une structure à 5 multicouches de BQs (a) sans couche de compensation de contrainte, (b) 8 MC de $\text{In}_{0.36}\text{Ga}_{0.64}\text{P}$ , (c) 8 MC de $\text{In}_{0.30}\text{Ga}_{0.70}\text{P}$ et (d) 4 MC de GaP [56].....	24
<b>Figure (I.12)</b>	Schéma de principe d'une croissance par épitaxie par jets moléculaires. [60].	26
<b>Figure (I.13)</b>	Montage expérimental du système de croissance MOCVD. [63].....	27
<b>Figure (I.14)</b>	Exemples de cavités destinées aux applications photoniques. (a) Cavité à cristaux photoniques formée d'un trou manquant dans un cristal photonique parfait. Le cristal photonique est gravé dans une membrane GaAs de 180 nm d'épaisseur, (b) Micro disque GaAs, image au microscope électronique, Images INL (c) Cavités micro piliers (diamètre de 125, 250 et 400 nm) contenant une BQ unique pour la génération d'états quantiques de la	

# Liste des figures

	lumière. Image LPN. [64].....	28
<b>Chapitre II : Etat de l'art des propriétés d'Oxide de Zinc (ZnO)</b>		
<b>Figure (II.1)</b>	a) Nombre de publications par an sur le ZnO et le GaN publiées au cours de la période 1900-2010. (La recherche sur le GaN s'est stabilisée alors que celle sur le ZnO continue de progresser). b) Nombre de publications scientifiques faisant référence à la recherche des expressions "oxyde de zinc" et "oxyde de nano zinc" publiées au cours de la période 2011-2020. [11, 12].....	35
<b>Figure (II.2)</b>	Représentation schématique des trois formes cristallographique du ZnO soit (a) cubique rocksalt (B1), (b) cubique zinc-blende (B3) et (c) hexagonale wurtzite (B4). Les sphères noires et grises représentent respectivement les atomes d'oxygène et de zinc. [17].....	36
<b>Figure (II.3)</b>	Variation de l'énergie totale en fonction du volume de maille par unité de ZnO pour les phases rocksalt, zinc blende et wurtzite1. [20].....	37
<b>Figure (II.4)</b>	Représentation schématique d'une structure wurtzite de ZnO avec les constantes de réseau a et c, le paramètre u qui est exprimé comme la longueur de liaison ou la distance entre les plus proches voisins b divisée par c (0,375 dans le cristal idéal), les angles de liaison $\alpha$ et $\beta$ (109,47° dans le cristal idéal), et trois types de distances entre les seconds plus proches voisins b'1 , b'2 , et b'3. [21].....	38
<b>Figure (II.5)</b>	Structures de bandes électroniques de ZnO wurtzite calculées avec la LDA (gauche), la LDA incluant le SIC-PP (droite). [27].....	40
<b>Figure (II.6)</b>	Structure de la bande de valence du ZnO près du point $\Gamma$ . Les cercles ouverts représentent les résultats de calcul en utilisant la méthode ASA-LMTO, y compris le couplage spin-orbite. Les lignes continues correspondent au hamiltonien effectif de Rashba-Sheka-Pikus. [32].....	42
<b>Figure (II.7)</b>	Evolution de la mobilité du ZnO en couche mince d'épaisseur 320 nm en fonction de la température de recuit in-situ. La couche a été préparée par pulvérisation en radiofréquence sur un substrat de verre [38].....	43
<b>Figure (II.8)</b>	Spectres de photoluminescences de ZnO pur et modifié par des réactifs : A(trichloro(dodécyl) silane), B((3-Aminopropyl) triethoxysilane), et C (3 (Trimethoxysilyl) propylmethacrylate). [47].....	44
<b>Figure (II.9)</b>	Paramètres du réseau de ZnO wurtzite en fonction de la température. [48]...	46
<b>Figure (II.10)</b>	Conductivité thermique de ZnO entièrement fritté, chauffé de la température ambiante à 1000 °C. [49].....	46
<b>Figure (II.11)</b>	Données de chaleur spécifique mesurées pour le ZnO pur comparées aux données pour le ZnO à varistance ( $\theta_D$ est la température de Debye). [50].....	47
<b>Figure (II.12)</b>	Bande interdite en fonction de la constante de réseau pour les ternaires de ZnO, ( $Mg_xZn_{1-x}O$ , $Cd_yZn_{1-y}O$ et $Be_zZn_{1-z}O$ ). Notez que les binaires terminaux MgO et CdO sont cubiques dans leur état d'équilibre. Alors que la bande interdite en fonction de la composition pour $Mg_xZn_{1-x}O$ est	

# Liste des figures

	raisonnablement établie, celles pour $\text{Be}_z\text{Zn}_{1-z}\text{O}$ et $\text{Cd}_y\text{Zn}_{1-y}\text{O}$ ne le sont pas. Les bandes interdites des variétés cubiques et wurtzitiques de $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ sont données. [15].....	48
<b>Figure (II.13)</b>	Spectres de transmission des films de $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ mesurés à température ambiante. L'encart montre le $E_g$ déterminé à partir des spectres, en supposant une dépendance $\alpha^2 \propto (h\nu - E_g)$ , où $\alpha$ et $h\nu$ sont le coefficient d'absorption et l'énergie photonique, respectivement. [68].....	49
<b>Figure (II.14)</b>	La dépendance de bande interdite de $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ sur toute la gamme de composition. Energies des transitions fondamentales bande à bande $E_0^A$ du ZnO wurtzitique et celles de la structure rocksalt. (Il faut garder à l'esprit que les couches dans la région correspondant aux transitions wurtzite cubes pourraient être de structure mixte). [57].....	50
<b>Figure (II.15)</b>	Dépendance à la concentration ( $y$ ) des spectres d'absorption des monocouches $\text{Cd}_y\text{Zn}_{1-y}\text{O}$ obtenues à température ambiante. Les courbes, de droite à gauche correspondent à celles des échantillons avec $y= 0, 0.0013, 0.027, 0.043$ et $0.073$ . [82].....	51

## Chapitre III : Lasers et lasers à BQ, propriétés fondamentales

<b>Figure (III.1)</b>	Eléments de base du système laser.....	60
<b>Figure (III.2)</b>	Illustration schématique des niveaux d'énergie discrets des atomes et des molécules.....	62
<b>Figure (III.3)</b>	Transitions électroniques entre les bandes de conduction et de valence dans les matériaux semi-conducteurs.....	63
<b>Figure (III.4)</b>	Schéma de <b>(a)</b> la structure d'un laser à émission latérale et <b>(b)</b> la structure d'un laser à émission de surface à cavité verticale.....	67
<b>Figure (III.5)</b>	Laser à structures <b>(a)</b> Fabry-Perot, <b>(b)</b> Distributed Bragg Reflector et <b>(c)</b> Distributed Feedback.....	69
<b>Figure (III.6)</b>	Schéma d'une structure de bande électronique d'électrons et de trous d'un laser à boîte quantique. [24].....	72
<b>Figure (III.7)</b>	Image d'exciton de la structure électronique du laser à boîte quantique. [24].....	73
<b>Figure (III.8)</b>	Fonction d'élargissement homogène du gain $B_{cv}(E - E_{opt})$ et de la variation de l'indice de réfraction $D_{cv}(E - E_{opt})$ . [24].....	78
<b>Figure (III.9)</b>	Fonction d'élargissement inhomogène $G_{cv}(E - E_{opt})$ de la taille de la boîte ou de la fluctuation de l'énergie. [24].....	79

## Chapitre IV : Résultats et discussions

<b>Figure (IV.1)</b>	a) Diagramme énergétique de la région active du laser de $\text{MgZnO}/\text{ZnO}$ avec les processus de diffusion, de recombinaison et de relaxation. b) Schémas	
----------------------	---	--

## *Liste des figures*

	d'une boîte quantique en ZnO en forme de lentille et son puits quantique de MgZnO.....	87
<b>Figure (IV.2)</b>	Variation temporelle de la densité de photons pour les états (A) ES2, (B) ES1 et (C) GS pour différents courants d'injection $I=0,01, 0,02, 0,03$ et $0,05$ A.....	94
<b>Figure (IV.3)</b>	Densité de photons en fonction de la densité d'électrons du GS.....	95
<b>Figure (IV.4)</b>	Puissance de sortie du laser en fonction du temps pour les états (A) ES2, (B) ES2 et (C) GS pour différents courants d'injection $I= 0,01, 0,02, 0,03$ et $0,05$ A.....	96
<b>Figure (IV.5)</b>	Courbe caractéristique de la puissance de sortie en fonction des courants d'injection.....	97
<b>Figure (IV.6)</b>	Courbe caractéristique du gain en fonction des courants d'injection.....	97
<b>Figure (IV.7)</b>	Réponse de la modulation du petit signal à différents courants d'injection $I$ pour les états (A) ES2, (B) ES1, et (C) GS.....	98
<b>Figure (IV.8)</b>	Diagramme de bande d'énergie de la région active du laser à BQ auto-assemblé CdZnO/ZnO/MgZnO avec différentes dynamiques de porteurs....	99
<b>Figure (IV.9)</b>	Densité de porteurs pour différents courants injectés et à différents HBs <b>a)</b> 1 meV, <b>b)</b> 5 meV, <b>c)</b> 10 meV, et <b>d)</b> 20 meV.....	104
<b>Figure (IV.10)</b>	Densité de photons pour différents courants injectés et à différents HBs a) 1 meV, b) 5 meV, c) 10 meV, et d) 20 meV.....	105
<b>Figure (IV.11)</b>	Densité de photons en fonction de la densité de porteurs pour différents courants injectés à HB=10 meV.....	106
<b>Figure (IV.12)</b>	Puissance de sortie en fonction des modes multi-longitudinaux pour différents courants injectés et à différents HBs : a) 1 meV, b) 5 meV, c) 10 meV, et d) 20meV. L'origine de l'énergie est prise à $E_{cv}$ et IHB est de 15 meV.....	107
<b>Figure (IV.13)</b>	Puissance de sortie en fonction des modes multi-longitudinaux pour différents HBs et à $I=10$ mA. L'origine de l'énergie est prise à $E_{cv}$ et l'IHB est de 15 meV.....	108
<b>Figure (IV.14)</b>	Spectre de gain optique à différents HBs a) 1 meV, b) 5 meV, c) 10 meV, et d) 20 meV pour différents courants injectés. L'origine de l'énergie est prise à $E_{cv}$ et l'IHB est de 15 meV.....	109
<b>Figure (IV.15)</b>	Le spectre de gain optique pour différents HBs et à $I=10$ mA. L'origine de l'énergie est prise à $E_{cv}$ et l'IHB est de 15 meV.....	110

# Liste des tableaux

---

## Liste des tableaux

<b>Tableau (II.1)</b>	Principaux résultats reportés dans la littérature concernant les paramètres associés (paramètres de réseau (a), le rapport c/a et le paramètre u) pour le ZnO cristallisé dans des structures de wurtzite, de Zinc blende et de Rocksalt. [13].....	<b>40</b>
<b>Tableau (II.2)</b>	L'énergie de gap, positions de la bande d du cation $E_d$ et largeurs de bande de valence de p anion $W_p$ de ZnO. [23].....	<b>41</b>
<b>Tableau (II.3)</b>	Indice de réfraction du ZnO autour de maximum d'absorption à 4.2K. [40]...	<b>44</b>
<b>Tableau (II.4)</b>	Paramètres des matériaux ZnO, MgO, BeO et CdO. [77, 78] .....	<b>52</b>
<b>Tableau (IV.1)</b>	Les paramètres utilisés dans la simulation. [10-12].....	<b>93</b>
<b>Tableau (IV.2)</b>	Paramètres utilisés pour la simulation des caractéristiques de laser à BQ auto-assemblé. [8, 19, 20].....	<b>103</b>

# Nomenclature

## Nomenclature

Abréviation	Désignation
<b>BQ</b>	La boîte quantique
<b>Oz</b>	L'axe de croissance
<b>SK</b>	Stranski-krastanov
<b>VW</b>	Volmer-weber
<b>FVdM</b>	Frank-Van der Merwe
<b>XRD</b>	Diffraction des rayons X
<b>WL</b>	Couche de mouillage (Wetting Layer)
<b>MBE</b>	Epitaxie par jet moléculaire (Moléculaire Beam Epitaxie)
<b>MOCVD</b>	Déposition chimique organométallique en phase vapeur (Metal Organic Chemical Vapor Deposition,).
<b>ZnO</b>	L'oxyde de zinc
<b>HF</b>	Hartree-fock
<b>LCAO</b>	Combinaisons linéaires d'orbitales atomiques
<b>DFT</b>	Density functional theory
<b>GGA</b>	Generalized gradient approximation
<b>HRXRD</b>	Diffraction des rayons X à haute résolution
	LDA (gauche), la LDA incluant le SIC-PP
<b>ARPES</b>	Angle Resolved photoelectron Spectroscopy
<b>SIC-PP</b>	Self interaction corrected pseudo-potentials
<b>LDA</b>	Local density approximation
<b>ASA</b>	L'approximation de la sphère atomique
<b>LMTO</b>	L'orbitale muffin-tin linéaire
<b>TCO</b>	Transparent conductive oxide
<b>PL</b>	Photoluminescence
<b>MASER</b>	Amplification micro-ondes par émission stimulée de rayonnement
<b>Laser</b>	L'amplification de la lumière par émission stimulée de radiations
<b>DEL</b>	Les diodes électroluminescentes
<b>EEL</b>	Lasers à émission latérale
<b>VCSEL</b>	Lasers à émission de surface à cavité verticale
<b>FP</b>	Lasers Fabry-Perot
<b>DBR</b>	Les lasers à réflecteur de Bragg distribué
<b>DFB</b>	Les lasers à rétroaction distribuée
<b>WL</b>	Couche de mouillage
<b>CB</b>	Bande de conduction
<b>VB</b>	Bande de valence
<b>TRPL</b>	Time-resolved photoluminescence
<b>LO</b>	Optique longitudinale
<b>WL</b>	Couche de mouillage

# Nomenclature

---

<b>ES2 et ES1</b>	Premier et deuxièmes états excités
<b>GS</b>	L'état fondamental
<b>HB</b>	L'élargissement homogène
<b>IHB</b>	L'élargissement inhomogène
<b>GS</b>	Etat fondamental doublement dégénéré
<b>ES1, ES2</b>	Etat excité doublement quadruplement dégénéré
<b>SCH</b>	Structure à confinement séparé
<b>FWHM</b>	La largeur maximale à mi-hauteur (full width at half maximum)

# **Introduction générale**

# Introduction générale

---

## Introduction générale

Les progrès des technologies de nano-fabrication au cours des dernières décennies ont facilité la réalisation de nouvelles nanostructures semi-conductrices aux propriétés adaptées à des applications spécifiques. Les nanostructures dont les dimensions spatiales sont comparables à la longueur d'onde de Broglie des porteurs de charge résidant dans le matériau sont facilement réalisables avec une précision nanométrique. À cette échelle de longueur, les effets de confinement quantique modifient les propriétés électroniques et optiques et des phénomènes quantiques intéressants apparaissent. Les boîtes quantiques (BQs) semi-conducteurs ont reçu une attention considérable au cours des dernières décennies en raison de leurs propriétés remarquables, où les porteurs de charge sont confinés dans les trois directions de l'espace. Ce confinement leur confère un spectre en énergie discret. Ces structures ont été avantageuses dans les dispositifs optoélectroniques où leur utilisation permet d'obtenir des performances plus élevées.

En 1982, Yasuhiko Arakawa et Hiroyuki Sakaki ont proposé l'utilisation de BQs comme milieu actif de diodes laser [1]. Dans les BQs, les porteurs sont confinés à des dimensions nulles, ce qui entraîne une structure de niveaux d'énergie discrets similaire à celle des atomes. C'est pourquoi les BQs sont également appelées atomes artificiels malgré l'existence de différences fondamentales. Les atomes artificiels sont constitués d'amas de plusieurs dizaines de milliers d'atomes naturels et les porteurs sont piégés dans un potentiel parabolique. Leur grand avantage est que, grâce au choix des matériaux, de la forme et de la taille, les propriétés des BQs peuvent être adaptées à la demande. Les BQs sous forme de nanoparticules étaient déjà utilisées dans les années 1930 pour colorer les verres [2], même si l'on ne comprenait pas alors que les différentes couleurs provenaient des différentes tailles des nanoparticules. Appliqués dans les lasers comme l'ont proposé Arakawa et Sakaki, les BQs peuvent, grâce à leurs niveaux d'énergie discrets, réduire la densité de courant de seuil, améliorer la stabilité en température.

Le laser à semi-conducteurs à BQs est une source lumineuse importante pour les applications de l'optoélectronique telle que la communication de données à haut débit, elle est insensible à la rétroaction optique, et offre des caractéristiques de largeur de bande de modulation élevée et de faible chirp, sa structure du dispositif est presque la même que celle des lasers à semi-conducteurs à émission par le bord à tripe étroite courants. Toutefois, dans la couche active, de petites BQs d'une taille de l'ordre du nanomètre sont fabriqués, généralement par une

# Introduction générale

---

méthode d'auto-assemblage du cristal. Un laser à semi-conducteur à BQs commun n'est pas un dispositif à couche unique, mais plusieurs couches minces de puits quantiques avec des BQs sont empilées dans la région active. Un électron et un trou sont capturés dans une boîte unique et se comportent comme des particules confinées de dimension zéro avec un état énergétique fixe. Ainsi, la lumière émise par un laser à semi-conducteur à BQs présente un état de cohérence élevé. La croissance du cristal, les caractéristiques du dispositif et leurs traitements théoriques ont été présentés dans un livre de Sugawara(1999) [3].

Récemment, l'oxyde de zinc (ZnO) a attiré l'attention de la communauté scientifique en tant que "matériau du futur". Il s'agit toutefois d'une erreur d'appellation, car le ZnO a été largement étudié depuis 1935 [4], et une grande partie de l'industrie actuelle et de notre vie quotidienne dépendent de ce composé. Le regain d'intérêt pour ce matériau est né du développement de technologies de croissance pour la fabrication de monocristaux et de couches épitaxiales de haute qualité, permettant la réalisation de dispositifs électroniques et optoélectroniques à base de ZnO.

Au cours de la dernière décennie, un certain nombre de groupes ont proposé que le ZnO puisse être un bon matériau pour les dispositifs optoélectroniques à part entière, en raison des nombreuses similitudes entre les propriétés optiques, électriques et structurelles du ZnO et du GaN, notamment leurs bandes interdites (3,437 eV pour le ZnO et 3,50 eV pour le GaN à 2 K) et leurs constantes de réseau. En outre, d'autres encore ont noté que le ZnO possède une énergie de liaison des excitons libres de 60 meV, soit environ deux fois celle du GaN, ce qui pourrait conduire à des lasers à injection UV (diodes laser UV et détecteurs) très efficaces à température ambiante, à base de ZnO et ses alliages (MgZnO, CdZnO...), à condition qu'un dopage p efficace et de bonnes jonctions p-n et hétérojonctions puissent être démontrés dans ces matériaux. Le dopage de type p du ZnO hétéro-épitaxial sur saphir a été rapporté par plusieurs groupes japonais et américains, en utilisant un dopage accepteur de N et plusieurs techniques de croissance différentes, avec des degrés de succès variables.

À la lumière de ce qui précède, L'objectif principal de ce présent travail est de montrer l'importance de la double utilisation du ZnO et ses alliages avec les BQs comme des milieux actifs dans les diodes laser. On cherche à améliorer les performances et les propriétés des lasers à partir de modélisation et simulation numérique des structures laser à BQ à base de ZnO et ses alliages tel que MgZnO et CdZnO.

# Introduction générale

---

Cette thèse comporte quatre chapitres. Le premier chapitre est consacré à la présentation des généralités sur les nanostructures de type BQs par la définition des hétéro-structures semi-conductrices souligner la dynamique de porteurs dans une BQ, les propriétés de base des BQs, citer les différentes méthodes, les techniques expérimentales de la fabrication et présenter les applications des BQs dans le domaine optoélectronique et photonique.

Le second chapitre dédié à la description sur l'oxyde de zinc (ZnO), nous présenterons un état de l'art de ses principales propriétés telles que sa structure cristalline, sa structure de bandes électroniques, ses caractéristiques électriques, optiques ou encore thermiques. Nous présenterons ensuite les différents alliages à base de ZnO tels que MgZnO, CdZnO et BeZnO et leurs propriétés.

Le troisième chapitre porte sur l'état de l'art sur les lasers, nous présenterons le principe de fonctionnement et les caractéristiques principales d'un laser à semi-conducteur. Et pour comprendre la physique de base et la modélisation de laser à BQs, nous décrirons ses propriétés fondamentales notamment la structure électronique, les processus de diffusion des porteurs, le gain et l'indice de réfraction, ainsi que les élargissements homogènes et inhomogènes.

Le quatrième chapitre est consacré aux résultats de modélisation et simulation numérique qui ont été menées dans ce travail. Deux nanostructures de basse dimensionnalité de laser à base de ZnO et ses alliages (ZnO/MgZnO et CdZnO/ZnO/MgZnO) ont été étudiées. Cette analyse est basée sur une approche semi-analytique d'un ensemble d'équations de taux couplées. Afin d'améliorer les performances dynamiques du laser à BQ et son fonctionnement sur l'état excité, l'influence de plusieurs paramètres comme par exemple le courant d'injection, l'élargissement homogène (les effets de la température), la puissance de sortie, la réponse de la modulation du petit signal et les caractéristiques de gain, ont été montrés et présentés.

Enfin, nous terminons par une conclusion générale qui résume nos résultats les plus saillants.

# Introduction générale

---

## Référence

- [1] Y. A rakawa and H. Sakaki, Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current, Appl. Phys. Lett. 40 , 939 (1982).
- [2] D. Bimberg, M. Grundmann, N.N. Ledentsov, Quantum dot heterostructures, John Wiley, New York (1999).
- [3] Junji Ohtsubo “ Semiconductor Lasers Stability, Instability and Chaos” Fourth Edition, volume 111, William T. Rhodes School of Electrical and Computer Engineering Georgia Institute of Technology Atlanta, USA.
- [4] C. W. Bunn, Proc. Phys. Soc. London 47 (1935) 835.

# **CHAPITRE I**

*Généralité sur les boites  
quantiques*

## **I.1. Introduction**

Les boîtes quantiques (BQs) semi-conductrices sont des objets de dimensions nanométriques, qui contiennent typiquement plusieurs milliers d'atomes de matériaux semi-conducteurs, ce qui mène au confinement des électrons et / ou des trous dans les trois directions spatiales et leurs niveaux d'énergie sont discrets, Un tel système de dimension zéro se comporte dans les propriétés électroniques et optiques presque comme un «atome artificiel» et offre de nombreuses possibilités pour de nouvelles applications, par exemple dans les dispositifs électroniques tels que les transistors à effet de champ [1, 2, 3] ou les cellules mémoires [2, 4, 5, 6], ainsi que dans les dispositifs optoélectroniques tels que les lasers [7, 8, 9], les détecteurs [10,11], les amplificateurs [12], des dispositifs optiques haute fréquence [13, 14, 15] et des sources à photon unique [16, 17, 18]. Les BQs peuvent être synthétisées par différentes méthodes comme l'épitaxie à jets moléculaires [19], la chimie colloïdale [20], ou par dépôt chimique en phase vapeur à partir de précurseurs organométalliques [21]. Les BQs définies par les potentiels électrostatiques permettent aussi d'observer des effets liés au confinement quantique à très basse température [22].

Dans ce chapitre, nous allons présenter des généralités sur les nanostructures de type BQs, la première partie du courant chapitre est consacré à la définition sur les hétéro-structures semi-conductrices ainsi que la dynamique de porteurs dans une BQ, la deuxième partie traite des propriétés de base des BQs. Par la suite, nous décrivons brièvement les différentes méthodes et techniques expérimentales de la fabrication. Finalement nous présenterons également les applications des BQs dans l'optoélectronique et la photonique.

## **I.2. Les hétéro-structures semi-conductrices**

En maîtrisant les conditions de croissance des matériaux, la physique des semi-conducteurs et ses domaines d'application peuvent faire des avancées étonnantes. Depuis les années 70 du siècle dernier, diverses techniques de croissance ont été développées qui ont permis d'améliorer la qualité du contrôle final du dépôt d'atomes, mono couche par mono couche. Ainsi, il est possible de concevoir des structures semi-conductrices dont les tailles sont réduites de l'ordre de la longueur d'onde des électrons dans le milieu, qui est typiquement de quelques nanomètres, et dont les compositions peuvent également varier à l'échelle du nanomètre.

Dans ce type de structures, du fait que le potentiel à l'interface entre deux matériaux de différente énergie de bande interdite est discontinu, des effets de confinement se produisent (Figure (I.1)). Les porteurs ne se déplacent plus librement dans toutes les directions de l'espace, et leurs états énergétiques sont quantifiés dans les directions de confinement. Nous présenterons ici en détail les principales propriétés électroniques des puits quantiques (confinement unidimensionnel) et des BQs (confinement tridimensionnel).

Dans une hétéro-structure, l'électron est soumis à un potentiel non périodique reflétant l'alternance des matériaux qui la composent (A et B). En pratique, ce potentiel peut être remplacé par la somme du potentiel périodique associé au cristal virtuel « moyen »  $V_{\text{cristal}}(\vec{r})$  et du potentiel variable  $V_n^h(\vec{r})$ , qui définit l'hétéro-structure [23]. Ce dernier, également appelé potentiel de confinement, permet de considérer des variations d'énergie de bandes entre les différents matériaux semi-conducteurs de l'hétéro-structure.

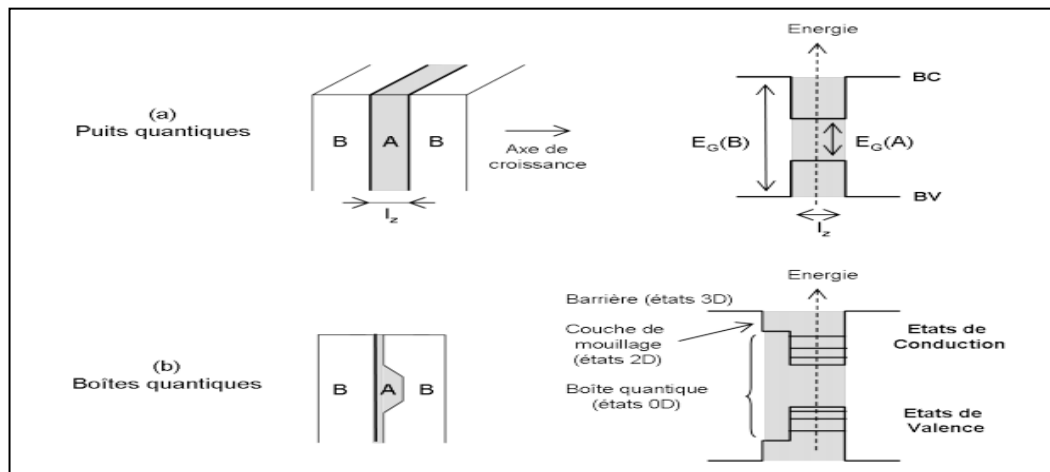


Figure (I.1) : Schéma de principe de la structure de bande (a) d'un puits quantique (b) d'une BQ.

L'équation de Schrödinger pour une hétéro-structure s'écrit alors :

$$H\Psi_{n,\vec{k}} = \left( \frac{-\hbar^2}{2m_0} \Delta_{\vec{r}} + V_{\text{cristal}}(\vec{r}) + V_n^h \right) \Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = E_{n,\vec{k}} \Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (I.1)$$

$\hbar$  est la constante de Planck réduite,  $m_0$  la masse de l'électron dans le vide et  $n$  l'indice des bandes considérées.

Nous utiliserons l'approximation de la fonction enveloppe pour simplifier cette équation. Cela inclut de considérer que le potentiel  $V_h$  varie lentement par rapport au paramètre du maille. Ceci est légal, sauf aux interfaces entre les deux matériaux, qui sont abruptes. Cependant,

l'approximation de la fonction enveloppe reste valable pour les hétéro-structures pour deux raisons :

- Aux interfaces, on prend en compte de la différence de masse effective des deux matériaux formant l'hétéro-structure, de plus la fonction enveloppe et la densité de courant de probabilité de présence a une continuité.
- D'autre part, le très fort confinement permet d'ignorer la densité de probabilité de présence aux interfaces entre les deux matériaux.

Dans le cadre de l'approximation de la fonction enveloppe, on décrit la fonction d'onde  $\Psi_{n,\vec{k}}$  à partir des fonctions de Bloch en  $\vec{K} = \vec{0}$ ,  $u_{n,0}(\vec{r})$ , moyennées sur l'ensemble de l'hétéro-structure. Elles font intervenir des fonctions lentement variables devant le pas du réseau cristallin  $F_n$ , appelées fonctions enveloppe.

La fonction d'onde  $\Psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$  pour les électrons de conduction s'écrit :

$$\Psi_n(\vec{r}) = F_{n,k}(\vec{r}) u_{n,0}(\vec{r}) \quad (I.2)$$

Nous pouvons à présent obtenir une nouvelle équation de Schrödinger faisant intervenir l'hamiltonien de masse effective  $\tilde{H}$ . Toutes les variations entre les couches semi-conductrices s'expriment alors grâce à la masse effective  $m_n(\vec{r})$  des matériaux semi-conducteurs massifs qui constituent l'hétéro-structure [24]. La fonction d'onde associée est la fonction enveloppe  $F_n$

L'équation (I.1) devient alors, pour la bande de conduction :

$$\tilde{H}F_{n,k}(\vec{r}) = \left( -\nabla \frac{\hbar^2}{2m_n(\vec{r})} \nabla + V_c^h(\vec{r}) \right) F_{n,k}(\vec{r}) = (E_{n,k} - E_{n,0}) F_{n,k}(\vec{r}) \quad (I.3)$$

$m_n(\vec{r})$  est la masse effective qui dépend du matériau semi-conducteur et  $E_{n,k} - E_{n,0}$  est l'énergie de confinement. L'approximation de la fonction enveloppe revient donc à considérer l'hétéro-structure comme un cristal "virtuel", qui aurait les mêmes propriétés de symétrie que le cristal de départ, perturbé par un potentiel considéré comme extérieur  $V_c^h$ .

Cette équation est valable uniquement pour une bande simple où la masse effective ne dépend que de  $\vec{k}$ . Un calcul tenant compte de plusieurs bandes est décrit dans [23] et les références

incluses. Il nécessite l'utilisation d'une nouvelle fonction enveloppe, possédant autant de composantes que de bandes considérées.

Nous pouvons maintenant résoudre l'équation (I.3) pour une hétéro-structure. Dans cette partie, nous nous intéresserons en particulier aux principales propriétés électroniques des puits quantiques (cas d'un confinement unidimensionnel) et des BQs (cas d'un confinement tridimensionnel). Nous présentons sur la Figure (I.1) le schéma de principe de ces structures de basse dimensionnalité.

### I.2.1. Les puits quantiques

La figure (I.1.a) montre schématiquement la structure du puits quantique, qui est obtenue en insérant une fine couche d'un matériau A entre deux couches de matériau B de largeur de bande interdite plus importante. Les porteurs restent libres de se déplacer dans un plan perpendiculaire à l'axe de croissance (Oz), mais ont des états énergétiques quantifiés dans la direction de confinement. L'équation peut être décomposée aux valeurs propres entre la partie suivant z et une partie dans le plan du puits dont la solution est une onde plane 2D.

La relation de dispersion peut s'écrire :

$$E(\vec{k}) = E_{n_z} + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m_{e,h}} \quad (\text{I.4})$$

Dans le cas de l'approximation d'un puits de potentiel de largeur  $L_z$  et de barrières infinies des deux cotés, les énergies de confinement  $E_{n_z}$  sont données par :

$$E_{n_z}^{e,h} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_{e,h} L_z^2} n_z^2 \quad n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{I.5})$$

Où  $n_z$  sont les nombres quantiques primaires pour l'électron ou pour le trou.

Dans le cas d'un semi-conducteur en phase ZB, ceci se traduit par la levée de dégénérescence des bandes de trous lourds et de trous légers au centre de la zone de Brillouin du fait que  $m_{hh} \neq m_{lh}$ .

### I.2.1.1. Notion d'exciton 2D

L'effet de la dimension structurale sur les excitons affecte non seulement leur densité d'états, mais affecte également leur énergie de liaison. Dans le cas des excitons bidimensionnels (2D), le mouvement des électrons et des trous est restreint selon la direction (Oz). Celui-ci est décrit par les fonctions d'onde  $\phi_e(\vec{k}_z, e)$  de l'électron et  $\phi_h(\vec{k}_z, h)$  du trou. Dans le plan, le mouvement de l'exciton est décrit en considérant séparément le mouvement du centre de masse et de la particule réduite. Le mouvement du centre de masse peut être décrit par une onde plane 2D et celui de la particule réduite par une fonction d'onde hydrogéoïde 1S à deux dimensions de rayon de Bohr  $a_{2D}$ . Cette dernière s'écrit :

$$\phi_{\text{env}}^{2D}(\vec{p}_{\parallel}) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_{2D}^2}} \exp\left(-\frac{|\vec{p}_{\parallel}|}{a_{2D}}\right) \quad (\text{I.6})$$

Où le rayon de Bohr  $a_{2D}$  décrit la distance moyenne dans le plan entre l'électron et le trou.

La relation de dispersion d'un exciton 2D s'écrit :

$$E_{\text{ex}}^{2D}(\vec{K}, n) = E_g + E_{n_z}^e + E_{n_z}^h - E_{\text{ex}}^b(3D) \frac{1}{(n-1/2)^2} + \frac{\hbar^2 (K_x^2 + K_y^2)}{2M^*} \quad (\text{I.7})$$

Où  $E_{n_z}^{e(h)}$  correspond à l'énergie de quantification de l'électron (du trou), donnée par la relation (I-5) dans le cas d'un puits de barrières infinies. L'énergie de liaison de l'exciton 1S se trouve renforcée  $E_{\text{ex}}^b(2D) = 4E_{\text{ex}}^b(3D)$  ainsi que sa force d'oscillateur. En effet, la quantification selon l'axe (Oz) augmente le recouvrement des fonctions d'onde de l'électron et du trou, renforçant leur attraction et réduisant le rayon de Bohr  $a_{2D}$ .

### I.2.2. Les boîtes quantiques (0D)

Les boîtes quantiques sont des nanostructures qui confinent les porteurs de charge dans les trois directions spatiales. Ce confinement tridimensionnel se traduit par une structure électronique discrète, qualitativement différente de la structure électronique d'un puits quantique qui ne confine les porteurs que dans une seule direction. Par conséquent, les boîtes quantiques présentent des niveaux d'énergie électronique discrets situés dans la bande de conduction. Le résultat de la limitation de l'effet cumulatif des porteurs dans trois directions de l'espace est de produire un objet appelé boîte quantique. Tout comme dans les puits

quantiques ou les fils quantiques, les gens observent la discrétisation des niveaux d'énergies dans trois directions de l'espace

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \left( \frac{n_x \pi}{L_x} \right)^2 + \left( \frac{n_y \pi}{L_y} \right)^2 + \left( \frac{n_z \pi}{L_z} \right)^2 \right) \quad (I.8)$$

On a donc une discrétisation complète des niveaux d'énergies du semi-conducteur.

Nous apparentons souvent aux BQs comme des "atomes artificiels". En raison de ces niveaux discrets, la densité d'états peut modifier considérablement. Elle s'exprime alors comme une somme de Dirac comme présentée dans la Figure (I.2):

$$\rho^{0D}(E) \propto \sum_{n_x, n_y, n_z} \delta(E - (E_g + E_{n_x, n_y, n_z})) \quad (I.9)$$

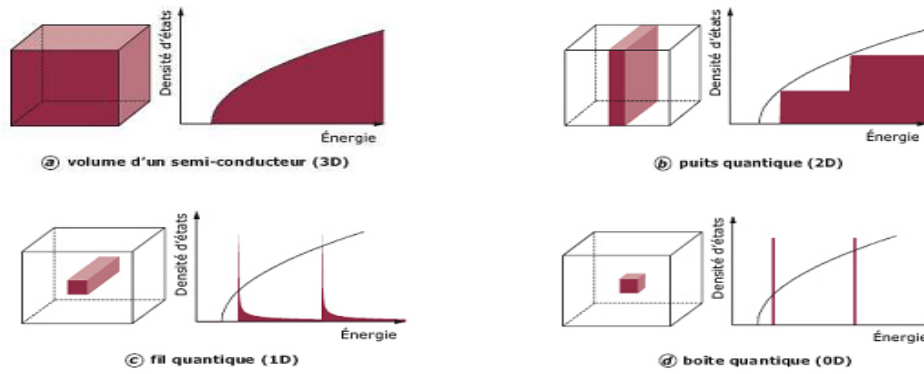
Nous avons finalement complètement résolu le problème soulevé pour les structures massives. Les porteurs injectés se recombinaient ici sur des transitions discrètes.

Enfin, sachez qu'il existe des structures appelées pointillés ou bâtonnets quantiques (quantum dash en anglais). Entre les fils quantiques et les BQs, ils ont un confinement selon deux directions de l'espace, mais ne sont pas infinis dans la troisième direction. Cependant, ils sont suffisamment étendus pour qu'il n'y ait aucun confinement dans cette troisième direction.

### I.3. Intérêt des boîtes quantiques

L'importance du BQ vient d'effets de basse dimensionnalité (0D) qui provoquent des changements dans les propriétés électroniques. Ces inclusions nanométriques présentent un fort confinement tridimensionnel des porteurs, car les porteurs vont aller dans le BQ pour minimisant leur énergie. Ce confinement conduit à la discrétisation de l'état électronique. C'est cette caractéristique des BQ qui a suscité le plus d'intérêt car ils peuvent être considérés comme des atomes artificiels.

Dans le domaine de l'optoélectronique, l'utilisation du BQ dans la structure des émetteurs et des détecteurs peut améliorer certaines de leurs caractéristiques : courant de seuil faible (16 A cm<sup>-2</sup>[25]), sensibilité à la température réduite, dans le cas de un seul BQ, la raie d'émission est fine, et pour un ensemble de BQ, la raie d'émission est plus large. Les bandes d'émission et de détection sont accordables à l'aide de la technologie de diffusion croisée.

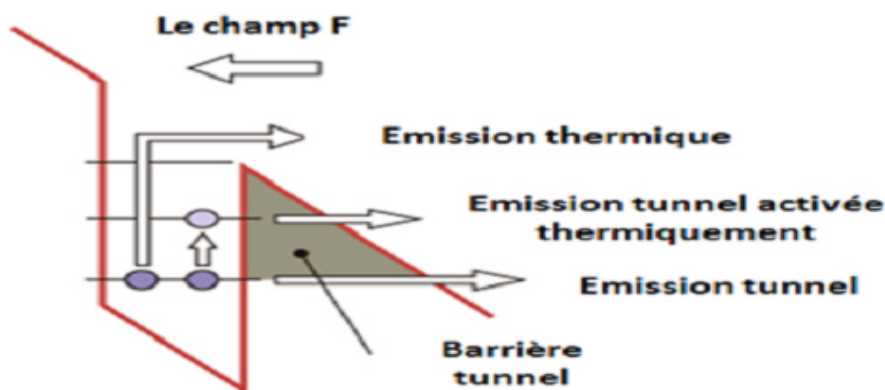


**Figure (I.2) :** Représentation de la densité d'états des porteurs de charges associées respectivement à un matériau massif (3D):  $\frac{d\rho}{dE} \propto E^{1/2}$ , un puits quantique (2D):  $\frac{d\rho}{dE} \propto \text{const}$ , un fil quantique (1D):

$$\frac{d\rho}{dE} \propto E^{-1/2} \text{ et une BQ (0D): } \frac{d\rho}{dE} \propto \delta(E).$$

#### I.4. Dynamique de porteurs dans une boîte quantique

Le BQ auto-assemblé peut capturer des électrons ou des trous pendant une certaine durée, en fonction des différents processus d'émission qui se produiront. Par conséquent, BQ agit comme un réservoir de stockage de charges et d'informations. Les mécanismes d'émission de porteurs d'une BQ vers les bandes de conduction ou les bandes de valence du matériau barrière limitent cette période de stockage. Dans cette partie, nous nous concentrerons sur les différents types d'émission pouvant exister au sein d'une boîte sous l'influence d'un champ électrique. Le dépiégeage des porteurs confinés dans la boîte peut être réalisée par l'une des méthodes suivantes : activation thermique, effet tunnel ou tunnel activé thermiquement (Figure (I.3)). Dans la suite nous allons introduire une description générale de ces phénomènes d'échappement de porteur dans la bande de conduction.



**Figure (I.3):** Différents mécanismes d'émission de porteurs dans la BQ.

#### I.4.1. Emission activée thermiquement

L'émission thermique est le principal phénomène qui domine l'émission de porteurs dans BQs auto-assemblées et les défauts profonds dans les semi-conducteurs, et a été largement étudié. La réponse du BQ sous activation thermique peut être similaire à la réponse d'un défaut profond. Ce type d'excitation provoque l'émission des électrons (trous) avec un taux d'émission thermique  $e_n$  ( $e_p$ ) est donnée par :

$$e_{n/p}(T) = AT^2 \sigma_{n/p} \exp\left(-\frac{E_a^{n/p}}{kT}\right) \quad \text{pour les électrons } n \text{ et les trous } p \quad (\text{I.10})$$

Avec  $E_a^{n/p}$  est l'énergie d'activation des électrons/des trous,  $\sigma_{n/p}$  est la section efficace de capture et A est une constante indépendante de la température.

Expérimentalement, il existe nombreuses précautions préventives à prendre pour les BQs. Parce que le processus d'émission peut être beaucoup plus compliqué et que l'énergie d'activation thermique extraite est différente de l'énergie d'activation (EC-E1) entre le niveau d'énergie de la boîte et la bande de conduction du matériau barrière. [26, 27]

#### I.4.2. Emission Poole-Frenkel, tunnel pur et tunnel activée thermiquement

En présence d'un fort champ électrique, la structure de bande est fortement courbée. Cela conduit à l'existence de l'effet Poole-Frenkel, de l'émission tunnel pure et de l'émission tunnel activée thermiquement.

En 1938, l'effet Poole-Frenkel a été étudié dans un model unidimensionnel [28]. L'existence de ce phénomène est marquée par l'abaissement de la barrière de potentiel au-dessus duquel les porteurs s'échappent (Figure (I.3)).

Le taux d'émission Poole-Frenkel est donné par :

$$e_n(F) = e_n(T) \exp\left(\frac{\delta E(F)}{kT}\right) \quad (\text{I.11})$$

Avec  $\delta E(F)$  est le changement effectif de l'énergie d'activation. Ce potentiel coulombien est donné par [29]:

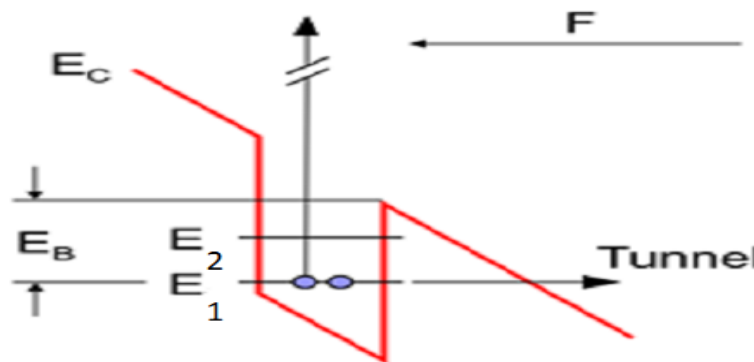
$$\delta E(F) = \frac{1}{2} \left( \frac{e^3 F}{\pi \epsilon \epsilon_0} \right)^{1/2} \quad (\text{I.12})$$

En combinant ces deux équations, on obtient :

$$\ln \left( \frac{e_n(F)}{e_n(T)} \right) = \frac{1}{2} \left( \frac{e^3}{\pi \epsilon \epsilon_0} \right)^{1/2} \frac{F^{1/2}}{kT} \quad (\text{I.13})$$

Avec  $\epsilon$  est la constante diélectrique de la matrice.

Par conséquent, la variation linéaire de l'émission logarithmique de  $e_n$  en fonction de la racine carrée du champ électrique  $F^{1/2}$ . En plus de l'effet Poole-Frenkel qui améliore l'émission des porteurs vers la bande de conduction ou bande de valence, il existe également un effet tunnel pur. L'émission tunnel est le principal processus d'émission qui limite la durée de stockage des porteurs (Figure (I.4)).



**Figure (I.4):** Emission tunnel des porteurs du niveau fondamental de BQ vers la bande de conduction de la couche matrice.

Une modélisation simple de ce phénomène appliquée à la barrière énergétique triangulaire [30, 31] donne la formule suivante, qui relie le taux d'émission tunnel au champ électrique appliqué ( $F$ ) :

$$e^T = \frac{eF}{4\sqrt{2m^*E_B}} \exp \left[ \left( -\frac{4}{3} \right) \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}} \frac{E_B^{3/2}}{eF} \right] \quad (\text{I.14})$$

Le facteur exponentiel est une expression couramment utilisée pour la transparence de la barrière triangulaire. Par conséquent, la probabilité de passage par effet tunnel augmente avec la courbure de la bande sous-champ.

Sous un champ électrique  $F$ , le taux d'émission tunnel pur pour une BQ allongée d'une distance  $L$  suivant la direction  $z$  est décrit par l'équation suivante :

$$e^T = \frac{\hbar\pi}{2m^*L^2} \exp\left[\left(-\frac{4}{3}\right)\sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}} \frac{E_B^{3/2}}{eF}\right] \quad (\text{I.15})$$

Pour l'émission tunnel activée thermiquement : la combinaison de l'émission thermique et de l'émission tunnel produit une émission tunnel activée thermiquement (également connue sous le nom d'effet tunnel assisté par phonons). La participation de phonons énergétiques réduit la largeur de la barrière et augmente la probabilité d'émission du tunnel. Par conséquent, on peut conclure que le processus se compose de deux étapes : la première étape implique une activation thermique à un niveau d'énergie plus élevé, puis un passage à travers une barrière triangulaire par effet tunnel. Ce type d'émission dépend de la température, de la forme de la barrière de potentiel et du champ électrique dans le matériau.

Une méthode très simplifiée donne une expression pour l'émission tunnel activée thermiquement (Equation (I.16)). Elle est composée du produit de la transparence de la barrière triangulaire et le taux d'émission thermique des électrons. [30]

$$e^{ph} = AT^2\sigma_n \exp\left(-\frac{E_a^n}{kT}\right) \exp\left[\left(-\frac{4}{3}\right)\sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}} \frac{E_B^{3/2}}{eF}\right] \quad (\text{I.16})$$

L'effet de l'émission tunnel assistée par phonons a été largement étudié expérimentalement pour les défauts profonds [32, 33] et a été observé dans plusieurs BQs [34, 35, 36].

## I.5. Propriétés de base des boîtes quantiques

Une BQ peut être imaginé comme un énorme atome artificiel, composé de milliers d'atomes réels. C'est une structure qui confine spatialement les porteurs à une région de l'ordre de la longueur d'onde de De Broglie, ce qui affecte considérablement l'état quantique du système. Cela a fait des progrès significatifs dans la recherche sur les propriétés de base des systèmes à zéro dimensionnalité, et a créé des opportunités pour de nouveaux dispositifs dans divers domaines d'application [37].

### I.5.1. Propriétés électroniques

#### I.5.1.1. Confinement de porteurs

Si un matériau semi-conducteur avec un gap optique  $E_{g1}$  appelé couche active est entouré d'un matériau avec un gap plus grand  $E_{g2}$  (appelé barrière), une région où les porteurs (électrons et trous) sont confinés avec des énergies quantifiées sera créée. La structure électronique du matériau présente des niveaux d'énergie discrets qui dépendent de l'épaisseur et de la profondeur du puits.

La réduction de la dimensionnalité des l'hétéro-structures conduit aux différents types de confinements des porteurs, on parle donc du confinement bidimensionnel dans la structure à puits quantique, du confinement unidimensionnel dans la structure à fils quantique, et enfin du confinement à zéro dimension dans la structure de BQs. Comparé aux matériaux massifs, aux puits quantiques ou aux fils quantiques, le confinement électronique dans les BQs peut provoquer une modification radicale de la densité d'états électroniques. En fait, la densité d'états électronique présente un spectre discret sous l'action de ce confinement provoqué par la discrétisation des niveaux d'énergies, comme le montre la figure (I.2).

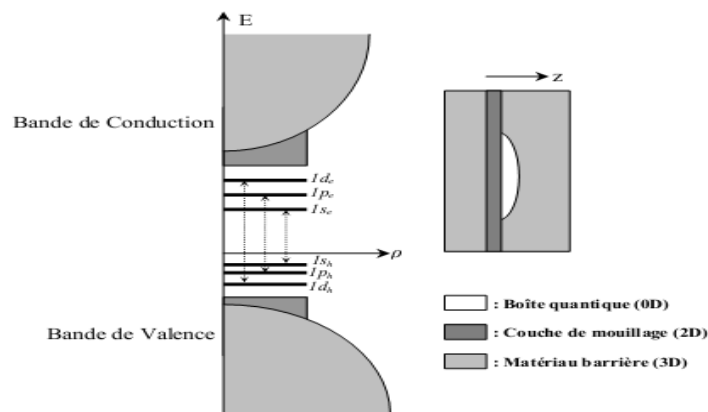
#### I.5.1.2. Etats électroniques et niveaux d'énergies

En raison du confinement en énergie dans les trois directions de l'espace, les niveaux d'énergies des électrons et des trous sont entièrement discrétisés dans une BQ.

De plus, la forte contrainte biaxiale appliquée entre le matériau qui constitue la boîte ( $a_{\text{InAs}} = 6.0583\text{\AA}$ ) et le matériau qui l'entoure ( $a_{\text{GaAs}} = 5.6533\text{\AA}$ ) ajoutée à la rupture de symétrie entre l'axe de croissance et les directions du plan, repoussant la bande de trous légers. Par conséquent, seuls les trous lourds sont considérés dans la suite.

La structure de boîte InAs / GaAs produite par croissance auto-organisée contient GaAs sous forme 3D (massive), un puits mince 2D (couche de mouillage) d'InGaAs et des boîtes 0D d'InAs. Par conséquent, les états de conduction de ce système sont constitués d'un continuum d'énergie correspondant à la bande de conduction du GaAs massif. Ensuite pour des énergies plus faibles se trouve le continuum de la couche 2D d'InGaAs (couche de mouillage), et enfin pour des énergies encore plus basses, les états de conduction sont réduits aux états discrets des boîtes. La figure (I.5) montre les densités d'états de valence et de conduction du système InAs/GaAs. Sur cette figure, nous avons représenté trois niveaux d'énergie dans la boîte,

représentant 1Se (h) (niveau fondamental), 1Pe (h) et 1de (h) (niveaux excités) pour les électrons (respectivement pour les trous). [38]



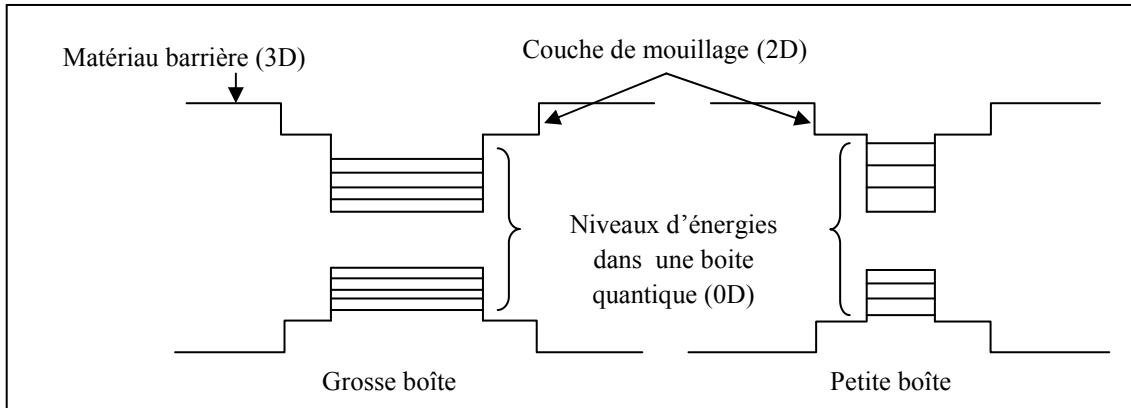
**Figure (I.5) :** Schéma de la densité d'états électronique et morphologie d'une structure à boîtes BQs InAs/GaAs. Les flèches en pointillés symbolisent les transitions optiques permises dans les boîtes [38].

L'emplacement et le nombre de niveaux d'énergie accessibles aux électrons dans les boîtes restent à déterminer. La figure (I.6) montre un diagramme schématique simple de la structure électronique d'une BQ, montrant l'effet de la taille des BQs sur le nombre et la position des niveaux d'énergie.

Différents modèles ont été utilisés pour calculer ces niveaux d'énergies. La considération la plus simple est une particule dans une sphère entourée de barrières de potentiel infinies. En introduisant des barrières de potentiel finies et différentes masses effectives entre l'intérieur et l'extérieur de la boîte, le modèle a été encore amélioré. Pour les BQs non sphériques, ce modèle n'est pas suffisant, et la forme de la boîte doit être prise en compte. Malheureusement, la forme exacte et la composition de la boîte sont encore mal comprises, il est donc difficile de comparer avec précision les calculs théoriques des niveaux d'énergie avec les résultats expérimentaux. De plus, compte tenu de la forme de la boîte, nous allons faire face à un problème. Selon les variables d'espace, le potentiel de confinement ne peut pas être séparé, donc l'équation de Schrödinger doit alors souvent être résolue numériquement. [39]

Il existe de nombreuses méthodes de calcul. Par exemple, J. Y. Marzin et al ont donné une méthode semi-analytique pour les BQs coniques [40]. Stier et al. ont proposé un calcul des niveaux d'énergie dans une boîte en tenant compte des contraintes par une méthode  $k_p$  à 8 bandes [41]. Cornet et al. ont utilisé une approche basée sur la transformation de Fourier de l'équation de Schrödinger pour tenir compte de la couche de mouillage [42]. D'autres

méthodes théoriques plus atomistiques ont également été proposées, telles que les calculs de liaisons fortes par Lippens et al [43] ou les méthodes de pseudo-potential par Wang et al [44].



**Figure (I.6) :** Niveaux d'énergie dans les BQs. Le confinement en énergie des porteurs varie selon les dimensions des boîtes. Plus la boîte est petite, plus le confinement est fort et donc plus les niveaux d'énergie sont éloignés du fond du puits (comme pour un puits à une dimension). [38]

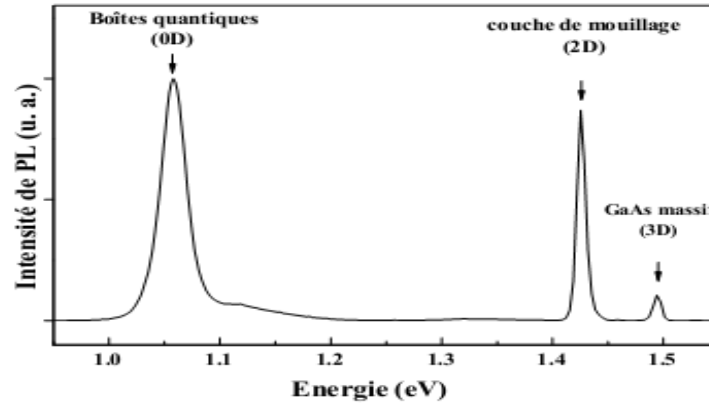
### I.5.2. Propriétés optiques

Le confinement des porteurs dans les BQs conduit à des émissions d'excitoniques plus intenses par rapport à celles obtenues dans des matériaux massifs en raison de la localisation des porteurs dans l'espace. Il s'avère que par rapport aux matériaux massifs, ces hétérostructures ont des propriétés intéressantes, et ont de meilleure performance optiques en raison d'une amélioration de l'interférence des fonctions d'onde, et de la possibilité de contrôler le comportement optique en ajustant la composition et la taille de ces nanostructures. De plus, la modification du diagramme de bande due à la quantification des niveaux d'énergie réduit le couplage des porteurs avec les phonons. Par conséquent, l'efficacité radiative élevée de ces nanostructures est une caractéristique importante pour les applications dans les dispositifs optoélectroniques. [45, 46]

#### I.5.2.1. Luminescence d'un ensemble de boîtes quantiques

En plus de la boîte (0D), les structures à BQs comportent également une matrice semi-conductrice (3D) et une couche de mouillage (2D). Ceci conduit à l'apparition des bandes d'émission de la barrière du massif ainsi que de la couche de mouillage à des énergies supérieures sur les spectres de photoluminescence stationnaire de ces structures à celle des BQs (Figure (I.7)).

Le spectre PL d'un ensemble de BQs est généralement très large (LMH de 20 à 100 meV), car l'élargissement inhomogène de la bande d'émission traduisant les fluctuations statistiques de taille des boîtes de la population.



**Figure (I.7) :** Spectre de photoluminescence d'une structure à boîte quantique InAs/GaAs à la température ambiante. [38]

### I.5.2.2. Luminescence d'une boîte quantique unique

Diverses techniques sont utilisées pour affiner le spectre PL des BQs. Par conséquent, il est possible d'isoler la raie de photoluminescence d'une BQ unique de la distribution inhomogène. La figure (I.8) montre le signal de photoluminescence obtenu pour deux diamètres différents de nano ouvertures dans un masque métallique. Le premier spectre (a) contient une dizaine de raies fines, chaque raie correspondant à l'émission d'une boîte. En revanche, le spectre (b) contient une seule raie fine preuve de l'émission d'une seule boîte. La largeur de cette ligne est limitée par la résolution du banc expérimental utilisé (250 $\mu$ eV). [47]

## I.5.3. Propriétés structurales

### I.5.3.1. Dimensions caractéristiques

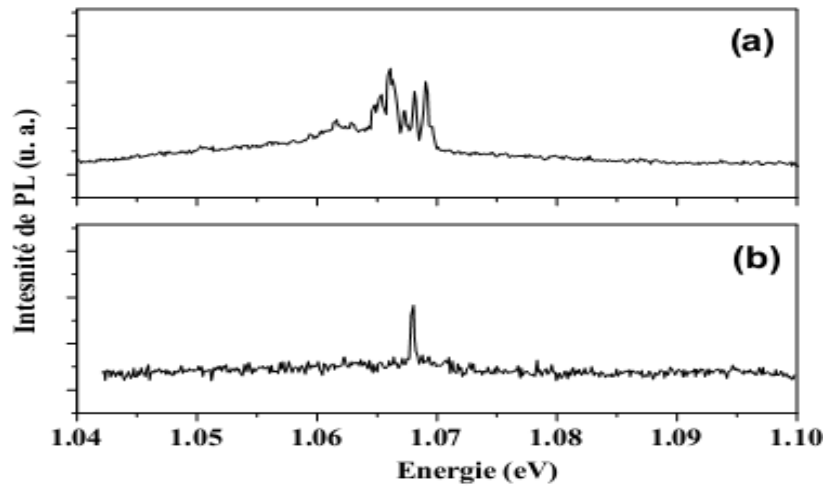
Pour que la quantification soit efficace dans les BQs, il faut que ces dernières aient des dimensions inférieures à la longueur d'onde de De Broglie thermique donnée par la relation :

$$\lambda_{th} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e^*kT}} \quad (I.17)$$

$m_e^*$  est la masse effective de l'électron dans la BQ,  $k$  est la constante de Boltzmann.

Dans le cas contraire, les effets quantiques seront masqués par l'énergie thermique  $kT$ .

Afin de préserver les effets de confinements, les BQs doivent répondre à deux exigences :



**Figure (I.8) :** Spectre de photoluminescence à basse température a) d'une dizaine de BQs InAs/GaAs. b) d'une BQ unique InAs/GaAs. [38]

La taille des boîtes doit être supérieure à une limite basse, pour garantir qu'il existe au moins un niveau électronique dans la structure quantique. Cette taille minimale est définie par l'égalité entre la discontinuité de la bande de conduction  $\Delta E_c$  et la valeur approximative du premier niveau présent dans la boîte [48]:

$$\Delta E_c = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e^*} \frac{1}{D_{\min}^2} \quad (\text{I.18})$$

Il s'agit d'une estimation théorique car il y a toujours un niveau même dans des boîtes de très petite taille. La différence d'énergie entre deux niveaux successifs doit être suffisamment grande pour que la population thermique à 300 K du niveau excité soit faible comparée à la population du niveau fondamental.

### I.5.3.2. Défauts

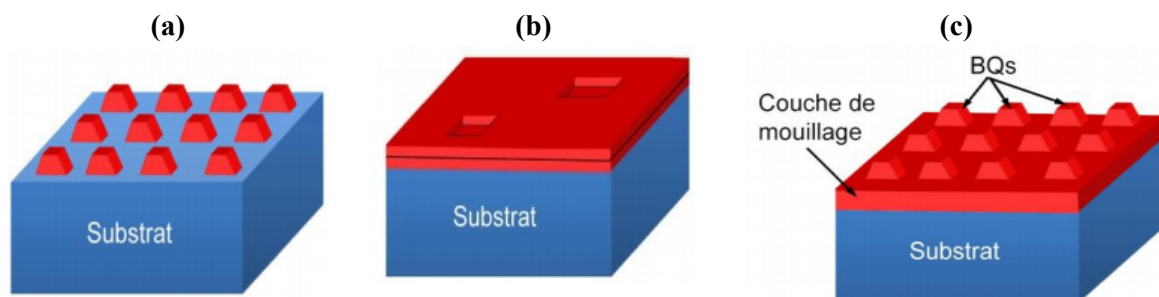
Parmi les obstacles à l'émission de lumière dans un semi-conducteur, les impuretés et défauts cristallins sont susceptibles de piéger les porteurs et entraîner leur recombinaison non radiative. Si les BQs limitent efficacement la diffusion des porteurs aux défauts dans le volume, les pièges de recombinaisons présents à l'interface entre les BQs et les barrières doivent être réduits. Il s'agit donc de fabriquer des BQs sans défauts structuraux avec des interfaces de bonne qualité, afin d'améliorer l'efficacité radiative.

## I.6. Caractéristiques physiques des boîtes quantiques

### I.6.1. Croissance auto-organisée des BQs

#### I.6.1.1. Modes de croissance

Expérimentalement, plusieurs méthodes de fabrication de BQ ont été rapportées, les trois modes les plus connus sont (Figure (I.9)), le premier mode de croissance Volmer-Weber (VW), est celui de la croissance bidimensionnelle couche par couche [49]. Dans la VW, les interactions adatom-adatom sont plus fortes que celles de l'adatom avec la surface, ce qui conduit à la formation de groupes ou d'îlots d'adatom en trois dimensions (3D) [50]. Ainsi que leur grossissement, provoquera la croissance de films multicouches rugueux à la surface du substrat. Ce mode sert à fabriquer des BQs. Le deuxième mode c'est le Frank-Van der Merwe (FM), et de manière antithétique, que VW, les adatoms s'attachent préférentiellement aux sites de surface, ce qui donne des couches entièrement formées et lisses. Cette croissance couche par couche est bidimensionnelle, ce qui indique que des films complets se forment avant la croissance des couches suivantes. [50, 51]. Ce mode essentiellement utilisé pour fabriquer des jonctions PN et des puits quantiques. Le troisième est le mode Stranski-Krastanov (SK), actuellement c'est le mode le plus employé pour la croissance des boîtes quantiques, Ce mécanisme de croissance a été noté pour la première fois par Ivan Stranski et Lyubomir Krastanov en 1938 [52], mais son application était en 1985[53]. Le SK est un processus intermédiaire caractérisé à la fois par la croissance des couches 2D et des îlots 3D, il consiste à déposer une couche épitaxiale mince d'un matériau présentant un paramètre de maille ( $a_c$ ) plus grand que celui du substrat cristallin ( $a_s$ ).



**Figure (I.9) :** Modes de croissance : **a)** Volmer-Weber (VW), **b)** Frank-Van der Merwe (FVdM) et **c)** Stranski-Krastanov (SK) [54].

Dans ce cas, le matériau épitaxié est en compression dans le plan de croissance et est soumis à une contrainte  $\sigma$ . initialement les atomes de la couche épitaxiale adaptée par compression

biaxiale dans une région de croissance couche par couche, traditionnellement appelée couche de mouillage (CM), par suite l'énergie élastique accumulée devient suffisante pour l'apparition de petits îlots tridimensionnels 3D dans la couche CM après une certaine épaisseur critique (C'est une forme de relaxation élastique des contraintes) (Figure (I.10)), parce que le mode de croissance de SK soit applicable si le désaccord de maille doit être suffisamment important  $\Delta a / a > 2\%$  ( $\Delta a = a_c - a_s$ ), Pour un  $\Delta a / a < 2\%$  la relaxation se fait d'une façon plastique par la formation de dislocations.

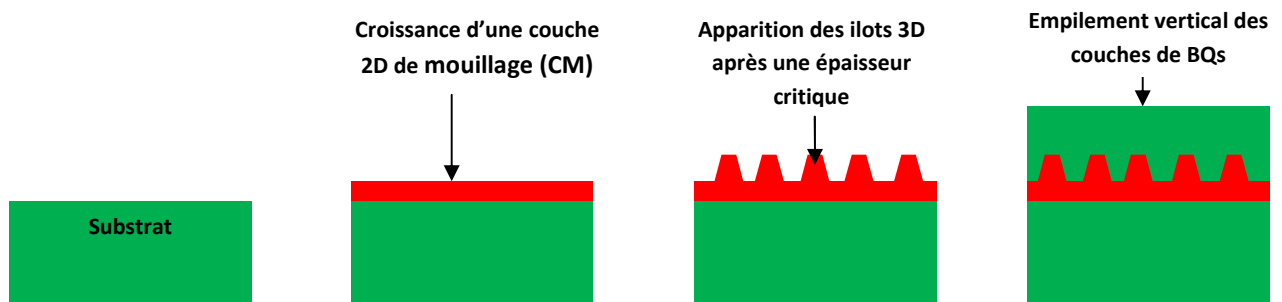


Figure (I.10) : Etapes de la méthode de croissance Stranski-Krastanov.

### I.6.1.2. Contrainte dans les structures de boîtes quantiques

La densité de BQ dépend en grande partie des conditions de croissance. En utilisant l'empilement vertical de plusieurs plans BQ, une haute densité de BQs peut être assurée. Cependant, la croissance du BQ multicouche conduira à l'accumulation de contraintes internes dans la structure. Après un certain nombre de couches de BQs, la contrainte se relâche plastiquement par la formation des défauts et des dislocations dans la structure. Afin d'éviter la relaxation, l'énergie élastique totale  $E_{total}$  de la structure ne doit pas dépasser la valeur critique. Cette dernière est donnée par la relation suivante [55]

$$E_{totale} = N_{empilement} \cdot \langle \varepsilon_{\perp} \rangle^2 \cdot e \cdot A \quad (I.19)$$

Avec  $N_{empilement}$  est le nombre d'empilement,  $\langle \varepsilon_{\perp} \rangle$  est la contrainte moyenne perpendiculaire aux couches de BQs,  $e$  est l'épaisseur des couches d'espacement entre les différents plans de BQs, et  $A$  est une fonction des coefficients élastiques de chaque couche, et elle est donné par [55] :

$$A = C_{11} + C_{12} - 2C_{12}^2 / C_{11} \quad (I.20)$$

Avec  $C_{11}$  et  $C_{12}$  sont les constants élastiques en (GPa).

La contrainte perpendiculaire  $\varepsilon_{\perp}$  de l' $i^{\text{ième}}$  couche dans un empilement est donnée par la relation suivante [56]

$$\varepsilon_{\perp} = \frac{a_{i\perp} - a_s}{a_s} \quad (\text{I.21})$$

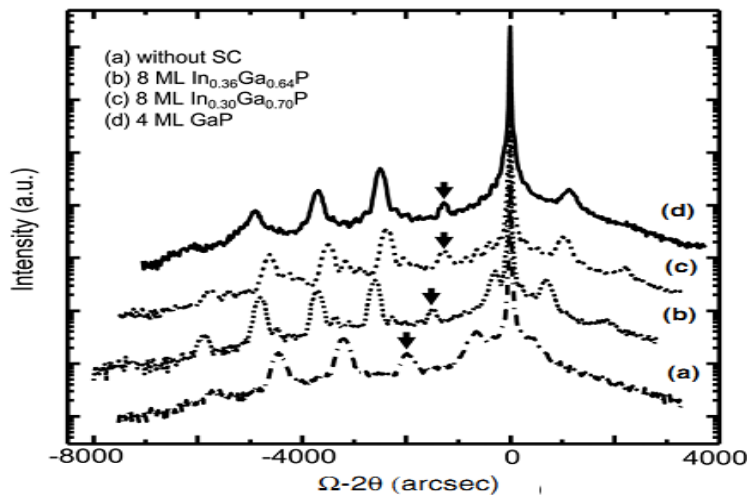
Avec  $a_{i\perp}$  est le paramètre de maille perpendiculaire de l' $i^{\text{ième}}$  couche épitaxiale et  $a_s$  est le paramètre de maille du substrat. Par conséquent, la contrainte perpendiculaire moyenne est calculée comme suit :

$$\langle \varepsilon_{\perp} \rangle = \frac{\sum_i (\varepsilon_{\perp})_i \cdot e_i}{\sum_i e_i} \quad (\text{I.22})$$

La valeur de la contrainte moyenne peut être obtenue à partir de la spectroscopie de diffraction des rayons X (XRD) par l'équation suivante [57]

$$\langle \varepsilon_{\perp} \rangle = \frac{\sin \theta_B}{\sin(\theta_B + \Delta\theta)} - 1 \quad (\text{I.23})$$

Où  $\theta_B$  est l'angle de Bragg du substrat,  $\Delta\theta$  est la séparation entre le premier pic du super réseau des BQs.



**Figure (I.11) :** Spectres XRD pour une structure à 5 multicouches de BQs (a) sans couche de compensation de contrainte, (b) 8 MC de  $\text{In}_{0.36}\text{Ga}_{0.64}\text{P}$ , (c) 8 MC de  $\text{In}_{0.30}\text{Ga}_{0.70}\text{P}$  et (d) 4 MC de GaP [56].

Par exemple, comme le montre la figure (I.11) qui présente les spectres XRD pour quatre échantillons qui ont des QDs à 5 piles avec une épaisseur d'espacement de  $15\text{nm}$  (les premiers

pics du super-réseau des BQs désigné par les flèches). Une diminution de la contrainte moyenne dans les structures à multicouches de BQs a été montrée par cette figure, en utilisant une technique de compensation de contrainte.

Avec l'élaboration de cette dernière et de la technique de l'indium-flush, les problèmes d'accumulation de contraintes compressive et de relaxation plastique de contrainte et de formation des défauts ont été surmontés. [56]

### **I.6.1.3. La couche de mouillage**

Pour obtenir des BQs, il convient de réaliser de petits volumes d'un matériau appelé "couche de mouillage" ou Wetting Layer (WL) dans laquelle se trouvent les boîtes. Cette couche est de l'ordre de 1nm et se comporte comme un puits quantique. L'importance de cette couche de mouillage est de taille puisque des porteurs libres peuvent y être confinés. Toutefois, cette énergie de confinement est en général supérieure à l'énergie de la boîte et des états électroniques correspondants. La couche de mouillage ne croît pas de façon homogène, il peut apparaître des terrasses ou défauts [58], qui peuvent se comporter comme des BQs plus plates avec des énergies de confinement variant d'une monocouche à plusieurs monocouches.

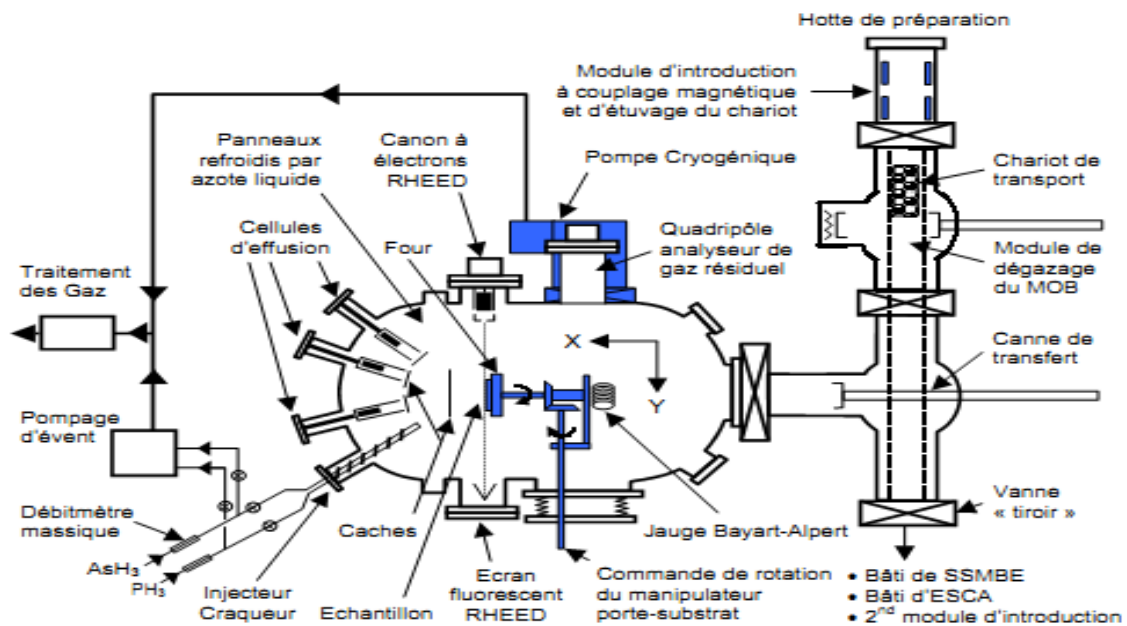
## **I.6.2. Méthodes de réalisation des boîtes quantiques**

La réalisation des BQs est très complexe. Plusieurs méthodes existent telle que la croissance MBE (Moléculaire Beam Epitaxie, épitaxie par jet moléculaire) ou une technique de dépôt MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition, déposition chimique organométallique en phase vapeur).

### **I.6.2.1. L'épitaxie par jets moléculaires**

Le principe de l'EJM a été développé au tournant du siècle, mais ce n'est qu'à la fin de 1960 qu'il a été perfectionné par John Arthur et Alfred Cho [59]. Cette technique est largement utilisée pour la croissance de couches minces, en particulier la croissance des BQs semi-conductrices, car elle permet d'obtenir des interfaces abruptes et cristallographiquement parfaites. EJM est une technologie de dépôt sous vide (pression résiduelle entre  $10^{-9}$  et  $10^{-10}$  Pa) pour assurer la propreté de la surface (sans vide, les atomes utilisés pour la croissance peuvent interagir avec les molécules de gaz résiduelles). Le principe consiste à évaporer sous forme de jets moléculaires des matériaux issus de sources élémentaires, placés dans des cellules à effusion, et à diriger ces flux de matière vers un support

cristallin chauffé (substrat). Les atomes décomposés diffusent à la surface du substrat pour former monocouche par monocouche des empilements de couches minces. [60]



**Figure (I.12) :** Schéma de principe d'une croissance par épitaxie par jets moléculaires. [60]

Une croissance très lente (de 0,1 à 1 monocouche moléculaire) assure un meilleur contrôle de l'épaisseur de la couche et de sa composition. Des clapets électromécaniques devant des sources peuvent s'ouvrir et se fermer en moins de 100ms, permettant d'interfaces abruptes entre deux couches minces de matériaux différents. Un contrôle précis de la température des sources permettent d'ajuster le taux de déposition. L'ajout de nouveaux éléments peut se faire simplement par un ajout de cellules supplémentaires. Malgré les nombreux avantages de la technique d'EJM, les BQs obtenues montrent des fluctuations de taille (~10%) et de répartition. [61]

### I.6.2.2. Epitaxie en phase vapeur aux organo-métalliques

L'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (EPVOM) est une technologie d'épitaxie largement utilisée dans l'industrie actuelle car elle permet d'épitaxier des hétéro-structures (boîtes quantiques) avec une grande vitesse de croissance (4µm/heure) sur de grandes surfaces. Dans EPVOM, les éléments à épitaxier sont introduits dans la chambre de réaction sous forme de précurseurs gazeux, entraîné par un gaz vecteur, et maintenu dans la chambre de croissance sous une pression de 70 Torr. Les BQs épitaxiées par EPVOM ne sont formées

que dans des conditions de croissance particulières, à basse température (environ 500 °C). [62]

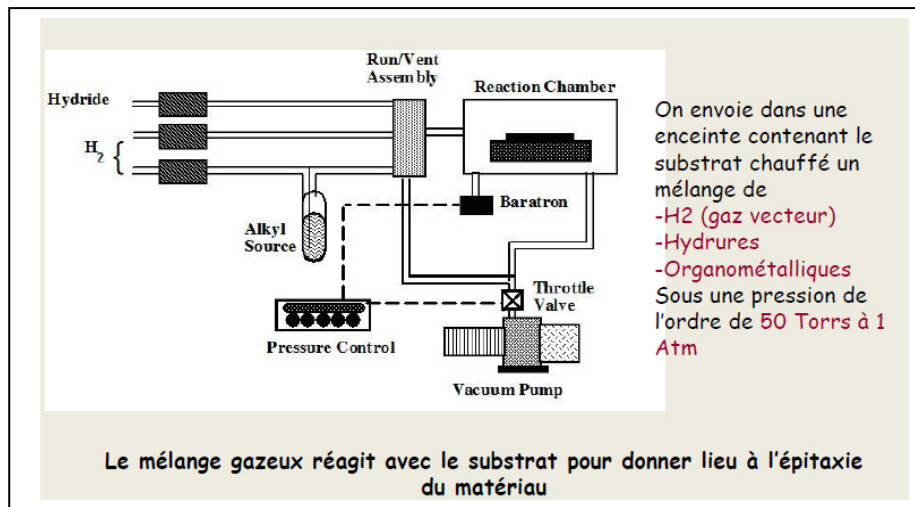
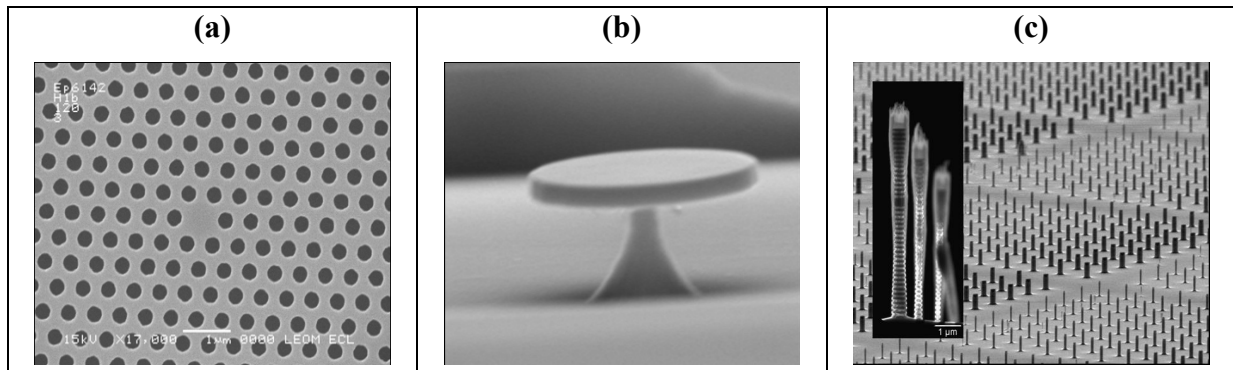


Figure (I.13): Montage expérimental du système de croissance MOCVD. [63]

## I.7. Les applications des boîtes quantiques dans l'optoélectronique et la photonique

On retrouve les BQs dans de nombreux domaines d'applications, principalement dans des dispositifs optoélectroniques et en photonique. Dès leur découverte à la fin des années 80, les BQs auto-assemblées crues en mode de croissance Stranski-Krastanow (SK) ont attiré l'attention due à leurs nombreuses perspectives d'applications. Les propriétés physiques remarquables de ces nanostructures découlent de leur spectre d'états énergétiques discrets. Le potentiel d'applications de ces nanostructures tient également au fait qu'elles peuvent aisément être intégrées à des dispositifs micro ou optoélectroniques et qu'un fort degré de confinement des porteurs assure une bonne stabilité en température des performances de ces dispositifs. Des structures à BQs auto-assemblées peuvent avantageusement remplacer des structures à puits quantiques 2D utilisés présentement comme zone active de plusieurs dispositifs optoélectroniques (Le chapitre suivant portera plus spécifiquement sur les applications aux lasers).



**Figure (I.14) :** Exemples de cavités destinées aux applications photoniques. **(a)** Cavité à cristaux photoniques formée d'un trou manquant dans un cristal photonique parfait. Le cristal photonique est gravé dans une membrane GaAs de  $180\text{ nm}$  d'épaisseur, **(b)** Micro disque GaAs, image au microscope électronique, Images INL **(c)** Cavités micro piliers (diamètre de  $125$ ,  $250$  et  $400\text{ nm}$ ) contenant une BQ unique pour la génération d'états quantiques de la lumière. Image LPN. [64]

En plaçant des BQs dans des cavités optiques (micropiliers, cristaux photoniques ou microdisques), on peut obtenir un régime de couplage faible ou fort entre une BQ et un mode de la cavité. Des exemples de cavités sont présentés sur la Figure (I.14). Le régime de couplage faible se manifestant par l'effet Purcell a été observé pour la première fois dans des micropiliers [65, 66]. L'effet Purcell étant la réduction de la durée de vie radiative des excitons de la boîte par la présence d'un mode de cavité résonant, il a été observé que cette durée de vie est réduite. Le régime de couplage fort a également été mis en évidence dans les micropiliers, dans les cristaux photoniques et dans les microdisques. Le groupe de Yamamoto a réussi à réaliser une source de photons indiscernables, intéressante pour la cryptographie quantique [67]. On peut également se servir d'une BQ comme source afin d'émettre deux photons intriqués [68].

## I.8. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté essentiellement la définition de boîtes quantiques, le confinement des porteurs dans ces structures et l'intérêt de l'étude des molécules de BQs ainsi que leurs propriétés telles que les propriétés électroniques et optiques. Par la suite nous décrivons brièvement les caractéristiques physiques des BQs avec mention des différentes techniques de leur fabrication et leurs applications.

**Référence:**

- [1] S. Tiwari, F. Rana, H. Hanafi, A. Hartstein, E. F. Crabbé, and K. Chan, Silicon nanocrystal based memory, *Appl. Phys. Lett.* 68, 1377 (1996).
- [2] K. Koike, K. Saitoh, S. Li, S. Sasa, M. Inoue, and M. Yano, Room-temperature operation of a memory-effect AlGaAs/GaAs heterojunction field-effect transistor with self-assembled InAs nanodots, *Appl. Phys. Lett.* 76, 1464 (2000).
- [3] H. Kim, T. Noda, T. Kawazu, and H. Sakaki, Control of Current Hysteresis Effects in a GaAs/n-AlGaAs Quantum Trap Field Effect Transistor with Embedded InAs Quantum Dots, *Jpn. J. Appl. Phys.* 39, 7100 (2000).
- [4] G. Yusa and H. Sakaki, Trapping of photogenerated carriers by InAs quantum dots and persistent photoconductivity in novel GaAs/n-AlAs field-effect transistor structures, *Appl. Phys. Lett.* 70, 345 (1997).
- [5] J.-E. Oh and J.-W. Kim, Room-temperature Memory Operation of Al-GaAs/GaAs High Electron Mobility Transistors with InAs Quantum Dots embedded in the Channel, in *Proceedings of the International Electron Device Meeting 2000, IEDM*, page 106, 2000.
- [6] C. Balocco, A. M. Song, and M. Missous, Room-temperature operations of memory devices based on self-assembled InAs quantum dot structures, *Appl. Phys. Lett.* 85, 5911 (2004).
- [7] Y. Arakawa and H. Sakaki, Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current, *Appl. Phys. Lett.* 40, 939 (1982).
- [8] N. Kirstaedter, N. N. Ledentsov, M. Grundmann, D. Bimberg, V. M. Ustinov, S. S. Ruvimov, M. V. Maximov, P. S. Kop'ev, Z. I. Alferov, U. Richter, P. Werner, U. Gosele, and J. Heydenreich, Low threshold, large  $T_0$  injection laser emission from (InGa)As quantum dots, *Electron. Lett.* 30, 1416 (1994).
- [9] F. Heinrichsdorff, C. Ribbat, M. Grundmann, and D. Bimberg, High-power quantum-dot lasers at 1100 nm, *Appl. Phys. Lett.* 76, 556 (2000).
- [10] J. C. Campbell, D. L. Huffaker, H. Deng, and D. G. Deppe, Quantum dot resonant cavity photodiode with operation near 1.3  $\mu\text{m}$  wavelength, *Electr. Lett.* 33, 1337 (1997).
- [11] L. Chu, A. Zrenner, M. Bichler, and G. Abstreiter, Quantum-dot infrared photodetector with lateral carrier transport, *Appl. Phys. Lett.* 79, 2249 (2001).
- [12] M. Lammlin, G. Fiol, C. Meuer, M. Kuntz, F. Hopfer, A. R. Kovsh, N. N. Ledentsov, and D. Bimberg, Distortion-free optical amplification of 20-80 GHz modelocked laser pulses at 1.3  $\mu\text{m}$  using quantum dots, *Electronics Lett.* 42, 697 (2006).
- [13] M. Kuntz, G. Fiol, M. Lammlin, D. Bimberg, M. G. Thompson, K. T. Tan, C. Marinelli, R. V. Penty, I. H. White, V. M. Ustinov, A. E. Zhukov, Y. M. Shernyakov, and A. R. Kovsh, 35 GHz mode-locking of 1.3  $\mu\text{m}$  quantum dot lasers, *Appl. Phys. Lett.* 85, 843 (2004).
- [14] X. D. Huang, A. Stintz, H. Li, L. F. Lester, J. Cheng, and K. J. Malloy, Passive mode-locking in 1.3  $\mu\text{m}$  two-section InAs quantum dot lasers, *Appl. Phys. Lett.* 78, 2825 (2001).
- [15] F. Hopfer, A. Mutig, M. Kuntz, G. Fiol, D. Bimberg, N. N. Ledentsov, V. A. Shchukin, S. S. Mikhrin, D. L. Livshits, I. L. Krestnikov, A. R. Kovsh, N. D. Zakharov, and P. Werner, Single-mode submonolayer quantum-dot vertical-cavity surface-emitting lasers with high modulation bandwidth, *Appl. Phys. Lett.* 89, 141106 (2006).
- [16] P. Michler, A. Kiraz, C. Becher, W. V. Schoenfeld, P. M. Petroff, L. Zhang, E. Hu, and A. Imamoglu, A quantum dot single-photon turnstile device, *Science* 290, 2282 (2000).
- [17] C. Santori, D. Fattal, J. Vuckovic, G. S. Solomon, and Y. Yamamoto, Indistinguishable photons from a single-photon device, *Nature* 419, 594 (2002).

- [18] A. Lochmann, E. Stock, O. Schulz, R. Hopfer, D. Bimberg, V. A. Haisler, A. I. Toropov, A. K. Bakarov, and A. K. Kalagin, Electrically driven single quantum dot polarised single photon emitter, *Electronics Lett.* 42, 774 (2006).
- [19] L. Goldstein, F. Glas, J.-Y. Marzin, M. N. Charasse, and G. Le Roux. Growth by molecularbeam epitaxy and characterization of InAs/GaAs strained-layer superlattices. *Appl. Phys. Lett.*, 47 : 1099, (1985).
- [20] C. B. Murray, D. J. Norris, and M. G. Bawendi. Synthesis and characterization of nearly monodisperse CdE (E = S, Se, Te) semiconductor nanocrystallites. *J. Am.Chem. Soc.*, 115 : 8706, (1993).
- [21] J. Oshinowo, M. Nishioka, S. Ishida, and Y. Arakawa. Highly uniform InGaAs/GaAs quantum dots (15nm) by metalorganic chemical vapor deposition. *Appl. Phys. Lett.*, 65 : 1421, (1994).
- [22] J. R. Petta, A. C. Johnson, J. M. Taylor, E. A. Laird, A. Yacoby, M. D. Lukin, C. M. Marcus, M. P. Hanson, and A. C. Gossard. Coherent manipulation of coupled electron spins in semiconductor quantum dots. *Science*, 309 : 2180, (2005).
- [23] G. Bastard. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. Les éditions de physique, (1992).
- [24] P. Yu and M. Cardona. Fundamentals of semiconductors. Springer, (1995).
- [25] Guimard, D., Tatebayashi, J., Nishioka, M., Yang, T., Tsukamoto, S. et Arakawa, Y. Les diodes lasers à bases des boîtes quantiques auto-assemblées de InAs/GaAs pour les télécommunications optiques. In Anonyme. Techniques de l'ingénieur. Electronique 1 (2006).
- [26] C. Kapteyn, Carrier Emission and Electronic Properties of Self-Organized Semi-conductor Quantum Dots, Mensch & Buch Verlag, Berlin, 2001, [Dissertation, Technische Universit at Berlin].
- [27] J. Bourgoin and M. Lannoo, Point Defects in Semiconductors II—Experimental Aspects, volume 35 of Springer Series in Solid-State Sciences, Springer, Berlin, 1983.
- [28] J. Frenkel, On pre-breakdown phenomena in insulators and electronic semi-conductors, *Phys. Rev.* 54, 647 (1938).
- [29] J. L. Hartke, The Three-Dimensional Poole-Frenkel, *J. Appl. Phys.* 39, 4871 (1968)
- [30] G. Vincent, A. Chantre, and D. Bois, Electric field effect on the thermal emission of traps in semiconductor junctions, *J. Appl. Phys.* 50, 5484 (1979).
- [31] S. Makram-Ebeid and M. Lannoo, Electric-Field-Induced Phonon-Assisted Tunnel Ionization from Deep Levels in Semiconductors, *Phys. Rev. Lett.* 48, 1281 (1982).
- [32] K. Irmscher, H. Klose, and K. Maas, Electric Field Enhanced Electron Emission from Gold Acceptor Level and A-Centre in Silicon, *Phys. stat. sol. (a)* 7, 25(1983).
- [33] A. Dadgar, R. Engelhardt, M. Kuttler, and D. Bimberg, Capacitance transient study of the deep Fe acceptor in indium phosphide, *Phys. Rev. B* 56, 10241(1997).
- [34] W. H. Chang, W. Y. Chen, T. M. Hsu, N. T. Yeh, and J. I. Chyi, Hole emission processes in InAs/GaAs self-assembled quantum dots, *Phys. Rev. B* 66, 195337 (2002).
- [35] C. M. A. Kapteyn, F. Heinrichsdor, O. Stier, R. Heitz. Electron Escape from InAs Quantum Dots, *Phys. Rev. B* 60 (20), 14265-14268 (1999).
- [36] W.-H. Chang, W. Chen, M. Cheng, C. Lai, T. Hsu, Charging of embedded InAs Self assembled quantum dots by space-charge techniques, *Phys. Rev. B* 64, 125315 (2001).
- [37] Michler P., « Single quantum dots », Springer, 2003.
- [38] Mourad Baira. Propriétés optiques et modélisation des structures à base de boîtes quantiques pour l'émission à 1.3  $\mu\text{m}$ . Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, (2009).
- [39] Marini J. C., Stebe B. et Kartheuser E., *Phys. Rev. B*, 1994, vol. 50, p. 14302.

- [40] Marzin J. Y. et Bastard G., *Solid State Commun.*, 1994, vol. 92, p. 437.
- [41] Stier O., Grundmann M. et Bimberg D., *Phys. Rev. B*, 1999, vol. 59, p. 5688.
- [42] Cornet C., Platz C., Caroff P., Even J., Labbé C., Folliot H., Corre A. L. et Loualiche S., *Phys. Rev. B*, 2005, vol. 72, p. 035342.
- [43] Lippens P. E. et Lannoo M., *Phys. Rev. B*, 1990, vol. 41, p. 6079.
- [44] Wang L.-W. et Zunger A., *Phys. Rev. B*, 1999, vol. 59, p. 15806.
- [45] Fafard, S., Leonard, D., Merz, J.L., et Petroff, P.M., “Selective excitation of the photoluminescence and the energy levels of ultra small InGaAs/GaAs quantum dots”. *Applied Physics Letters*, vol 65, pp 1388–1390, 1994.
- [46] Leon, R., Petroff, P.M., Leonard, D., et Fafard, S., “Spatially-resolved visible luminescence of self-assembled”, *Science*, vol 267 (5206), pp.1966–8, 1995.
- [47] Nishi K., Saito H., Sugou S. et Lee J. S., *Appl. Phys. Lett.*, 1999, vol. 74, p. 1111.
- [48] Bimberg D., Grundmann M. et Ledentsov N. N., « Quantum dot heterostructures », Wiley, 1999.
- [49] F. C. FRANK AND J. H. VAN DER MERWE, One-dimensional dislocations. I. Static theory and II. Misfitting monolayers and oriented overgrowth. *Proc. Roy. Soc. London*, 1949. A 198: 205.
- [50] Oura, K., Lifshits, V.G., Saranin, A.A., Zotov, A.V., Katayama, M., “Surface Science: An Introduction”, Berlin: Springer, 2003.
- [51] Pimpinelli, A., Villain, J., “Physics of Crystal Growth”, Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
- [52] Stranski, I. N. et Krastanow, L., “Abhandlungen der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Klasse IIB”, Akademie der Wissenschaften Wien, 1938.
- [53] Goldstein, L., Glas, F., Marzin, J.Y., Charasse, M.N., et Le Roux, G. “Growth by molecular beam epitaxy and characterization of InAs/GaAs strained-layer superlattices”, *Applied Physics Letters*, vol 47(10), pp 1099–1101, 1985.
- [54] Ahiram EL AKRA. Croissance de boîtes quantiques In(Ga)As sur substrats de silicium et de SOI pour la réalisation d'émetteurs de lumière . Thèse de Doctorat, Université de Lyon, (2012).
- [55] Nasi, L., Ferrari, C., Lazzarini, L., et Clarke, G., “Role of strain on the wavy growth onset in strain-balanced InGaAs-based multiquantum wells”, *Journal of Applied Physics*, vol 92(12), pp 7678–80, 2002.
- [56] J. Tatebayashi, N. Nuntawong, P.S. Wong, Y.-C. Xin, L.F. Lester, et D.L. Huffaker. *Journal of Physics D: Applied Physics* 42 (7), 073002 (12 pp.) – (2009).
- [57] N. Nuntawong, S. Birudavolu, C.P. Hains, S. Huang, H. Xu, et D.L. Huffaker. *Applied Physics Letters* 85 (15), 3050–2 (2004).
- [58] F. Patella, S. Nufri, M. Fanfoni, E. Placidi, A. Sgarlata, and A. Balzarotti, Tracing the two- to three-dimensional transition in the InAs/GaAs(001), heteroepitaxial growth. *Phys. Rev. B*. 67, 205308, 2003.
- [59] Jensen, P. (1996). Fabriquer des objets à l'échelle atomique : comment, alimenté par une pluie d'atomes, un film ultramince se construit. ISSN 0029-5671 CODEN RCCHBV, p. 42-47.
- [60] Olivier Schuler, thèse doctorat “ Epitaxie par Jets Moléculaires à Sources Gazeuses des matériaux AlGaInP sur substrat GaAs pour applications hyperfréquences ”, Université de Lille I (1998).
- [61] Richter, M., “MBE-overgrowth of quantum dots and FIB-written doping patterns”, Thèse de Doctorat en physique, Ruhr-Universität Bochum, 2007.
- [62] A. Michon, thèse de doctorat, Université Paris VI (2007).
- [63] Saint-Girons, G., “L'épitaxie”, Ecole Centrale de Lyon.

- [64] R. Ray-Djondang, ‘‘Thèse de Doctorat de l’Institut National Des Sciences Appliquées de Lyon’’, (2010).
- [65] A. Michon, thèse de doctorat, Université Paris VI (2007).
- [66] J.M Gerard, B.Gayral, J. Lightwave Technol. 17, (1999)p 2089.
- [67] J. M. Gerard, B. Sermage, B. Gayral, B. Legrand, E. Costard, and V. Thierry-Mieg, Phys. Rev. Lett. 81(5) (1998)1110.
- [68] A. K. Ekert, Phys. Rev. Lett. 67, (1991) 661.

# **CHAPITRE II**

*Etat de l'art des propriétés  
d'Oxide de Zinc (ZnO)*

## II.1. Introduction

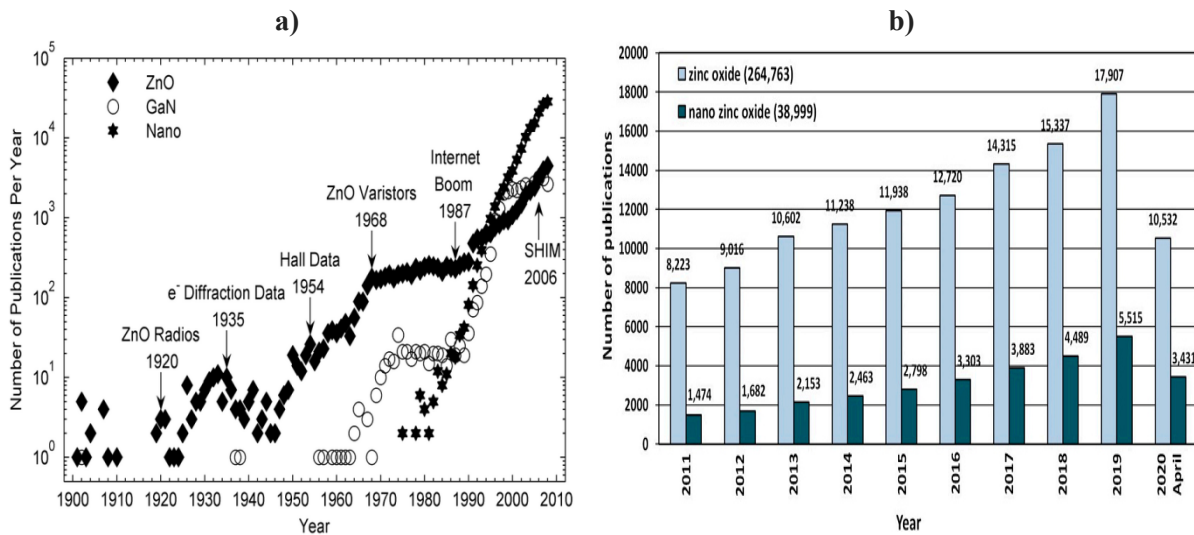
Ce deuxième chapitre est consacré à une description sur l'oxyde de zinc (ZnO), ce matériau qui à l'état nanométrique suscite un grand intérêt ces dernières années. Le nombre de publications et de brevets à son sujet connaît d'ailleurs une croissance exponentielle. Ses propriétés justifient cet intérêt. Dans une première partie, nous présenterons un état de l'art de ses principales propriétés telles que sa structure cristalline, sa structure de bandes électroniques, ses caractéristiques électriques, optiques ou encore thermiques. Ensuite nous présentons les différents alliages à base de ZnO tels que MgZnO, CdZnO et BeZnO et ses propriétés.

## II.2. Historique de ZnO

L'oxyde de zinc est communément appelé blanc de zinc ou zincite est un composé inorganique de formule ZnO. Dans la nature, il apparaît sous forme de minerai rouge contenant beaucoup d'impuretés notamment le manganèse, se présente à l'état solide sous l'aspect d'une poudre inodore de couleur blanc cassé à jaune pâle.

L'utilisation d'oxyde de zinc dans la médecine traditionnelle indienne remonte à 500 ans avant notre ère. Il était utilisé sous forme de baumes médicinaux pour le traitement de plaies ouvertes ou d'irritations des yeux. L'oxyde de zinc serait présent dans le Charaka Samhita (est un traité médical datant de l'antiquité fondateur de la médecine traditionnelle Indienne). Du 12ème au 16ème siècle, le zinc et l'oxyde de zinc ont été reconnus et produits en Inde en utilisant une forme primitive du procédé de synthèse directe. De l'Inde, la fabrication de zinc a été transférée en Chine au 17ème siècle. En 1743, la première fonderie européenne de zinc fut établie à Bristol, au Royaume-Uni [1]. La première utilisation fut rapportée par Guyton de Morveau en 1782. Celui-ci insista sur la non toxicité de l'oxyde de zinc et en préconisa sa substitution au blanc de plomb [2]. Et il a été inscrit comme un élément du tableau périodique par Antoine Lavoisier en 1789 [3]. Depuis 1912, l'oxyde de zinc est étudié comme semi-conducteur, Peut-être que la première utilisation de ZnO pour des applications électroniques a été la création de vos propres postes de radio dans les années 1920 [4]. Une barrière Schottky a été créée en mettant en contact un cristal de ZnO avec un fil de cuivre, fournissant le redressement nécessaire pour convertir les ondes radioélectriques (courant alternative (AC)) en signaux (courant contenu (DC)). La science des matériaux s'est vraiment épanouie au 20ème siècle et le ZnO a été l'un des premiers matériaux à avoir été étudié en détail. Les

données de diffraction électronique sur le ZnO sont apparues pour la première fois en 1935 [5]. Trois ans plus tard, la toute première image au microscope électronique à transmission par balayage consistait en un cristal de ZnO [6]. Les mesures de Hall de ZnO dépendantes de la température ont été rapportées pour la première fois en 1954, confirmant la nature intrinsèque de ce matériau de type n [7]. À peu près à la même époque, l'émission de lumière de ZnO suscitait de l'intérêt après quelques travaux initiaux en Allemagne dans les années 1930 [8]. Depuis ces premiers rapports, des dizaines de milliers d'articles sur le ZnO ont été publiés. Presque toutes les grandes revues s'intéressant à la science des matériaux publient plusieurs articles sur le ZnO chaque mois (figure(II.1.a)). En 1960, ses bonnes propriétés piézoélectriques ont conduit à la première application électronique sous forme de couches minces dans les dispositifs à ondes acoustiques. Dans les années 85, la difficulté de doper ZnO en type p c'est-à-dire en déficit d'électrons, a ralenti les recherches sur ce matériau. L'intérêt pour l'oxyde de zinc a refait surface dans les années 1990 avec la synthèse de ZnO sous forme nanométrique [9], et en couches minces. Ainsi, des émissions laser ultra violet (UV) ont été observées à température ambiante dans des couches minces à base de ZnO nano-structuré [10]. Depuis, une augmentation considérable du nombre de publications portant sur le ZnO a eu lieu (Figure (II.1.b)) et de nouvelles applications prometteuses ont vu le jour.



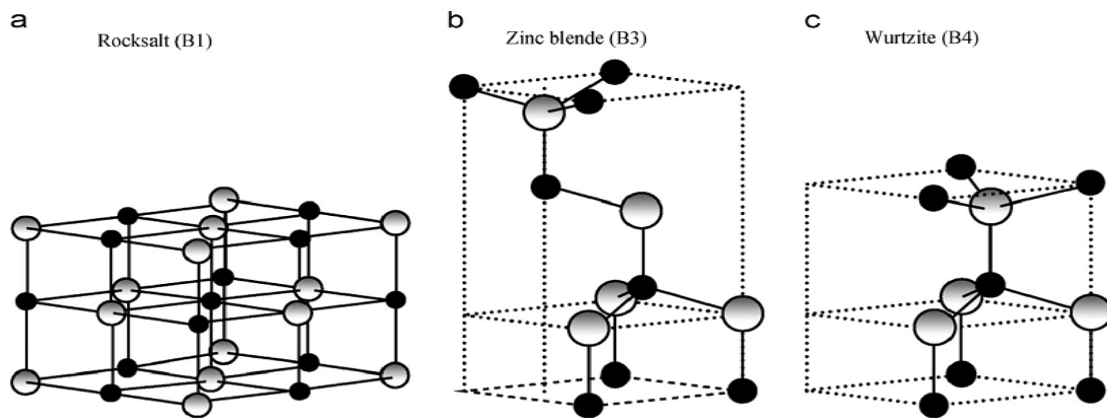
**Figure (II.1) :** a) Nombre de publications par an sur le ZnO et le GaN publiées au cours de la période 1900-2010. (La recherche sur le GaN s'est stabilisée alors que celle sur le ZnO continue de progresser). b) Nombre de publications scientifiques faisant référence à la recherche des expressions "oxyde de zinc" et "oxyde de nano zinc" publiées au cours de la période 2011-2020. [11, 12].

### II.3. Les propriétés de ZnO massif

H. Morkoç et U. Ozgur, C. Jagadish et S. J. Pearton, ainsi que C. Klingshirn et al., ont publié un état de l'art exhaustif des propriétés du ZnO dans un article de revue [13, 14] ainsi que dans deux ouvrages [4, 15] dont nous rappelons ici quelques unes des plus importantes.

#### II.3.1. La structure cristalline

La plupart des semi-conducteurs composés binaires des groupes II à VI se cristallisent dans une structure cubique de zinc-blende ou hexagonale de wurtzite où chaque anion est entouré de quatre cations aux coins d'un tétraèdre et inversement. Cette coordination tétraédrique est typique de la liaison covalente  $sp^3$ , mais ces matériaux ont également un caractère ionique important. ZnO est un semi-conducteur composé II-VI dont l'ionicté réside à la limite entre le semi-conducteur covalent et ionique. Les structures cristallines partagées par ZnO sont la wurtzite (B4), le zinc blende (B3) et rocksalt (B1) (même structure que le chlorure de sodium NaCl) [16], comme le montre schématiquement la figure (II.2). Dans les conditions ambiantes, la phase thermodynamiquement stable est la wurtzite. La structure du zinc-blende ZnO ne peut être stabilisée que par croissance sur des substrats cubiques, et la structure de rocksalt peut être obtenue à des pressions relativement élevées.



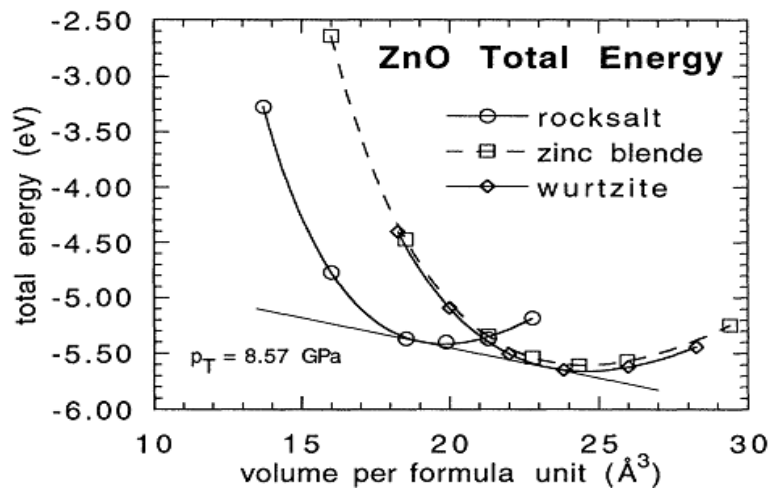
**Figure (II.2) :** Représentation schématique des trois formes cristallographique du ZnO soit (a) cubique rocksalt (B1), (b) cubique zinc-blende (B3) et (c) hexagonale wurtzite (B4). Les sphères noires et grises représentent respectivement les atomes d'oxygène et de zinc. [13]

L'énergie totale de cohésion à l'état fondamental de ZnO dans les structures de wurtzite, de zinc-blende et rocksalt a été calculée en fonction du volume de cellules élémentaires la figure (II.3), ces résultats proviennent de calculs Hartree-Fock (HF) en utilisant des combinaisons

linéaires d'orbitales atomiques (LCAO) [17], et avec les ajustements à la forme fonctionnelle empirique de l'équation de Murnaghan du troisième ordre, qui est utilisée pour calculer les propriétés structurales dérivées. [17]

$$E(V) = E_0 - \frac{B_0 V_0}{B' - 1} + \frac{B_0 V}{B'} \left[ \frac{(V_0/V)^{B'}}{B' - 1} - 1 \right] \quad (\text{II.1})$$

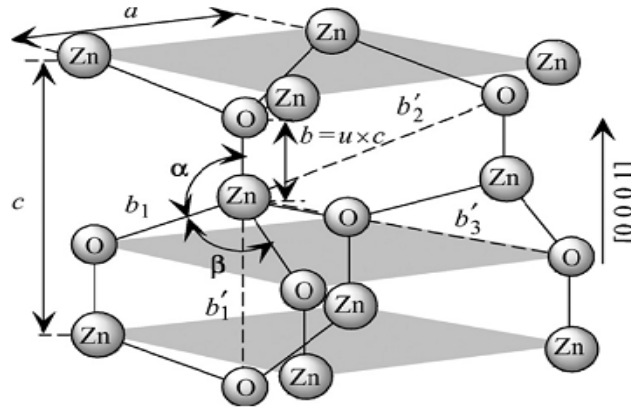
À travers la figure (II.3) on constate premièrement que la phase la plus stable c'est la wurtzite à pression ambiante avec une énergie de cohésion de -5.658 eV très proche de la phase zinc blende avec une énergie de cohésion de -5.606 eV et -5.416 eV pour les phases rocksalt. Cette dernière devient stable pour des petits volumes de maille ou similairement, lorsqu'elle est soumise à de hautes pressions. Il apparaît aussi clairement que la courbe de la phase rocksalt ne croise jamais celle de la phase wurtzite ce qui le donne caractéristique métastable. Notons toutefois que l'énergie de cohésion calculée est assez éloignée de la valeur expérimentale donnée à -7.52 eV qui est déduit de la chaleur de vaporisation au Zn expérimentale, de l'enthalpie de ZnO de formation et de l'énergie de liaison de l'O<sub>2</sub> pour la phase wurtzite [18]. Mais les meilleurs de ces résultats sont ceux obtenus par la DFT (Density Functionnal Theory) avec une fonctionnelle de la technique GGA (Generalized Gradient Approximation), cela donne -7.692, -7.679 et -7.455 eV des énergies cohérentes pour les phases de wurtzite, de zinc-blende et de rocksalt, respectivement.



**Figure (II.3) :** Variation de l'énergie totale en fonction du volume de maille par unité de ZnO pour les phases rocksalt, zinc blende et wurtzite. [17]

La structure en wurtzite a une cellule unitaire hexagonale avec deux paramètres de réseau,  $a$  et  $c$ , dans le ratio  $c/a = C_{6v}^4 = 1.633$  et appartient au groupe spatial de  $C_{6v}^4$  ou  $p6_3mc$ . Une représentation schématique de la structure wurtzite de ZnO est présentée à la figure (II.4). La

structure est composée de deux sous-réseaux interpénétrés de type hexagonal décalés parallèlement à la direction [0001], chacun d'entre eux consistant en un type d'atome déplacé l'un par rapport à l'autre le long du triple axe c de la quantité de  $u=3/8=0.375$  (dans une structure de wurtzite idéale) en coordonnées fractionnaires (le paramètre u est défini comme la longueur de la liaison parallèle à l'axe c, en unités de c).



**Figure (II.4) :** Représentation schématique d'une structure wurtzite de ZnO avec les constantes de réseau a et c, le paramètre u qui est exprimé comme la longueur de liaison ou la distance entre les plus proches voisins b divisée par c (0,375 dans le cristal idéal), les angles de liaison  $\alpha$  et  $\beta$  ( $109,47^\circ$  dans le cristal idéal), et trois types de distances entre les seconds plus proches voisins  $b_1$ ,  $b_2$ , et  $b_3$ . [13]

Chaque sous-réseau comprend quatre atomes par unité de cellule et chaque atome d'un type (atome du groupe II) est entouré de quatre atomes de l'autre type (groupe VI), ou inversement, qui sont coordonnées aux bords d'un tétraèdre. Dans un cristal de ZnO idéal, la structure en wurtzite s'écarte de la configuration idéale en modifiant le ratio c/a ou la valeur u. Il convient de souligner qu'il existe une forte corrélation entre le rapport c/a et le paramètre u. En effet, lorsque le rapport c/a diminue, le paramètre u augmente de telle sorte que ces quatre distances tétraédriques restent presque constantes à travers distorsion des angles tétraédriques due aux interactions polaires à longue portée. Ces deux longueurs de liaison légèrement différentes seront égales si la relation suivante est vérifiée:

$$u = \left(\frac{1}{3}\right)\left(\frac{a^2}{c^2}\right) + \frac{1}{4} \tag{II.2}$$

Étant donné que le rapport c/a est également corrélé à la différence d'électronégativité des deux constituants, les composants présentant les différences les plus grandes présentent l'écart le plus important par rapport au rapport idéal c/a. [19]

### II.3.2. Le Paramètres de maille

Les paramètres de réseau d'un semi-conducteur dépendent généralement des facteurs suivants: (1) concentration en électrons libres agissant via le potentiel de déformation d'un minimum de la bande de conduction occupée par ces électrons, (2) concentration en atomes étrangers et défauts et leur différence de rayons ioniques en ce qui concerne à l'ion matrice substitué, (3) contraintes externes (par exemple, celles induites par le substrat) et (4) la température [13]. Les paramètres de réseau de tout matériau cristallin sont communément et le plus précisément mesurés par diffraction des rayons X à haute résolution (HRXRD) en utilisant la méthode de Bond [20] pour un ensemble de réflexions symétriques et asymétriques. Le tableau (II.1) montre une comparaison des paramètres de réseau mesurés et calculés, du rapport  $c/a$  et du paramètre  $u$  rapportés par plusieurs groupes pour le ZnO cristallisé dans des structures de wurtzite, de Zinc blende et de Rocksalt.

Pour le ZnO wurtzite, les constantes du réseau à la température ambiante déterminées par diverses mesures expérimentales et calculs théoriques sont en bon accord. Les constantes de réseau vont généralement de 3.2475 à 3.2501 Å pour le paramètre  $a$  et de 5.2042 à 5.2075 Å pour le paramètre  $c$ . Les données produites lors de calculs antérieurs examinées par Reeber [21] sont également cohérentes avec les valeurs données dans le tableau (II.1). Le ratio  $c/a$  et le paramètre  $u$  varient dans une plage légèrement plus large, de 1.593 à 1.6035 et de 0.383 à 0.3856, respectivement [13]. L'écart par rapport à celui du cristal de wurtzite idéal est probablement dû à la stabilité du réseau et à l'ionicté. Il a été rapporté que la charge libre est le facteur dominant responsable de l'extension du réseau proportionnelle au potentiel de déformation du minimum de la bande de conduction et inversement proportionnelle à la densité de porteurs et au module d'encombrement. Les défauts ponctuels tels que les antisites de zinc, les lacunes en oxygène et les défauts étendus, tels que les dislocations du filetage, augmentent également la constante du réseau, bien que dans une moindre mesure dans les couches hétéro-épitaxiales. Pour le poly-type zinc-blende du ZnO, les constantes de réseau calculées sur la base d'une technique *ab initio* moderne sont prédites à 4,60 et 4,619 Å. Ashrafi et al.[22] ont caractérisé la phase zinc-blende des films de ZnO cultivés par épitaxie par faisceau moléculaire métal-organique assistée par plasma en utilisant la diffraction des électrons à haute énergie par réflexion RHEED, la diffraction des rayons X XRD, le microscope électronique à transmission TEM, et le microscope à force atomique AFM. Ils ont constaté que l'utilisation d'une couche tampon de ZnS conduisait à la croissance des films de zinc-blende ZnO. Les constantes de réseau de l'épi-couche ont été estimées à 4,463, 4,37 et

4,47 Å en utilisant l'espacement du motif RHEED, bien que ponctuel, en comparant la position du pic XRD et en examinant le TEM, respectivement. Ces valeurs sont éloignées de celles de la phase wurtzite, indiquant la formation de ZnO de type de zinc blende.

a(Å)	c (Å)	Wurtzite c/a	U
3.2496	5.204	1.6018	0.3819
3.2501	5.2071	1.6021	0.3817
3.286	5.241	1.595	0.383
3.2498	5.2066	1.6021	

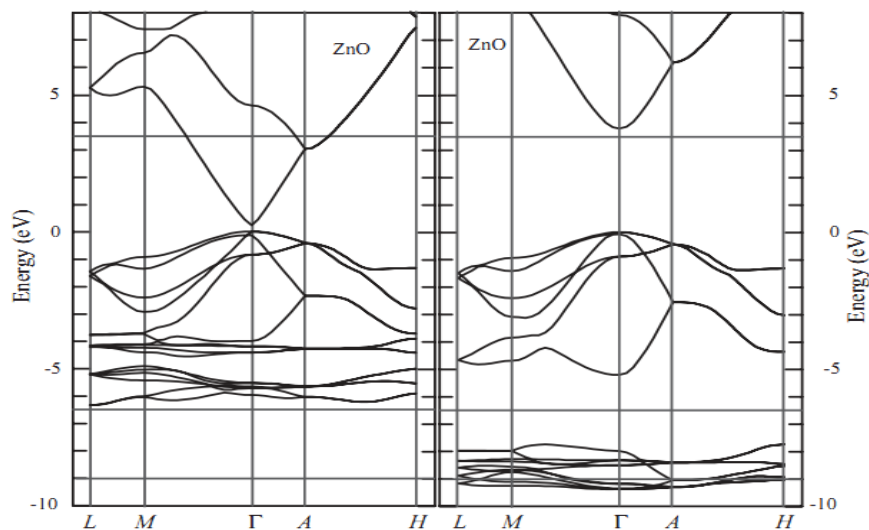
**zinc-blende**  
4.619, 4.60, 4.463, 4.37, 4.47

**rocksalt**  
4.271, 4.283, 4.294, 4.30, 4.280, 4.275

**Tableau (II.1) :** Principaux résultats reportés dans la littérature concernant les paramètres associés (paramètres de réseau (a), le rapport c/a et le paramètre u) pour le ZnO cristallisé dans des structures de wurtzite, de Zinc blende et de Rocksalt. [13]

### II.3.3. La structure de bande

La structure de bande d'un semi-conducteur donné est essentielle pour déterminer son utilité potentielle. Par conséquent, une connaissance précise de la structure de bande est essentielle si le semi-conducteur en question doit être intégré dans la famille des matériaux envisagés pour les applications de dispositifs. Plusieurs approches théoriques de différents degrés de complexité ont été utilisées pour calculer la structure de bande du ZnO pour ses poly-types wurzite, zinc-blende et rocksalt.



**Figure (II.5) :** Structures de bandes électroniques de ZnO wurtzite calculées avec la LDA (gauche), la LDA incluant le SIC-PP (droite). [23]

Le ZnO et pour ses polytypes wurzite, zinc-blende et rocksalt a été largement étudiée par des techniques ab-initio [24-26]. Mesurée par des techniques telles que l'ARPES [27] (Angle Resolved PhotoElectron Spectroscopy), à température ambiante, elle montre un gap direct en  $\Gamma$  de 3,37 eV particulièrement intéressant pour des applications opto-électroniques dans l'ultra-violet proche. Il convient de noter qu'avec l'utilisation de pseudo-potentiels plus précis, à savoir les SIC-PP (self interaction corrected pseudo-potentials) qui prennent en compte correctement les électrons 3d, un gap de 3.7eV a été obtenu, ce qui est bien plus proche du gap expérimental. Contrairement aux résultats obtenus avec la DFT utilisée avec une fonctionnelle LDA (Local Density Approximation), la plus petite valeur attendue est de 0.23eV [23]. Cette déficience chronique de la DFT se traduit concrètement dans le cas de ZnO, par une mauvaise estimation du positionnement et du taux d'occupation des niveaux 3d du Zinc, et Ceci est illustré à la figure (II.5).

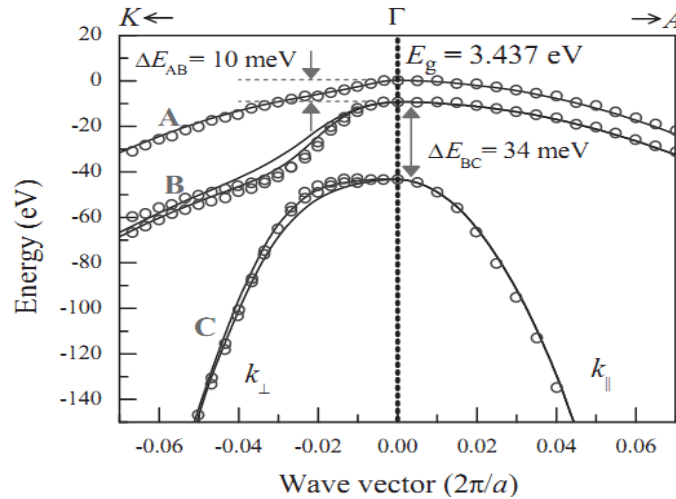
Les écarts énergétiques calculés et mesurés, la position de la bande d du cation et les largeurs de bande de valence de l'anion de ZnO sont donnés dans le tableau (II.2). D'après ce tableau, l'approximation LDA-SIC-PP donne un accord proche des résultats expérimentaux pour la bande interdite et la largeur de bande par rapport à la méthode LDA standard. Cependant, les bandes d donnent une énergie d'environ 1 eV trop faible par rapport à la valeur expérimentale. Cet écart a été attribué aux énergies d'exciton mesurées influencées par les relaxations électroniques, qui devraient être surtout prononcées pour les états d du semi-core cationique hautement localisés. [13]

	LDA-PP	LDA-SIC-PP	Expérimentale
$E_g(\text{eV})$	0.23	3.77	3.4
$E_d(\text{eV})$	-5.1	-8.9	-7.8
$W_p(\text{eV})$	-3.99	-5.2	-5.3

**Tableau (II.2) :** L'énergie de gap, positions de la bande d du cation  $E_d$  et largeurs de bande de valence de p anion  $W_p$  de ZnO. [23]

La structure de bande du ZnO révèle trois bandes de valence très rapprochées (généralement appelées bandes A, B et C, ou bandes à trou lourd, à trou léger et à séparation du champ cristallin, respectivement, résultant du couplage spin-orbite et de la séparation du champ cristallin) près du centre de la zone (point  $\Gamma$ ). La figure (II.6) montre la structure de la bande de valence du ZnO près du point  $\Gamma$ , calculée à l'aide des méthodes d'approximation de la sphère atomique (ASA) et d'orbitale muffin-tin linéaire (LMTO) dans le cadre du LDA. [28]

Les énergies de séparation entre les bandes A, B et C ont été calculées comme étant faibles, avec  $E_{AB} = 10\text{meV}$  et  $E_{BC} = 34\text{meV}$  [28], où la bande interdite expérimentale est de  $3.437\text{eV}$ . [29]



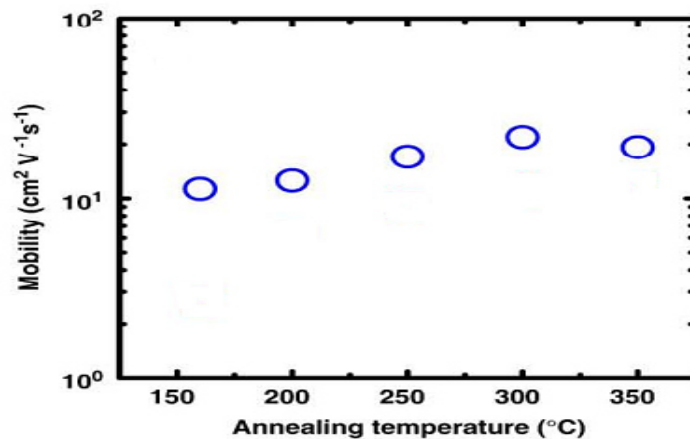
**Figure (II.6) :** Structure de la bande de valence du ZnO près du point  $\Gamma$ . Les cercles ouverts représentent les résultats de calcul en utilisant la méthode ASA-LMTO, y compris le couplage spin-orbite. Les lignes continues correspondent au hamiltonien effectif de Rashba-Sheka-Pikus. [28]

### II.3.4. Propriétés électriques

Généralement l'oxyde de zinc non dopé est considéré comme un semi-conducteur de type n. Il est possible d'ajuster sa résistance électrique par l'utilisation de dopage, en introduisant des atomes de zinc en excès en position interstitielle, ou en créant des lacunes d'oxygène. Ces interstitiels de zinc et ces lacunes d'oxygène ainsi créés, se comportent comme des donneurs d'électrons, et conduisent à une diminution de la résistivité électrique du matériau [30].

Pour la couche mince d'oxyde de zinc, les valeurs de résistance électrique varient de  $10^{-4}$ - $10^9 \Omega \cdot \text{cm}$  [31-33]. Ces valeurs dépendent fortement des normes technologiques et en particulier des traitements thermiques. Lorsque la température de dépôt varie de  $120^\circ\text{C}$  à  $230^\circ\text{C}$  la résistivité du ZnO en couche mince augmente considérablement de  $2.38 \times 10^{-4} \Omega \cdot \text{cm}$  à  $1.31 \Omega \cdot \text{cm}$  [31]. Entre  $230^\circ\text{C}$  et  $320^\circ\text{C}$ , la résistivité reste à peu près constante. Au-delà de  $320^\circ\text{C}$  la résistivité diminue pour atteindre  $6 \times 10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$  à  $440^\circ\text{C}$ . Il convient également de noter que le nombre de porteurs libres et de leur mobilité contrôle la résistance électrique. Selon la température de recuit in-situ et de la taille des cristallites du ZnO, on peut obtenir des mobilités différentes. Lorsque la température augmente de  $160^\circ\text{C}$  à  $300^\circ\text{C}$ , la mobilité du ZnO passe environ de  $10 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  à  $22 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  alors que la taille des cristallites augmente de  $145\text{nm}$  à  $275\text{nm}$  (Figure (II.7)). Au delà de  $300^\circ\text{C}$  [34], les auteurs constatent

d'une part que la mobilité diminue de  $22 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  à  $19 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$  et d'autre part que la taille des cristallites diminue de 275 nm à 270 nm. Les auteurs attribuent l'évolution de la mobilité à la différence de taille des cristallites en fonction de la température de dépôt. En effet, lorsque la taille des cristallites augmente, la densité des joints entre les cristallites diminue et la mobilité des porteurs de charge augmente. A l'opposé, si la taille des cristallites diminue, la diffusion par les joints des cristallites devient prépondérante, et a pour conséquence de diminuer la mobilité des porteurs de charge [34].



**Figure (II.7) :** Evolution de la mobilité du ZnO en couche mince d'épaisseur 320 nm en fonction de la température de recuit in-situ. La couche a été préparée par pulvérisation en radiofréquence sur un substrat de verre [34].

### II.3.5. Propriétés optiques

En fait, l'interaction de la matière (électrons du matériau) avec la lumière (onde électromagnétique) peut expliquer clairement les propriétés optiques d'un matériau. Les caractéristiques optiques de ZnO ont été étudiées par nombreuses techniques comme l'absorption optique, la transmission, la réflexion, la photo-réflexion, l'ellipsométrie, la photoluminescence, la cathodoluminescence. Le ZnO est un matériau transparent avec l'indice de réfraction sous la forme massive est égal à 2 [18]. Sous forme de couche mince, son indice de réfraction et son coefficient d'absorption varient en fonction des conditions d'élaboration. Selon les auteurs [35,36], l'indice de réfraction a une valeur qui varie entre 1.90 et 2.20. On peut trouver dans le tableau (II.3) des valeurs précises de ce coefficient pour des longueurs d'onde autour de son maximum d'absorption.

L'amélioration de la stœchiométrie de ZnO entraîne une diminution du coefficient d'absorption et à une augmentation de l'énergie de la bande interdite [37,38]. Le ZnO dopé entre dans la classe des oxydes conducteurs transparents appelés TCO (transparent conductive

oxide). Très peu dopé, il peut être utilisé en luminescence. Le groupe de Jellison et al a pu déterminer par ellipsométrie les parties réelle et imaginaire du coefficient d'absorption pour un échantillon de ZnO monocristallin obtenu par CVT [39], ils ont pu montrer que ces coefficients sont faible pour des énergies inférieures à 3 eV ( $<10^3\text{cm}^{-1}$ ) et augmentent rapidement pour atteindre un maximum d'environ  $2.10^5\text{cm}^{-1}$  à 3.3 eV pour la partie réelle et 3.34 eV pour la partie imaginaire, se stabilisant pour des énergies supérieures.

E $\perp$ C		E $\parallel$ C	
$\lambda$ (nm)	N	$\lambda$ (nm)	N
366.43	9.842	363.71	3.525
366.72	6.734	365.67	2.917
367.01	9.414	367.54	2.722
369.04	3.089	369.79	2.598
371.19	2.747	371.52	2.539
381.87	2.382	381.90	2.358
385.86	2.332	383.44	2.343
399.39	2.232	405.31	2.215
401.89	2.220	408.19	2.204

Tableau (II.3) : Indice de réfraction du ZnO autour de maximum d'absorption à 4.2K. [40]

Sous l'action d'un faisceau lumineux de haute énergie ( $E>3,4\text{eV}$ ) ou d'un bombardement d'électrons, le ZnO émet des photons, ce phénomène correspond à de la luminescence. En fonction des conditions d'élaboration et des traitements ultérieurs, différentes bandes de photoluminescence (PL) ont été observées. [41]

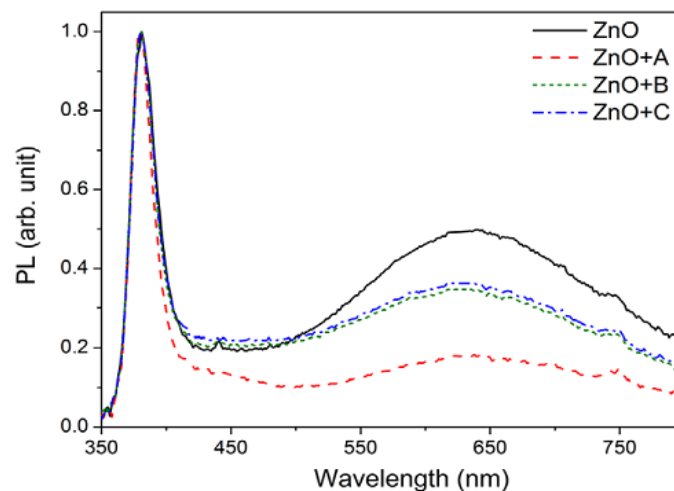


Figure (II.8): Spectres de photoluminescences de ZnO pur et modifié par des réactifs : A(trichloro(dodécyl) silane), B((3-Aminopropyl) triéthoxysilane), et C (3 (Triméthoxysilyl) propylméthacrylate). [42]

Les spectres de PL montrent l'existence de 2 pics d'émission, un premier pic situé dans le domaine ultra-violet ( $\lambda = 375nm$ ) et un deuxième dans le domaine du visible ( $\lambda = 640nm$ ). Leung et al. [42] ont montré que les spectres de PL présentent une bande d'émission dans le domaine du visible plus importante selon la méthode d'élaboration ou de traitement. Cette deuxième bande correspond à une émission de couleur.

### II.3.6. Propriétés thermiques

Comme dans tous les solides, les atomes d'un semi-conducteur à température non nulle sont en mouvement incessant, oscillant autour de leurs états d'équilibre. Ces modes d'oscillation sont définis par les phonons. L'amplitude des vibrations augmente avec la température et les propriétés thermiques du semi-conducteur déterminent la réponse du matériau aux changements de température. La dilatation thermique, la chaleur spécifique et la pyroélectricité font partie des propriétés standard des matériaux qui définissent les relations linéaires entre les variables mécaniques, électriques et thermiques. Ces propriétés thermiques et la conductivité thermique dépendent de la température ambiante, et la limite ultime de température pour étudier ces effets est la température de fusion, qui est de 1975 K pour le ZnO. Parce que le ZnO est largement utilisé sous forme de couche mince déposé sur des substrats étrangers, c'est-à-dire des modèles autres que le ZnO, il faut également noter que les propriétés des couches de ZnO dépendent aussi étroitement des propriétés inhérentes des substrats, telles que les constantes de réseau et les coefficients de dilatation thermique. [13]

#### II.3.6.1. Coefficients de dilatation thermique

La dépendance en température des constantes de réseau  $a$  et  $c$  et les coefficients de dilatation thermique du ZnO hexagonal ont été déterminés par les méthodes de diffraction des rayons X sur poudre dans la gamme de 4,2 à 296 K. Les résultats sont présentés dans la figure (II.9). [21]

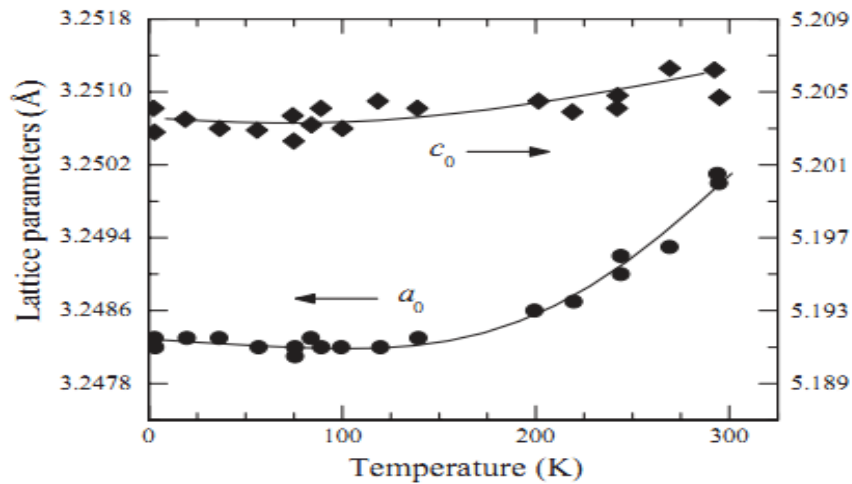


Figure (II.9) : Paramètres du réseau de ZnO wurtzite en fonction de la température. [21]

### II.3.6.2. Conductivité thermique

La conductivité thermique  $K$ , qui est une propriété cinétique déterminée par les contributions des degrés de liberté vibrationnels, rotationnels et électroniques, est une propriété matérielle extrêmement importante lorsque l'on considère les dispositifs électroniques et optoélectroniques à haute puissance et à haute température. La figure (II.10) montre la conductivité thermique mesurée d'un échantillon entièrement fritté chauffé de la température ambiante à 1000°C. La conductivité thermique diminue de 37 à 4  $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  lorsque la température passe de la température ambiante à 1000°C. Il s'agit de la courbe de conductivité thermique d'un cristal de ZnO entièrement dense, où les interactions résistives phonon-phonon sont les mécanismes de diffusion dominants. [43]

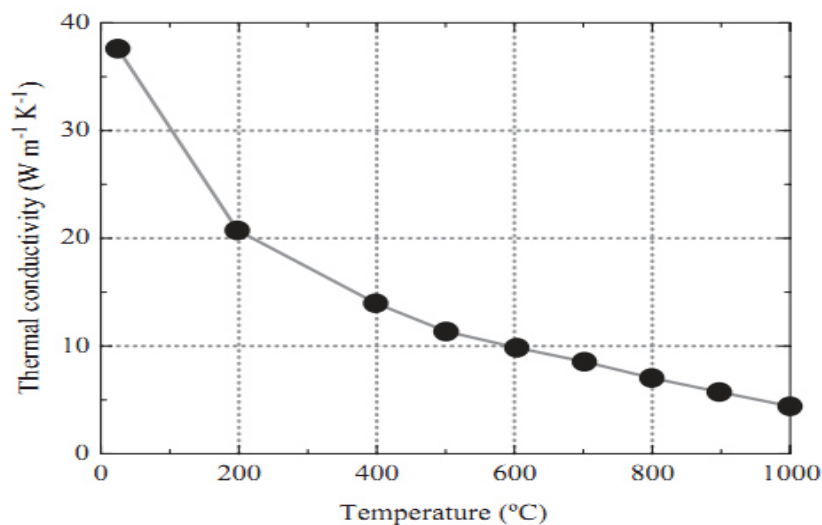


Figure (II.10) : Conductivité thermique de ZnO entièrement fritté, chauffé de la température ambiante à 1000 °C. [43]

### II.3.6.3. Chaleur spécifique

La chaleur spécifique (appelée aussi la capacité thermique massique) d'un semi-conducteur a des contributions des vibrations du réseau, des porteurs libres (très efficaces à basse température), et des défauts ponctuels et terminaux. Pour un cristal semi-isolant de bonne qualité, la chaleur spécifique est déterminée principalement par les vibrations du réseau. Les données de chaleur spécifique disponibles pour le ZnO sont très limitées. Lawless et Gupta [44] ont étudié la chaleur spécifique pour des échantillons de ZnO pur et de type varistance entre les plages de température de 1.7 - 25 K, où ce dernier a une taille moyenne de grain de 10  $\mu\text{m}$ . Les mesures de chaleur spécifique ont été effectuées en utilisant la méthode des impulsions. Comme on le voit sur la figure (II.11), la chaleur spécifique du ZnO à varistance diverge de celle du ZnO pur en dessous de 20 K. Cette différence a été attribuée à la contribution de la grande quantité d'impuretés, présentes dans la région des joints de grains du ZnO à varistance, donnant lieu à un très grand excès de chaleur spécifique en dessous de 20 K.

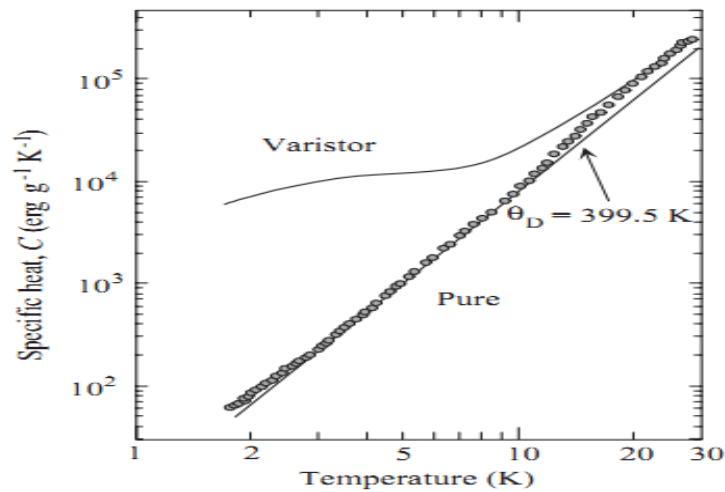


Figure (II.11) : Données de chaleur spécifique mesurées pour le ZnO pur comparées aux données pour le ZnO à varistance ( $\theta_D$  est la température de Debye). [44]

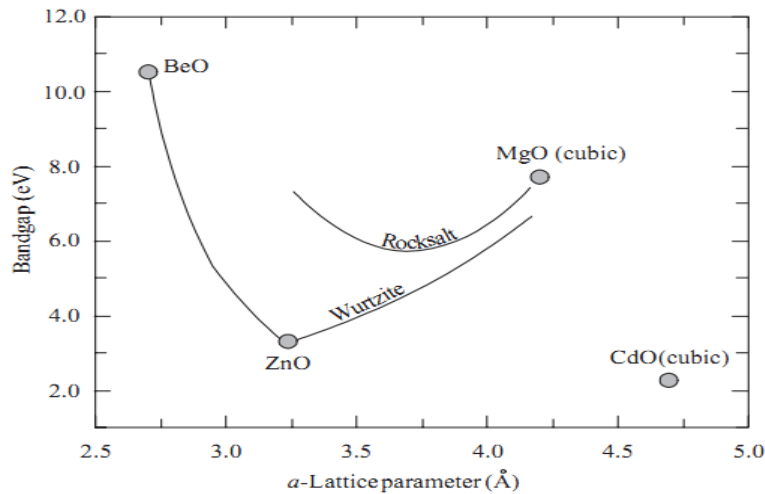
## II.4. Les différents alliages à base de ZnO

Un seuil crucial dans la conception de dispositifs optoélectroniques et électroniques modernes est la réalisation de l'énergie de bande interdite pour créer des couches barrières et des puits quantiques dans le dispositif hétéro-structures. Pour réaliser de tels dispositifs optoélectroniques, une modulation de la bande gap est nécessaire. Cela a été démontré par le développement des alliages tel que les alliages à base de ZnO, le  $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  [45-49] et le  $\text{Be}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  [50, 51] pour le matériau à large bande gap et de l'alliage  $\text{Cd}_y\text{Zn}_{1-y}\text{O}$  pour le

matériau à bande gap plus petit [45, 49, 52, 53], permettant d'accorder une bande passante large. L'énergie de gap  $E_g(x)$  du semi-conducteur ternaire  $A_xZn_{1-x}O$  (avec  $A= Mg, Be$  ou  $Cd$ ) est déterminé par l'équation suivante [54]:

$$E_g(x) = (1-x)E_{ZnO} + xE_{AO} - bx(1-x) \tag{II.3}$$

Où  $b$  est le paramètre de courbure et  $E_{AO}$  et  $E_{ZnO}$  sont les énergies de bande gap des composés AO ( $MgO, CdO$  et  $BeO$ ) et  $ZnO$ , respectivement. Le paramètre de courbure  $b$  dépend de la différence d'électronégativité des binaires d'extrémité  $ZnO$  et  $AO$ .



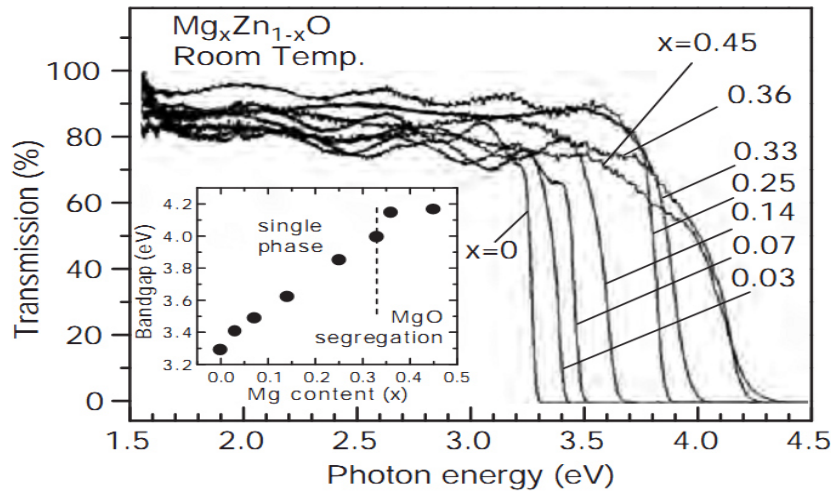
**Figure (II.12) :** Bande interdite en fonction de la constante de réseau pour les ternaires de ZnO, ( $Mg_xZn_{1-x}O, Cd_yZn_{1-y}O$  et  $Be_zZn_{1-z}O$ ). Notez que les binaires terminaux MgO et CdO sont cubiques dans leur état d'équilibre. Alors que la bande interdite en fonction de la composition pour  $Mg_xZn_{1-x}O$  est raisonnablement établie, celles pour  $Be_zZn_{1-z}O$  et  $Cd_yZn_{1-y}O$  ne le sont pas. Les bandes interdites des variétés cubiques et wurtzitiques de  $Mg_xZn_{1-x}O$  sont données. [15]

La bande gap peut être augmentée (ou diminuée) en incorporant Mg [55-57] et Be [46, 47] (Cd [52, 58]) dans ZnO. La bande gap par rapport à la constante de réseau dans le plan pour les trois ternaires mentionnés ci-dessus, à savoir,  $Be_zZn_{1-z}O, Mg_xZn_{1-x}O$  et  $Cd_yZn_{1-y}O$  est représentée à la figure (II.12).

#### II.4.1. L'alliage $Mg_x Zn_{1-x} O$

L'alliage  $Mg_xZn_{1-x}O$  a été considéré comme un matériau approprié pour les couches barrières des structures de super-réseau  $ZnO/(Mg, Zn)O$  [45], car l'alliage de ZnO avec MgO ( $E_g \sim 7.7eV$ ) [59, 60] permet d'élargir le gap d'énergie de ZnO. Selon le diagramme de phase du système binaire ZnO-MgO, la solubilité solide thermodynamique du MgO dans le ZnO est inférieure à 4% mol [61]. De plus, le ZnO a une structure en wurtzite ( $a=3.24\text{Å}$  et  $c=5.20\text{Å}$ ),

tandis que MgO a une structure cubique ( $a=4.24\text{\AA}$ ). L'énergie de liaison de l'exciton dans le MgO cubique ( $E_B \sim 80\text{meV}$ ) [60] est également supérieure à celle du ZnO wurtzite (60meV).



**Figure (II.13) :** Spectres de transmission des films de  $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  mesurés à température ambiante. L'encart montre le  $E_g$  déterminé à partir des spectres, en supposant une dépendance  $\alpha^2 \propto (h\nu - E_g)$ , où  $\alpha$  et  $h\nu$  sont le coefficient d'absorption et l'énergie photonique, respectivement. [62]

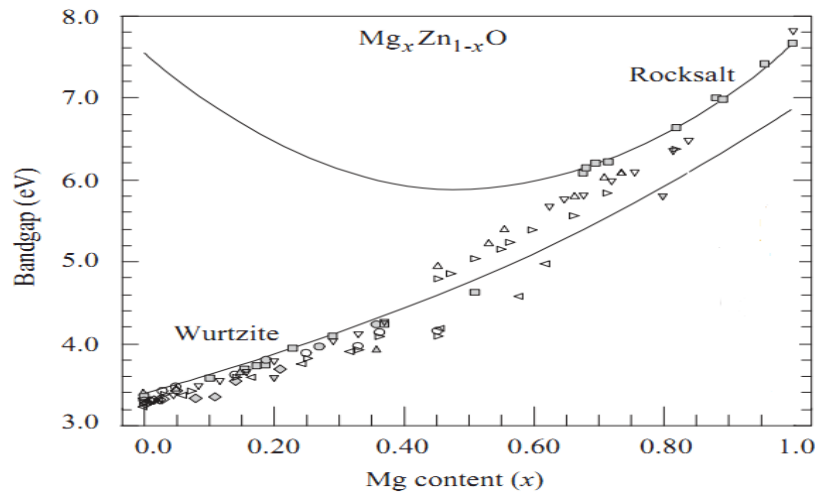
La figure (II.13) montre les spectres de transmission de  $\text{MgZnO}$  mesurés à la température ambiante. La bande gap  $E_g$  augmente linéairement avec  $x$  jusqu'à 4.15eV pour  $0 \leq x \leq 0.36$  et sature pour les concentrations de Mg plus élevées en raison de la ségrégation de MgO (Figure (II.13), encadré). Cela indique que  $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  est un matériau approprié pour les couches barrières dans les hétéro-structures  $\text{ZnO}/(\text{Mg}, \text{Zn})\text{O}$  avec une bande gap décalée jusqu'à 0,85eV. La dépendance compositionnelle du paramètre de bande gap ainsi que des paramètres de réseau  $a$  et  $c$  pour l'alliage  $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  a été étudiée sur toute la plage de composition [63-66]. Comme on pouvait s'y attendre, la qualité du film est inférieure dans la région de transition wurtzite-cubique où un mélange des deux structures peut être présent.

La figure (II.14) montre les données du gap d'énergie par rapport à la composition des portions de wurtzite et de rocksalt, et aussi l'ajustement au point  $\Gamma$  des transitions  $E_0^A$  pour le ternaire wurtzitique à l'aide de

$$E_0^A(x) = E_0^A(x=0) + xp^A + x^2q^A \quad (\text{II.4})$$

Avec  $E_0^A(x=0)=3.37\text{eV}$ ,  $p^A=1.93\text{eV}$  et  $q^A=1.57\text{eV}$ . De même, la largeur du gap d'énergie par rapport à la composition peut être déterminée de manière empirique avec les paramètres  $E_0^D=7.6\text{eV}$ ,  $p^D=7\text{eV}$  et  $q^D=7\text{eV}$ , dont les résultats apparaissent également en trait plein sur

la figure (II.14). Le gap d'énergie de la structure relaxée de MgO wurtzite semble être  $E_0^A(x=0)=6.9\text{eV}$ , et le gap d'énergie du ZnO rocksalt  $E_0^D(x=0)=7.6\text{eV}$ .



**Figure (II.14) :** La dépendance de bande interdite de  $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  sur toute la gamme de composition. Energies des transitions fondamentales bande à bande  $E_0^A$  du ZnO wurtzitique et celles de la structure rocksalt. (Il faut garder à l'esprit que les couches dans la région correspondant aux transitions wurtzite cubes pourraient être de structure mixte). [51]

Cependant, l'estimation théorique du gap d'énergie de ZnO de rocksalt est d'environ 5,4eV et elle est indirecte avec l'énergie de gap de point  $\Gamma$  associée  $E_0^D(x=0)=6.54\text{eV}$ , ce qui est beaucoup plus grand que le  $E_0^A(x=0)=3.34\text{eV}$  de la wurtzite ZnO [67-69].

#### II.4.2. L'alliage $\text{Be}_z\text{Zn}_{1-z}\text{O}$

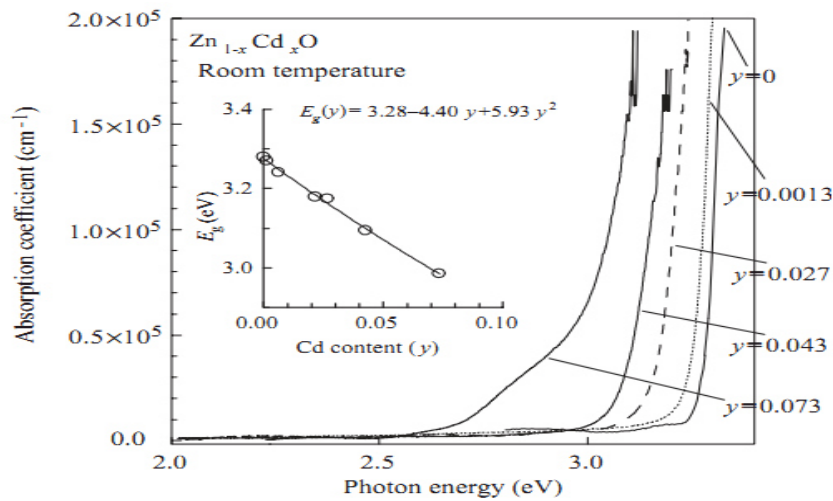
La substitution de Be par Zn augmente la bande interdite de ZnO. Contrairement au  $\text{MgZnO}$  qui se transforme en forme cubique près de 40% de concentration de Mg,  $\text{Be}_z\text{Zn}_{1-z}\text{O}$  est wurtzitique dans toute la plage de composition car l'état d'équilibre de BeO est wurtzitique. Ryu et al. [50] ont étudié cette concentration ternaire jusqu'à une concentration de 60% en Be. Comme indiqué à la figure (II.12), l'énergie du gap d'énergie de  $\text{Be}_z\text{Zn}_{1-z}\text{O}$  peut en théorie aller de la bande gap de ZnO (3.3eV) à celle de BeO (10,6eV). Il convient de noter que la bande interdite de BeO n'est pas bien établie et que les valeurs rapportées vont de 7.8 à 10.7eV [70, 71]. Par rapport au ZnO wurtzite ( $a=3.25\text{\AA}$  et  $c=5.20\text{\AA}$ ), BeO présente des constantes de réseau beaucoup plus petites  $a=2.698\text{\AA}$  et  $c=3.38\text{\AA}$  [72, 73].

Ryu et al. [51] ont appliqué le système d'hétérojonction  $\text{Be}_z\text{Zn}_{1-z}\text{O}/\text{ZnO}$  pour produire une électroluminescence à partir de ce que l'on appelait des LED à jonction p-n constituées d'une couche active  $\text{Be}_z\text{Zn}_{1-z}\text{O}/\text{ZnO}$  contenant sept puits quantiques. L'arsenic et le gallium ont été

utilisés pour le dopage de type  $p$  et de type  $n$ , respectivement. La région de puits quantiques était chevauchée avec une  $\text{Be}_{0.3}\text{Zn}_{0.70}\text{O}$  de type  $n$  et une  $\text{Be}_{0.3}\text{Zn}_{0.70}\text{O}$  de type  $p$  suivie d'une couche de  $\text{ZnO}$  de type  $p$ . La structure entière a été développée sur un substrat de  $\text{ZnO}$  de type  $n$ . Deux pics d'électroluminescence dominants, l'un entre 360 et 390nm et un large pic à 550nm, ont été observés.

**II.4.3. L'alliage  $\text{Cd}_y\text{Zn}_{1-y}\text{O}$**

L'alliage  $\text{Mg}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$  a été considéré comme un matériau approprié pour les couches barrières en raison de sa bande interdite plus large que celle du  $\text{ZnO}$ . Pour les bandes interdites plus étroites, souhaitables pour l'accordabilité en longueur d'onde et pour obtenir des bandes interdites correspondant au spectre visible, l'alliage  $\text{Cd}_y\text{Zn}_{1-y}\text{O}$  serait un bon candidat en raison de la petite bande interdite directe de  $\text{CdO}$  (2.3eV) [74]. Cependant, la structure à l'équilibre de  $\text{CdO}$  est cubique, avec une constante de réseau de  $a=4.69\text{\AA}$  [50, 73]. L'incorporation maximale de  $\text{Cd}$ , par MOCVD distant renforcé par plasma, obtenue jusqu'à présent pour la phase wurtzite est de 70%, ce qui correspond à une bande interdite minimale de 1,85eV [75].



**Figure (II.15):** Dépendance à la concentration ( $y$ ) des spectres d'absorption des monocouches  $\text{Cd}_y\text{Zn}_{1-y}\text{O}$  obtenues à température ambiante. Les courbes, de droite à gauche correspondent à celles des échantillons avec  $y= 0, 0.0013, 0.027, 0.043$  et  $0.073$ . [76]

Makino et al. [49] ont mis en évidence des films d'alliage  $\text{Cd}_y\text{Zn}_{1-y}\text{O}$  monophasés développés par PLD sur des substrats de saphir (0001) et  $\text{ScAlMgO}_4(0001)$  avec une teneur en  $\text{Cd}$  allant jusqu'à 7%. Comme le montre la figure (II.15), l'énergie de la bande de gap  $E_g$ , décroît à mesure que la teneur en  $\text{Cd}(y)$  augmente et peut être estimée à  $E_g(y) = 3.29 - 4.4y + 5.93y^2$ .

On observe une diminution de la bande interdite de 3.28eV jusqu'à 2.99 eV en introduisant 7.3% de Cd. La figure (II.15) montre la dépendance en fonction de la concentration (y) des spectres d'absorption à la température ambiante dans des films en croissance.

Le tableau (II.4) présenté les paramètres des matériaux ZnO, MgO, BeO et CdO tel que  $\Delta_{so}$  est l'écart du spin-orbite,  $\Delta_{cr}$  est l'écart du cristal-champ et b c'est le paramètre de courbure.

Paramètre	ZnO	MgO	BeO	CdO
a (Å)	3.264	3.199	2.717	4.699
c (Å)	5.238	5.062	3.38	5.739
Eg (eV) à 300K	3.373	5.289	10.585	2.2
b	/	0.87	3.925	0.94
$\Delta_{so}$ (meV)	13.59	32.169	24.891	68
$\Delta_{cr}$ (meV)	38	317.2	46.35	117
$\epsilon_r$	8.1	9.6	2.9	21.9
$m_e^{\parallel}$	0.23	0.28	0.58	0.21
$m_e^{\perp}$	0.21	0.28	0.73	0.154

Tableau (II.4) : Paramètres des matériaux ZnO, MgO, BeO et CdO. [77, 78]

Il est clair que la bande interdite de ZnO peut être augmentée par alliage avec Mg et Be et peut être réduite également par alliage avec Cd. Dans le cas du Mg, l'alliage MgZnO est wurtzite jusqu'à des concentrations de Mg d'environ 40% et clairement cubique (rocksalt) pour des concentrations supérieures à 60%. Dans la zone intermédiaire, le mélange des phases se fait avec une très mauvaise qualité de matériau. Cependant, lorsqu'il est allié avec du Be, l'alliage est wurtzite sur toute la plage de composition. L'incorporation de Cd dans le ZnO réduit la bande interdite de l'alliage par rapport à celle du ZnO. Par conséquent, il est possible d'obtenir des bandes interdites à la fois plus petites et plus grandes que celles du ZnO, ce qui ouvre la voie à des hétéro-structures qui sont nécessaires à la formation de nombreux dispositifs avancés.

## II.5.Conclusion

Afin de mieux comprendre l'intérêt de l'utilisation de l'oxyde de zinc (ZnO) dans certains domaines tel que l'optoélectronique, nous avons consacré ce chapitre à une étude bibliographique de ce matériau et ses alliage tels que MgZnO, CdZnO et BeZnO, à partir de la présentation de ses propriétés structurales, électriques, optiques et thermiques. Dans le cadre

de cette thèse, nous cherchons à identifier ces caractéristiques afin d'utiliser ces matériaux comme des bases pour les lasers à boîte quantique.

## References

- [1] General Information of Zinc from the National Institute of Health, WHO, and International Zinc Association. Retrieved 10 march 2009.
- [2] Kühn H., Zinc White, « A Handbook of Their History and Characteristics », vol.1, National Gallery of Art, Washington, p 169- 186, (1986).
- [3] J.R. Partington, A short history of chemistry, 3rd Edition, Dover, 1989.
- [4] C. Jagadish and S. Pearton (Eds.), Zinc Oxide Bulk, Thin Films and Nanostructures: Processing, Properties, and Applications, Amsterdam, Elsevier, 2006.
- [5] H.J. Yearian, Intensity of diffraction of electrons by ZnO, Physical Review 48, 631 (1935).
- [6] M von Ardenne, Das Elektronen - Rastermikroskop. Praktische Ausfhrung, Z. tech. Phys. 19 407 (1938).
- [7] S.E. Harrison, Conductivity and Hall effect of ZnO at low temperatures, Physical Review 93 52 (1954) 52.
- [8] F.A. Kroger and H.J. Vink, The origin of the fluorescence in self activated ZnS, CdS, and ZnO, J. Chem. Phys. 22, 250 (1954).
- [9] Mongia Zehani "Optimisation du procédé polyol pour la synthèse de nanoparticules d'oxyde de zinc : mise à l'échelle du procédé et applications photovoltaïques" Thèse de Doctorat de l'université paris 13- Sorbonne paris cité-institut Galilée et université de Tunis el Manar-faculté des sciences de Tunis. (2014).
- [10] Klingshirn C. (2007), ZnO: Material, Physics and Applications. ChemPhysChem, 8, 6, pp. 782-803.
- [11] <https://sites.google.com/site/zincoxidetco/project-definition#TOC-Investigation-into-the-Properties-of-ZnO>
- [12] Jacek Wojnarowicz , Tadeusz Chudoba and Witold Lojkowski "A Review of Microwave Synthesis of Zinc Oxide Nanomaterials: Reactants, Process Parameters and Morphologies" Nanomaterials (2020), 10, 1086; doi:10.3390/nano10061086.
- [13] Ü Özgür, Y. Alivov, C Liu, A Teke, M. Reshchikov, S Dogan, V Avrutin, S. Cho et H Morkoc. « A comprehensive review of ZnO materials and devices ». Journal of Applied Physics 98.4 (août 2005), p. 041301 (cf. p. 15, 22–23, 26, 181, 204).
- [14] C. Klingshirn. « ZnO: From basics towards applications ». physica status solidi (b) 244.9 (sept. 2007), p. 3027–3073 (cf. p. 22–23).
- [15] Hadis Morkoç and Ümit Özgür. Zinc oxide: fundamentals, materials and device technology. Wiley-VCH, Weinheim, 2009.
- [16] Desgreniers S. (1998), High-density phases of ZnO: Structural and compressive parameters. Physical Review B, 58, 21, pp. 14102-14105.
- [17] Jaffe J. E., Hess A. C. (1993), Hartree-Fock study of phase changes in ZnO at high pressure. Physical Review B, 48, 11, pp. 7903-7909.
- [18] Weast, R.C. (1997) CRC Handbook of Chemistry and Physics , 58th edn, CRC Press, Boca Raton, FL.
- [19] E. Kisi and M. M. Elcombe, Acta Crystallogr., Sect. C: Cryst. Struct. Commun. C45, 1867 1989.
- [20] Bond, W.L. (1960) Acta Crystallographica, 13, 814.
- [21] Reeber, R.R. (1970) Journal of Applied Physics, 41, 5063.
- [22] A. B. M. A. Ashrafi, A. Ueta, A. Avramescu, H. Kumano, I. Suemune, Y.-W. Ok, and T.-Y. Seong, Appl. Phys. Lett. 76, 550 (2000).
- [23] Vogel, D., Krüger, P. & Pollmann, J. Ab-initio electronic-structure calculations for II-VI semiconductors using self-interaction-corrected pseudo-potentials. Phys. Rev. B 52, R14316–R14319 (1995).

- [24] Jaffe, J. E., Snyder, J. A., Lin, Z. & Hess, A. C. LDA and GGA calculations for high-pressure phase transitions in ZnO and MgO. *Phys. Rev. B* 62, 1660–1665 (2000).
- [25] Chelikowsky, J. R. An oxygen pseudo-potential: Application to the electronic structure of ZnO. *Solid State Commun.* 22, 351–354 (1977).
- [26] Usuda, M., Hamada, N., Kotani, T. & van Schilfgarde, M. All-electron GW calculation based on the LAPW method: Application to wurtzite ZnO. *Phys. Rev. B* 66, 125101 (2002).
- [27] Himpsel, F. J. Angle-resolved measurements of the photoemission of electrons in the study of solids. *Adv. Phys.* 32, 1–51 (1983).
- [28] Lambrecht, W.R.L., Rodina, A.V., Limpijumnong, S., Segall, B. and Meyer, B.K. (2002) *Physical Review B: Condensed Matter*, 65, 075207.
- [29] Reynolds, D.C., Look, D.C., Jogai, B., Litton, C.W., Cantwell, G. and Harsch, W.C. (1999) Valence band ordering in ZnO. *Physical Review B: Condensed Matter*, 60, 2340.
- [30] A. Moustaghfir, Elaboration et caractérisation de couches minces d'oxyde de zinc. Application à la photo-protection du polycarbonate, Thèse de l'Université Blaise Pascal (2006) pp. 15.
- [31] X.L. Xu, S.P. Lau, J.S. Chen, Z. Sun, B.K. Tay, J.W. Chai, Dependence of electrical and optical properties of ZnO films on substrate temperature, *Mater. Sci. Semicon. Proc.* 4 (2001) pp. 617-620.
- [32] T.K. Subramanyam, B. Srinivasulu Naidu, S. Uthanna, Effect of substrate temperature on the physical properties of DC reactive magnetron sputtered ZnO films, *Opt. Mat.* 13 (1999) pp. 239-247.
- [33] R. Al Asmar, G. Ferblantier, F. Mailly, P. Gall-Borrut, A. Foucaran, Effect of annealing on the electrical and optical properties of electron beam evaporated ZnO thin films, *Thin Solid Films* 473 (2005) pp. 49-53.
- [34] M. Bouderbala, S. Hamzaoui, M. Adnane, T. Sahraoui, M. Zerdali, Annealing effect on properties of transparent and conducting ZnO thin films, *Thin Solid Films* 517 (2009) pp. 1572-1576.
- [35] E.M. Bachari, G. Baud, S. Ben Amor, M. Jacquet, *Thin Solid Films*, 348 (1999)165.
- [36] T.K. Subramanyam, B. Srinivasulu Naidu, S. Uthanna. *Cryst. Res. Technol.*, 35 (2000) 1193.
- [37] M. Rebien, W. Henrion, M. Bär, Ch.-H. Fischer, *App. Phys. Lett.*, 80 (2002).
- [38] F. Ng-Cheng-Chin, M. Roslin, Z.H. Gu. T.Z. Fahidy, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 31 (1998) L71.
- [39] G. E. Jellison and L. A. Boatner. Optical functions of uniaxial ZnO determined by generalized ellipsometry. *Physical Review B*, 58(7) :3586, 1998.
- [40] Y. S. Park. Index of refraction of ZnO. *Journal of Applied Physics*, 39(7) :3049, 1968.
- [41] W. Li, D. Mao, F. Zhang, X. Wang, X. Liu, S. Zou, Q. Li, and J. Xu, *Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res.*, B169 (2000) 59.
- [42] Leung Y. H., Chan C. M. N., Ng A. M. C., et al. (2012), Antibacterial activity of ZnO nanoparticles with a modified surface under ambient illumination. *Nanotechnology*, 23, 47, pp. 475703.
- [43] Olorunyolemi, T., Birnboim, A., Carmel, Y., Wilson, O.C., Jr, and Lloyd, I.K. (2002) *Journal of the American Ceramic Society*, 85, 1249.
- [44] Lawless, W.N. and Gupta, T.K. (1986) *Journal of Applied Physics*, 60, 607.
- [45] Ohtomo, A., Tamura, K., Kawasaki, M., Makino, T., Segawa, Y., Tang, Z.K., Wong, G.K., Matsumoto, Y. and Koinuma, H. (2000) *Applied Physics Letters*, 77, 2204.
- [46] Makino, T., Ohtomo, A., Chia, C.H., Segawa, Y., Koinuma, H. and Kawasaki, M. (2004) *Physica E*, 21, 671.
- [47] Shan, F.K., Kim, B.I., Liu, G.X., Liu, Z.F., Sohn, J.Y., Lee, W.J., Shin, B.C. and Yu, Y.S. (2004) *Journal of Applied Physics*, 95, 4772.

- [48] Cohen, D.J., Ruthe, K.C. and Barnett, S.A. (2004) *Journal of Applied Physics*, 96, 459.
- [49] Makino, T., Segawa, Y., Kawasaki, M., Ohtomo, A., Shiroki, R., Tamura, K., Yasuda, T. and Koinuma, H. (2001) *Applied Physics Letters*, 78, 1237.
- [50] Ryu, Y.R., Lee, T.S., Lubguban, J.A., Corman, A.B., White, H.W., Leem, J.H., Han, M.S., Park, Y.S., Youn, C.J. and Kim, W.J. (2006) Wide-band gap oxide alloy: BeZnO. *Applied Physics Letters*, 88, 052103.
- [51] Ryu, Y., Lee, T.-S., Lubguban, J. A., White, H. W., Kim, B.-J., Park, Y.-S. and Youn, C.-J. (2006) Next generation of oxide photonic devices: ZnO-based ultraviolet light emitting diodes. *Applied Physics Letters*, 88, 241108.
- [52] Makino, T., Chia, C.H., Tuan, Nguen T., Segawa, Y., Kawasaki, M., Ohtomo, A., Tamura, K. and Koinuma, H. (2000) *Applied Physics Letters*, 77, 1632.
- [53] Choi, Y.-S., Lee, C.-C. And Cho, S.M. (1996) *Thin Solid Films*, 289, 153.
- [54] Van Vechten, J.A. and Bergstresser, T.K. (1970) *Physical Review B: Condensed Matter*, 1, 3351.
- [55] Ohtomo, A., Kawasaki, M., Ohkubo, I., Koinuma, H., Yasuda, T. and Segawa, Y. (1999) *Applied Physics Letters*, 75, 980.
- [56] Choopun, S., Vispute, R.D., Yang, W., Sharma, R.P., Venkatesan, T. and Shen, H. (2002) *Applied Physics Letters*, 80, 1529.
- [57] Gruber, T., Kirchner, C., Kling, R., Reuss, F. and Waag, A. (2004) *Applied Physics Letters*, 84, 5359.
- [58] Ma, D.W., Ye, Z.Z. and Chen, L.L. (2004) *Physica Status Solidi a: Applied Research*, 201, 2929.
- [59] Johnson, P.D. (1954) some optical properties of MgO in the vacuum ultraviolet. *Physical Review*, 94, 845.
- [60] Roessler, D.M. and Walker, W.C. (1967) Electronic spectrum and ultraviolet optical properties of crystalline MgO. *Physical Review*, 159, 733.
- [61] Segnit, E.R. and Holland, A.E. (1965) *Journal of the American Ceramic Society*, 48, 412.
- [62] Ohtomo, A., Kawasaki, M., Koida, T., Masubuchi, K. and Koinuma, H. (1998)  $Mg_xZn_{1-x}O$  as II-VI wide gap semiconductor alloy. *Applied Physics Letters*, 72, 2466.
- [63] Ohtomo, A. and Tsukazaki, A. (2005) Pulsed laser deposition of thin films and superlattices based on ZnO. *Semiconductor Science and Technology*, 20, S1.
- [64] Minemoto, T., Negami, T., Nishiwaki, S., Takakura, H. and Hamakawa, Y. (2000) *Thin Solid Films*, 372, 173.
- [65] Bundesmann, C., Schmidt-Grund, R. and Schubert, M. (2008) Far-infrared to vacuum-ultra-violet optical properties of ZnO: phonons, plasmons, dielectric constants, refractive indices, band-to-band transitions, and excitons, in *Transparent Conductive Zinc Oxide*, Springer Series in Materials Science, Vol. 104 (eds K. Ellmer, A. Klein and B. Rech) Springer, Berlin.
- [66] Sharma, A.K., Narayan, J., Muth, J.F., Teng, C.W., Jin, C., Kvit, A., Kolbas, R.M. and Holland, O. (1999) *Applied Physics Letters*, 75, 3327.
- [67] Jaffe, J.E., Pandey, R. and Kunz, A.B. (1991) *Physical Review B: Condensed Matter*, 43, 14030.
- [68] Jellison, G.E., Jr, and Boatner, L.A. (1998) *Physical Review B: Condensed Matter*, 58, 3586.
- [69] Jellison, G.E., Jr, (2001) *Physical Review B: Condensed Matter*, 65, 049902.
- [70] Chang, K.J., Froyen, S. and Cohen, M.L. (1983) *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 16, 3475, and references therein.
- [71] Emeline, A.V., Kataeva, G.V., Ryabchuk, V.K. and Serpone, N. (1999) *The Journal of Physical Chemistry B*, 103, 9190.
- [72] Madelung, O. (2003) *Semiconductors: Data Handbook*, 3rd edn, Springer, New York.
- [73] Ashrafi, A. and Jagadish, C. (2007) *Journal of Applied Physics*, 102, 071101.
- [74] Koffyberg, R.P. (1976) *Physical Review B: Condensed Matter*, 13, 4470.

- [75] Shigemori, S., Nakamura, A., Ishihara, J., Aoki, T. and Temmyo, J. (2004) Japanese Journal of Applied Physics, 43, L1088.
- [76] Makino, T., Segawa, Y., Kawasaki, M., Ohtomo, A., Shiroki, R., Tamura, K., Yasuda, T. and Koinuma, H. (2001) Applied Physics Letters, 78, 1237.
- [77] Taleb, S., Soudini, B., Abid, H. Investigation of Electronic and Optical Properties of CdZnO/ZnO/MgZnO Self-Assembled Quantum-Dot Lasers. Iranian Journal of Science and Technology, Transactions A: Science (2019) <https://doi.org/10.1007/s40995-019-00706-4>
- [78] FURNO, E., CHIARIA, S., PENNA, M., BELLOTTI, E., and GOANO, M. Electronic and Optical Properties of  $Mg_xZn_{1-x}O$  and  $Be_xZn_{1-x}O$  Quantum Wells. Journal of ELECTRONIC MATERIALS, Vol. 39, No. 7, (2010) [https://doi: 10.1007/s11664-010-1163-y](https://doi.org/10.1007/s11664-010-1163-y)

# **CHAPITRE III**

*Lasers et lasers à BQ,  
propriétés fondamentales*

### **III.1. Introduction**

De nos jours, les lasers à semi-conducteurs jouent un rôle clé pour de nombreuses applications technologiques comme par exemple la communication optique à haut débit, les interconnexions optiques et l'échantillonnage électro-optique. De plus, ils sont importants pour les applications biomédicales comme, par exemple, la tomographie par cohérence optique [1, 2]. L'objectif de ce chapitre est d'expliquer brièvement ce qu'est un laser, de décrire l'histoire de laser et de rappeler les caractéristiques de base des lasers à semi-conducteur. En second lieu, nous présenterons les propriétés fondamentales des structures laser à boîte quantique, notamment la structure électronique, les processus de diffusion des porteurs, le gain et l'indice de réfraction, ainsi que les élargissements homogènes et inhomogènes. Ces éléments fondamentaux sont nécessaires pour comprendre la physique de base et la modélisation de ce dispositif.

### **III.2. Laser**

Le mot LASER est l'acronyme anglais de " Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation ", soit en français, amplification de la lumière par émission stimulée de radiation. Ce composant si répandu n'est pourtant pas bien connu du grand public. Son principe de fonctionnement provient de l'émission stimulée de rayonnement dont la notion fut introduite en 1917 par EINSTEIN [3] et qui sera développée plus en détails par la suite.

### **III.3. L'histoire ultra-courte des lasers**

L'histoire du laser commence sans doute avec l'hypothèse quantique avancée par Max Planck vers 1900. Il a notamment proposé que les atomes ne peuvent absorber et émettre des radiations que dans des quanta discrets, ce comportement est primordial pour le fonctionnement du laser. Le concept d'émission stimulée, qui est à la base du fonctionnement des lasers, a été émis en 1917 par Albert Einstein. L'électromagnétisme classique ne pouvait rendre compte que des processus d'absorption et d'émission spontanée, ce qui avait laissé l'émission stimulée non découverte. Einstein a considéré un atome en équilibre thermique avec un champ de rayonnement de corps noir, et a montré que la loi de Planck (du rayonnement de corps noir) ne pouvait être redéfinie que si l'atome pouvait subir le processus hypothétique d'émission stimulée (en plus de l'absorption et de l'émission spontanée) [3].

L'émission stimulée a d'abord été réalisée en laboratoire, non pas dans le domaine optique, mais dans le domaine des micro-ondes. L'idée d'un dispositif utilisant l'émission stimulée pour réaliser des sources cohérentes de rayonnement micro-ondes (MASER : amplification micro-ondes par émission stimulée de rayonnement) a été conçue (indépendamment) par Joseph Weber, Charles Townes, Nikolay Basov, et Alexandre Prokhorov vers 1950. La première démonstration en laboratoire d'un maser a été rapportée en 1954 par Townes, avec J. P. Gordon et H. J. Zeiger. Conceptuellement, les lasers peuvent être considérés comme des masers opérant dans le domaine optique. Leur construction pratique est cependant technologiquement différente. En 1957, Gordon Gould a eu l'idée de construire un laser en utilisant un résonateur Fabry-Perot à face ouverte. Des idées similaires ont été poursuivies simultanément par Townes avec A. Schawlow. [4]

Le premier laser réel a été construit et démontré par Theodore Maiman en 1960 [5]. En utilisant un cristal de rubis pompé par des lampes flash photographiques, il a réalisé un fonctionnement laser pulsé avec une longueur d'onde de 694,3 nm (rouge). À partir de là, de nombreux lasers et technologies laser différents ont rapidement été développés. En 1964, Townes Basov et Prokhorov ont reçu le prix Nobel de physique "pour des travaux fondamentaux dans le domaine de l'électronique quantique, qui ont conduit à la construction d'oscillateurs et d'amplificateurs basés sur le principe du maser-laser". [6]

#### III.4. Principes de base du laser

Le laser se compose principalement de trois parties. Le résonateur, un milieu actif dans le résonateur et une source d'énergie pour activer le milieu. Avec ces composants, il constitue un oscillateur auto excité. [7]

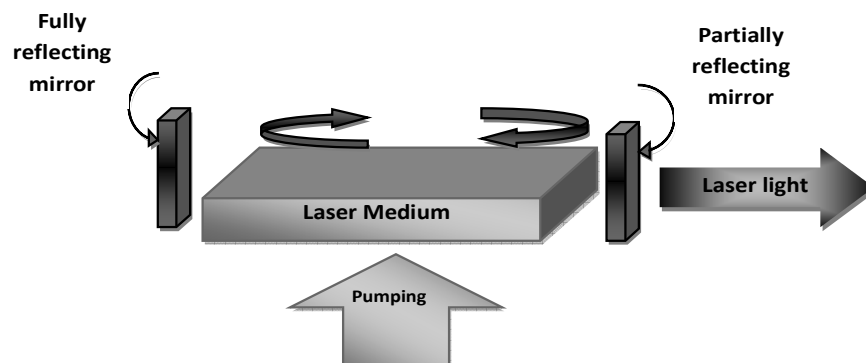
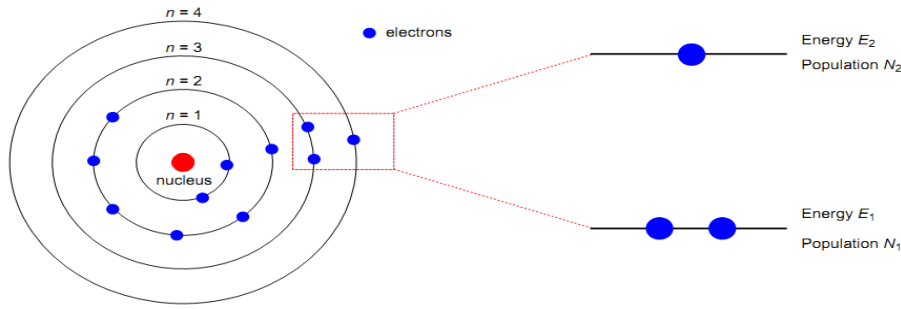


Figure (III.1) : Éléments de base du système laser.

- **Milieu actif** (milieu laser = milieu gain). Le milieu actif est capable d'amplifier le rayonnement électromagnétique. Le milieu actif, situé à l'intérieur d'un résonateur, remplit partiellement ou complètement un résonateur.
- **Système de pompage**. Il "pompe" le milieu actif. Les méthodes de pompage sont : le pompage optique avec un autre laser ou une lampe ; le pompage par décharge de gaz ; le pompage par un courant à travers un semi-conducteur ou une hétéro-structure semi-conductrice ; le pompage chimique.
- **Résonateur laser**. Le résonateur laser a pour tâche de stocker un champ électromagnétique cohérent et de permettre au champ d'interagir avec le milieu actif, le milieu actif subit la rétroaction du champ cohérent. Nous décrivons les résonateurs qui se composent de deux miroirs, l'un est un réflecteur d'une réflectivité  $R_1$  proche de 1, et l'autre est un réflecteur partiel servant de coupleur de sortie. Le miroir de couplage de sortie a une réflectivité ( $R_2$ ) qui peut également avoir une valeur proche de 1 mais qui peut être beaucoup plus petite. Les lasers à semi-conducteurs peuvent avoir des réflecteurs avec  $R_1 = R_2 \sim 0.3$ . Chaque type de laser nécessite sa propre conception de résonateur. Il existe un critère principal concernant les réflectivités des résonateurs : un laser doit pouvoir fonctionner tout court. En fonction de la tâche d'un laser, d'autres critères peuvent être choisis, par exemple qu'un laser doit avoir une efficacité optimale de conversion de la puissance de pompage en puissance de sortie du laser.

### III.5. Interaction de la lumière et des atomes

Les énergies des atomes, des ions ou des molécules (électrons) sont quantifiées en valeurs discrètes : elles ne peuvent occuper que des niveaux d'énergie discrets (figure (III.2)). La première preuve expérimentale de ce fait a été l'observation, faite dès le 19ème siècle, qu'un ensemble de raies spectrales (raies de Fraunhofer) était absent du spectre d'émission solaire. L'explication théorique complète de la discrétude des niveaux d'énergie atomique est venue avec le développement de la mécanique quantique et de l'équation d'onde de Schrödinger. L'existence de niveaux d'énergie discrets est la clé du fonctionnement des lasers.



**Figure (III.2) :** Illustration schématique des niveaux d'énergie discrets des atomes et des molécules.

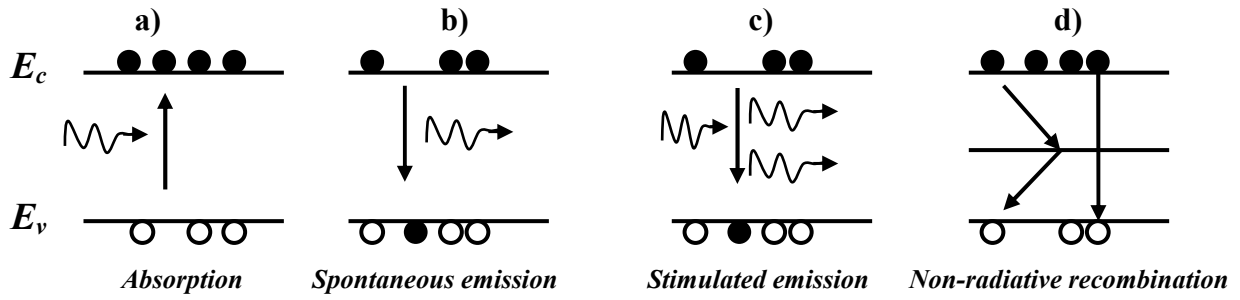
Il existe trois processus de base par lesquels le rayonnement EM peut interagir avec la matière : (1) l'émission spontanée, (2) l'absorption et (3) l'émission stimulée. Ces processus ont été identifiés pour la première fois par Einstein en 1917. La figure (III.3) illustre ces processus à l'aide d'un atome hypothétique ayant seulement deux niveaux d'énergie :  $E_1$  (niveau inférieur) et  $E_2$  (niveau supérieur). Les densités de population respectives dans ces niveaux sont  $N_1$  et  $N_2$ . Un faisceau de lumière monochromatique collimaté de fréquence angulaire  $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$  peut interagir avec les atomes des trois manières suivantes. Sur la base de ces phénomènes, il existe deux types de dispositifs utilisés comme sources de lumière. Dispositifs utilisés comme sources de lumière : l'amplification de la lumière par émission stimulée de radiations (laser) et les diodes électroluminescentes (DEL).

### III.5.1. Absorption

Dans des conditions normales, tous les matériaux absorbent la lumière. Le processus d'absorption est illustré par la figure (III.3.a), dans laquelle un photon d'énergie  $\hbar\omega = E_2 - E_1$  est absorbé, transférant un électron du niveau inférieur au niveau supérieur. La partie gauche de figure (III.3.a) représente l'état initial de l'atome, tandis que la partie droite décrit les états après la transition. L'intensité de la lumière incidente est atténuée par l'absorption, mais la direction de propagation et la polarisation de la lumière restent inchangées. Le taux d'absorption est donné par

$$\frac{dN_1(t)}{dt} = -B_{12}N_1\rho(\omega) = -\frac{dN_2(t)}{dt} \quad (\text{III.1})$$

Où  $B_{12}$  est le coefficient B d'Einstein pour l'absorption,  $\rho$  est la densité d'énergie du flux de photons incidents.



**Figure(III.3)** : Transitions électroniques entre les bandes de conduction et de valence dans les matériaux semi-conducteurs.

### III.5.2. Émission spontanée

Dans ce processus, comme le montre la figure (III.3.b), un atome du niveau supérieur saute spontanément vers le niveau inférieur et un photon d'énergie  $\hbar\omega$  est émis. La direction de propagation et la polarisation du rayonnement émis sont arbitraires. L'équation de taux correspondante est

$$\frac{dN_1(t)}{dt} = -A_{21}N_2(t) = -\frac{dN_2(t)}{dt} \tag{III.2}$$

Où  $A_{21}$  est appelé le coefficient A d'Einstein et est lié à la durée de vie de l'émission spontanée par  $\tau = (A_{21})^{-1}$ .

### III.5.3. Émission stimulée

Dans ce cas, comme l'illustre la figure (III.3.c), le photon incident incite l'atome à effectuer une transition descendante du niveau supérieur au niveau inférieur. L'énergie est libérée sous la forme d'un photon, qui a la même fréquence, la même phase, la même polarisation et la même direction de propagation que le photon incident ayant stimulé la transition. L'équation de taux correspondante est

$$\frac{dN_2(t)}{dt} = -B_{21}N_2\rho(\omega) = -\frac{dN_1(t)}{dt} \tag{III.3}$$

Où  $B_{21}$  est le coefficient B d'Einstein pour l'émission stimulée.

### III.5.4. Taux d'absorption et d'émission

Nous pouvons écrire les taux d'émission spontanée, d'émission stimulée et d'absorption à partir des équations (III.1) et (III.3) comme suit

$$R_{spon} = A_{21}N_2 , R_{stim} = B_{21}N_2\rho(\omega) , \text{ and } R_{abs} = B_{12}N_1\rho(\omega) \quad (\text{III.4})$$

En équilibre thermique, les densités atomiques obéissent aux statistiques de Boltzmann, et par conséquent

$$N_2/N_1 = \exp[-(E_2 - E_1)/k_B T] = \exp(-\hbar\omega/k_B T) \quad (\text{III.5})$$

Où  $k_B$  est la constante de Boltzmann,  $T$  est la température absolue

En régime permanent, les taux des transitions ascendantes et descendantes doivent être égaux, ce qui conduit à

$$A_{21}N_2 + B_{21}N_2\rho(\omega) = B_{12}N_1\rho(\omega) \quad (\text{III.6})$$

En utilisant l'équation (III.5) dans l'équation (III.6), la densité spectrale peut être exprimée comme suit

$$\rho(\omega) = \frac{A_{21}/B_{21}}{(B_{12}/B_{21})\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \quad (\text{III.7})$$

En équilibre thermique, la densité spectrale du rayonnement doit être identique à celle du rayonnement du corps noir, donnée par la formule de Planck

$$\rho_{BB}(\omega) = \frac{2\hbar\omega^3}{\pi c^3} \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \quad (\text{III.8})$$

En comparant les équations (III.7) et (III.8), on obtient les relations suivantes

$$A_{21} = (2\hbar\omega^3/\pi c^3)B_{21} \text{ et } B_{12} = B_{21} \quad (\text{III.9})$$

Le rapport entre les taux d'émission stimulés et spontanés est donc le suivant

$$R_{stim}/R_{spon} = [\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1]^{-1} \quad (\text{III.10})$$

Pour calculer les coefficients d'Einstein, nous avons supposé une onde monochromatique de fréquence  $\omega$ . Un modèle plus réaliste introduit le concept d'une fonction de forme de raie atomique  $g(\omega)$ . La distribution  $g(\omega)$  est la forme d'équilibre des transitions à largeur de raie élargie. L'expression de la densité de rayonnement est :

$$\rho(\omega) = \rho_{\omega} g(\omega) \quad (\text{III.11})$$

Où  $\rho_{\omega}$  est la densité d'énergie du champ électromagnétique induisant les transitions [8]. Dans ce qui suit, le terme de taux stimulé (équation (III.4)) sera exprimé avec une probabilité de transition stimulée  $W_{21}$  comme

$$W_{21}N_2 = B_{21}\rho(\omega)N_2 \quad (\text{III.12})$$

Avec l'intensité  $I = c\rho_{\nu} / n$  [8], et les équations (III.7) et (III.12), la probabilité de transition stimulée s'écrit alors

$$W_{21} = \frac{c^2 I}{8\pi n^2 h\nu^3 \tau_{21}} g(\omega) \quad (\text{III.13})$$

Avec  $c$  est la vitesse de la lumière dans le vide et  $n$  est l'indice de réfraction du milieu.

### III.6. Laser à semi-conducteur

Les lasers sont des dispositifs qui génèrent ou amplifient un rayonnement hautement monochromatique dans la région infrarouge, la région optique ou au-delà. Selon des développements récents, des diodes laser sophistiquées peuvent avoir une largeur de ligne de quelques centaines de kHz et une puissance élevée allant jusqu'à 100mW [9].

Leur petite dimension, leur faible consommation d'énergie, la possibilité de modulation directe, leur haute efficacité et leur productivité de masse sont quelques-uns des avantages exceptionnels des lasers à semi-conducteurs. Comme exemple et pour les systèmes de communication et avec la technologie des fibres optiques, les lasers à semi-conducteurs ont apporté un changement radical dans ces systèmes pour répondre à la demande croissante de communication à haut débit. De nouvelles applications dans les réseaux locaux de communication de données et de télécommunication continuent d'apparaître à mesure que ces dispositifs deviennent plus fiables et plus efficaces. [10, 11]

Dans un matériau semi-conducteur solide, il y a quatre transitions électroniques de base qui peuvent se produire entre les bandes de valence et de conduction : émission spontanée (émission de photons), génération stimulée (absorption de photons), émission stimulée (émission cohérente de photons), la recombinaison assistée par piège et la recombinaison Auger. La lumière est générée par l'émission spontanée et l'émission stimulée.

**III.6.1. Fonctionnement d'un laser à semi-conducteur**

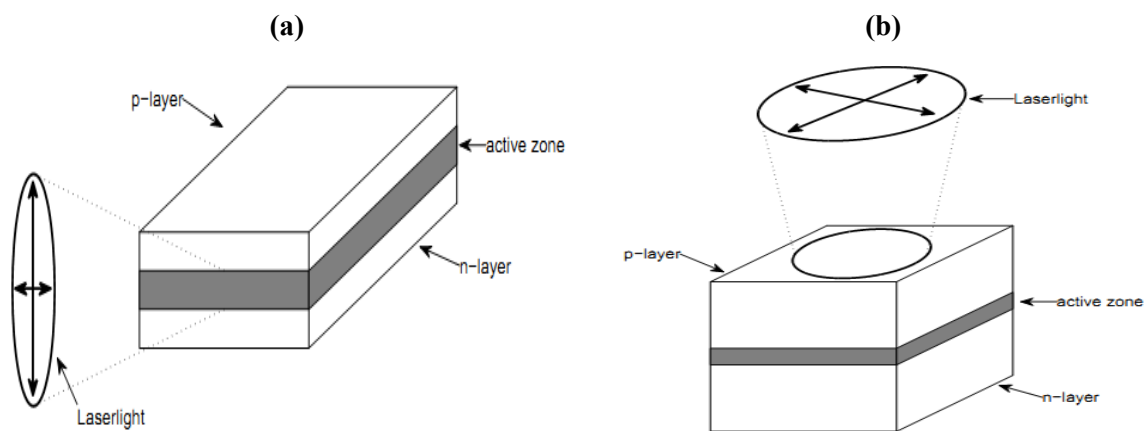
Le principal mécanisme des LED est qu'un grand nombre d'émissions spontanées se produisent à l'intérieur du matériau et qu'aucune rétroaction des photons n'est assurée. Ce mécanisme entraîne une émission incohérente puisque le moment et la direction de l'émission sont aléatoires, ce qui les rend impropres à la communication optique. Alors que dans les lasers, l'émission spontanée et l'émission stimulée se produisent toutes deux, l'émission stimulée est dominante et permet l'émission de lumière monochromatique. C'est pour cette raison que les lasers font partie intégrante d'un système de communication optique.

Le milieu de gain optique dans les diodes laser à semi-conducteurs est constitué d'un matériau qui absorbe le rayonnement incident sur une certaine gamme de longueurs d'onde et intègre une cavité optique résonante. Lorsqu'une énergie externe est appliquée sous forme d'énergie électrique ou optique, les électrons à l'intérieur du matériau sont excités jusqu'à un état de non-équilibre qui peut provoquer une émission spontanée ou stimulée. Si l'énergie du rayonnement incident est supérieure à l'énergie de la bande interdite entre l'électron dans l'état excité et l'état disponible dans la bande de valence (trou), l'électron et le trou se recombinent en émettant un photon qui a la même énergie que le photon incident. Le rayonnement incident est donc amplifié au lieu d'être absorbé en stimulant la désexcitation de ces électrons et en générant un rayonnement supplémentaire. Si le gain résultant est suffisant pour surmonter les pertes de certains modes optiques résonnants de la cavité, une lumière relativement monochromatique peut être produite. Dans les lasers à semi-conducteurs, après l'émission de la lumière par émission spontanée, les photons résultants sont amplifiés car ils sont réfléchis dans la cavité résonnante qui fournit la rétroaction positive nécessaire pour que le rayonnement soit amplifié, de sorte qu'une oscillation laser peut être établie et maintenue avec une injection suffisante d'énergie électrique (injection d'électrons).

La gamme des longueurs d'onde d'émission des lasers à semi-conducteurs couvre le spectre optique du proche ultraviolet à l'infrarouge lointain, en fonction des matériaux utilisés dans la région d'émission. Le critère le plus important pour sélectionner le matériau semi-conducteur d'un laser à hétéro-structure spécifique est lié à l'adaptation du réseau entre les deux semi-conducteurs de bandes interdites différentes. Les lasers à grande longueur d'onde dans la gamme de 1,1 à 1,6  $\mu\text{m}$  sont souhaitables pour la communication par fibre optique, car l'atténuation de la fibre optique dans cette fenêtre est très faible. [12]

### III.6.2. Types de lasers

Les diodes laser pratiques peuvent être de deux catégories (Figure (III.4)) : celles à cavités dans le plan (lasers à émission latérale, EEL) et celles à cavités verticales (lasers à émission de surface à cavité verticale, VCSEL). La principale différence réside dans le fait que la cavité optique des EEL se trouve dans l'axe latéral, où la rétroaction peut être réalisée à l'aide d'un miroir à facettes clivées et d'une émission au bord du dispositif. Alors que dans les VCSEL, la cavité est dans la direction verticale, qui est également la direction de croissance du dispositif, et la rétroaction est réalisée en utilisant une pile réfléchissante multicouche cultivée sous et au-dessus de la région active. [13, 14]



**Figure (III.4) :** Schéma de (a) la structure d'un laser à émission latérale et (b) la structure d'un laser à émission de surface à cavité verticale.

Une autre classification des lasers à semi-conducteurs est basée sur les miroirs sélectifs de fréquence placés dans la direction de propagation du mode axial pour déterminer la fréquence d'émission et l'accordabilité. Certains de ces lasers comprennent, sans s'y limiter, les lasers Fabry-Perot (FP), les lasers à réflecteur de Bragg distribué (DBR) et les lasers à rétroaction distribuée (DFB).

#### III.6.2.1. Laser Fabry-Pérot

Les diodes laser Fabry-Pérot (FP) sont celles dont les miroirs sont simplement les surfaces planes découpées aux deux extrémités du puce laser pour créer une rétroaction positive. La grande discontinuité de l'indice de réfraction à l'interface semi-conducteur - air fournit un coefficient de réflexion d'environ 30 % (Figure (III.5.a)). Les lasers FP correspondent à la configuration par défaut d'un laser (l'habituelle inversion de population, émission stimulée et

rétroaction positive). Ces lasers sont caractérisés par des spectres multi-modes longitudinaux avec un étalement des longueurs d'onde de plusieurs nm à plusieurs dizaines de nm.

### **III.6.2.2. Lasers DBR (Distributed Bragg Reflector)**

L'autre solution pour créer une cavité résonante dans la région active consiste à placer des couches de matériaux différents aux deux extrémités de la région active. Ces couches créent une réflectivité effective élevée à la longueur d'onde de Bragg, d'où le nom de réflecteur de Bragg distribué (Distributed Bragg Reflector DBR). Ces types de lasers peuvent émettre un seul mode longitudinal qui est lié à la longueur d'onde de Bragg.

De nombreux lasers à diode importants utilisent des réflecteurs à réseau passif distribué pour l'un ou les deux miroirs de la cavité (Figure (III.5.b)). Un DBR possède généralement deux régions de réseau séparées de part et d'autre de la région de gain, et le réseau ne chevauche pas la région de gain. Avec les lasers dans le plan, la raison est d'utiliser leur sélectivité de fréquence pour un fonctionnement en mode axial unique et avec les lasers à cavité verticale, la raison est d'obtenir une valeur de réflectivité très élevée. Les réseaux sont constitués d'un réseau périodique de variations d'indice. L'un des problèmes ici est d'effectuer la transition entre les guides d'ondes actifs et passifs sans introduire une discontinuité indésirable. Ce problème est peu important dans le cas des VCSEL, car la direction axiale est la direction de croissance et le changement de matériau se fait toujours plusieurs fois au cours de la croissance. La fabrication de diodes laser à émission latérale avec miroir DBR est relativement complexe, car de nombreuses structures doivent être créées le long de la surface de la tranche. En effet, les lasers DBR dans le plan ne sont formés que lorsque leurs propriétés uniques, telles que l'accordabilité de la longueur d'onde, sont requises.

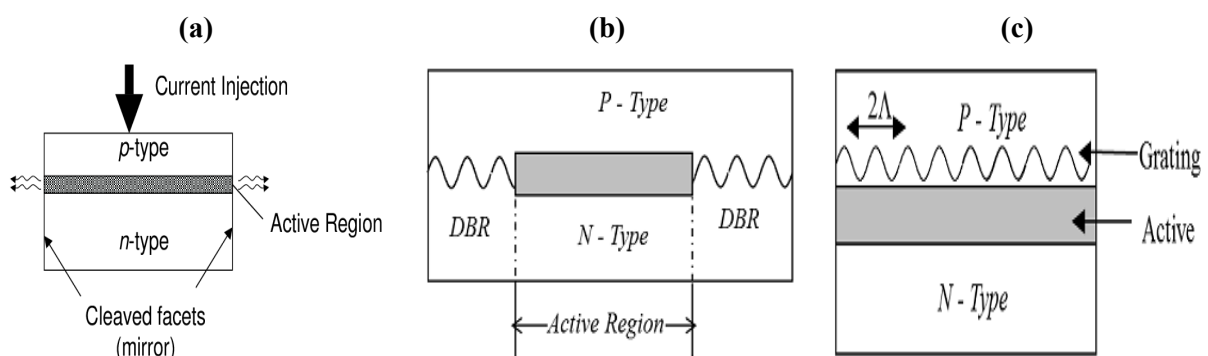
### **III.6.2.3. Lasers DFB (Distributed Feedback)**

Les lasers Distributed Feedback (DFB) sont des dispositifs très populaires, largement utilisés dans les systèmes de communication optique. Un laser DFB utilise également des miroirs à réseau, mais le gain est inclus dans les réseaux (Figure (III.5.c)). Il est donc possible de fabriquer un laser à partir d'un seul réseau, bien qu'il soit souhaitable d'avoir au moins une fraction de décalage de longueur d'onde près du centre pour faciliter l'émission laser à la fréquence de Bragg. Les lasers DFB font généralement partie des types de cavité dans le plan, mais des versions à cavité verticale sont également possibles, mais elles ne présentent

aucun avantage par rapport aux lasers à cavité verticale DBR et leur fabrication n'est pas plus facile.

La sélectivité de fréquence des lasers DFB est due au réseau périodique qui forme une interférence constructive entre les ondes optiques se propageant vers l'avant et vers l'arrière à certaines longueurs d'onde. Par conséquent, pour que la résonance se produise, la longueur d'onde doit correspondre à la période du réseau, ainsi la condition de résonance d'un laser DFB est :  $\lambda_g = 2n\Lambda$  où  $\lambda_g$  est la longueur d'onde de Bragg et  $\Lambda$  est la période du réseau, et  $n$  est l'indice de réfraction effectif du guide d'onde optique.

Dans un laser DFB simple, il y a deux modes également espacés de chaque côté de la longueur d'onde de Bragg qui atteignent le seuil simultanément s'il n'y a pas de réflexions perturbatrices supplémentaires telles que celles provenant de clivages non revêtus à l'extrémité. La première méthode pour éviter l'émission bi-mode consiste à utiliser des réflexions supplémentaires pour détruire la dégénérescence indésirable. En pratique, au moins un miroir clivé fera l'affaire si les réseaux ne sont pas trop longs et si la phase de réflexion nette d'une extrémité est décalée par rapport à celle du réseau. Toutefois, la relation de phase entre la réflectivité de la facette et la réflectivité du réseau est difficile à contrôler et la phase est aléatoire, de sorte que le rendement d'un bon laser DFB est limité. Une autre méthode consiste à utiliser des facettes recouvertes d'un revêtement antireflet et une configuration décalée de demi/quart d'onde pour améliorer le rendement et les ajustements de phase.



**Figure (III.5):** Laser à structures (a) Fabry-Perot, (b) Distributed Bragg Reflector et (c) Distributed Feedback.

### III.7. Laser à boîte quantique

Un laser à boîtes quantiques est un laser à semi-conducteurs qui utilise des boîtes quantiques comme milieu actif du laser dans sa région émettrice de lumière. En raison du confinement étroit des porteurs de charge dans les boîtes quantiques, ceux-ci présentent une structure électronique similaire à celle des atomes. Les lasers fabriqués à partir d'un tel milieu actif évitent certains des aspects négatifs des performances des dispositifs associés aux lasers à semi-conducteurs traditionnels basés sur des milieux actifs en vrac ou à puits quantiques.

Sur la base de la revue de la littérature, les lasers à boîte quantique présentent les avantages suivants par rapport à leurs homologues à puits quantiques : [15, 16, 17]

- Faible densité de courant de seuil.
- stabilité à haute température.
- Gain matériel élevé.
- Gain différentiel élevé de l'ordre de  $10^{-15} \sim 10^{-13} \text{ cm}^2$ , soit un ou deux ordres de grandeur de plus que celui des lasers puits quantique.
- Potentiel de réduction du facteur  $\alpha$ .

D'autre part, les lasers à boîte quantique présentent également les caractéristiques suivantes, qui peuvent constituer des inconvénients limitant les performances dynamiques des lasers :

- Large élargissement inhomogène (30~80meV) des spectres optiques dû à la fluctuation de la taille de boîte.
- Compression à gain élevé de l'ordre de  $10^{-16} \sim 10^{-14} \text{ cm}^3$ , ce qui est également un ou deux ordres de grandeur supérieur à celui des lasers à puits quantique.

#### III.7.1. Notions fondamentales sur les lasers à boîtes quantiques

Dans la théorie quantique semi-classique, le champ laser est traité classiquement avec les équations de Maxwell, et le milieu de gain est décrit mécaniquement quantique par les équations de Bloch optique ou les équations de Bloch semi-conducteur. Dans les lasers à semi-conducteurs basés sur les transitions inter-bandes, le déphasage de la polarisation se produit beaucoup plus rapidement que les changements de porteur, la population et l'intensité lumineuse, qui permet l'élimination adiabatique de la dynamique de polarisation et donne une description simplifiée de l'équation de taux [18, 19].

Afin de modéliser correctement les caractéristiques statiques et dynamiques des lasers à boîte quantique, il faut tenir compte des caractéristiques fondamentales et cruciales de ces lasers.

D'une part, ces caractéristiques peuvent être décrites au niveau microscopique, ce qui est généralement complexe mais utile pour comprendre la physique.

D'autre part, pour les applications d'ingénierie des dispositifs, ces modèles peuvent être simplifiés en introduisant certains concepts phénoménologiques et paramètres empiriques. Cette section traite des caractéristiques fondamentales du laser à boîte quantique et décrit l'état de l'art de la modélisation du laser à boîte quantique.

### III.7.1.1. Structure électronique d'une boîte quantique et processus de diffusion des porteurs

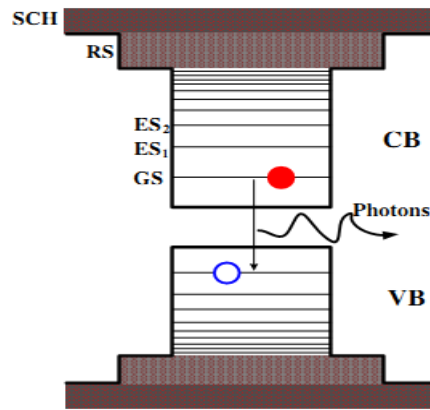
Schématiquement, la région active d'un laser à boîte quantique est souvent constituée d'une hétéro-structure de confinement séparée en 3D (SCH, également appelée barrière), d'un réservoir de porteurs en 2D (RS, correspondant approximativement à la couche de mouillage (WL)) et de boîtes confinées spatialement en trois dimensions. Le calcul de la structure de bande électronique des lasers à semi-conducteurs peut être effectué en utilisant la théorie multi-bande k-p [20, 21]. La figure (III.6) montre une illustration de la structure électronique d'un laser à boîte quantique.

Les porteurs dans la barrière et la couche de mouillage peuvent être traités comme des particules quasi libres. Ainsi, des états électroniques quasi-continus sont formés dans le SCH et le RS. Les densités des états pour la SCH (par volume) et celle de la RS (par zone) sont respectivement données par [22] :

$$\rho_{SCH} = 2 \left( 2 \frac{m_{SCH}^*}{\hbar^2} \pi k_B T \right)^{3/2} \quad (III.14)$$

$$\rho_{RS} = \frac{m_{RS}^*}{\pi \hbar^2} k_B T \quad (III.15)$$

Avec  $m^*$  étant la masse effective des électrons ou des trous. Le réservoir porteur quasi-continu se couplant avec les états d'énergie localisés des boîtes, il en résulte des séparations d'énergie plus petites et donc des états se chevauchant à des énergies plus élevées [23]. Les états discrets se trouvant à des énergies plus faibles sont séparés de quelques dizaines de meV dans la bande de conduction (CB), tandis qu'ils sont plus petits dans la bande de valence (VB) en raison de la masse effective plus importante des trous.

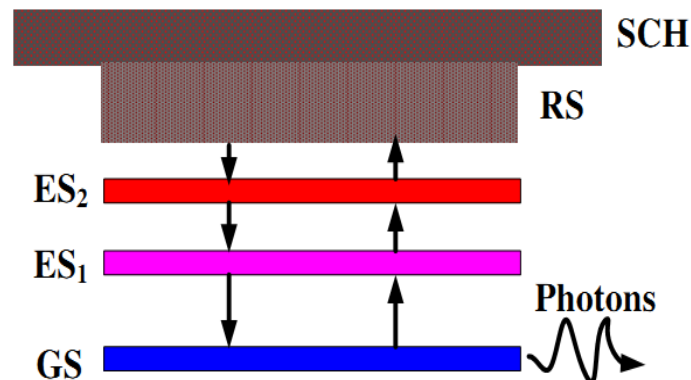


**Figure (III.6) :** Schéma d'une structure de bande électronique d'électrons et de trous d'un laser à boîte quantique. [24]

Grâce à l'interaction de Coulomb, les électrons et les trous dans le semi-conducteur peuvent être liés en paires électron-trou, appelées excitons. La distance entre l'électron et le trou dans un exciton est appelée rayon de Bohr de l'exciton. Le rayon de Bohr typique de l'exciton des semi-conducteurs est de quelques nanomètres [25]. La nature de l'exciton peut être modifiée par la structure de confinement et présente donc des propriétés optiques différentes. Dans le cadre d'une image excitonique simplifiée, la structure électronique du laser à boîte quantique est illustrée dans la figure (III.7). L'approximation de l'exciton peut simplifier considérablement la modélisation semi-empirique des lasers à boîte quantique car elle réduit de moitié les équations de taux concernant les populations de porteurs. Cette approximation permet d'introduire directement des données expérimentales et peut donner des images intuitives de des processus physiques. Cette hypothèse est valable tant que les populations d'électrons et de trous ne présentent des écarts importants. Dans certains cas, il est nécessaire d'utiliser des s'approche [26, 27].

Dans un dispositif de boîte quantique, une fois que l'injection de courant a généré des porteurs de charge dans la couche SCH, les porteurs vont se transporter à travers la barrière 3D et atteindre la RS 2D, qui agit comme un réservoir de porteurs pour les états boîte quantique localisés. Le processus de capture des porteurs fait référence à la capture de porteurs de la RS aux états excité (ES) de boîtes. Dans les boîtes, les porteurs se détendent des ES à haute énergie jusqu'au niveau GS. Enfin, la recombinaison radiative des trous d'électrons et l'effet laser se produisent sur le GS. De plus, la capture des porteurs directement du RS dans le GS est également possible [28]. Ce canal direct accélère le processus indirect de la porteur (via l'ES) vers le GS, et joue un rôle important dans le processus d'émission laser double (GS et

ES). De plus, ces états électroniques présentent également un couplage électronique entre boîtes [23].



Figure(III.7) : Image d'exciton de la structure électronique du laser à boîte quantique. [24]

Comme dans les lasers à puits quantique, le processus de transport des porteurs joue également un rôle important dans la détermination de la dynamique du laser à boîte quantique, ce qui induit une coupure parasite qui ne peut être distinguée d'une coupure RC dans la réponse de modulation, et limite ainsi la largeur de bande de modulation [29, 30]. La photoluminescence résolue en temps (Time-resolved photoluminescence TRPL) montre que le temps de transport des porteurs à travers la barrière vers le RS est de plusieurs picosecondes (1~5 ps) selon l'épaisseur de la couche SCH [31, 32].

Les processus de transition de capture et de relaxation des porteurs sont principalement soutenus par deux mécanismes physiques : La diffusion porteur-porteur induite par l'interaction coulombienne (processus Auger) et la diffusion de porteur-phonons Optique longitudinale (LO). Le comportement de diffusion est différent pour les densités de porteurs d'excitation faibles et élevées. À faible densité d'excitation, l'interaction des porteurs avec les phonons LO peut fournir des canaux de diffusion efficaces à condition que la conservation de l'énergie soit respectée. Alors que la séparation énergétique des états de boîte quantique ne correspond généralement pas à l'énergie des phonons LO, ce mécanisme de diffusion est souvent possible pour les trous en raison de leurs états denses [33]. Lorsque le plasma de porteurs à haute densité est créé dans le réservoir de porteurs, la diffusion porteur-porteur explique la capture efficace du RS dans les états de boîte quantique localisés ainsi que la relaxation entre les états de boîte quantique discrets [34]. La diffusion Auger peut être classée en trois types, selon les états électroniques initiaux des porteurs impliqués. Le type I implique deux porteurs dans les états RS [35], le type II est avec un porteur dans un état ES tandis que l'autre est dans le RS [36], et le type III a les deux porteurs occupés le ES [37].

Dans les expériences TRPL, les processus de capture et de relaxation peuvent être identifiés en faisant varier l'énergie d'excitation. Il est démontré que le processus d'interaction porteur-phonon est dépendant de la température, le taux de diffusion augmente à haute température. En revanche, le processus Auger est indépendant de la température, mais dépend de la densité des porteurs [38-40]. L'analyse du temps de montée du Photoluminescence (PL) à température ambiante montre que les temps de capture et de relaxation varient dans une large gamme de 0,1 à 100ps en fonction de l'intensité d'excitation [38, 41]. Cependant, pour une densité modérée de porteurs de RS de  $10^{11} \sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , les temps typiques de diffusion des porteurs sont de l'ordre de 1~10ps [41, 42]. Pour les processus liés aux interactions multi-corps de Coulomb, la relaxation à l'intérieur de la boîte quantique est typiquement sur une échelle de temps plus rapide que la capture des porteurs du WL dans la boîte quantique. Les processus impliquant des trous sont plus rapides que les processus correspondants impliquant des électrons et la capture vers les états excités est plus efficace que la capture vers les états fondamentaux. Par conséquent, dans un scénario dynamique, les trous sont d'abord capturés vers les états excités de la boîte quantique et immédiatement dispersés par relaxation vers les états fondamentaux de la boîte quantique. La capture des électrons est un peu plus lente, la relaxation ultérieure des électrons n'est que légèrement plus lente que celle des trous [33].

Dans la modélisation de l'équation de taux des lasers à boîte quantique, les distributions des porteurs dans tous les états sont supposées être dans une condition de quasi-équilibre avec la distribution de Fermi-Dirac, ce qui est tout à fait approprié pour un processus de relaxation intra-bande suffisamment rapide [43]. Les occupations de porteurs au moins dans un GS à effet laser et un réservoir (RS) doivent être modélisées afin de distinguer le cas de boîte quantique du cas de puits quantique.

Le calcul rigoureux des taux de diffusion des porteurs est une tâche ardue, qui nécessite une théorie quantique sophistiquée à plusieurs corps qui traite les processus de collision intra-bande [43, 44].

W. Berg et al [45] a proposé une formule phénoménologique pour prendre en compte le temps de capture et de relaxation dépendant des porteurs dans un modèle semi-empirique :

$$\tau_i = \frac{1}{A_i + C_i N_{RS}} \quad (\text{III.16})$$

Où  $i$  désigne le processus de capture ou de relaxation,  $A_i$  est le taux de diffusion assistée par phonon, et  $C_i$  est le coefficient déterminant la diffusion assistée par Auger par les porteurs dans le RS (NRS).

Bien que cette expression donne un bon accord avec les expériences TRPL réalisées par P. Miska et al [40], les paramètres  $A_i$  et  $C_i$  peuvent être très différents d'un dispositif à l'autre [46], ce qui limite l'applicabilité de cette expression. Cependant, étant donné qu'une fois que le laser est pompé au-dessus de son seuil, il y a une grande densité de porteurs dans le RS qui ne varie pas beaucoup avec le courant de polarisation, c'est une approximation raisonnable de supposer que le temps de diffusion des porteurs est une valeur constante, ce qui simplifie le modèle d'équation de taux pour l'étude de la dynamique des lasers à boîte quantique.

### III.7.1.2. Gain, indice de réfraction et facteur d'amélioration de la largeur de ligne

Le champ laser et le milieu de gain semi-conducteur sont couplés par le gain et l'indice de réfraction induit par les porteurs, ou de manière équivalente, par la susceptibilité optique complexe. Pour déterminer ces quantités, il est nécessaire de résoudre les équations de mouvement du milieu de gain en mécanique quantique pour la polarisation microscopique. En principe, ces équations dynamiques devraient être dérivées en utilisant le système Hamiltonien complet, qui inclut les contributions des énergies cinétiques, les interactions de Coulomb à plusieurs corps, l'interaction électrique-dipôle entre les porteurs et le champ laser, ainsi que les interactions entre les porteurs et les phonons. Les effets du pompage du courant d'injection doivent également être inclus [44].

La connexion entre l'électrodynamique classique et la mécanique quantique s'effectue par le biais de la polarisation macroscopique  $P$  et de la polarisation microscopique  $p_\alpha$ .

$$P = \frac{1}{V} \sum_{\alpha} \mu_{\alpha} p_{\alpha} \quad (\text{III.17})$$

Où  $\mu_{\alpha}$  est l'élément de matrice dipôle pour la transition  $\alpha$ . Dans les lasers à boîte quantique, les processus comprennent les transitions GS, ES, RS et les transitions de barrière.  $V$  est le volume de la région active et la sommation de la polarisation est effectuée sur toutes les transitions optiques inter-bandes. La susceptibilité optique complexe  $\chi$  est liée à la polarisation via :

$$\chi = \frac{1}{\varepsilon_0 n_b^2} \frac{P}{E} \quad (\text{III.18})$$

Où  $\varepsilon_0$  est la permittivité du vide de la lumière,  $n_b$  est l'indice de réfraction sans injection de porteurs, et  $E$  est l'amplitude du champ électrique. Le gain  $g$  et l'indice de réfraction  $\delta n$  induit par les porteurs dans le modèle sont définis par :

$$\frac{d}{dt} E(t) = \Gamma_p \frac{cg}{2n_b} E(t) + j \frac{\omega \delta n}{n_b} E(t) \quad (\text{III.19})$$

Où  $\omega$  et  $c$  sont la fréquence du laser et la vitesse de la lumière respectivement, et  $\Gamma_p$  est le facteur de confinement optique. Nous pouvons obtenir la relation suivante entre le gain, l'indice de réfraction, la susceptibilité et la polarisation [47] :

$$g = -\frac{\omega n_b}{c} \text{Im}\{\chi\} = -\frac{\omega}{\varepsilon_0 n_b c} \frac{\text{Im}\{P\}}{E} \quad (\text{III.20})$$

$$\delta n = \frac{n_b}{2} \text{Re}\{\chi\} = \frac{1}{2\varepsilon_0 n_b} \frac{\text{Re}\{P\}}{E} \quad (\text{III.21})$$

En introduisant le gain différentiel  $a$ , le gain phénoménologique avec une approximation linéaire peut être exprimé comme suit

$$g = a(N - N_{tr}) \quad (\text{III.22})$$

Avec  $N$  et  $N_{tr}$  étant la densité de porteurs injectés et la densité de porteurs de transparence à gain nul, respectivement.

A partir des équations (III.20) et (III.21), le facteur  $\alpha_H$  est introduit pour décrire le couplage entre le gain et l'indice de réfraction [48, 49] :

$$\alpha_H = \frac{\partial \text{Re}\{\chi\} / \partial N}{\partial \text{Im}\{\chi\} / \partial N} = -2 \frac{\omega}{c} \frac{dn/dN}{dg/dN} = -\frac{4\pi}{\lambda} \frac{dn/dN}{dg/dN} \quad (\text{III.23})$$

Où  $\lambda$  est la longueur d'onde de l'effet laser, et  $dn/dN$  l'indice différentiel.

Le facteur  $\alpha_H$  est un paramètre vital dans la description de la physique des lasers à semi-conducteurs qui influence de nombreuses caractéristiques et performances, par exemple la

largeur de ligne spectrale optique [48, 50], le chirp en fréquence [51], la stabilité du mode [52] ainsi que la dynamique non linéaire sous injection optique [53] ou rétroaction optique [54-56]. Dans ces derniers cas, un  $\alpha_H$  positif est nécessaire pour générer des dynamiques non linéaires complexes au sein d'un laser à semi-conducteur.

Historiquement, le facteur  $\alpha_H$  a été introduit pour la première fois simultanément en 1967 par Lax [57] et Haug & Haken [58]. En utilisant soit des calculs quantiques à partir des équations de la matrice de densité, soit une théorie semi-classique, les deux ont introduit un facteur de  $(1 + \alpha_H^2)$  pour décrire les fluctuations de phase induites par le bruit qui apparaissent également dans l'équation fixant la largeur de la ligne spectrale. Cependant, le premier n'a pas exploité davantage l'équation de la largeur de raie spectrale, tandis que le second n'a pas considéré le facteur  $\alpha_H$  car il était trop petit par rapport à l'unité. En 1982, Henry [48] a réintroduit le facteur  $\alpha_H$  et a entièrement théorisé la largeur de raie spectrale des lasers à semi-conducteurs.

Les valeurs typiques du facteur  $\alpha_H$  sont comprises entre 2 et 5 pour les matériaux massifs et puits quantique.

### III.7.1.3. Élargissements homogènes et inhomogènes

L'élargissement homogène dans les boîtes quantiques semi-conducteurs est inversement proportionnel au temps de déphasage de la polarisation, qui est le temps de décroissance de la polarisation optique associée à une transition inter-bande. En principe, le déphasage de la polarisation optique implique non seulement la paire électron-trou particulière mais aussi d'autres polarisations électron-trou [59]. Cependant, dans le système de porteurs en quasi-équilibre, le temps de déphasage ( $T_2$ ) peut être traité comme une constante de temps, qui est simplement le double du temps total de diffusion des porteurs [60]. Il existe un certain nombre de mécanismes responsables de l'élargissement homogène, tels que la diffusion porteur-porteur, la diffusion porteur-phonon et la durée de vie de la recombinaison radiative électron-trou. Ainsi, la largeur totale à mi-hauteur (FWHM) de l'élargissement homogène pour un état lié de boîte quantique confiné peut être exprimée comme [61].

$$2\hbar\Gamma_{\text{hom}} = \frac{2\hbar}{T_2} = \hbar \left( \frac{1}{\tau_{hh}} + \frac{1}{\tau_{he}} + \frac{1}{\tau_{ee}} + \frac{1}{\tau_{eh}} \right) + \hbar \frac{1}{\tau_{\text{phon}}} + \hbar \frac{1}{\tau_{\text{recom}}} \quad (\text{III.24})$$

Où le premier terme est dû au processus de diffusion Auger entre les électrons et les trous. Le second terme est la contribution de l'interaction porteur-phonon, et le dernier terme est attribué à la recombinaison radiative. L'élargissement homogène du gain optique est caractérisé par une fonction Lorentzienne comme [62].

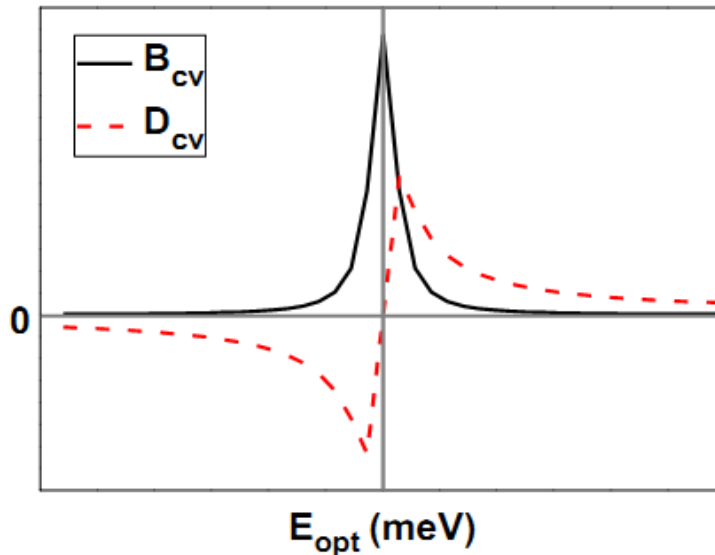
$$B_{cv}(E - E_{opt}) = \frac{\hbar\Gamma_{hom}/\pi}{(E - E_{opt})^2 + (\hbar\Gamma_{hom})^2} \quad (III.25)$$

Où  $E_{opt}$  est l'énergie de transition optique inter-bande. Il a été démontré que l'élargissement homogène est responsable de la dépendance en température des spectres d'effet laser [63].

Les boîtes produisent un effet laser indépendamment à basse température en raison de la localisation spatiale des porteurs ainsi que du gain de type atomique, tandis qu'à température ambiante, l'ensemble des boîtes contribue à un effet laser à ligne étroite de manière corrélative via l'élargissement homogène du gain optique ainsi que la redistribution des porteurs entre les boîtes [62, 64, 65].

Parallèlement, l'élargissement homogène de l'indice de réfraction est donné par [22].

$$D_{cv}(E - E_{opt}) = \frac{(E - E_{opt})/\pi}{(E - E_{opt})^2 + (\hbar\Gamma_{hom})^2} \quad (III.26)$$



**Figure (III.8) :** Fonction d'élargissement homogène du gain  $B_{cv}(E - E_{opt})$  et de la variation de l'indice de réfraction  $D_{cv}(E - E_{opt})$ . [24]

La figure (III.8) illustre les profils de  $B_{cv}(E - E_{opt})$  et  $D_{cv}(E - E_{opt})$  en fonction de l'énergie  $E$ . Nous observons que pour la même valeur de  $\hbar\Gamma_{hom}$ , la fonction d'élargissement de l'indice de réfraction  $D_{cv}(E - E_{opt})$  (tiret) est plus large que la fonction d'élargissement du gain  $B_{cv}(E - E_{opt})$  (solide). Par conséquent, la population de porteurs dans les états hors résonance de la boîte quantique, qui a une faible contribution de gain à l'émission stimulée, peut néanmoins causer une variation significative de l'indice de réfraction du mode laser. [24]

L'élargissement inhomogène provient de la fluctuation de la taille et de la variation de la composition des boîtes quantiques auto-assemblés, ce qui donne des énergies d'état confinées différentes.

En considérant une distribution gaussienne habituelle de la taille de la boîte, la fluctuation de l'énergie des boîtes peut être ainsi représentée par la fonction gaussienne [62].

$$G_{cv}(E - E_{opt}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\xi_{inh}} \exp\left(-\frac{(E - E_{opt})^2}{2\xi_{inh}^2}\right) \quad (III.27)$$

Dont la FWHM est donnée par  $2.35 \xi_{inh}$ . La figure (III.9) montre une illustration d'une distribution gaussienne. L'élargissement inhomogène de la boîte est connu pour réduire significativement le gain et le gain différentiel du laser à boîte quantique et ainsi dégrader les performances dynamiques du laser [66].

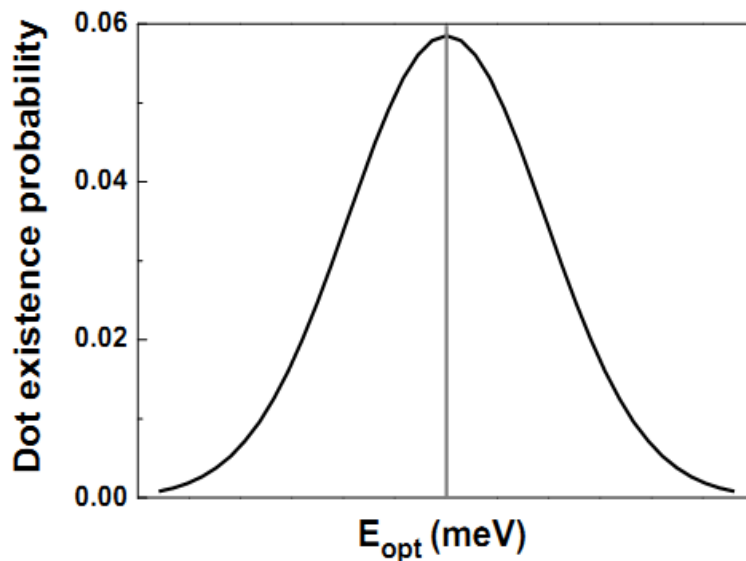


Figure (III.9) : Fonction d'élargissement inhomogène  $G_{cv}(E - E_{opt})$  de la taille de la boîte ou de la fluctuation de l'énergie. [24]

### **III.8. Conclusion**

En résumé, la première partie de ce chapitre se concentre sur les connaissances de base des lasers à semi-conducteurs et explique brièvement leurs propriétés. La deuxième partie présente les notions fondamentales des lasers à semi-conducteurs à nanostructure de boîtes quantiques, notamment les structures électroniques, les processus de diffusion des porteurs, le gain et l'indice de réfraction, le facteur d'amélioration de la largeur de raie ainsi que les élargissements homogène et inhomogène. Ces connaissances sont utiles pour les différentes analyses menées dans les chapitres suivants.

**Référence**

- [1] W.H. Knox, Ultrafast technology in telecommunications. *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 6(6), 1273–1278 (2000). doi: 10.1109/2944.902178.
- [2] D. Huang, E.A. Swanson, C.P. Lin, J.S. Schuman, W.G. Stinson, W. Chang, M.R. Hee, T. Flotte, K. Gregory, C.A. Puliafito et al., Optical coherence tomography. *Science* 254(5035), 1178–1181 (1991). doi: 10.1126/science.1957169.
- [3] Albert Einstein. On the quantum mechanics of radiation. *Physikalische Zeitschrift*, 18:121–128, 1917.
- [4] Arthur L Schawlow and Charles H Townes. Infrared and optical masers. *Physical Review*, 112(6):1940, 1958.
- [5] Theodore H Maiman. Stimulated optical radiation in ruby. 1960.
- [6] R. N. Hall, G. E. Fenner, J. D. Kingsley, T. J. Soltys, R. O. Carlson, Coherent light emission from GaAs junctions, *Physical Review Letters*, Vol. 9, 366-369 (1962).
- [7] Professor Dr. Karl F. Renk *Basics of Laser Physics For Students of Science and Engineering.* Universitat Regensburg Institut für Angewandte Physik, Universitätsstr. 31 93053 Regensburg, Germany (2011)
- [8] A. Yariv, *Quantum Electronics* 3<sup>rd</sup> edn. (John Wiley & Sons, New York, 1989).
- [9] M. Faugeron, M. Tran, O. Parillaud, M. Chtioui, Y. Robert, E. Vinet, A. Enard, J. Jacquet and F. van Dijk, "High-Power Tunable Dilute Mode DFB Laser With Low RIN and Narrow Linewidth," *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 25, no. 1, pp. 7-10, 2013.
- [10] G.A. Keeler, B. E. Nelson, D. Agarwal, C. Debaes, N.C. Helman, A. Bhatnagar, D. A B Miller, The benefits of ultrashort optical pulses in optically interconnected systems. *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 9(2), 477–485 (2003). doi: 10.1109/jstqe.2003.813317.
- [11] O. Reimann, D. Huhse, E. Droge, E. H. Botcher, D. Bimberg, H.D. Stahlmann, Electrooptical sampling using 1.55  $\mu\text{m}$  self-seeded semiconductor laser with soliton pulse compression. *IEEE Photon. Technol. Lett.* 11(8), 1024–1026 (1999). doi: 10.1109/68.775334.
- [12] L. A. Coldren and S. W. Corzine, *Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits*, New York: John Wiley & Sons, inc, 1995.
- [13] J. Hecht, *Understanding Lasers: An Entry-Level Guide*, 3rd Ed. John Wiley & Sons, (2008).
- [14] H. Soda, K. Iga, C. Kitahara, and Y. Suematsu, GaInAsP/InP surface emitting injection lasers, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol. 18, 12, 2329-2330 (1979).
- [15] D. Bhattacharyya, A. A. Avrutin, A. C. Bryce, J. H. Marsh, D. Bimberg, F. Heinrichsdorff, V. M. Ustinov, S. V. Zaitsev, N. N. Ledentsov, P. S. Kop'ev, Zh. I. Alferov, A. I. Onischenko, and E. P. O'Reilly, "Spectral and dynamic properties of InAs-GaAs self-organized quantum-dot lasers," *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 5, 648 (1999).
- [16] G. T. Liu, A. Stintz, H. Li, K. J. Malloy, and L. F. Lester, "Extremely low room-temperature threshold current density diode lasers using InAs dots in InGaAs quantum well," *Electron. Lett.* 35, 1163 (1999).
- [17] S. S. Mikhlin, A. R. Kovsh, I. L. Krestnikov, A. V. Kozhukhov, D. A. Livshits, N. N. Ledentsov, Yu M. Shernyakov, I. I. Novikov, M. V. Maximov, V. M. Ustinov, and Zh. I. Alferov, "High power temperature-insensitive 1.3  $\mu\text{m}$  InAs/InGaAs/GaAs quantum dot lasers," *Semicond. Sci. Technol.* 20, 340 (2005).
- [18] W. W. Chow and F. Jahnke, "On the physics of semiconductor quantum dots for applications in lasers and quantum optics," *Progress in Quantum Electronics*, 37, 109 (2013).

- [19] F. T. Arecchi, G. L. Lippi, G. P. Puccioni, and J. R. Tredicce, "Deterministic chaos in laser with injected signal," *Opt. Commun.* 51, 308 (1984).
- [20] C. Cornet, A. Schliwa, J. Even, F. Doré, C. Celebi, A. Létoublon, E. Macé, C. Paranthoën, A. Simon, P. M. Koenraad, N. Bertru, D. Bimberg, and S. Loualiche, "Electronic and optical properties of InAs/InP quantum dots on InP(100) and InP(311)B substrates. Theory and experiment," *Phys. Rev. B* 74, 035312 (2006).
- [21] J. Even, F. Dré, C. Cornet, and L. Pedesseau, "Semianalytical model for simulation of electronic properties of narrow-gap strained semiconductor quantum nanostructures," *Phys. Rev. B* 77, 085305 (2008).
- [22] M. Gioannini and I. Montrosset, "Numerical analysis of the frequency chirp in quantum-dot semiconductor lasers," *IEEE J. Quantum Electron.* 43, 941 (2007).
- [23] C. Cornet, C. Platz, P. Caroff, J. Even, C. Labbé, H. Folliot, A. Le Corre, "Approach to wetting-layer-assisted lateral coupling of InAs/InP quantum dots," *Phys. Review B* 72, 035342 (2005).
- [24] A. J. Zilkie, J. Meier, M. Mojahedi, P. J. Poole, P. Barrios, D. Poitras, T. J. Rotter, C. Yang, A. Stintz, K. J. Malloy, P. W. E. Smith, and J. S. Aitchison, "Carrier Dynamics of Quantum-Dot, Quantum-Dash, and Quantum-Well Semiconductor Optical Amplifiers Operating at 1.55  $\mu\text{m}$ ," *IEEE J. Quantum Electron.*, vol. 43, no. 11, pp. 982–991, 2007.
- [25] A. J. Nozik, "Multiple exciton generation in semiconductor quantum dots," *Chem. Phys. Lett.* 457, 3 (2008).
- [26] K. Lüdge and E. Schöll, "Quantum-dot lasers--- Desynchronized nonlinear dynamics of electrons and holes," *IEEE J. Quantum. Electron.* 45, 1396 (2009).
- [27] M. Gioannini and M. Rossetti, "Time-domain traveling wave model of quantum dot DFB lasers," *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 17, 1318 (2011).
- [28] Y. Wu and L. V. Asryan, "Direct and indirect capture of carriers into the lasing ground state and the light current characteristics of quantum dot lasers," *J. Appl. Phys.* 115, 103105 (2014).
- [29] R. Nagarajan, M. Ishikawa, T. Fukushima, R. Geels, and J. Bowers, "High speed quantum well lasers and carrier transport effects," *IEEE J. Quantum Electron.* 28, 1990 (1992).
- [30] L. A. Coldren and S. W. Corzine, *Diode Lasers and Photonic Integrated Circuits*, New York: Wiley, 1995.
- [31] J. Siegert, S. Marcinkevicius, and Q. X. Zhao, "Carrier dynamics in modulation-doped InAs/GaAs quantum dots," *Phys. Rev. B* 72, 085316 (2005).
- [32] S. Marcinkevicius and R. Leon, "Carrier capture and escape in  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  quantum dots: Effects of intermixing," *Phys. Rev. B* 59, 4630 (1999).
- [33] T. R. Nielsen, P. Gartner, and F. Jahnke, "Many-body theory of carrier capture and relaxation in semiconductor quantum-dot lasers," *Phys. Rev. B* 69, 235314 (2004).
- [34] M. Lorke, T. R. Nielsen, J. Seebeck, P. Gartner, and F. Jahnke, "Influence of carrier-carrier and carrier phonon correlations on optical absorption and gain in quantum-dot systems," *Phys. Rev. B* 73, 085324 (2006).
- [35] I. Magnusdottir, S. Bischoff, A. V. Uskov, and J. Mork, "Geometry dependence of Auger carrier capture rates into cone-shaped self-assembled quantum dots," *Phys. Rev. B* 67, 205326 (2003).
- [36] U. Bockelmann and T. Egeler, "Electron relaxation in quantum dots by means of Auger processes," *Phys. Rev. B* 46, 15574 (1992).
- [37] P. Ferreira and G. Bastard, "Phonon assisted capture and intra-dot Auger relaxation in quantum dots," *Appl. Phys. Lett.* 74, 2818 (1999).

- [38] B. Ohnesorge, M. Albrecht, J. Oshinowo, A. Forchel, and Y. Arakawa, "Rapid carrier relaxation in self-assembled In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs quantum dots," *Phys. Rev. B* 54, 11532 (1996).
- [39] I. V. Ignatiev, I. E. Kozin, S. V. Nair, H. W. Ren, S. Sugou, and Y. Masumoto, "Carrier relaxation dynamics in InP quantum dots studied by artificial control of nonradiative losses," *Phys. Rev. B* 61, 15633 (2000).
- [40] P. Miska, J. Even, O. Dehaese, and X. Marie, "Carrier relaxation dynamics in InAs/InP quantum dots," *Appl. Phys. Lett.* 92, 191103 (2008).
- [41] A. V. Uskov, J. McInerney, F. Adler, H. Schweizer, and M. H. Pilkuhn, "Auger carrier capture kinetics in self-assembled quantum dot structures," *Appl. Phys. Lett.* 72, 58 (1998).
- [42] A. V. Uskov, F. Adler, H. Schweizer, and M. H. Pilkuhn, "Auger carrier relaxation in self-assembled quantum dots by collisions with two-dimensional carriers," *J. Appl. Phys.* 81, 7895 (1997).
- [43] W. W. Chow and S. W. Koch, "Theory of semiconductor quantum-dot laser dynamics," *IEEE J. Quantum Electron.* 41, 495 (2005).
- [44] W. W. Chow and S. W. Koch, *Semiconductor-Laser Fundamentals*, Berlin: Springer, 1999.
- [45] T. W. Berg, S. Bischoff, I. Magnusdottir, and J. Mørk, "Ultrafast gain recovery and modulation limitations in self-assembled quantum-dot devices," *IEEE Photon. Tech. Lett.* 13, 541 (2001).
- [46] K. Veselinov, F. Grillot, C. Cornet, J. Even, A. Bekiarski, M. Gioannini, and S. Loualiche, "Analysis of the double laser emission occurring in 1.55- $\mu$ m InAs-InP(113)B quantum-dot lasers," *IEEE J. Quantum Electron.* 43, 810 (2007).
- [47] W. W. Chow, M. Lorke, and F. Jahnke, "Will quantum dots replace quantum wells as the active medium of choice in future semiconductor lasers," *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 17, 1349 (2011).
- [48] C. Henry, "Theory of the linewidth of semiconductor lasers," *IEEE J. Quantum Electron.*, vol. 18, no. 2, pp. 259–264, 1982.
- [49] M. Osinski and J. Buus, "Linewidth broadening factor in semiconductor lasers--An overview," *IEEE J. Quantum Electron.*, vol. 23, no. 1, pp. 9–29, 1987.
- [50] G. H. Duan, P. Gallion, and G. Debarge, "Analysis of the Phase-Amplitude Coupling Factor and Spectral Linewidth of Distributed Feedback and Composite-Cavity Semiconductor Lasers," *IEEE J. Quantum Electron.*, vol. 26, no. 1, pp. 32–44, 1990.
- [51] G. Duan, P. Gallion, and G. Debarge, "Analysis of frequency chirping of semiconductor lasers in the presence of optical feedback," *Opt. Lett.*, vol. 12, no. 10, pp. 800–802, 1987.
- [52] G. P. Agrawal, "Intensity dependence of the linewidth enhancement factor and its implications for semiconductor lasers," *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 1, no. 8, pp. 212–214, 1989.
- [53] S. Wiczorek, B. Krauskopf, and D. Lenstra, "Multipulse Excitability in a Semiconductor Laser with Optical Injection," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 88, no. 6, p. 63901, 2002.
- [54] M. T. Crowley, N. A. Naderi, H. Su, F. Grillot, and L. F. Lester, "GaAs-Based Quantum Dot Lasers," in *Advances in Semiconductor Lasers*, J. J. Coleman, A. C. Bryce, and C. Jagadish, Eds. Academic Press, pp. 371–417, 2012.
- [55] B. Haegeman, K. Engelborghs, D. Roose, D. Pieroux, and T. Erneux, "Stability and rupture of bifurcation bridges in semiconductor lasers subject to optical feedback," *Phys. Rev. E*, vol. 66, no. 4, p. 46216, 2002.

- [56] C.-F. Chuang, Y.-H. Liao, C.-H. Lin, S.-Y. Chen, F. Grillot, and F.-Y. Lin, "Linewidth enhancement factor in semiconductor lasers subject to various external optical feedback conditions," *Opt. Express*, vol. 22, no. 5, p. 5651, 2014.
- [57] M. Lax, "Classical Noise. V. Noise in Self-Sustained Oscillators," *Phys. Rev.*, vol. 160, no. 2, pp. 290–307, 1967.
- [58] H. Haug and H. Haken, "Theory of noise in semiconductor laser emission," *Zeitschrift für Phys.*, vol. 204, no. 3, pp. 262–275, 1967.
- [59] H. C. Schneider, W. W. Chow, and S. W. Koch, "Excitation-induced dephasing in semiconductor quantum dots," *Phys. Rev. B* 70, 235308 (2004).
- [60] H. Haug and S. W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, World Scientific, Singapore, 1998.
- [61] H. H. Nilsson, J. Z. Zhang, and I. Galbraith, "Homogeneous broadening in quantum dots due to Auger scattering with wetting layer carriers," *Phys. Rev. B* 72, 205331 (2005).
- [62] M. Sugawara, K. Mukai, Y. Nakata, and H. Ishikawa, "Effect of homogeneous broadening of optical gain on lasing spectra in self-assembled  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  quantum dot lasers," *Phys. Rev. B* 61, 7595 (2000).
- [63] K. Veselinov, F. Grillot, M. Gioannini, I. Montrosset, E. Homeyer, R. Piron, J. Even, A. Bekiarski, and S. Loualiche, "Lasing spectra of 1.55  $\mu\text{m}$   $\text{InAs}/\text{InP}$  quantum dot lasers: theoretical analysis and comparison with the experiments," *Opt. Quant. Electron.* 40, 227 (2008).
- [64] D. Gready and G. Eisenstein, "Effects of homogeneous and inhomogeneous broadening on the dynamics of tunneling injection quantum dot lasers," *IEEE J. Quantum Electron.* 47, 944 (2011).
- [65] C. Cornet, M. Hayne, P. Caroff, C. Levallois, L. Joulaud, and E. Homeyer, "Increase of charge-carrier redistribution efficiency in a laterally organized superlattice of coupled quantum dots," *Phys. Review B* 74, 245315 (2006).
- [66] H. Dery and G. Eisenstein, "The impact of energy band diagram and inhomogeneous broadening on the optical differential gain in nanostructure lasers," *IEEE J. Quantum Electron.* 41, 26 (2005).

# **CHAPITRE IV**

*Résultats et discussions*

## IV.1. Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation d'une modélisation et simulation numérique des structures de laser à BQ à base de ZnO et ses alliages. En utilisant un modèle cinétique fondé sur la théorie des réservoirs, la dynamique des porteurs dans les BQ est analysée en considérant les principaux mécanismes mis en jeu lors des processus de capture et de relaxation. Ce modèle phénoménologique est étendu aux diodes lasers à nanostructures quantiques afin de simuler leurs propriétés remarquables.

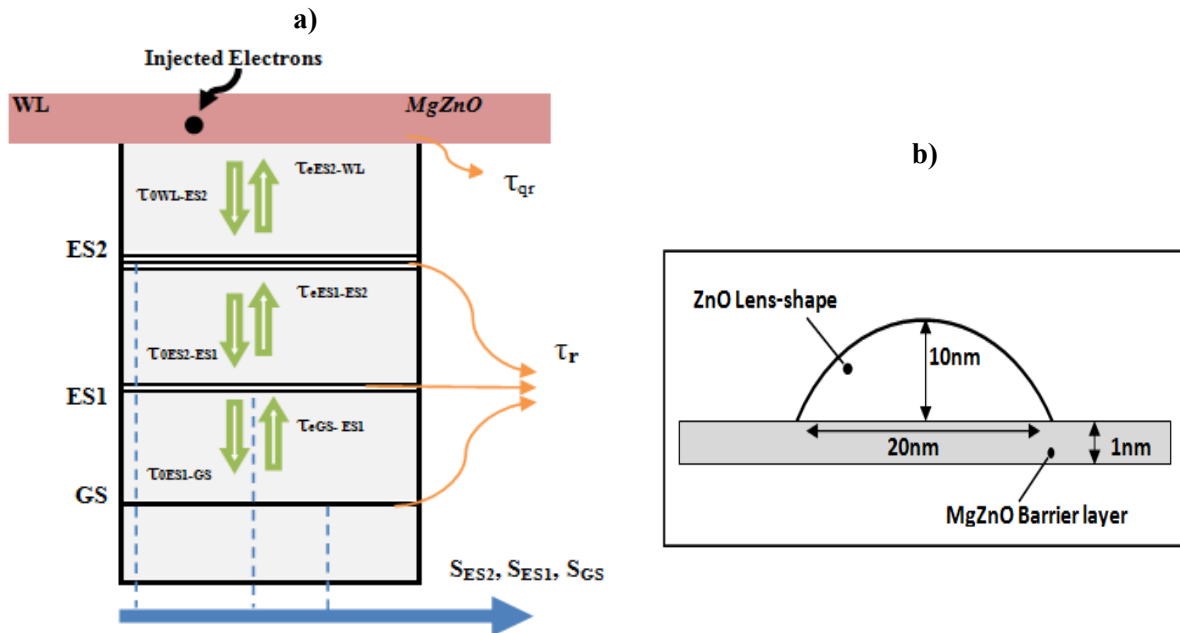
Cette analyse est basée sur une approche semi-analytique d'un ensemble d'équations de taux couplées. Nous montrons comment les équations de taux expliquent les contributions des états hors résonance sur le changement du courant d'injection (I) et de l'élargissement homogène (HB) (les effets de la température). L'amélioration des performances dynamiques du laser à BQ et son fonctionnement sur l'état excité sont également discutés. Notre travail est basé sur deux nanostructures laser à base de ZnO (ZnO/MgZnO et CdZnO/ZnO/MgZnO), et dont la simulation a été réalisée à l'aide de la programmation sous MATLAB. Les résultats obtenus sont présentés dans cette section. Les paramètres relatifs aux matériaux utilisés dans notre simulation sont énumérés dans le tableau (II.4) du chapitre II.

## IV.2. Structure I

Dans cette structure, les BQs ZnO/Mg<sub>0.3</sub>Zn<sub>0.7</sub>O sont considérés comme une région active dans un laser à BQ composé de quatre niveaux d'énergies pour les porteurs confinés. Nous avons supposé que tous les BQs sont uniformes selon les études théoriques et expérimentales réalisées dans les références [1-3]. Nous avons considéré des BQs de ZnO en forme de lentille d'un diamètre  $D=20$  nm, d'une hauteur  $H=10$  nm, et d'une couche de mouillage de MgZnO d'une épaisseur de 1 nm. Dans notre étude, nous avons supposé que les BQs sont suffisamment espacés pour éviter les effets tunnel quantique, et les effets homogènes et inhomogènes sont ignorés. Les BQs comprennent trois états d'énergie avec un état fondamental doublement dégénéré (GS) et un état excité doublement quadruplement dégénéré (ES1, ES2). (Figure (IV.1)).

Dans cette partie, nous rapportons une modélisation et une simulation numérique de la dynamique des porteurs des lasers à BQ ZnO/MgZnO. Nos calculs sont effectués en résolvant l'ensemble de sept équations de taux pour les porteurs et les photons à quatre états d'énergie en utilisant le quatrième ordre de la méthode Runge-Kutta dans le logiciel MATLAB. De nombreuses propriétés des lasers à BQ telles que la densité de photons, la puissance de sortie

et la réponse de la modulation du petit signal en fonction du temps et du courant d'injection ont été étudiées et discutées.



**Figure (IV.1):** a) Diagramme énergétique de la région active du laser de MgZnO/ZnO avec les processus de diffusion, de recombinaison et de relaxation. b) Schémas d'une boîte quantique en ZnO en forme de lentille et son puits quantique de MgZnO.

### IV.2.1. Modèle physique

Dans notre structure, nous avons considéré quatre niveaux d'énergie qui appartiennent à la couche de mouillage (WL), aux deuxièmes et premiers états excités (ES2) et (ES1), et à l'état fondamental (GS). Les niveaux d'énergie de la région active dans le laser à BQ pour la bande de conduction sont présentés dans la Figure (IV.1). Figure (IV.1.a) montre la dynamique principale des porteurs dans la bande de conduction comme le modèle de relaxation en cascade de ZnO/MgZnO. Les porteurs sont injectés directement dans le réservoir de la WL créant ainsi un courant d'injection  $I$ . Une partie des paires électron-trou créées est capturée sur la seconde ES2 avec un temps de relaxation ( $\tau_{WL-ES2}$ ) tandis que l'autre partie se recombine spontanément. Les porteurs occupant l'ES2 peuvent alors se relaxer sur l'ES1, s'échapper dans le réservoir de la couche de mouillage ( $\tau_{ES2-WL}$ ) ou se recombiner radiativement. Les porteurs déjà relaxés sur l'ES1 peuvent être libérés sur l'état excité ( $\tau_{ES1-ES2}$ ), se recombiner spontanément ou se relaxer sur l'état fondamental GS ( $\tau_{ES1-GS}$ ). Une partie de ces porteurs réémis sur l'état excité ( $\tau_{GS-ES1}$ ), et le reste effectue une désintégration due aux effets

spontanés et Auger ( $\tau_r$ ), ou contribue à la recombinaison stimulée et génère des photons laser (par l'analyse de la dynamique des porteurs dans la BQ).

### IV.2.2. Modèle théorique et équations du bilan

Dans cette partie, le modèle numérique utilisé est basé sur les sept équations de taux couplées, à travers une analyse de la dynamique des porteurs à l'intérieur de la BQ. Ce modèle est divisé en deux types d'équations : la première pour les électrons et la seconde pour les photons. Les équations de taux peuvent être écrites comme suit [4, 5] :

$$\frac{dS_{GS}}{dt} = -\frac{S_{GS}}{\tau_s} + \Gamma v_g g_{GS} (2f_{GS} - 1) S_{GS} + \beta_{sp} \frac{N_{GS}}{\tau_{sp}} \quad (IV.1)$$

$$\frac{dS_{ES1}}{dt} = -\frac{S_{ES1}}{\tau_s} + \Gamma v_g g_{ES1} (2f_{ES1} - 1) S_{ES1} + \beta_{sp} \frac{N_{ES1}}{\tau_{sp}} \quad (IV.2)$$

$$\frac{dS_{ES2}}{dt} = -\frac{S_{ES2}}{\tau_s} + \Gamma v_g g_{ES2} (2f_{ES2} - 1) S_{ES2} + \beta_{sp} \frac{N_{ES2}}{\tau_{sp}} \quad (IV.3)$$

$$\frac{dN_{GS}}{dt} = -\frac{N_{GS}}{\tau_r} - \Gamma v_g g_{GS} (2f_{GS} - 1) S_{GS} - \frac{N_{GS}}{\tau_{eGS}} (1 - f_{ES1}) + \frac{N_{ES1}}{\tau_{0ES1-GS}} (1 - f_{GS}) \quad (IV.4)$$

$$\frac{dN_{ES1}}{dt} = -\frac{N_{ES1}}{\tau_r} - \Gamma v_g g_{ES1} (2f_{ES1} - 1) S_{ES1} + \frac{N_{GS}}{\tau_{eGS}} (1 - f_{ES1}) - \frac{N_{ES1}}{\tau_{0ES1-GS}} (1 - f_{GS}) + \frac{N_{ES2}}{\tau_{eES2-ES1}} (1 - f_{ES1}) - \frac{N_{ES1}}{\tau_{eES1}} (1 - f_{ES2}) \quad (IV.5)$$

$$\frac{dN_{ES2}}{dt} = -\frac{N_{ES2}}{\tau_r} - \Gamma v_g g_{ES2} (2f_{ES2} - 1) S_{ES2} - \frac{N_{ES2}}{\tau_{eES2}} + \frac{N_{WL}}{\tau_c} (1 - f_{ES2}) - \frac{N_{ES2}}{\tau_{0ES2-ES1}} (1 - f_{ES1}) + \frac{N_{ES1}}{\tau_{eES1}} (1 - f_{ES2}) \quad (IV.6)$$

$$\frac{dN_{WL}}{dt} = n_i \frac{I}{q} - \frac{N_{WL}}{\tau_{qr}} + \frac{N_{ES2}}{\tau_{eES2}} - \frac{N_{WL}}{\tau_c} (1 - f_{ES2}) \quad (IV.7)$$

Où  $N_{WL}$ ,  $N_{ES2}$ ,  $N_{ES1}$ , et  $N_{GS}$  sont les densités de porteurs dans WL et les niveaux discrets du BQ ES2, ES1 et GS, respectivement.  $S_{ES2}$ ,  $S_{ES1}$ , et  $S_{GS}$  représentent la densité des photons dans ES2, ES1 et GS, respectivement. Les termes  $-\frac{S_{ES2}}{\tau_s}$ ,  $-\frac{S_{ES1}}{\tau_s}$ , et  $-\frac{S_{GS}}{\tau_s}$  représentent les taux de désintégration des photons dans ES2, ES1 et GS, respectivement. Dans ces termes,  $\tau_s^{-1}$  est la durée de vie du photon et est donné par [6]

$$\tau_s^{-1} = c / n_r (\alpha + \ln(1 / R_1 R_2) / 2L) \quad (IV.8)$$

Où  $n_r$  est l'indice de réfraction de la région active,  $\alpha$  est la perte interne de la cavité,  $R_1$  et  $R_2$  sont les réflectivités du miroir de la cavité,  $L$  est la longueur de la cavité, et  $c$  est la vitesse de la lumière.

$\beta_{sp} N_m / \tau_{sp}$  indique les taux de génération de photons fournis par la recombinaison spontanée dans le niveau  $m$  ( $m=GS, ES1$  ou  $ES2$ ), avec  $\beta_{sp}$  est le facteur de couplage de l'émission spontanée, et  $\tau_{sp}$  est le temps de recombinaison spontanée.

$\Gamma v_g g_{GS} (2f_{GS} - 1) S_{GS}$  et  $\Gamma v_g g_{ES1/ES2} (2f_{ES1/ES2} - 1) S_{ES1/ES2}$  définit le taux de génération de photons et le taux de décroissance des porteurs dus à l'émission stimulée, où  $\Gamma$  est le facteur de confinement optique,  $v_g$  est la vitesse de groupe, et  $g_m$  est le gain du niveau  $m$  qui est donné par

$$g_m = \frac{k_m}{1 + \epsilon_m S_m} \quad (IV.9)$$

Avec  $\epsilon_m$  est le facteur de gain écrit par

$$\epsilon_m = \frac{q^2 p_{cv}^2 \tau_s \Gamma}{4 \hbar V_a n_r m_0^2 \epsilon_0 E_m \Gamma_{hom}} \quad (IV.10)$$

Et

$$k_m = \frac{2\pi q^2 \hbar \mu_m \xi p_{cv}^2}{c n_r m_0^2 \epsilon_0 V_d \gamma_0 E_m} \quad (IV.11)$$

Où  $\gamma_0$  est le coefficient d'élargissement inhomogène et  $\xi$  est la couverture des boîtes donnée par  $\xi = N_d V_d$  avec  $N_d$  est la densité des boîtes, et  $V_d = 2\pi(D/2)^2 H/3$  est le volume des boîtes.

Dans l'expression du facteur de gain,  $V_a$  est le volume de la région active et  $\Gamma_{hom}$  est l'élargissement homogène. Le carré de l'élément de la matrice de transition est donné par  $|p_{cv}|^2 = |I_{cv}|^2 M^2$ , où  $I_{cv}$  représente l'intégrale de chevauchement entre les fonctions

d'enveloppe d'un électron et d'un trou, et  $M^2 = \frac{m_0^2 E_g (E_g + \Delta)}{12 m_e (E_g + 2\Delta/3)}$  avec  $E_g$  est la bande

interdite,  $m_e$  est la masse effective de l'électron,  $\Delta$  est l'énergie d'interaction spin-orbite du matériau de BQ.

Les termes  $-\frac{N_m}{\tau_r}$  et  $-\frac{N_{WL}}{\tau_{qr}}$  sont les taux de décroissance de la densité des porteurs au niveau  $m$  et WL, respectivement,  $-N(1-f)/\tau_e$  indiquent le taux d'échappement des porteurs du niveau actuel au niveau supérieur, et  $\tau_e$  est le temps d'échappement des porteurs. De même,  $N(1-f)/\tau_0$  et  $-N(1-f)/\tau_0$  sont les taux de relaxation des porteurs du niveau supérieur au niveau actuel et du niveau actuel au niveau inférieur, respectivement.  $\tau_0$  est le temps de relaxation. En outre,  $\frac{N_{WL}}{\tau_c}(1-f_{ES2})$  représente le taux de capture des porteurs de WL à ES2, où  $\tau_c$  est le temps de capture des porteurs. Nous définissons  $f_m$  comme la probabilité d'occupation des porteurs du niveau  $m$  (effet du principe de blocage de Pauli sur le transfert des porteurs d'un niveau à l'autre), avec  $f_m = N_m / \mu_m N_D$ ,  $N_D$  représente le nombre total de BQs, et  $\mu_m$  représente la dégénérescence du niveau  $m$ . Par définition,  $n_i$  est le coefficient du taux de courant injecté,  $I$  le courant de pompage et  $q$  est la charge unitaire. L'expression des différents temps de relaxation s'écrit comme suit : [7]

$$\tau_{eGS} = \mu_{ES1} / \mu_{GS} \tau_{ES1-GS} e^{(E_{ES1}-E_{GS}/k_B T)} \quad (IV.12)$$

$$\tau_{eES1} = \mu_{ES2} / \mu_{ES1} \tau_{ES2-ES1} e^{(E_{ES2}-E_{ES1}/k_B T)} \quad (IV.13)$$

$$\tau_{ES1-GS} = \tau_{0ES1-GS} / (1-f_{GS}) \quad (IV.14)$$

$$\tau_{ES2-ES1} = \tau_{0ES2-ES1} / (1-f_{ES1}) \quad (IV.15)$$

Pour étudier la modulation de la réponse laser à BQ, les équations de taux sont linéarisées par une analyse modifiée des petits signaux [8]. En considérant  $I$ ,  $N_n$  ( $n = \text{WL}$  ou  $\text{ES1}$  ou  $\text{ES2}$  ou  $\text{GS}$ ) et  $S_m$  comme variables dynamiques et afin de simplifier le modèle,  $g_m$  sont supposés être constants. La modulation du courant et les variations correspondantes des porteurs et des photons sont les suivantes : [9]

$$I(t) = I_1 e^{j\omega t} \quad (IV.16)$$

$$N_n(t) = N_{n,1} e^{j\omega t} \quad (\text{IV.17})$$

$$S_m(t) = S_{m,1} e^{j\omega t} \quad (\text{IV.18})$$

Où  $\omega$  est la fréquence de modulation.

En utilisant les équations (VI.16), (VI.17) et (VI.18) dans les équations différentielles de taux, on obtient la matrice  $A$  :

$$A = \begin{bmatrix} A11 + j\omega & 0 & 0 & A14 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A22 + j\omega & 0 & 0 & A25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A33 + j\omega & 0 & 0 & A36 & 0 \\ A41 & 0 & 0 & A44 + j\omega & A45 & 0 & 0 \\ 0 & A52 & 0 & A54 & A55 + j\omega & A56 & 0 \\ 0 & 0 & A63 & 0 & A65 & A66 + j\omega & A67 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A76 & A77 + j\omega \end{bmatrix}$$

$$A^* \begin{bmatrix} S_{GS,1} \\ S_{ES1,1} \\ S_{ES2,1} \\ N_{GS,1} \\ N_{ES1,1} \\ N_{ES2,1} \\ N_{WL,1} \end{bmatrix} = \frac{n_i \Pi}{q} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Avec

$$A11 = -\frac{1}{\tau_s} - \Gamma v_g g_{GS} (2f_{GS} - 1), \quad A14 = -\frac{\beta_{sp}}{\tau_{sp}} - \frac{2\Gamma v_g g_{GS}}{\mu_{GS} N_D} S_{GS}, \quad A22 = -\frac{1}{\tau_s} - \Gamma v_g g_{ES1} (2f_{ES1} - 1)$$

$$A25 = -\frac{\beta_{sp}}{\tau_{sp}} - \frac{2\Gamma v_g g_{ES1}}{\mu_{ES1} N_D} S_{ES1}, \quad A33 = \frac{1}{\tau_s} - \Gamma v_g g_{ES2} (2f_{ES2} - 1), \quad A36 = -\frac{\beta_{sp}}{\tau_{sp}} - \frac{2\Gamma v_g g_{ES2}}{\mu_{ES2} N_D} S_{ES2}$$

$$A41 = \Gamma v_g g_{GS} (2f_{GS} - 1), \quad A44 = \frac{1}{\tau_r} + \frac{2\Gamma v_g g_{GS}}{\mu_{GS} N_D} S_{GS} + \frac{(1 - f_{ES1})}{\tau_{eGS}} + \frac{1}{\tau_{0ES1-GS} \mu_{GS} N_D} N_{ES1},$$

$$A45 = -\frac{N_{GS}}{\tau_{eGS} \mu_{ES1} N_D} - \frac{1 - f_{GS}}{\tau_{0ES1-GS}}, \quad A52 = \Gamma v_g g_{ES1} (2f_{ES1} - 1), \quad A54 = -\frac{(1 - f_{ES1})}{\tau_{eGS}} + \frac{N_{ES1}}{\tau_{0ES1-GS} \mu_{GS} N_D}$$

$$A55 = \frac{1}{\tau_r} + \frac{2\Gamma v_g g_{ES1}}{\mu_{ES1} N_D} S_{ES1} + \frac{N_{GS}}{\tau_{eGS} \mu_{ES1} N_D} + \frac{1-f_{GS}}{\tau_{0ES1-GS}} + \frac{N_{ES2}}{\tau_{eES2-ES1} \mu_{ES1} N_D} + \frac{1-f_{ES2}}{\tau_{eES1}},$$

$$A56 = -\frac{1-f_{ES1}}{\tau_{eES2-ES1}} - \frac{N_{ES1}}{\tau_{eES1} \mu_{ES2} N_D}, \quad A63 = \Gamma v_g g_{ES2} (2f_{ES2} - 1), \quad A65 = -\frac{N_{ES2}}{\tau_{0ES2-ES1} \mu_{ES1} N_D} - \frac{1-f_{ES2}}{\tau_{eES1}}$$

$$A66 = \frac{1}{\tau_r} + \frac{2\Gamma v_g g_{ES2}}{\mu_{ES2} N_D} S_{ES2} + \frac{1}{\tau_{eES2}} + \frac{N_{WL}}{\tau_c \mu_{ES2} N_D} + \frac{1-f_{ES1}}{\tau_{0ES2-ES1}} + \frac{N_{ES1}}{\tau_{eES1} \mu_{ES2} N_D}, \quad A67 = -\frac{1-f_{ES2}}{\tau_c},$$

$$A76 = -\frac{1}{\tau_{eES2}} - \frac{N_{WL}}{\tau_c \mu_{ES2} N_D}, \quad A77 = \frac{1}{\tau_{qr}} + \frac{1-f_{ES2}}{\tau_c}$$

Pour obtenir le petit signal porteur dans chaque état, nous pouvons appliquer la règle de Cramer comme suit

$$S_{GS,1} = \frac{\begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & A14 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A22 + \mathcal{J}\omega & 0 & 0 & A25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A33 + \mathcal{J}\omega & 0 & 0 & A36 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A44 + \mathcal{J}\omega & A45 & 0 & 0 \\ 0 & A52 & 0 & A54 & A55 + \mathcal{J}\omega & A56 & 0 \\ 0 & 0 & A63 & 0 & A65 & A66 + \mathcal{J}\omega & A67 \\ \frac{n_i \Pi}{q} & 0 & 0 & 0 & 0 & A76 & A77 + \mathcal{J}\omega \end{vmatrix}}{\det A}$$

$$S_{ES1,1} = \frac{\begin{vmatrix} A11 + \mathcal{J}\omega & 0 & 0 & A14 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A33 + \mathcal{J}\omega & 0 & 0 & A36 & 0 \\ A41 & 0 & 0 & A44 + \mathcal{J}\omega & A45 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A54 & A55 + \mathcal{J}\omega & A56 & 0 \\ 0 & 0 & A63 & 0 & A65 & A66 + \mathcal{J}\omega & A67 \\ 0 & \frac{n_i \Pi}{q} & 0 & 0 & 0 & A76 & A77 + \mathcal{J}\omega \end{vmatrix}}{\det A},$$

$$S_{ES2,1} = \frac{\begin{vmatrix} A11 + \mathcal{J}\omega & 0 & 0 & A14 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A22 + \mathcal{J}\omega & 0 & 0 & A25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A36 & 0 \\ A41 & 0 & 0 & A44 + \mathcal{J}\omega & A45 & 0 & 0 \\ 0 & A52 & 0 & A54 & A55 + \mathcal{J}\omega & A56 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A65 & A66 + \mathcal{J}\omega & A67 \\ 0 & 0 & \frac{n_i \Pi}{q} & 0 & 0 & A76 & A77 + \mathcal{J}\omega \end{vmatrix}}{\det A}$$

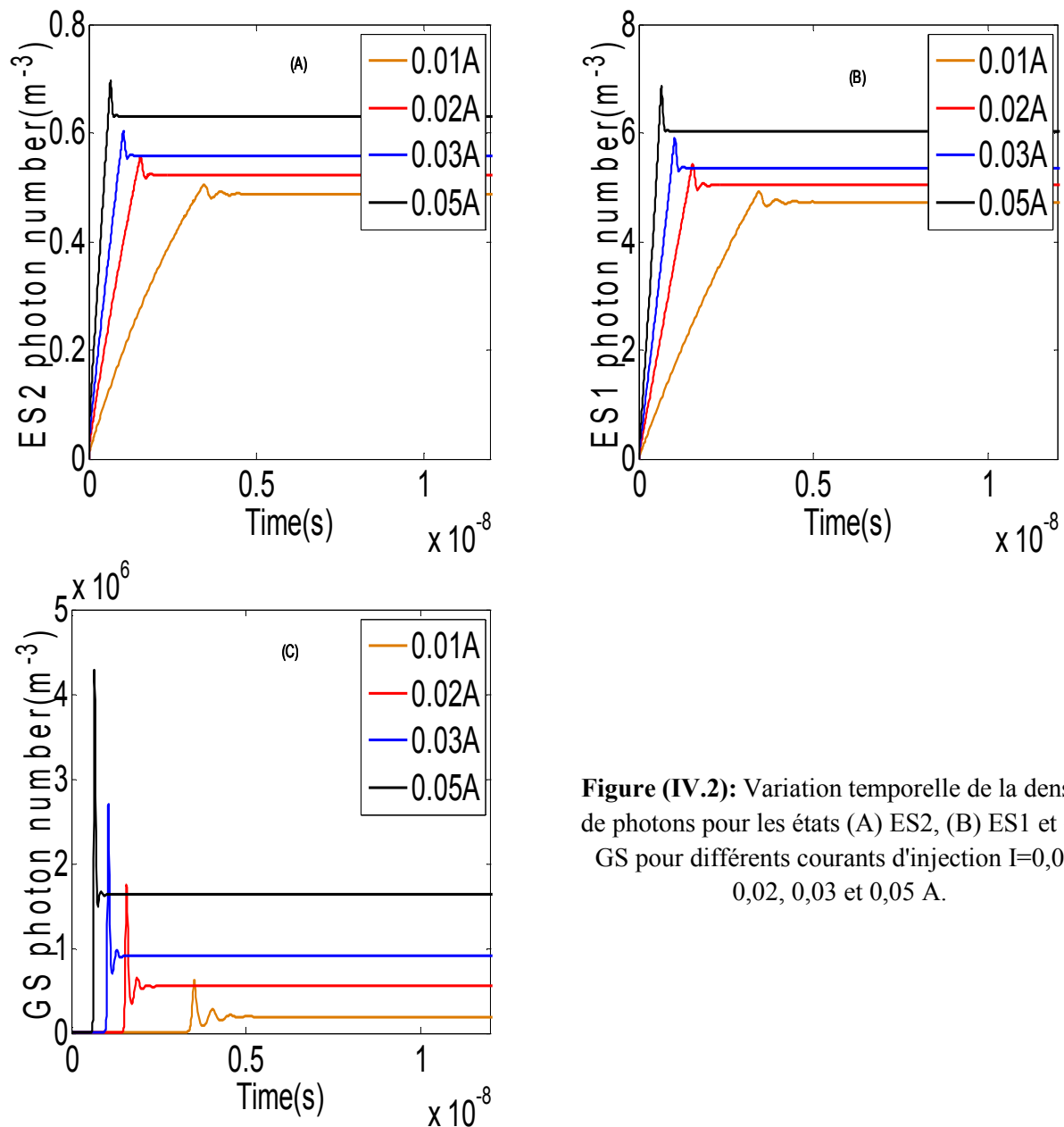
Avec  $\det A$  est le déterminant de la matrice  $A$ .

Les paramètres utilisés dans notre simulation sont énumérés dans le tableau (IV.1).

Paramètre	Symbole	Valeur
Taux d'injection de porteurs	$n_i$	0.9
Facteur de confinement optique	$\Gamma$	0.01
Facteur de couplage de l'émission spontanée	$\beta_{sp}$	$1 \times 10^{-4}$
Perte optique	$\alpha_l$	$6 \times 10^2 \text{ m}^{-1}$
Réfectivité des miroirs de la cavité	$R_1, R_2$	0.3
Temps de décroissance en WL	$\tau_{qr}$	$5 \times 10^{-9} \text{ s}$
Temps de décroissance en ES2 ES1 GS	$\tau_r$	$5 \times 10^{-9} \text{ s}$
Temps de capture des porteurs de WL à ES2	$\tau_c$	$2 \times 10^{-12} \text{ s}$
Temps de relaxation de ES2 à ES1	$\tau_{0ES2-ES1}$	$2 \times 10^{-12} \text{ s}$
Temps de relaxation de ES1 à GS	$\tau_{0ES1-GS}$	$12 \times 10^{-12} \text{ s}$
Temps de recombinaison spontanée	$\tau_{sp}$	$5 \times 10^{-10} \text{ s}$
Dégénérescence	$\mu_{GS}, \mu_{ES1}, \mu_{ES2}$	2, 4, 6
Largeur de la cavité	$W$	$1 \times 10^{-5} \text{ m}$
Longueur de la région active	$L$	$15 \times 10^{-4} \text{ m}$
Facteur d'élargissement homogène	$\Gamma_{hom}$	$1 \times 10^{-2} \text{ eV}$
Facteur d'élargissement inhomogène	$\gamma_0$	$2 \times 10^{-2} \text{ eV}$
Séparation énergétique ES2-ES1	$E_{ES2} - E_{ES1}$	0.058 eV
Séparation énergétique ES1-GS	$E_{ES1} - E_{GS}$	0.053 eV

Tableau (IV.1) : Les paramètres utilisés dans la simulation. [10-12]

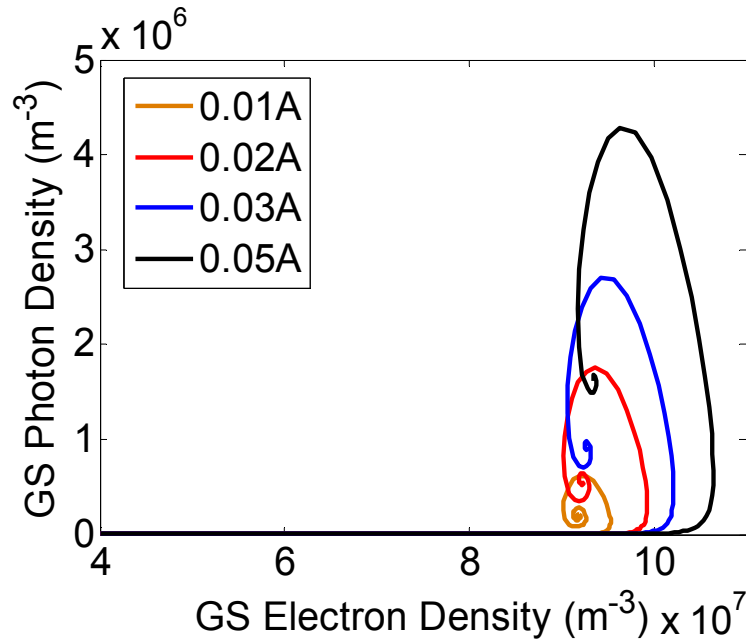
## IV.2.3. Résultats de simulation et discussion:



**Figure (IV.2):** Variation temporelle de la densité de photons pour les états (A) ES2, (B) ES1 et (C) GS pour différents courants d'injection  $I=0,01$ ,  $0,02$ ,  $0,03$  et  $0,05$  A.

La figure (IV.2) montre le comportement dynamique des photons d'un laser à BQ ZnO/MgZnO pour trois niveaux de BQ (GS, ES1 et ES2) avec différents courants injectés ( $I = 0,01$ ,  $0,02$ ,  $0,03$  et  $0,05$  A). Sur cette figure, on peut voir que le délai diminue avec l'augmentation du courant de pompage. Cette variation signifie que la durée de vie effective des porteurs est réduite [13]. Cette analyse est plus claire dans figure (IV.3), qui représente la densité de photons en fonction de la densité d'électrons du GS. De plus, la figure (IV.2) montre que la densité de photons pour les trois niveaux augmente jusqu'aux états stables.

Avant cette stabilité, nous pouvons voir des oscillations de relaxation de niveau dans les premières étapes du flux d'injection. Ceci est dû aux porteurs supplémentaires créés par le courant d'injection à l'intérieur des BQs. De plus, lorsque nous augmentons l'intensité du courant d'injection, le courant de seuil diminue. Nous remarquons également que l'intensité du photon généré au niveau GS est plus élevée qu'au niveau ES1 et ES2.



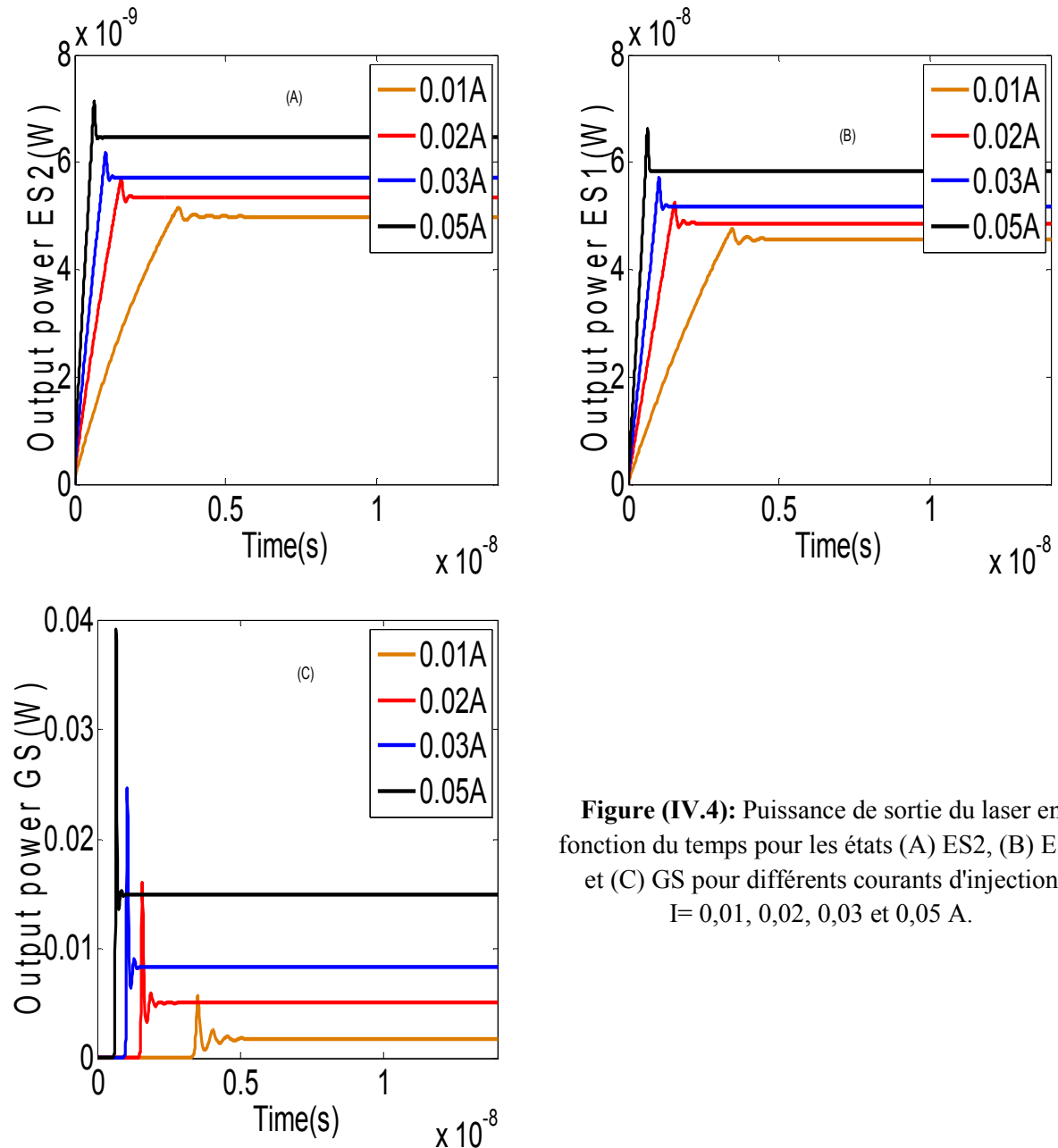
**Figure (IV.3):** Densité de photons en fonction de la densité d'électrons du GS.

#### IV.2.4. Puissance de sortie

La puissance de sortie des différents états  $m$  est donnée par : [14]

$$P_{\text{out}-m} = S_m E_m / \tau_s \quad (\text{IV.19})$$

La figure (IV.4) montre la puissance de sortie du laser à BQ ZnO/MgZnO pour les trois niveaux discrets (GS, ES1 et ES2) en fonction du temps pour différents courants injectés ( $I = 0.01, 0.02, 0.03$  et  $0.05$  A). Il est clair que la structure présente une puissance de sortie plus élevée au niveau GS (figure (IV.4.c)) que les autres niveaux (figure (IV.2.a.b)) quelle que soit la valeur du courant injecté  $I$ . Dans les trois parties, la valeur de la puissance est directement proportionnelle à l'intensité de l'injection. D'autre part, nous pouvons observer que les temps de commutation diminuent avec l'augmentation de l'injection de courant.



**Figure (IV.4):** Puissance de sortie du laser en fonction du temps pour les états (A) ES2, (B) ES1 et (C) GS pour différents courants d'injection  $I = 0,01, 0,02, 0,03$  et  $0,05$  A.

Après l'injection de courant, les porteurs de GS commencent à émettre des photons jusqu'à la saturation de la sortie d'émission liée à GS. À ce moment-là, les porteurs d'ES1 émettent des photons de manière similaire jusqu'à la saturation, puis ES2 commence à émettre. La figure (IV.5) montre la courbe caractéristique de la puissance de sortie en fonction des courants d'injection où nous avons considéré que le courant de seuil est égal à  $10^{-13}$ , 0,56 et 4,1 A pour le GS, ES1 et ES2, respectivement.

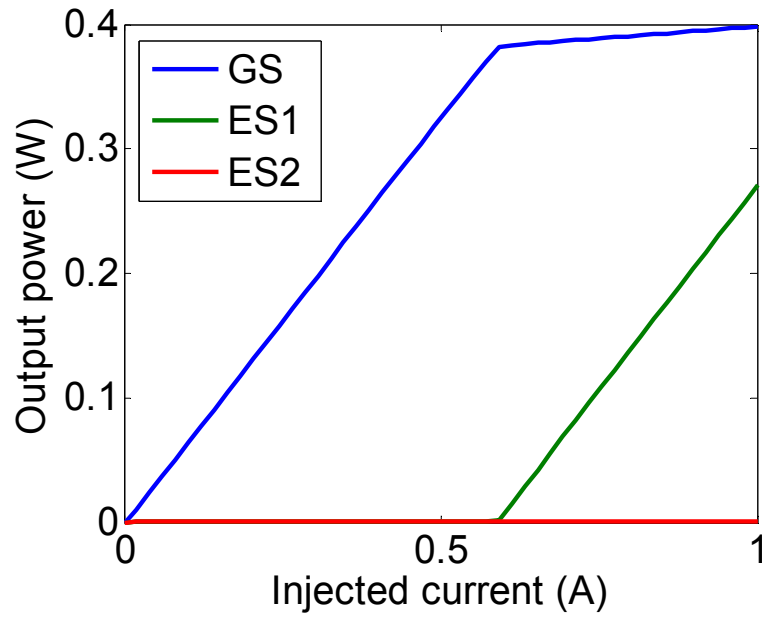


Figure (IV.5): Courbe caractéristique de la puissance de sortie en fonction des courants d'injection.

#### IV.2.5. Gain optique

Le gain optique pour différents niveaux m s'écrit :

$$Gain_m = \frac{\Gamma K_m \left( \frac{2N_m}{\mu_m N_D} - 1 \right)}{1 + \epsilon_m S_m} \quad (IV.20)$$

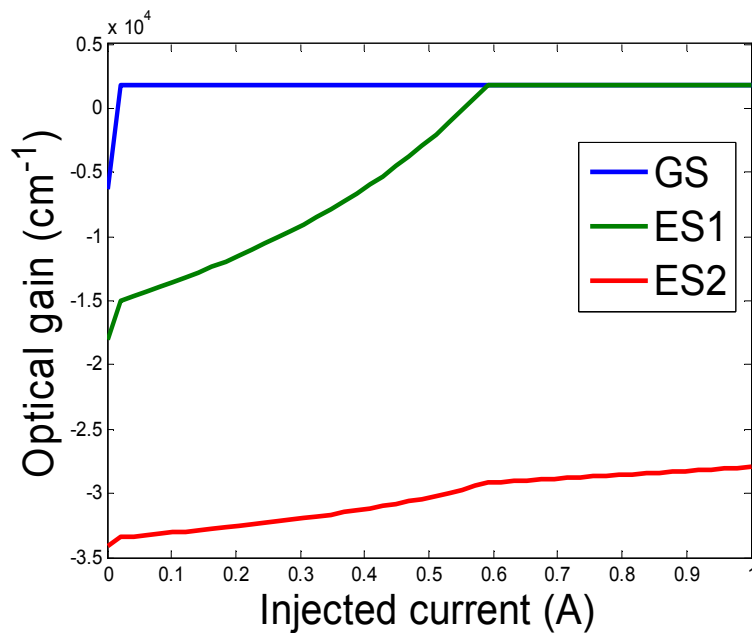
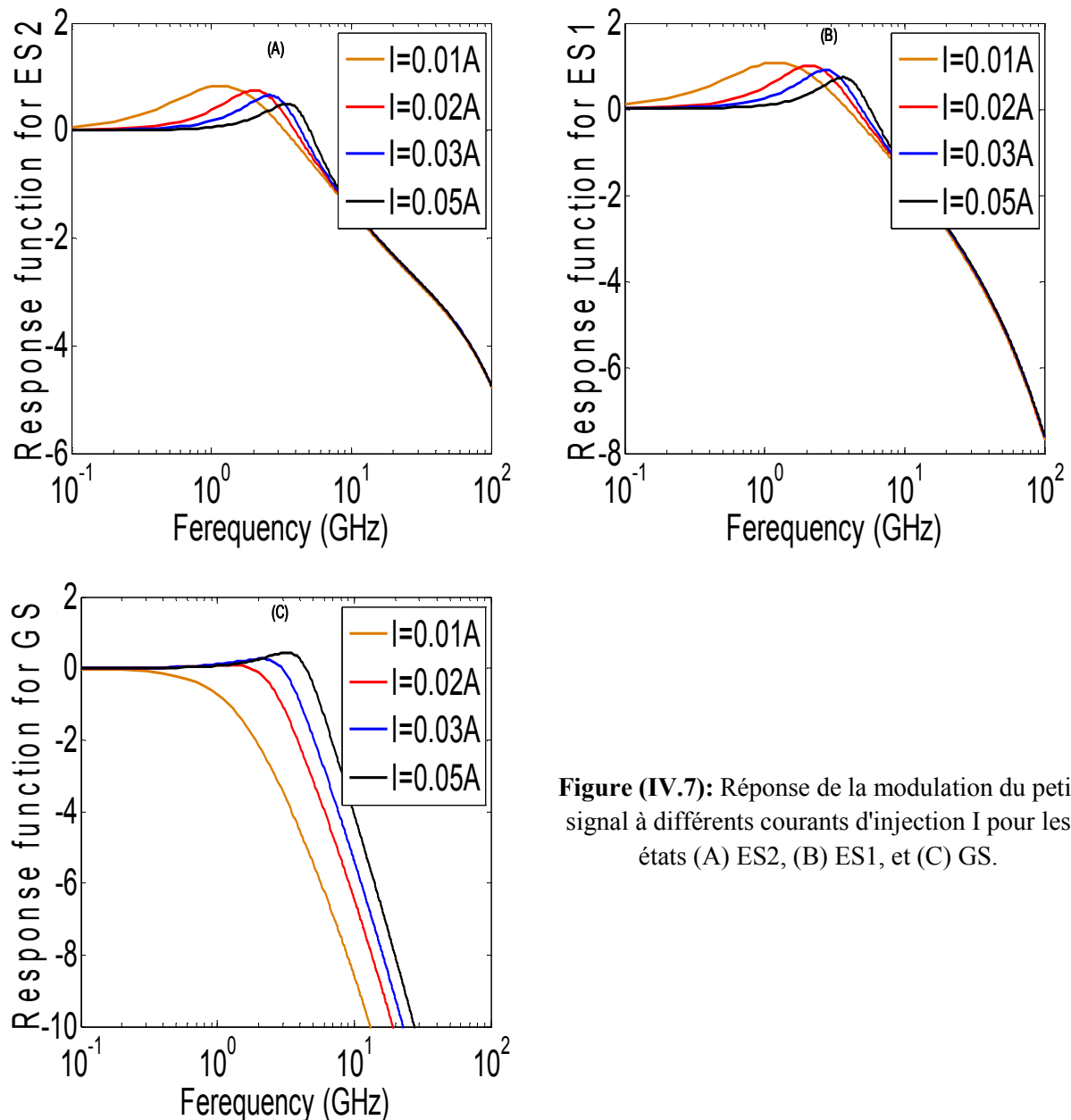


Figure (IV.6): Courbe caractéristique du gain en fonction des courants d'injection.

La figure (IV.6) montre la caractéristique du gain en fonction des courants d'injection pour les trois états d'énergie (GS, ES1 et ES2). Aux faibles courants, nous remarquons que le gain est négatif pour les trois niveaux d'énergie où l'état GS a atteint la saturation d'environ  $2 \times 10^3 \text{ cm}^{-1}$  avant les niveaux ES1 et ES2.



**Figure (IV.7):** Réponse de la modulation du petit signal à différents courants d'injection  $I$  pour les états (A) ES2, (B) ES1, et (C) GS.

La figure (IV.7) représente la réponse de la modulation du signal faible en fonction de la fréquence de modulation sous l'effet du courant injecté  $I$  ( $I = 0,01, 0,02, 0,03$  et  $0,05 \text{ A}$ ) pour les états GS, ES1, et ES2. On constate que l'augmentation de l'injection de courant conduit à une largeur de bande passante de modulation de 3dB pour les trois niveaux. La puissance

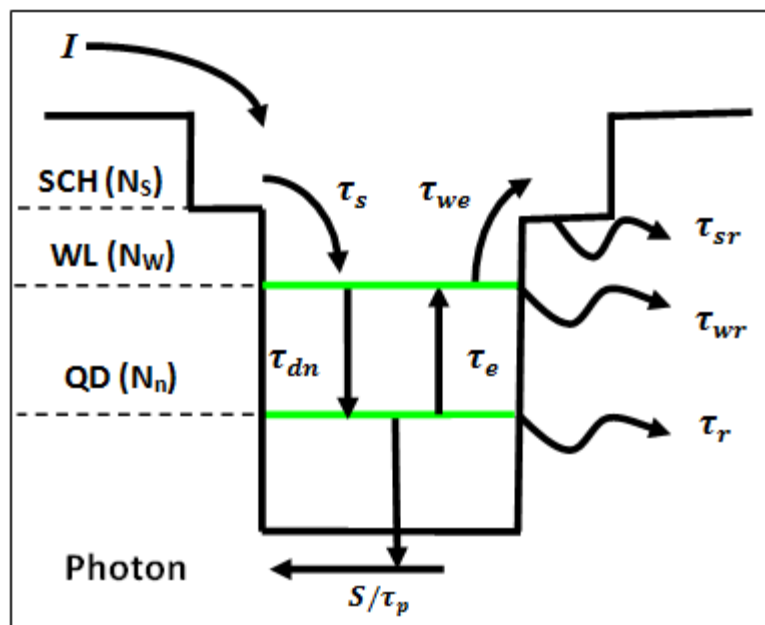
optique à l'intérieur de la cavité augmente avec le courant d'injection, ce qui produit une fréquence de relaxation plus élevée et donc la modulation de la bande passante, est étendue.

#### IV.2.6. Résumé I

Dans cette étude, le mécanisme interne du laser à BQ ZnO/MgZnO a été modélisé et simulé numériquement. Nos résultats ont montré qu'en augmentant le courant d'injection, le temps d'enclenchement et de stabilité diminue. De plus, les courants de seuil et les densités de photons pour les trois niveaux (GS, ES1 et ES2) augmentent jusqu'à atteindre la saturation. La conséquence immédiate de cet effet est l'augmentation de la fréquence de relaxation et donc l'extension de la modulation de la bande passante. Ce travail montre l'avantage des lasers à BQ ZnO/MgZnO pour améliorer les propriétés du laser.

#### IV.3. Structure II

Dans cette partie, le CdZnO/ZnO/MgZnO BQ est considéré comme un milieu actif dans un laser à BQ. Cette structure est constituée de trois couches, la couche d'hétérostructure à confinement séparé (SCH), la couche de mouillage (WL) et la boîte quantique (BQ). Dans notre étude, nous avons supposé que les BQs présentent une forme cylindrique (CdZnO) avec un diamètre  $R=20$  nm et une hauteur  $h=10$  nm.



**Figure (IV.8) :** Diagramme de bande d'énergie de la région active du laser à BQ auto-assemblé CdZnO/ZnO/MgZnO avec différentes dynamiques de porteurs.

Dans cette étude, un modèle théorique est utilisé. Les équations de taux pour CdZnO/ZnO/MgZnO ont été résolues numériquement en utilisant la méthode Runge-Kutta du quatrième ordre. Plusieurs résultats ont été trouvés tels que la densité de porteurs et de photons, le comportement à l'allumage du laser, le courant lumineux, la puissance de sortie et les caractéristiques de gain. A chaque fois, le courant injecté et l'élargissement homogène (HB) (les effets de la température) ont été variés pour mettre en évidence leurs impacts sur ces caractéristiques.

### IV.3.1. Modèle physique

La figure (IV.8) illustre le diagramme de la bande de conduction d'énergie de la région active du laser à BQ auto-assemblé CdZnO/ZnO/MgZnO avec les différentes dynamiques des porteurs qui se sont produites, telles que les processus de génération, de relaxation, de recombinaison et de capture-échappement des porteurs. Tout d'abord, le courant est injecté dans la bande SCH, ce qui conduit à l'augmentation de la densité de porteurs dans cette bande en augmentant les paires électron-trou. Ensuite, les porteurs de la bande SCH se relaxent dans la bande WL, puis dans la boîte quantique, et certains d'entre eux se recombinent. Nous considérons que le groupe de BQ contient  $n=1, 2, \dots, 2M+1$  sous-groupes basés sur leur énergie de résonance aux transitions inter-bandes.

### IV.3.2. Modèle théorique et Equations du bilan

Dans ce travail, le modèle numérique utilisé pour simuler le laser à BQ auto-assemblé CdZnO/ZnO/MgZnO est basé sur l'ensemble des équations de taux couplées, qui inclut la plupart des mécanismes clés des BQs et la dynamique des porteurs du laser à BQ auto-assemblé. Afin de décrire avec précision l'interaction des BQs avec les différentes énergies de résonance par l'intermédiaire des photons, la largeur d'énergie de chaque groupe que nous considérons est égale à la séparation des modes des photons de la cavité longitudinale. Par conséquent, nous prenons la séparation des modes en énergie égale à [15] :

$$\Delta E = ch / (2n_r L_{cav}) \quad (IV.21)$$

Où  $L_{cav}$  est la longueur de la cavité. L'énergie du  $n^{ième}$  groupe est donnée par [15] :

$$E_n = E_{cv} - (M - n)\Delta E \quad (IV.22)$$

$E_{cv}$  est l'énergie de transition du groupe central à  $n = M$ .

Les équations de taux pour la densité de porteurs (électrons) et de photons prennent la forme suivante [15, 16] :

$$dN_s / dt = I / e - N_s / \tau_s - N_s / \tau_{sr} + N_w / \tau_{we} \quad (IV.23)$$

$$dN_w / dt = N_s / \tau_s + \sum_n N_n / \tau_e D_g - N_w / \tau_{wr} - N_w / \tau_{we} - N_w / \bar{\tau}_d \quad (IV.24)$$

$$dN_n / dt = N_w G_n / \tau_{dj} - N_n / \tau_r - N_n / \tau_e D_g - c\Gamma / n_r \sum_m g^{(1)} S_m \quad (IV.25)$$

$$dS_m / dt = \beta N_m / \tau_r + c\Gamma / n_r \sum_n g^{(1)} S_m - S_m / \tau_p \quad (IV.26)$$

Où  $N_s$  et  $N_w$  sont les nombres de porteurs dans la couche séparée SCH et WL, respectivement.  $N_n$  est le nombre de porteurs dans le  $n^{\text{ième}}$  groupe de BQ, et  $S_m$  est le nombre de photons du  $m^{\text{ième}}$  mode  $m = 1, 2, \dots, 2M+1$ .  $I$  est le courant de pompe, l'unité de charge est définie par  $e$  et  $\beta_{sp}$  est l'efficacité de couplage de l'émission spontanée au mode d'effet laser.

Les constantes de temps associées  $\tau_s, \tau_{sr}, \tau_{qe}, \tau_e, \tau_{qr}, \tau_{dn}$  et  $\tau_r$  sont respectivement la diffusion dans la région SCH, la durée de vie de recombinaison des porteurs dans la région SCH, la ré-excitation des porteurs de WL vers la région SCH, la ré-excitation des porteurs du  $n^{\text{ième}}$  BQ vers WL, la recombinaison des porteurs dans WL, la relaxation des porteurs dans le  $n^{\text{ième}}$  groupe de BQ et la recombinaison dans les  $n^{\text{ièmes}}$  BQ. De plus,  $\tau_s c$  est la durée de vie des photons dans la cavité décrite par l'équation (IV.8).

Les boîtes du  $n^{\text{ième}}$  groupe fournissent aux photons du  $m^{\text{ième}}$  mode un gain optique linéaire  $g_{mn}^{(1)}$  qui s'écrit comme suit [15] :

$$g_{mn}^{(1)} = \frac{2\pi e^2 \hbar N_D}{c n_r \epsilon_0 m_0^2} \frac{|P_{cv}^\sigma|^2}{E_{cv}} (2P_n - 1) G_n B_{cv} (E_m - E_n) \quad (IV.28)$$

Où la couverture des BQs  $\xi = N_D V_D$ ,  $N_D$  est la densité des BQs et  $V_D$  est le volume des boîtes  $V_D = \pi R^2 h / 4$ .

$|P_{cv}^\sigma|^2$  est l'élément de matrice de transition de la recombinaison inter-bande avec  $|P_{cv}^\sigma|^2 = |I_{cv}|^2 M^2$ , où  $I_{cv}$  représente l'intégrale de chevauchement entre les fonctions

d'enveloppe d'un électron et d'un trou, et  $M^2 = \frac{m_0^2 E_g (E_g + \Delta)}{12m_e (E_g + 2\Delta/3)}$ . Ici,  $E_g$  est le gap

d'énergies du matériau CdZnO massif,  $m_e$  est la masse effective de l'électron,  $\Delta$  est l'énergie d'interaction spin-orbite du matériau BQ. L'élargissement homogène lorentzien  $B_{cv}(E_m - E_n)$  est exprimé comme suit : [17]

$$B_{cv}(E_n - E_{cv}) = (\hbar\Gamma_{cv} / \pi) / \left[ (E_n - E_{cv})^2 + (\hbar\Gamma_{cv})^2 \right] \quad (\text{IV.29})$$

$E_{cv}$  est l'énergie de transition optique inter-bande et la largeur maximale à mi-hauteur (full width at half maximum FWHM)  $\Gamma_{cv}$  est donnée par  $\Gamma_{cv} = 2\hbar\gamma_{cv}$  avec  $\gamma_{cv}$  est le taux de diffusion. L'élargissement inhomogène  $G_n$  du  $n^{\text{ième}}$  sous-groupe est donné comme suit [15] :

$$G_n(E_n - E_{cv}) = 1 / \sqrt{2\pi}\xi_0 \exp\left[-(E_n - E_{cv})^2 / 2\xi_0^2\right] \quad (\text{IV.30})$$

Où FWHM de l'élargissement inhomogène est donné par  $\Gamma_0 = 2.35\xi_0$ .

La durée de vie moyenne de la relaxation des porteurs est donnée par [16].

$$\bar{\tau}_d^{-1} = \sum_n \tau_{dn}^{-1} G_n = \sum_n \tau_0^{-1} (1 - P_n) G_n \quad (\text{IV.31})$$

Nous supposons que les contributions des BQs sont distribuées dans un intervalle d'énergie. Elles sont exprimées comme  $4\Gamma_0$  autour de  $E_{cv}$ . La probabilité d'occupation des porteurs du  $n^{\text{ième}}$  sous-groupe de BQ  $P_n$  (selon le principe d'exclusion de Pauli) est définie comme [18].

$$P_n = N_n / (D_g N_D V_a G_n) \quad (\text{IV.32})$$

Où  $N_n$  est le nombre de porteurs dans le  $n^{\text{ième}}$  groupe de BQ,  $V_a$  est le volume total de la région active,  $D_g$  est la dégénérescence de l'état fondamental des BQs sans spin et  $G_n$  est le pourcentage du  $n^{\text{ième}}$  groupe de BQ dans l'ensemble des BQs.

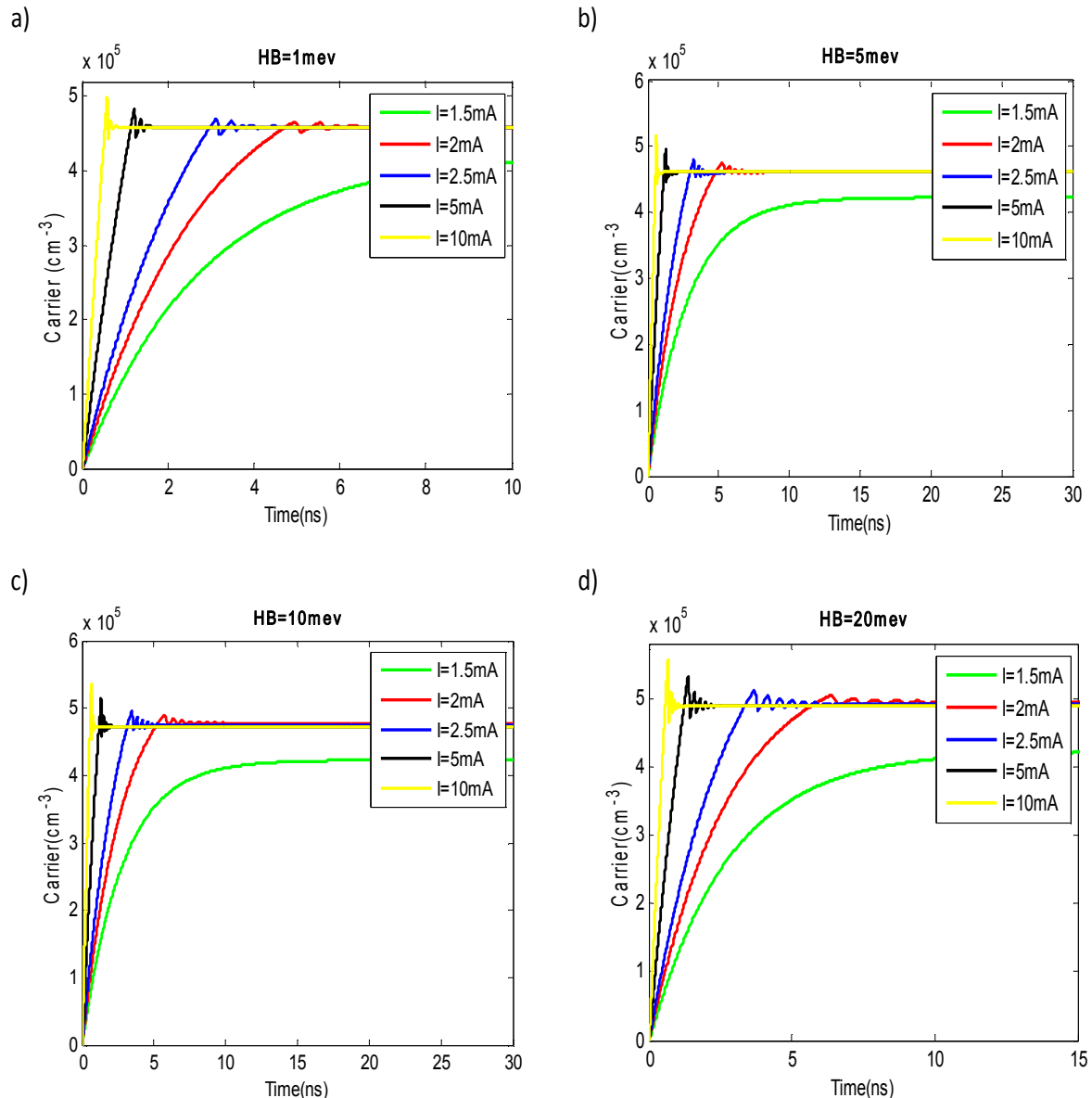
Les paramètres utilisés dans notre simulation sont listés dans le tableau (IV.2).

Paramètres	Symboles	Valeurs
Durée de vie de la relaxation des porteurs	$\tau_0$	1-100 ps
Temps de capture des porteurs dans la région SCH	$\tau_s$	1 ps
Durée de vie de l'émission spontanée dans la région SCH	$\tau_{sr}$	2.8 ns
Durée de vie de la recombinaison des porteurs dans le WL	$\tau_{qr}$	3 ns
Durée de vie de la recombinaison dans une BQ	$\tau_r$	2.8 ns
Durée de vie des cavités photoniques	$\tau_p$	8.8 ps
Nombre de couches de BQ	$n$	3
Facteur de confinement optique	$\Gamma$	6 %
Réflexivités des miroirs	$R_1, R_2$	30 %, 90 %
Perte interne	$\alpha_i$	$6 \text{ cm}^{-1}$
Largeur de la bande	$d$	10 nm
Volume total de la région active	$V_a$	$2 \times 10^{-16} \text{ m}^3$
Longueur de la cavité	$L_{\text{cav}}$	900 $\mu\text{m}$
Couverture des BQ	$\xi$	20 %
Efficacité du couplage émission spontanée	$\beta_{sp}$	$10^{-4}$

**Tableau (IV.2) :** Paramètres utilisés pour la simulation des caractéristiques de laser à BQ auto-assemblé. [8, 19, 20]

### IV.3.3. Résultats de la simulation et discussion:

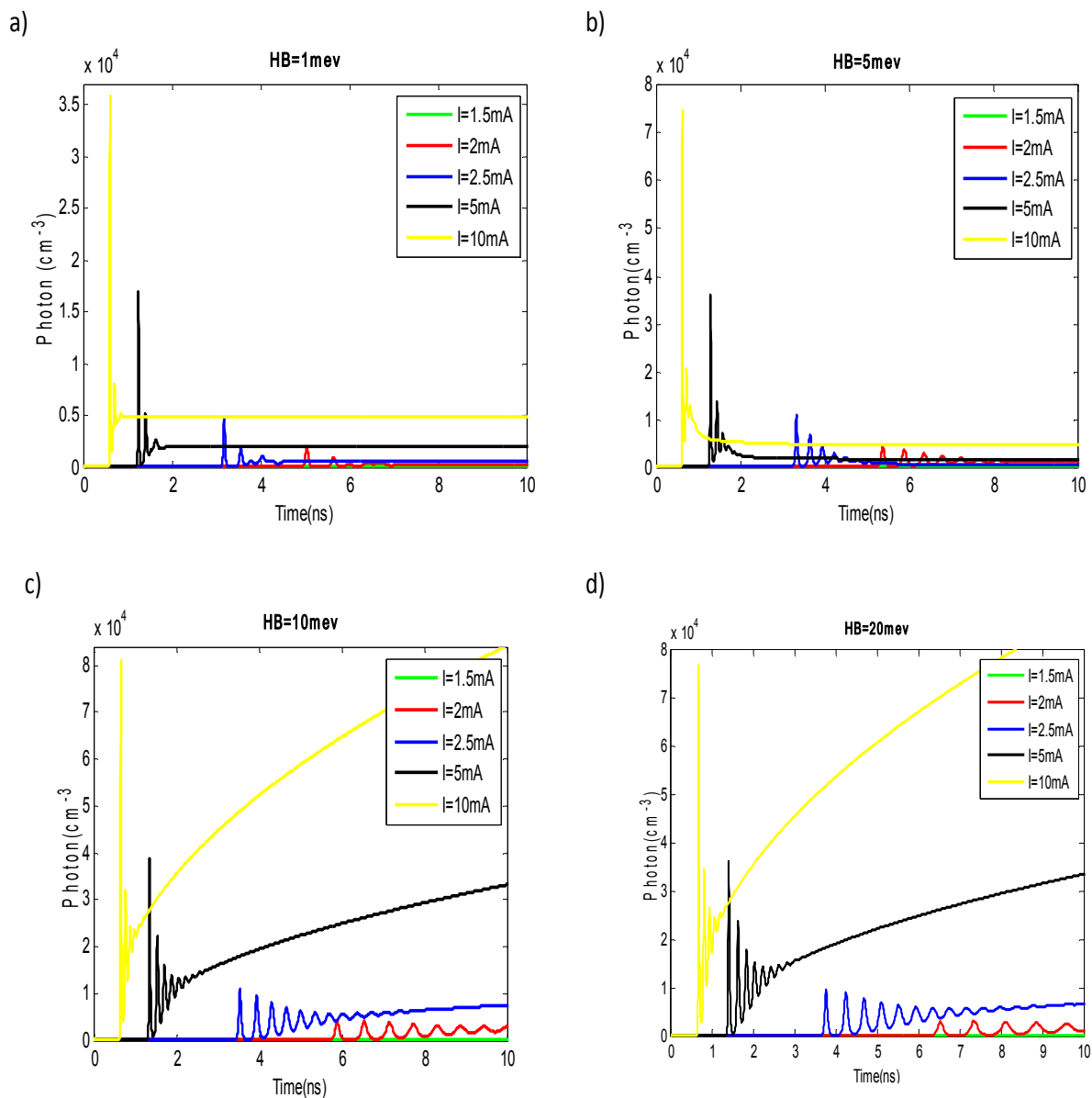
En utilisant la méthode numérique Runge-Kutta, nous avons résolu les équations de taux (IV.23) à (IV.26). La figure (IV.9) montre les caractéristiques des porteurs pour différents courants d'injection  $I = 1,5, 2, 2,5, 5$  et  $10 \text{ mA}$  à différentes valeurs de FWHM de l'élargissement homogène (a)  $HB=1 \text{ meV}$ , (b)  $HB=5 \text{ meV}$ , (c)  $HB=10 \text{ meV}$  et (d)  $HB=20 \text{ meV}$ . Il est clair que le délai d'allumage diminue avec l'augmentation du courant d'injection, contre une augmentation de l'amplitude et de la fréquence de l'oscillation de relaxation. On peut également remarquer que l'amplitude de l'oscillation de relaxation augmente pour une plus grand FWHM d'élargissement homogène, tandis que la fréquence diminue.



**Figure (IV.9):** Densité de porteurs pour différents courants injectés et à différents HBs a)  $1\text{ meV}$ , b)  $5\text{ meV}$ , c)  $10\text{ meV}$ , et d)  $20\text{ meV}$ .

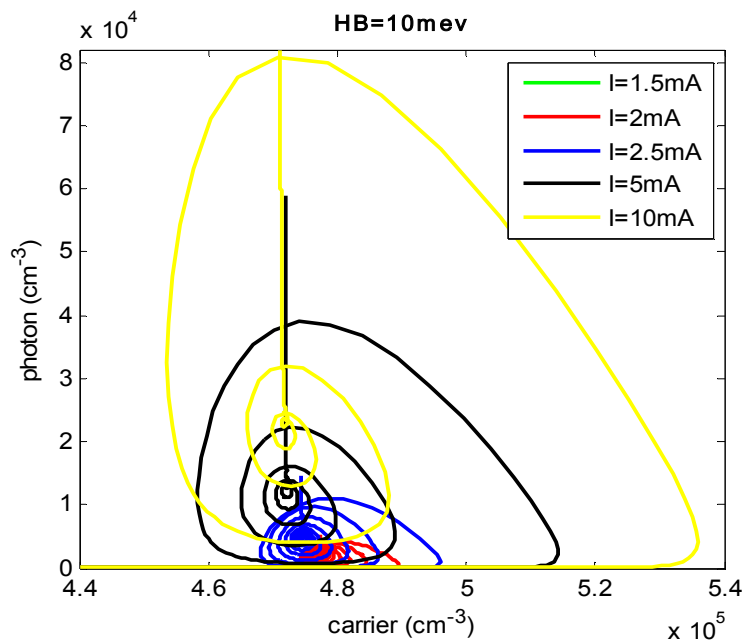
La figure (IV.10) montre le comportement dynamique de la densité de photons pour différents courants d'injection  $I = 1.5\text{mA}$ ,  $2\text{ mA}$ ,  $2.5\text{ mA}$ ,  $5\text{ mA}$ , et  $10\text{ mA}$  à différentes FWHM de l'élargissement homogène (a)  $HB = 1\text{ meV}$ , (b)  $5\text{ meV}$ , (c)  $10\text{ meV}$ , et (d)  $20\text{ meV}$ . Il est évident que lorsque nous augmentons le courant d'injection, les photons à l'état stable augmentent, ce qui devient plus clair dans les valeurs élevées de l'élargissement homogène (Figure (IV.10.c)) et Figure (IV.10.d)). Cela peut s'expliquer par le fait que l'augmentation du courant d'injection provoque une augmentation des porteurs dans les BQs, ce qui augmente les photons du laser de cavité. Ce dernier atteint sa valeur maximale pour  $I = 10\text{ mA}$  à

HB=10 meV. Ces photons initiaux améliorent le taux d'émission stimulée, puis augmentent les photons laser dans le nouvel état d'équilibre. Cette amélioration du taux d'émission stimulée conduit à l'amplification de la lumière et réduit le temps des photons de la cavité, car le début de l'oscillation de relaxation précoce nécessite de nombreux porteurs. De plus, nous notons que l'augmentation du courant d'injection provoque une dégradation du délai d'allumage et une augmentation de la fréquence et de l'amplitude maximale de l'oscillation de relaxation.



**Figure (IV.10):** Densité de photons pour différents courants injectés et à différents HBs a) 1 meV, b) 5 meV, c) 10 meV, et d) 20 meV.

En revanche, pour la variation de l'élargissement homogène de la FWHM de 1 meV à 10 meV, le nombre de photons à l'état stable augmente et atteint une valeur maximale à 10 meV. Au-delà de cette valeur de HB, elle commence à diminuer. Le même comportement est remarqué pour le maximum de l'amplitude de l'oscillation de relaxation. Ceci est dû à l'augmentation des porteurs du groupe central. Nous remarquons également une nette augmentation du courant de seuil, où les photons à l'état stable sont considérablement réduits à certains courants d'injection, et ceci est évident pour  $I=1.5$  mA et  $I=2$  mA, qui disparaît presque à 20 meV, et en plus l'émission laser disparaît avec lui. De plus, l'augmentation de l'élargissement homogène FWHM augmente le temps nécessaire aux photons du laser pour atteindre l'état d'équilibre. La même conclusion est tirée de la figure (IV.11), qui représente la variation de la densité de photons en fonction de la densité de porteurs pour différents courants injectés à  $HB=10$  meV. La densité de photons augmente avec l'augmentation de la densité de porteurs à travers une forme de spirale conventionnelle avec une rotation dans le sens inverse des aiguilles d'une montre, ces formes atteignent leur pic pour le courant injecté le plus élevé.

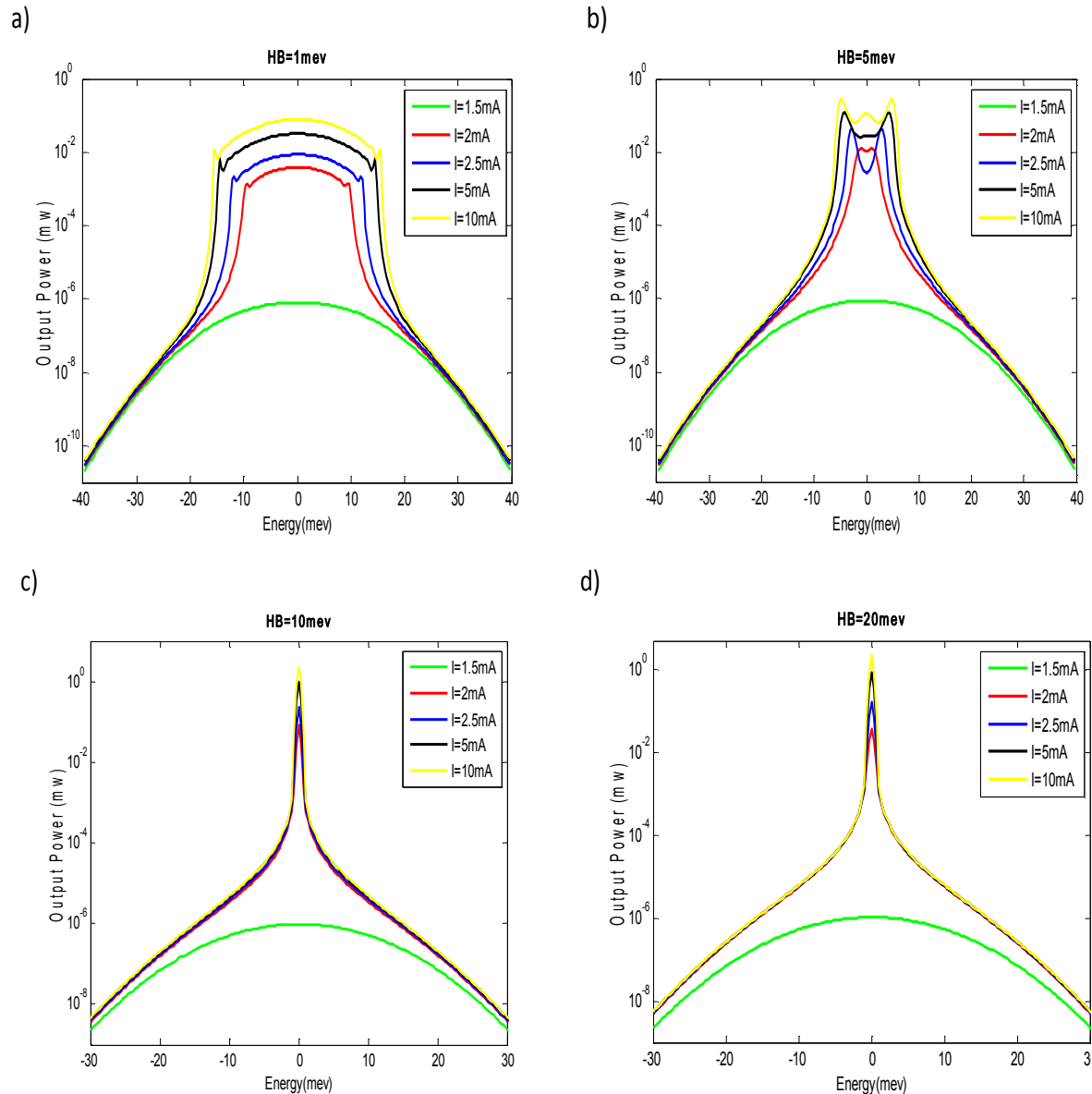


**Figure (IV.11):** Densité de photons en fonction de la densité de porteurs pour différents courants injectés à  $HB=10$  meV.

#### IV.3.4. Puissance de sortie

La figure (IV.12) montre les comparaisons de la puissance de sortie pour différents courants injectés et à différents HBs : (a) 1 meV, (b) 5 meV, (c) 10 meV et (d) 20 meV. L'origine de

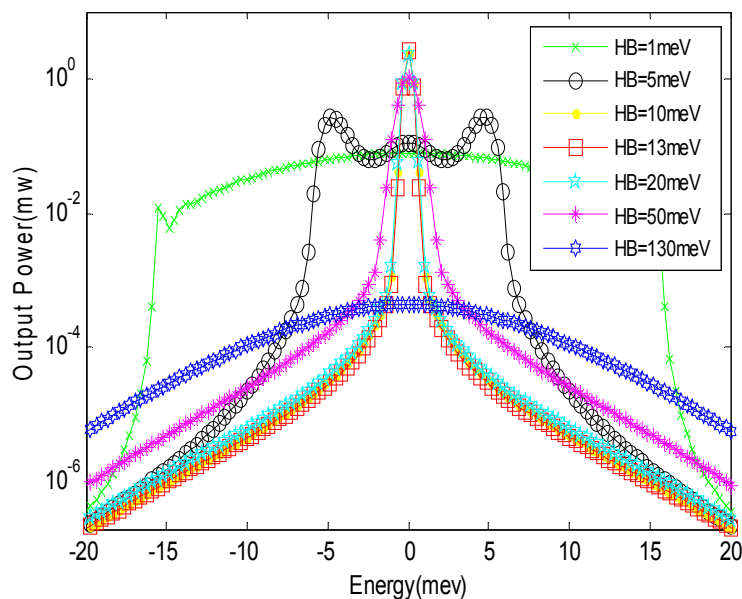
l'énergie est prise à  $E_{cv}$  et le FWHM de l'élargissement inhomogène (IHB) est de 15 meV. Il est évident que lorsque le courant injecté est augmenté, le spectre de l'effet laser s'étend, et est plus étendu pour les petites valeurs de HBs. Quant à la puissance de sortie, elle augmente en augmentant le courant injecté et est plus prononcée pour des valeurs plus élevées de HBs.



**Figure (IV.12):** Puissance de sortie en fonction des modes multi-longitudinaux pour différents courants injectés et à différents HBs : a) 1 meV, b) 5 meV, c) 10 meV, et d) 20meV. L'origine de l'énergie est prise à  $E_{cv}$  et IHB est de 15 meV.

La figure (IV.13) montre la puissance de sortie en fonction des modes multi-longitudinaux pour différents HBs et à  $I=10mA$ . L'origine de l'énergie est prise à  $E_{cv}$  et IHB est de 15 meV. On a remarqué qu'en augmentant la valeur de HB, le pic du spectre laser se rétrécit et la

puissance de sortie augmente jusqu'à atteindre un maximum à  $HB=13$  meV. Au-delà de cette valeur de  $HB$ , ce pic diminue jusqu'à s'estomper au FWHM de  $HB$  130 meV. Dans le même temps, le spectre laser commence à s'étendre et à diminuer progressivement. Par conséquent, nous pouvons déduire que plus le courant injecté est suffisant (supérieur au courant de seuil), le spectre laser apparaît dans un mode proéminent et clair avec la puissance de sortie la plus élevée à une certaine température ( $HB$ ) d'approbation et surtout dans ce courant. Ainsi, nous concluons que les émissions laser (puissance de sortie) sont plus importantes pour des valeurs de  $HB$ s proches de  $IHB$ , et cette puissance de sortie augmente en augmentant le courant injecté.



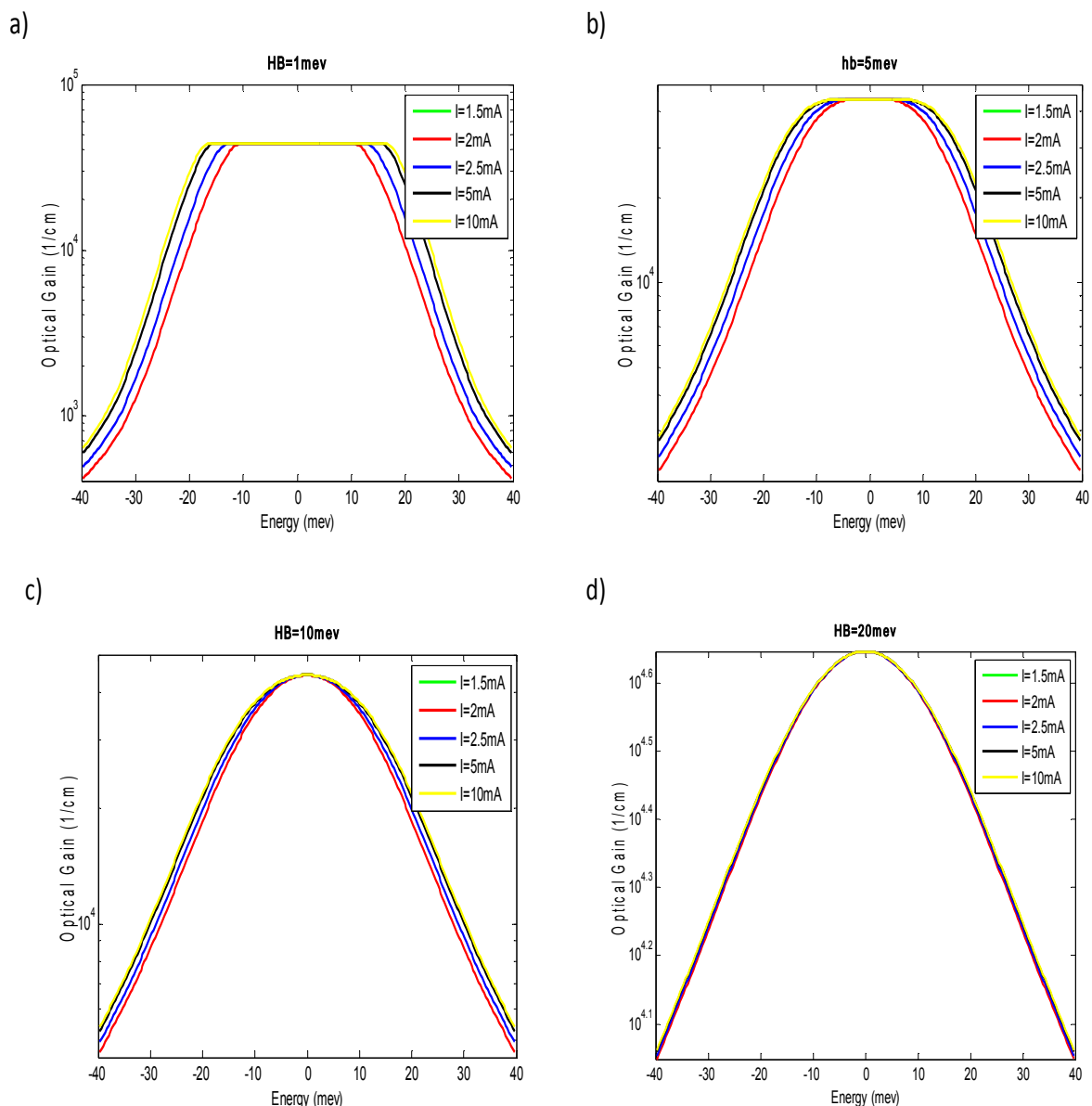
**Figure (IV.13):** Puissance de sortie en fonction des modes multi-longitudinaux pour différents  $HB$ s et à  $I=10$ mA. L'origine de l'énergie est prise à  $E_{cv}$  et l' $IHB$  est de 15 meV.

Cette variation de la performance laser à BQ auto-assemblé est due à l'augmentation des groupes de BQ se trouvant dans la portée (FWHM) de  $HB$  des groupes centraux et à la diminution du nombre de modes centraux. En conséquence, il y a une augmentation des porteurs émetteurs dans les modes centraux. Dans ce cas, l'effet laser se produit avec un seul mode proéminent. De plus, une augmentation de la température améliore l'échappement thermique des porteurs des BQs vers les WLs, ce qui augmente également le taux d'émission des porteurs dans les modes centraux. Sur la base de ces résultats, nous proposons la possibilité d'un effet laser monomode dans de grands courants injectés ; ceci est cohérent avec les résultats de Sugawara et al pour le laser BQ à base de GaAs [15]. Malgré quelques

désaccords avec ces résultats, nous trouvons la même suggestion qu'ils ont faite que HB devrait être proche ou égal à IHB pour toute amélioration des performances.

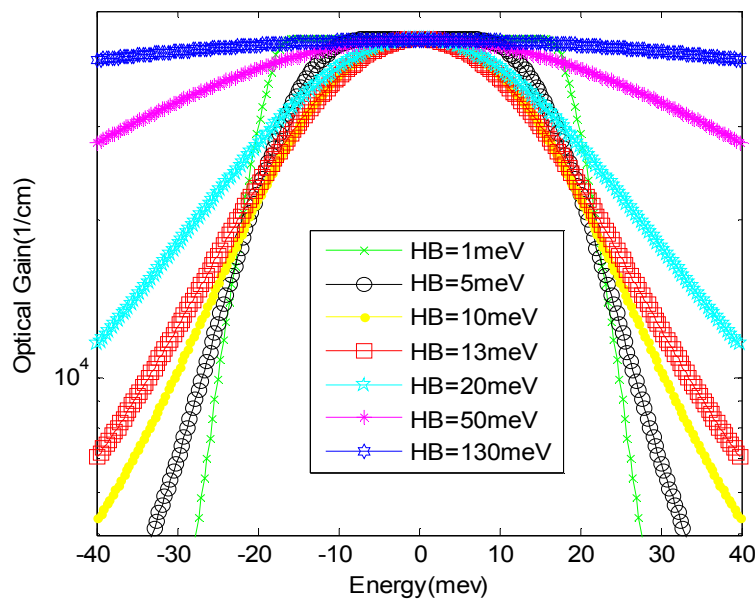
### IV.3.5. Gain optique

Le spectre du gain optique à différents HBs a) 1 meV, b) 5 meV, c) 10 meV, et d) 20 meV pour différents courants injectés est montré dans la figure (IV.14). Nous constatons que le gain optique n'est pas affecté par la modification du courant injecté. Il y a également une légère extension du spectre de gain optique en augmentant le courant injecté.



**Figure (IV.14):** Spectre de gain optique à différents HBs a) 1 meV, b) 5 meV, c) 10 meV, et d) 20 meV pour différents courants injectés. L'origine de l'énergie est prise à  $E_{cv}$  et l'IHB est de 15 meV.

L'effet du HB sur le gain optique est montré dans la figure (IV.15) qui représente le spectre de gain optique pour différents HBs et à  $I=10\text{mA}$ . Le gain optique se rétrécit avec l'augmentation du HB jusqu'à une valeur de HB d'environ 13 meV. Après cette valeur, il commence à s'étendre pour des valeurs plus élevées de HB. A partir de cette figure, nous pouvons déduire les modes se situant à l'extrémité hors de FWHM du spectre de gain optique. Ce comportement est en accord avec les résultats de la DG. Nahri [21]. De plus, l'augmentation de HB n'élève pas le pic du gain optique, et tous les modes trouvent des gains optiques qui restent sous le seuil de gain.



**Figure (IV.15):** Le spectre de gain optique pour différents HBs et à  $I=10\text{mA}$ . L'origine de l'énergie est prise à  $E_{cv}$  et l'IHB est de 15 meV.

#### IV.3.6. Résumé II

Dans cette partie, nous avons étudié et simulé une nouvelle structure de laser à BQ auto-assemblé CdZnO/ZnO/MgZnO, nous avons résolu les équations de taux numériquement en utilisant la méthode Runge-Kutta du quatrième ordre, et analysé certains des résultats obtenus pour cette structure. En particulier, nous nous sommes intéressés aux caractéristiques dynamiques et statiques, aux propriétés de la puissance de sortie et du gain optique afin de montrer l'effet du courant injecté et de l'élargissement homogène sur ces caractéristiques. Les résultats ont montré qu'en augmentant le courant injecté et l'élargissement homogène HB, les caractéristiques dynamiques et les photons à l'état stable sont améliorés. Nous avons également constaté que pour un courant injecté particulier, la meilleure performance

d'émission laser (FWHM la plus faible et puissance de sortie la plus élevée) pour un élargissement homogène HB est comparable, proche ou égale à l'élargissement inhomogène IHB.

#### IV.4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons essayé de montrer l'importance de la double utilisation du ZnO et ses alliages avec les BQs comme des milieux actifs dans les diodes laser. Nous avons présenté cet objectif à travers la modélisation et la simulation numérique de deux nanostructures laser à base de ZnO et ses alliages (ZnO/MgZnO et CdZnO/ZnO/MgZnO). À chaque fois on a analysé le côté théorique à partir des modèles numériques basés sur des équations différentielles couplées de taux pour les porteurs et les photons qui incluent la plupart des mécanismes clés et les dynamiques des porteurs du laser à BQ. Cette méthode est la plus efficace et la plus courante pour l'examen des caractéristiques des nanostructures laser. Plusieurs résultats ont été obtenus tels que la densité de porteurs et de photons, le courant lumineux, la puissance de sortie, la réponse de la modulation du petit signal et les caractéristiques de gain. A chaque fois, le courant injecté et l'élargissement homogène (HB) ont été variés pour mettre en évidence leurs impacts sur ces caractéristiques. A travers ces résultats, nous avons montré que les nanostructures laser à base de ZnO et ses alliages possèdent un potentiel prometteur en termes de performances.

## Références

- [1] M. Gioannini, IEEE Journal of Quantum Electronics **42**(3), 331 (2006).
- [2] M. Zieliński, M. Korkusiński, P. Hawrylak, Physical Review B **81**(8), 085301 (2010).
- [3] H. Jiang, J. Singh, Applied Physics Letters **71**(22), 3239 (1997).
- [4] S. F. Lv, I. Montrosset, M. Gioannini, S. Song, J. Ma, Optoelectronics Letters **7**(2), 122 (2011).
- [5] M. Sugawara, K. Mukai, Y. Nakata, H. Ishikawa, A. Sakamoto, Physical Review B **61**, 7595 (2000).
- [6] M. Sugawara, “Effect of carrier dynamics on quantum-dot laser performance and possibility of bi-exciton lasing,” in Proc. SPIE, vol. 3283, pp. 88–99, 1998.
- [7] M. Nady Abdul Aleem , Khalid F. A. H, and Abd-El-hadi A. A” Semiconductor quantum dot lasers as pulse sources for high bit rate data transmission” Progress In Electromagnetics Research M, Vol. 28, 185{199, 2013.
- [8] C. Wang, F. Grillot, J. Even, SPIE Photonics Europe, Brussels, Belgium, (2012).
- [9] J. Helms and K. Petermann, “Microwave modulation of laser diodes with optical feedback,” J. Lightw. Technol., vol. 9,no. 4, pp. 468–476, Apr.1991.
- [10] S.-F. Lv, I. Montrosset, M. Gioannini, S.-Z. Song and J.-W. Ma, “Modeling and Simulation of InAs/GaAs Quantum Dot Lasers,” Optoelectronics Letters, Vol. 7, No. 2, 2011, pp. 122-125.doi:10.1007/s11801-011-0102-3.
- [11] Ashkan Horri, Seyedeh Z ahra Mirmoeini, and R ahim Faez “The noise equivalent circuit model of quantum-dot lasers” Journal of Russian Laser Research, Volume 33, Number 3, May, 2012.
- [12] C. Wang, B. Lingnau, K. Lüdge, J. Even, and F. Grillot “Enhanced Dynamic Performance of Quantum Dot Semiconductor Lasers Operating on the Excited State”. Ieee journal of quantum electronics, vol. 50, no. 9, september 2014 723.
- [13] G. P. Agrawal, N. K. Dutta, Van Nostrand Reinhold, New York, 240 (1986).
- [14] A. Daraei, S. M. Izadyar, N. Chenarani “Simulation and Analysis of Carrier Dynamics in the InAs/GaAs Quantum Dot Laser, Based upon Rate Equations” Optics and Photonics Journal, 2013, 3, 112-116.
- [15] Sugawara M, Mukai K, Nakata Y, Ishikawa H, Sakamoto A (2000) Effect of homogeneous broadening of optical gain on lasing spectra in self assembled  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  quantum dot lasers. Physical Review B **61**:7595–7603.
- [16] Sugawara M, Willardson R K, Weber E R (1999) Self-assembled InGaAs/GaAs quantum dots. In: Semiconductors and Semimetals Academic Press **60**, 1st edn. New York.
- [17] K. Veselinov, F. Grillot, M. Gioannini, I. Montross et, E. Homeyer, R.Piron, J. Even, A. Bekiarski, and S. Loualiche, “ Lasing spectr a of  $1.55 \mu\text{m}$  InAs/I nP quantum dot lasers: theoretical analysis and comparison with the experiments ,” Opt. Quant um Electron. **40**, 227–237 (2008).

- [18] Sugawara M, Hatori N, Ebe H, Ishida M (2005) Modeling room temperature lasing spectra of 1.3  $\mu\text{m}$  self-assembled InAs/GaAs quantum dot lasers: homogeneous broadening of optical gain under current injection. *Journal of Applied Physics* 97: 43523–43527.
- [19] Shoji H, Nakata Y, Mukai K, Sugiyama Y, Sugawara M, Yokoyama N, Ishikawa H. Room temperature CW operation at the ground state of self-formed quantum dot lasers with multistacked dot layer. *Electronics Letters* 1996;32: 2023–2024.
- [20] Yavari, M.H., Ahmadi, V.: Effects of carrier relaxation and homogeneous broadening on dynamics and modulation behavior of self-assembled quantum-dot laser. *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 17, 1153–1157 (2011)
- [21] Nahri DG (2012) Simulation of output power and optical gain characteristics of self-assembled quantum-dot lasers: effects of homogeneous and inhomogeneous broadening, quantum dot coverage and phonon bottleneck. *Optics & Laser Technology* 44: 2436–2442.

# **Conclusion générale**

# Conclusion générale

---

## Conclusion générale

L'une des sources optiques importantes ces dernières années avec de larges utilisations dans plusieurs domaines (systèmes de télécommunication optique, ordinateur quantique, les applications biomédicales, ordinateur quantique, etc....) est le laser à boîtes quantiques. Cela est dû à ses propriétés intéressantes telles qu'une large bande passante et une insensibilité à la température, un seuil de courant faible, ainsi qu'un gain différentiel élevé et facteur d'amélioration de la largeur de ligne réduite (LEF ou facteur  $\alpha$  Henry) à la longueur d'onde du laser.

Afin d'améliorer les performances et les propriétés du laser, nous proposons dans cette thèse une étude de la dynamique et modulation de lasers à semi-conducteurs nano-structurés à base d'un matériau qui a suscité une grande attention ces dernières années, le ZnO et ses alliages. Le but principal de notre travail est de présenter l'importance de la double utilisation du ZnO et ses alliages avec les boîtes quantiques (BQs) comme des milieux actifs dans les diodes laser. Cette étude est basée sur deux structures laser à BQ ZnO/MgZnO et CdZnO/ZnO/MgZnO.

Le manuscrit de notre thèse est divisé en quatre chapitres. Nous avons tout d'abord présenté dans le premier chapitre l'état de l'art sur les nanostructures de type BQs. Après avoir présenté quelques notions de base de BQs, nous avons cité leurs principales propriétés électriques et optiques, par suite nous avons également précisé des méthodes d'épitaxies qui permettent de fabriquer ces dispositifs, et à la fin de ce chapitre nous avons donné quelques applications des BQs dans le domaine optoélectronique et photonique.

Le deuxième chapitre est consacré à la présentation des généralités fondamentales aux propriétés (structurales, électroniques, optiques, thermiques, etc....) de l'oxyde de zinc (ZnO) et à la description de leurs différents alliages tels que MgZnO, CdZnO et BeZnO et ses propriétés particulière pertinentes pour notre étude.

Le troisième chapitre fournit dans la première partie l'état de l'art sur le laser à semi-conducteur, son principe de fonctionnement et ses caractéristiques principales. En deuxième partie, nous avons présenté les propriétés fondamentales des structures laser à BQ, notamment la structure électronique, les processus de diffusion des porteurs, le gain et l'indice de réfraction, ainsi que les élargissements homogènes et inhomogènes. Ces éléments fondamentaux sont nécessaires pour comprendre la physique de base et la modélisation de ce

## Conclusion générale

---

dispositif, qui fait l'objet de notre étude. Enfin, le quatrième chapitre est consacré à la présentation des modèles numériques utilisés dans cette étude et nos résultats de modélisation et simulation numérique qui ont été menées dans ce travail pour optimiser des structures laser à BQs à base de ZnO et ses alliages. Dans ce travail, on a utilisé une méthode plus efficace et la plus courante pour l'examen les caractéristiques des nanostructures laser, cette méthode est basée sur un modèle cinétique fondé sur des équations différentielles couplées de taux pour les porteurs et les photons qui incluent la plupart mécanismes clés, la théorie des réservoirs et les dynamiques des porteurs de la BQ, Ce modèle phénoménologique est étendu aux diodes lasers à nanostructures quantiques afin de simuler leurs propriétés remarquables. Notre modélisation et simulation numérique a touché deux nanostructures laser à base de ZnO et ses alliages ZnO/MgZnO et CdZnO/ZnO/MgZnO. Plusieurs résultats ont été obtenus tels que la densité de porteurs et de photons, le courant lumineux, la puissance de sortie, la réponse de la modulation du petit signal et les caractéristiques de gain. A chaque fois, le courant injecté et l'élargissement homogène (HB) ont été variés pour mettre en évidence leurs impacts sur ces caractéristiques. A travers ces résultats, nous avons montré que les nanostructures laser à base de ZnO et ses alliages possèdent un potentiel prometteur en termes de performances.

Les résultats obtenus sont très impressionnants par rapport à d'autres travaux dans le domaine du laser à BQs, ce qui nous donne une indication claire de l'importance de ZnO et ses alliages, et de la grande efficacité de notre modèle utilisé pour mettre en évidence les propriétés de ce type de composés optoélectroniques. Comme perspective d'avenir, nous espérons de mettre en évidence l'importance de ces matériaux en les utilisant comme des bases pour d'autres composants optoélectroniques tels que les diodes électroluminescentes à BQs, les cellules solaires à BQs, les amplificateurs à BQs, photo-détecteurs à BQ etc. En préservant les caractéristiques distinctives de chaque composant cité, il est intéressant de tester la validité des modèles de simulation utilisés dans le cadre de cette thèse.

# **Publications**

# *Investigation of Electronic and Optical Properties of CdZnO/ZnO/MgZnO Self-Assembled Quantum-Dot Lasers*

**Soufyane Taleb, Belabbès Soudini & Hamza Abid**

**Iranian Journal of Science and Technology, Transactions A: Science**

ISSN 1028-6276

Iran J Sci Technol Trans Sci  
DOI 10.1007/s40995-019-00706-4



 Springer

**Your article is protected by copyright and all rights are held exclusively by Shiraz University. This e-offprint is for personal use only and shall not be self-archived in electronic repositories. If you wish to self-archive your article, please use the accepted manuscript version for posting on your own website. You may further deposit the accepted manuscript version in any repository, provided it is only made publicly available 12 months after official publication or later and provided acknowledgement is given to the original source of publication and a link is inserted to the published article on Springer's website. The link must be accompanied by the following text: "The final publication is available at [link.springer.com](http://link.springer.com)".**



# Investigation of Electronic and Optical Properties of CdZnO/ZnO/MgZnO Self-Assembled Quantum-Dot Lasers

Soufyane Taleb<sup>1</sup> · Belabbès Soudini<sup>1</sup> · Hamza Abid<sup>1</sup>Received: 29 September 2018 / Accepted: 26 March 2019  
© Shiraz University 2019

## Abstract

In the goal to improve the self-assembled quantum-dot lasers (SAQDL) performance and properties, we propose in this paper a structure based on a material that gained a great attention in the recent years, the ZnO and their alloys. In this study, a theoretical model is used. The rate equations for CdZnO/ZnO/MgZnO were numerically solved using the fourth-order Runge–Kutta method. Several results have been found such as the carrier and photon density, laser turn-on behavior, light-current, output power, and gain characteristics. In each time, the injected current and the homogeneous broadening (HB) (the effects of temperature) have been varied to highlight their impacts on these characteristics. The results have shown that good performances of SAQDL have been achieved with optimal values of current injection and HB. In addition, the peak of optical gain has not changed with the variations of these factors. Based on the results obtained, ZnO and their alloys are found emerging materials to improve the laser performances.

**Keywords** SAQDL · CdZnO/ZnO/MgZnO · HB · Rate equations model

## 1 Introduction

Reducing the dimension of the active region could significantly improve laser performance due to the effect of quantum volume. This was the purpose of Arakawa and Sakaky in 1982 and suggested quantum dots (Arakawa and Sakaki 1998). Quantum dot (QD) is a semiconductor-based compound where the charge carriers are confined in three dimensions of space leading to the modification of electronic and optical properties. In QDs, the energy levels are discrete and the transitions between electrons and holes are comparable with transitions between discrete levels of single atoms. So, quantum dots are sometimes described as artificial atoms (Steiner 2004). The important optical sources used in optical communication systems in recent years are the quantum dot laser (QDL) (Rafailov et al. 2011; Sugawara et al. 1999; Giannini et al. 2006) due to their interesting properties such as wide bandwidth, temperature insensitivity (Mikhrin et al.

2005), low current threshold, as well as high differential gain (Bhattacharyya et al. 1999; Bhattacharya et al. 2000), and reduced linewidth enhancement factor (LEF or  $\alpha$ H-factor) at the lasing wavelength (Crowley et al. 2012). In this paper, CdZnO/ZnO/MgZnO QD is considered as an active medium in a QD laser in order to show the positive potential of ZnO and its alloys in the field of optoelectronics, especially quantum dot laser. This structure consists of three layers, the separated confinement heterostructure (SCH) layer, the wetting layer (WL) and quantum dot (QD). In our study, we assumed that the QDs presents a cylindrical shape (CdZnO) with a diameter  $R = 20$  nm and a height  $h = 10$  nm. This paper is the first to study the advantages of using ZnO and its alloys in quantum dots lasers. In this work, the numerical model used to simulate CdZnO/ZnO/MgZnO SAQDL is based on the coupled rate equations set, which includes most of key mechanisms of QDs and dynamics of SAQDL carriers. To solve these equations, we used the fourth-order Runge–Kutta method in MATLAB software. Many results have been achieved and discussed such as dynamic response and carrier and photon density time evolution of mentioned QD laser, output power, and the gain characteristics at different inhomogeneous/homogeneous broadening (IHB and HB) factors for various injected currents.

✉ Soufyane Taleb  
tsoufyane2011@gmail.com

<sup>1</sup> Applied Materials Laboratory (AML), University of Sidi Bel Abbès, Sidi Bel Abbès, Algeria

## 2 Physics and Modeling

A numerical method based on the rate equations for carriers and photons has been used to explain and analyze the properties and performance of SAQDL. This method is the most effective and most common method for examination of laser characteristics. Figure 1 illustrates the energy conduction band diagram of CdZnO/ZnO/MgZnO SAQDL laser active region with the different carrier dynamics happened such as the generation, relaxation, recombination, and capture–escape processes of carriers. Firstly, the current is injected into SCH band, leading to the lifting of carrier density in the band by increasing the electron–hole pairs.

Thereafter, the carriers in SCH band relax into WL, and then into the quantum dot, and some of them recombine. We consider that the QD group contains  $n = 1, 2, \dots, 2M + 1$  subgroups based on their resonant energy at the inter-band transitions. In order to accurately describe the interaction of quantum dots with the various resonant energies through photons, the energy width of each group we consider is equal to the mode separation of the longitudinal cavity photon modes. Therefore, we take the mode separation in energy equal to (Sugawara et al. 2000):

$$\Delta E = ch/(2n_r L_{cav}) \quad (1)$$

where  $L_{cav}$  is the length cavity. The energy of the  $n$ th group is given by Sugawara et al. (2000):

$$E_n = E_{cv} - (M - n)\Delta E \quad (2)$$

$E_{cv}$  is the transition energy of the central group at  $n = M$ .

The rate equations for the density of carrier (electrons) and photons take the following form (Sugawara et al. 1999, 2000):

$$dN_s/dt = I/e - N_s/\tau_s - N_s/\tau_{sr} + N_w/\tau_{we} \quad (3)$$

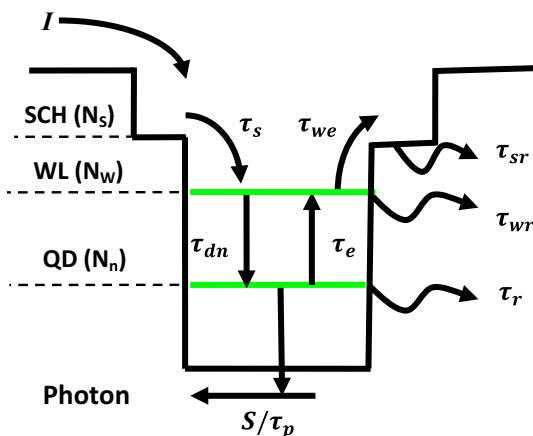


Fig. 1 Energy band diagram of the active region of the CdZnO/ZnO/MgZnO SAQDL with different carriers dynamics

Table 1 (a) Parameters used for simulation of SAQDL characteristics, (b) material parameters for ZnO, MgO, and CdO used in the present calculations

(a)			
Parameter	Symbol	Value	
Carrier relaxation lifetime	$\tau_0$	1–100 ps	
Carrier capture time in SCH region	$\tau_s$	1 ps	
Spontaneous emission lifetime in SCH	$\tau_{sr}$	2.8 ns	
Carrier recombination lifetime in QW	$\tau_{qr}$	3 ns	
Recombination lifetime in QD	$\tau_r$	2.8 ns	
Photon cavity lifetime	$\tau_p$	8.8 ps	
Number of QD layers	$n$	3	
Optical confinement factor	$\Gamma$	6 (%)	
Mirror reflectivities	$R_1, R_2$	30, 90 (%)	
Internal loss	$\alpha_i$	6 (cm <sup>-1</sup> )	
Stripe width	$d$	10 (mm)	
Total active region volume	$V_a$	$2 \times 10^{-16}$ (m <sup>3</sup> )	
Cavity length	$L_{cav}$	900 (um)	
QD coverage	$\xi$	20 (%)	
Spontaneous emission coupling efficiency	$\beta_{sp}$	$10^{-4}$	
(b)			
Parameter	ZnO	MgO	CdO
$a$ (Å)	3.25 <sup>a</sup>	3.322 <sup>d</sup>	4.6995 <sup>j</sup>
$c$ (Å)	5.205 <sup>a</sup>	5.062 <sup>e</sup>	5.739 <sup>k</sup>
$E_g$ (eV)	3.37 <sup>b</sup>	5.289 <sup>f</sup>	2.2 <sup>l</sup>
$b$ (eV)	/	0.87 <sup>f</sup>	0.94 <sup>m</sup>
$m_e$	0.23 $m_0^a$	0.28 $m_0^g$	0.21 $m_0^1$
$\epsilon_r$	8.1 <sup>c</sup>	9.6 <sup>h</sup>	21.9 <sup>n</sup>
$\Delta_{so}$ (meV)	13.59 <sup>a</sup>	32.169 <sup>i</sup>	68 <sup>o</sup>
$\Delta_{cr}$ (meV)	38 <sup>a</sup>	317.2 <sup>i</sup>	117 <sup>k</sup>

<sup>a</sup>Lambrech et al. (2002), <sup>b</sup>Goano et al. (2007), Saha and Alam (2017), <sup>c</sup>Coli and Bajaj (2001), <sup>d</sup>Schleife et al. (2006), <sup>e</sup>Ryu et al. (2006), <sup>f</sup>Fan et al. (2008), <sup>g</sup>Coleman et al. (2006), <sup>h</sup>Emanetoglu et al. (2003), <sup>i</sup>Xu et al. (2008), <sup>j</sup>Usharani et al. (2015), <sup>k</sup>Yan et al. (2012), <sup>l</sup>Vasheghani Farahani et al. (2013), <sup>m</sup>Schleife et al. (2011), <sup>n</sup>Yu et al. (2012), <sup>o</sup>Zhu et al. (2008)

$$dN_w/dt = N_s/\tau_s + \sum_n N_n/\tau_e D_g - N_w/\tau_{wr} - N_w/\tau_{we} - N_w/\bar{\tau}_d \quad (4)$$

$$dN_n/dt = N_w G_n/\tau_{dj} - N_n/\tau_r - N_n/\tau_e D_g - c\Gamma/n_r \sum_m g^{(1)} S_m \quad (5)$$

$$dS_m/dt = \beta N_m/\tau_r + c\Gamma/n_r \sum_n g^{(1)} S_m - S_m/\tau_p \quad (6)$$

where  $N_s$  and  $N_w$  are carrier numbers in the separated SCH layer and WL, respectively.  $N_n$  is the number of carriers in  $n$ th QD group, and  $S_m$  is the photon number of  $m$ th mode  $m = 1, 2, \dots, 2M + 1$ .  $I$  is the pump current, unit of charge is

defined by  $e$ , and  $\beta_{sp}$  is the spontaneous emission coupling efficiency at the lasing mode. The associated time constants  $\tau_s, \tau_{sr}, \tau_{qe}, \tau_e, \tau_{qr}, \tau_{dn}$  and  $\tau_r$  are diffusion in the SCH region, carrier recombination lifetime in SCH region, carrier re-excitation from WL to SCH region, carrier re-excitation from  $n$ th QD to WL, carrier recombination in WL, carrier relaxation into  $n$ th QD group, and recombination in  $n$ th QDs, respectively. In addition, the photon lifetime in the cavity  $\tau_s$  is written as:

$$\tau_s^{-1} = \left[ \frac{c}{n_r} \left( \alpha + \frac{\ln(1/R_1 R_2)}{2L_{cav}} \right) \right] \quad (7)$$

where  $c$  is the speed of light,  $n_r$  is the refractive index of active region,  $R_1$  and  $R_2$  are the cavity mirror reflectivities, and  $\alpha$  is the internal loss of cavity. The  $n$ th group dots

provide the  $m$ th mode photons a linear optical gain  $g_{mn}^{(1)}$  which is written by Sugawara et al. (2000):

$$g_{mn}^{(1)} = \frac{2\pi e^2 \hbar N_D}{cn_r \epsilon_0 m_0^2} \frac{|P_{cv}^\sigma|^2}{E_{cv}} (2P_n - 1) G_n B_{cv} (E_m - E_n) \quad (8)$$

where the coverage of QD  $\xi = N_D V_D$ ,  $N_D$  is the QD density and  $V_D$  is the dot volume  $V_D = \pi R^2 h/4$ .

$|P_{cv}^\sigma|^2$  is the transition matrix element of the inter-band recombination with  $|P_{cv}^\sigma|^2 = |I_{cv}|^2 M^2$ , where  $I_{cv}$  represents the overlap integral between the envelope functions of an electron and hole, and  $M^2 = \frac{m_0^2 E_g (E_g + \Delta)}{12 m_e (E_g + 2\Delta/3)}$ . Here,  $E_g$  is the band gap of bulk CdZnO material,  $m_e$  is the electron effective mass,  $\Delta$  is the

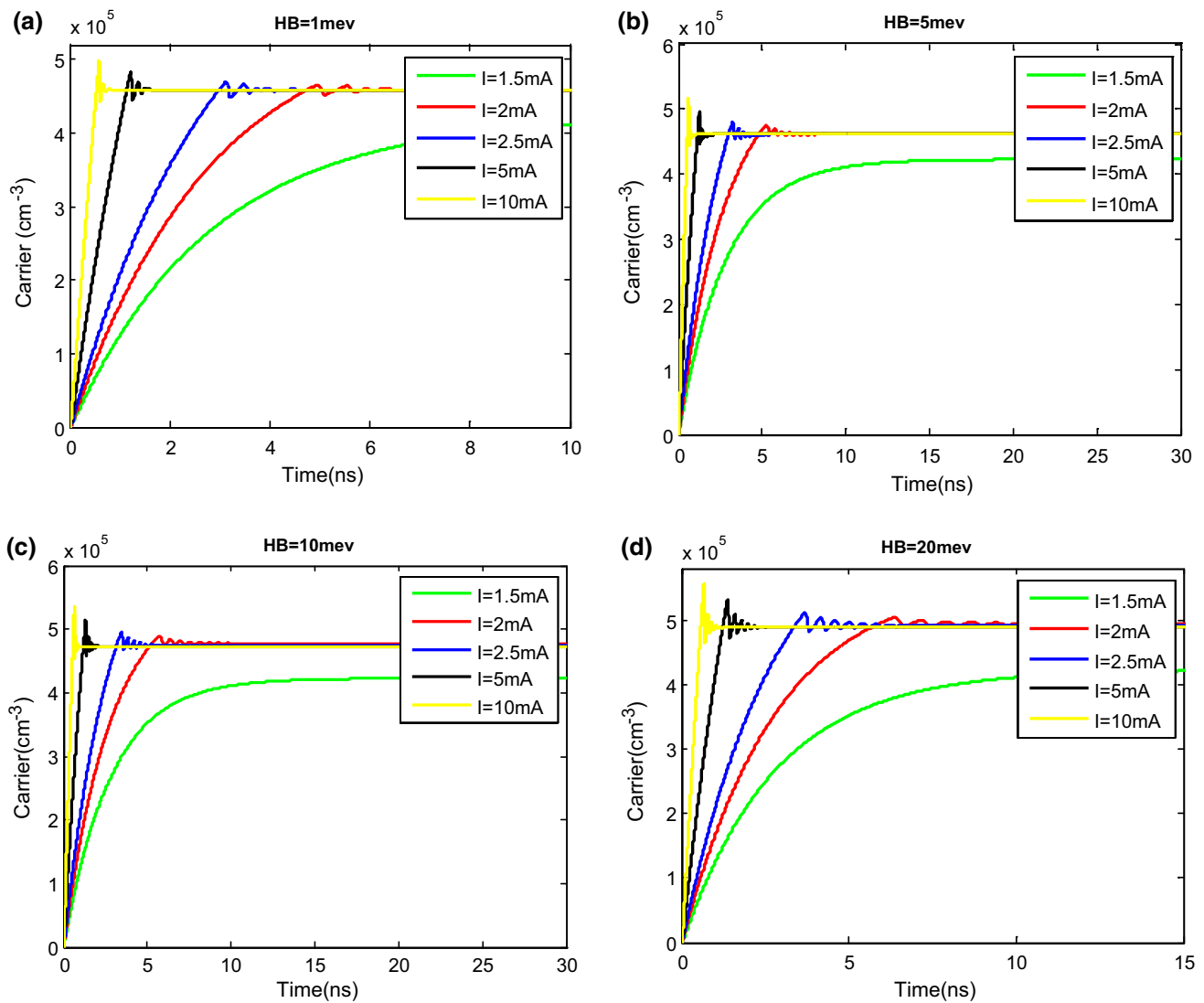


Fig. 2 Density of carrier for different injected currents and at various HBs a 1 meV, b 5 meV, c 10 meV, and d 20 meV

spin-orbit interaction energy of the QD material. The Lorentzian homogeneous broadening  $B_{cv}(E_m - E_n)$  is expressed as:

$$B_{cv}(E_n - E_{cv}) = (\hbar\Gamma_{cv}/\pi) / [(E_n - E_{cv})^2 + (\hbar\Gamma_{cv})^2] \quad (9)$$

$E_{cv}$  is the optical inter-band transition energy and the full width at half maximum FWHM is given as  $\Gamma_{cv} = 2\hbar\gamma_{cv}$  with  $\gamma_{cv}$  as scattering rate. The inhomogeneous broadening  $G_n$  of the  $n$ th subgroup is given as follows (Sugawara et al. 2000):

$$G_n(E_n - E_{cv}) = 1/\sqrt{2\pi}\xi_0 \exp[-(E_n - E_{cv})^2/2\xi_0^2] \quad (10)$$

where FWHM is given by  $\Gamma_0 = 2.35\xi_0$ .

The average carrier relaxation lifetime is given by Sugawara et al. (1999)

$$\bar{\tau}_d^{-1} = \sum_n \tau_{dn}^{-1} G_n = \sum_n \tau_0^{-1} (1 - P_n) G_n \quad (11)$$

We assume that the contributions of QD are distributed in an energy span. They are expressed as  $4\Gamma_0$  around  $E_{cv}$ . The carrier occupation probability of  $n$ th QD subgroup  $P_n$  (according to Pauli Exclusion Principle) is defined as (Sugawara et al. 2005)

$$P_n = N_n / (D_g N_D V_a G_n) \quad (12)$$

where  $N_n$  is the carrier number in the  $n$ th QD group,  $V_a$  is the total active region volume,  $D_g$  is the degeneracy of the QD ground state without spin and  $G_n$  is the percentage of the  $n$ th QD group within QD set. The parameters used in our simulation are listed in Table 1.

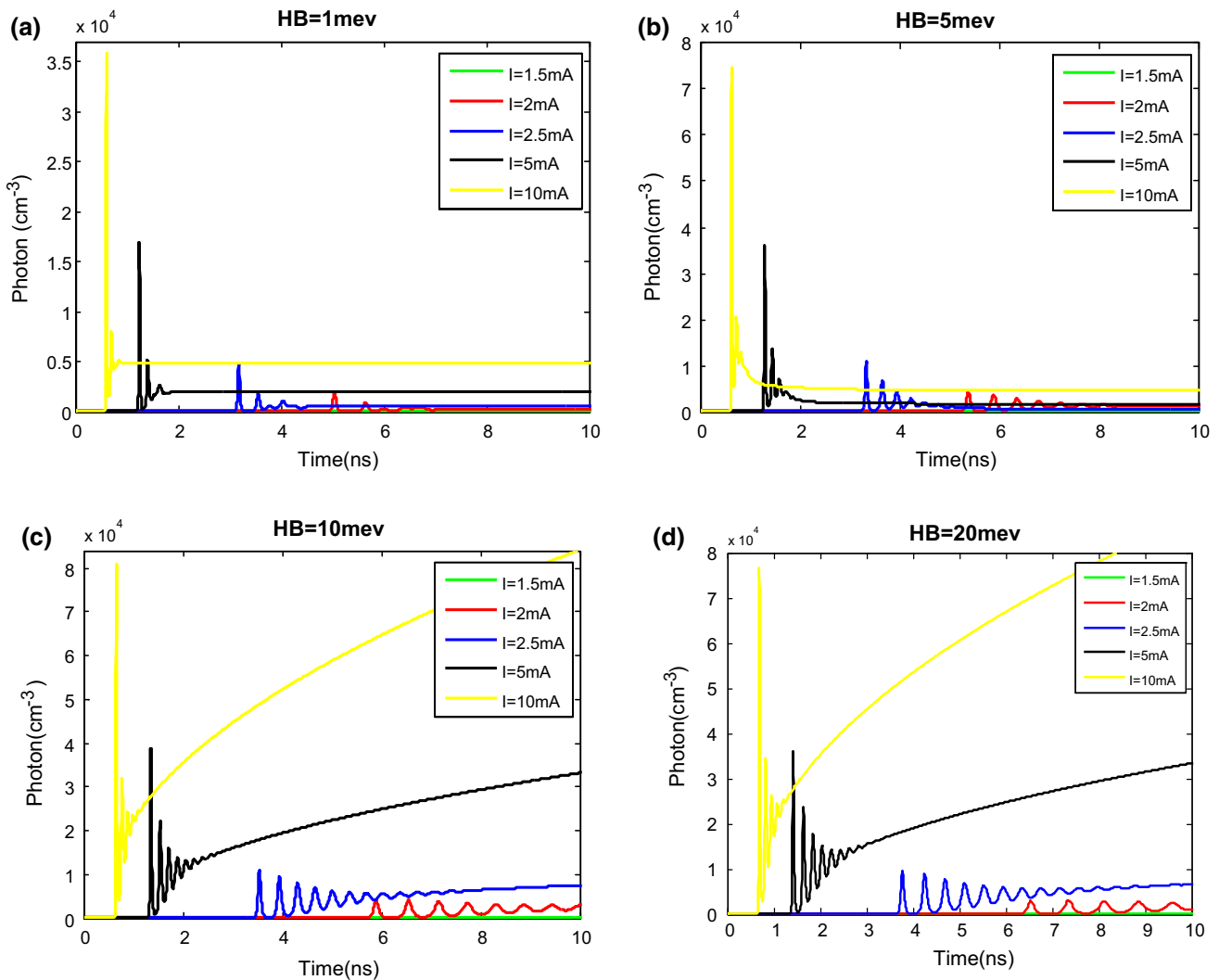
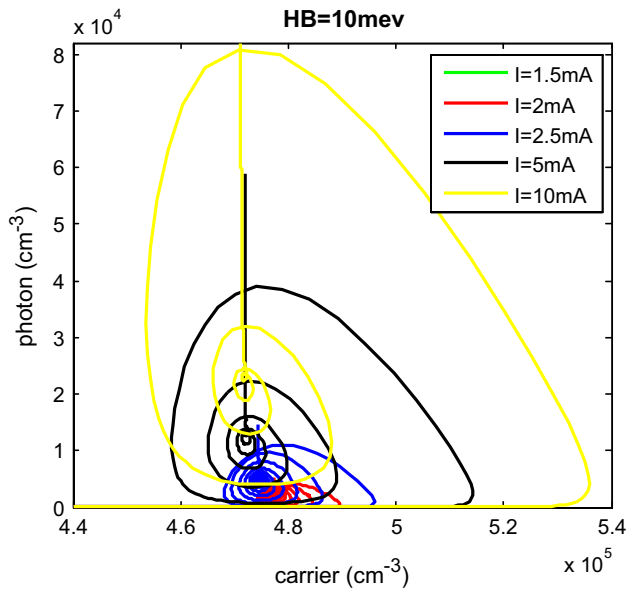


Fig. 3 Density of photons for different injected currents and at different HBs a 1 meV, b 5 meV, c 10 meV, and d 20 meV



**Fig. 4** Photon density versus carrier density for different injected currents at  $HB = 10$  meV

### 3 Results and Discussion

Using Runge–Kutta numerical method, we have solved the rate Eqs. (3)–(6). Figure 2 shows the carrier characteristics for various injection currents  $I = 1.5, 2, 2.5, 5$  and  $10$  mA at different FWHM's values of homogeneous broadening (a)  $HB = 1$  meV, (b)  $HB = 5$  meV, (c)  $HB = 10$  meV, and (d)  $HB = 20$  meV. It was clear that the turn-on delay decreases with the raise of injection current, against an increase in the relaxation oscillation magnitude and frequency. One can also notice that the magnitude of the relaxation oscillation increases for a larger FWHM of homogeneous broadening, while the frequency decreases.

Figure 3 shows the dynamic behavior of the photon density for different injection currents  $I = 2$  mA,  $2.5$  mA,  $5$  mA, and  $10$  mA at various FWHM of homogeneous broadening (a)  $HB = 1$  meV, (b)  $5$  meV, (c)  $10$  meV, and (d)  $20$  meV. It was obviously seen that when we increase the injection current, the steady-state photons increase, this becomes clearer in high values of the homogeneous broadening (Fig. 3c, d). This can be explained by that the increase in the injection current causes an increase in carriers in QDs which enhances the cavity lasing photons. This latter reaches its highest value for  $I = 10$  mA at  $HB = 10$  meV. These initial photons improve the stimulated emission rate, and then increase the lasing photons in the new steady state. This improvement in the stimulated emission rate leads to light amplification and reduce the time of the cavity photons, because the onset of early relaxation oscillation requires many carriers.

Moreover, we note that the increase in injection current causes a degradation of the turn-on delay and an increasing relaxation oscillation frequency and maximum magnitude. On the other hand, for the variation of FWHM's homogeneous broadening from  $1$  to  $10$  meV, the steady-state photons rise and reach a maximum value at  $10$  meV. Further, this HB value starts to decrease. The same behavior is noticed for the maximum of relaxation oscillation magnitude. This is due to the enhancement of the central group carriers. We also notice a clear increase in the threshold current, where the steady-state photons are significantly reduced at some injection currents, and this is evident for  $I = 1.5$  mA and  $I = 2$  mA, which almost vanishes at  $20$  meV, and in addition the lasing emission fails with it. In addition, the increase in FWHM homogeneous broadening increases the time required for lasing photons to reach steady state. The same conclusion is drawn from Fig. 4, which represents the variation of the photon density as a function of the carrier density for different injected currents at  $HB = 10$  meV. The photons density increases with the increase in carrier density through a conventional spiral form with an anticlockwise rotation; these forms reach their peak for the highest injected current.

Figure 5 shows the output power comparisons for different injected currents and at various HBs: (a)  $1$  meV, (b)  $5$  meV, (c)  $10$  meV, and (d)  $20$  meV. The origin of the energy is taken at  $E_{cv}$ , and the FWHM of IHB is  $15$  meV. It was obviously seen that when the injected current is increased, the lasing spectrums are expanded, and be more extensive for smaller HBs values. As for the output power, it increases by increasing the injected current and is more pronounced for higher values of HBs.

Figure 6 shows the output power versus the multi-longitudinal modes for different HBs and at  $I = 10$  mA. The origin of the energy is taken at  $E_{cv}$  and IHB is  $15$  meV. It was noticed that by raising the value of HB, the lasing spectrum peak is narrowing and the output power is increasing until it reaches a maximum at  $HB = 13$  meV. Beyond this HB value, this peak drops until it fades at the FWHM of HB  $130$  meV. In the same time, the lasing spectrum starts to expand and decrease gradually. Therefore, we can deduce that the more the injected current is sufficient (greater than the threshold current), the lasing spectrum occurs in a prominent and clear mode with the highest output power at a certain temperature (HB) approval and especially in this current. Thus, we conclude that lasing emissions (output power) are more extensive for HBs values near to IHB, and this output power increases by increasing the injected current. This variation in SAQDL performance is due to the increase in QD groups lying within the scope (FWHM) of HB of the central groups and to the decrease in the central modes number. As a consequence, there is an increase in the emitting carriers into the central modes. In this case, the lasing

occurs with a single prominent mode. Moreover, an increase in the temperature improves the thermal carrier escape from QDs to WL which enhances also the carrier emission rate within the central modes. Based on these results, we propose the possibility of single mode lasing in large injected currents; this is consistent with the results in Sugawara et al. (2000). Although there is a disagreement of these results with respect to temperature lasing, we see that HB has to be near or equal to IHB for any improvement of performances. The optical gain spectrum at different HBs (a) 1 meV, (b) 5 meV, (c) 10 meV, and (d) 20 meV for various injected currents is shown in Fig. 7. We note that the optical gain is not affected by changing the

current injected. There is also a slight extension of the optical gain spectrum by increasing current injected. The effect of HB on the optical gain is shown in Fig. 8 which represents the optical gain spectrum for different HBs and at  $I = 10$  mA. The optical gain narrows with the increase in HB until a value of HB about 13 meV. After this value, it starts to expand for higher values for HB. From this figure, we can deduce the modes lying at end out of FWHM of the optical gain spectrum. This behavior is in agreement with the results of Nahri (2012). In addition, enhancing HB does not elevate the peak of optical gain, and all modes find optical gains remain under the threshold gain.

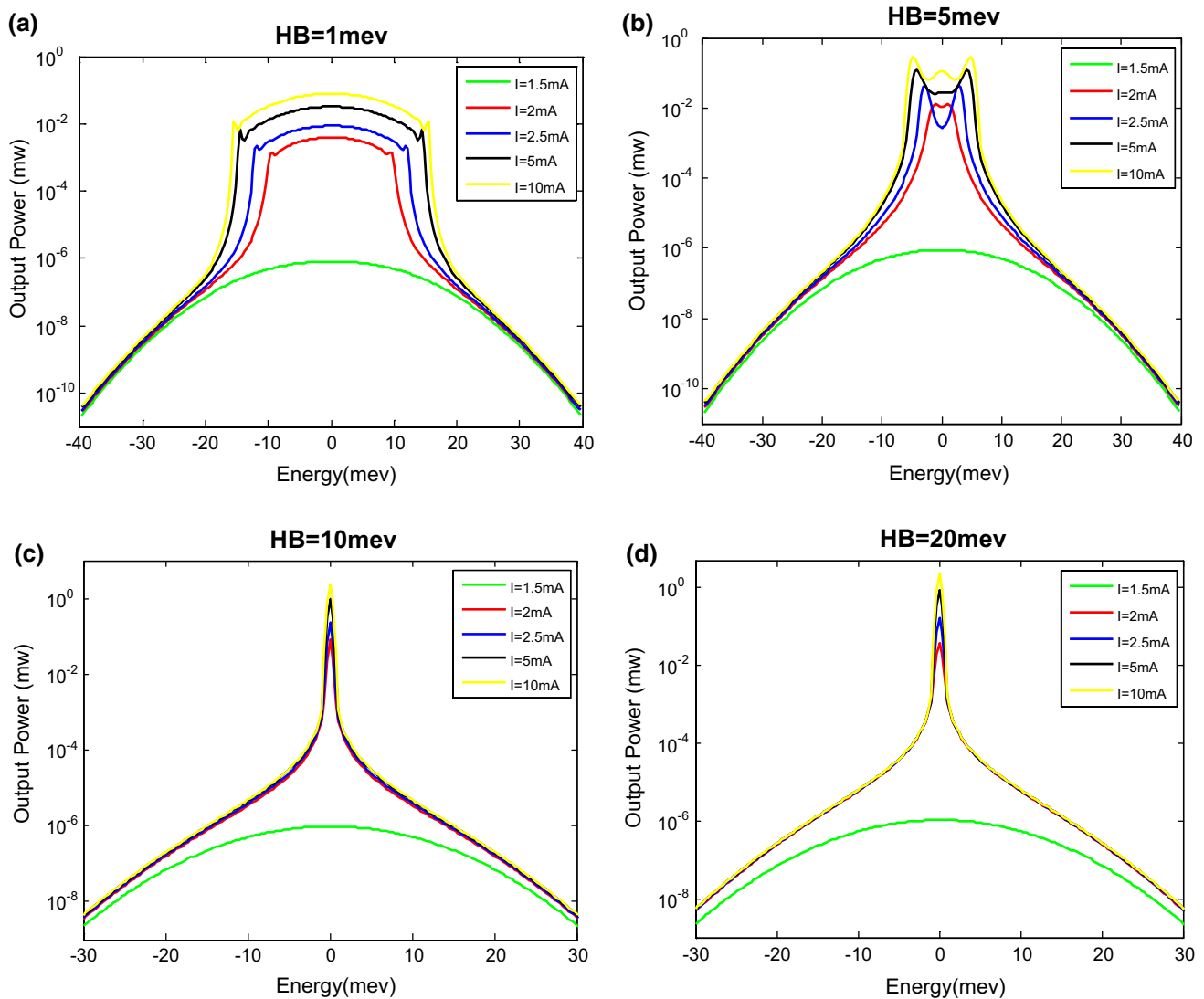


Fig. 5 Output power versus the multi-longitudinal modes for different injected currents and at various HBs: a 1 mA, b 5 mA, c 10 mA, and d 20 mA. The origin of the energy is taken at  $E_{cv}$  and IHB is 15 meV

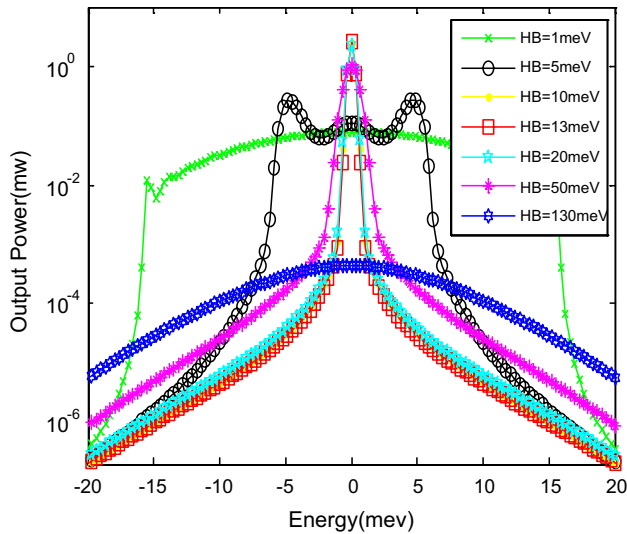


Fig. 6 Output power versus the multi-longitudinal modes for different HBs and at  $I=10$  mA. The origin of the energy is taken at  $E_{cv}$  and the IHB is 15 meV

### 4 Conclusion

In this work, we have studied and simulated a novel structure of SAQDL CdZnO/ZnO/MgZnO, we have solved the rate equations numerically using the fourth-order Runge–Kutta method, and analyzed some of the results obtained for this structure. In particular, we are interested to the dynamic and static characteristics, to the output power and optical gain properties in order to show the effect of the injected current and the homogeneous broadening on these characteristics. The results showed that by increasing the injected current and the homogeneous broadening HB, the dynamic characteristics and the steady-state photons are improved. We also found that for a particular injected current, the best lasing performance (lowest FWHM and highest output power) at a homogeneous broadening HB is comparable near or equal to the inhomogeneous broadening IHB. Through this study, we have showed that the structure based on ZnO

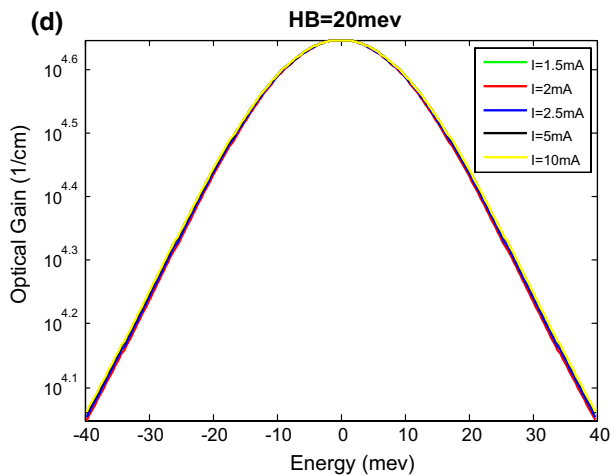
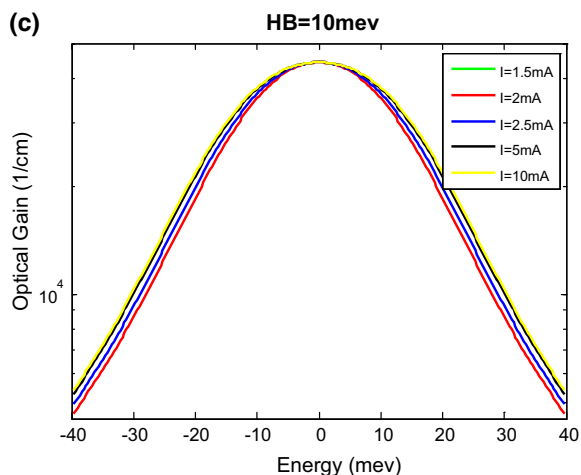
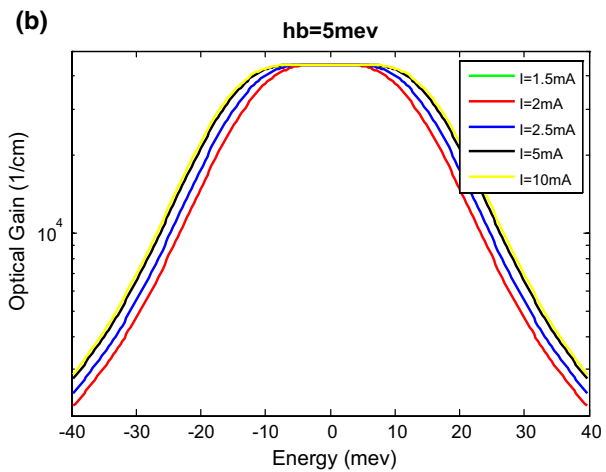
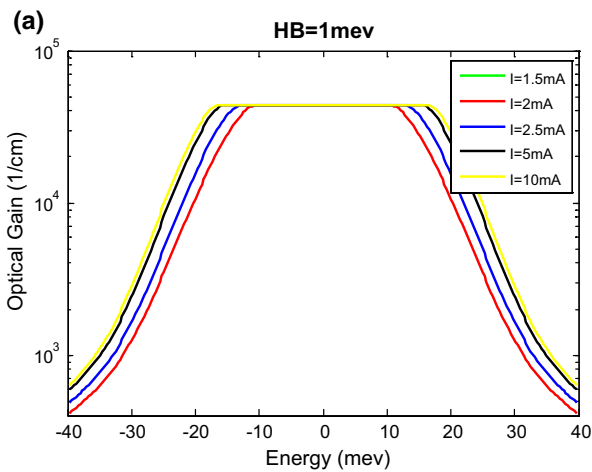
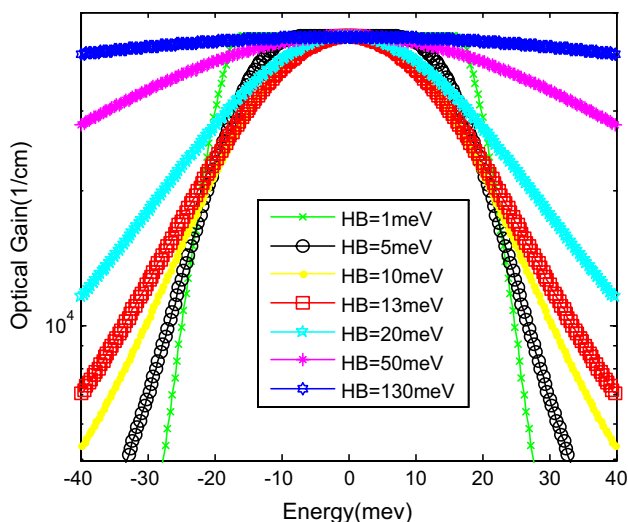


Fig. 7 Optical gain spectrum at different HBs a 1 meV, b 5 meV, c 10 meV, and d 20 meV for various injected currents. The origin of the energy is taken at  $E_{cv}$  and the IHB is 15 meV



**Fig. 8** The optical gain spectrum for different HBs and at  $I = 10$  mA. The origin of the energy is taken at  $E_{cv}$  and the IHB is 15 meV

possesses a promising potential in terms of performance. As a perspective, we hope these results will be validated experimentally.

## References

- Arakawa Y, Sakaki H (1998) Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current. *Appl Phys Lett* 40:939
- Bhattacharya P, Klotzkin D, Qasaimeh O, Zhou W, Krishna S, Zhu D (2000) High-speed modulation and switching characteristics of In(Ga)As–Al(Ga)As self-organized quantum-dot lasers. *IEEE J Sel Top Quantum Electron* 6(3):426–438
- Bhattacharyya D, Avrutin EA, Bryce AC, Marsh JH, Bimberg D, Heinrichsdorff F, Ustinov VM, Zaitsev SV, Ledentsov NN, Kop'ev PS, Alferov ZI, Onischenko AI, O'Reilly EP (1999) Spectral and dynamic properties of InAs–GaAs self-organized quantum-dot lasers. *IEEE J Sel Top Quantum Electron* 5(3):648–657
- Coleman V, Buda M, Tan HH, Jagadish C, Phillips M, Koike K, Sasa S, Inoue M, Yano M (2006) Observation of blue shifts in ZnO/ZnMgO multiple quantum well structures by ion-implantation induced intermixing. *Semicond Sci Technol* 21:25–28
- Coli G, Bajaj KK (2001) Excitonic transitions in ZnO/MgZnO quantum well heterostructures. *Appl Phys Lett* 78:2861
- Crowley MT, Naderi NA, Su H, Grillot F, Lester LF (2012) GaAs based quantum dot lasers. In: Coleman JJ, Bryce AC, Jagadish C (eds) *Semiconductors semimetals: advances in semiconductor lasers*, vol 86, 1st edn. Academic Press, New York, pp 371–417
- Emanetoglu NW, Muthukumar S, Wu P, Wittstruck RH, Chen Y, Lu Y (2003) Mg/sub<sub>x</sub>/Zn/sub<sub>1-x</sub>/O: a new piezoelectric material. *IEEE Trans Ultrason Ferroelectr Freq Control* 50:537
- Fan XF, Sun HD, Shen ZX, Jer-Lai Kuo LuYM (2008) A first-principle analysis on the phase stabilities, chemical bonds and band gaps of wurtzite structure  $A_xZn_{1-x}O$  alloys ( $A = Ca, Cd, Mg$ ). *J Phys Condens Matter* 20:235221
- Gioannini M, Sevega A, Montrosset I (2006) Simulations of differential gain and linewidth enhancement factor of quantum dot semiconductor lasers. *Opt Quantum Electron* 38:381–394
- Goano M, Bertazzi F, Penna M, Bellotti E (2007) Electronic structure of wurtzite ZnO: nonlocal pseudo-potential and ab initio calculations. *J Appl Phys* 102:083709
- Lambrecht W, Rodina AV, Limpijumngong S, Segall B, Meyer BK (2002) Valence-band ordering and magneto-optic exciton fine structure in ZnO. *Phys Rev B* 65:075207
- Mikhrin S, Kovsh A, Krestnikov I, Kozhukhov A, Livshits D, Ledentsov N, Shernyakov YM, Novikov I, Maximov M, Ustinov V (2005) High power temperature-insensitive 1.3  $\mu$ m InAs/InGaAs/GaAs quantum dot lasers. *Semicond Sci Technol* 20:340–342
- Nahri DG (2012) Simulation of output power and optical gain characteristics of self-assembled quantum-dot lasers: effects of homogeneous and inhomogeneous broadening, quantum dot coverage and phonon bottleneck. *Opt Laser Technol* 44:2436–2442
- Rafailov EU, Cataluna MA, Avrutin EA (2011) *Ultrafast lasers based on quantum dot structures: physics and devices*. Wiley, New York
- Ryu YR, Lee TS, Lubguban JA, Corman AB, White HW, Leem JH, Han MS, Park YS, Youn CJ, Kim WJ (2006) Wide-band gap oxide alloy: BeZnO. *Appl Phys Lett* 88:052103
- Saha U, Alam MK (2017) Proposition and computational analysis of a kesterite/kesterite tandem solar cell with enhanced efficiency. *RSC Adv* 7:4806–4814
- Schleife A, Fuchs F, Furthmüller J, Bechstedt F (2006) First-principles study of ground- and excited-state properties of MgO, ZnO, and CdO polymorphs. *Phys Rev B* 73:245212
- Schleife A, Rödl C, Furthmüller J, Bechstedt F (2011) Electronic and optical properties of  $Mg_xZn_{1-x}O$  and  $Cd_xZn_{1-x}O$  from ab initio calculations. *New J Phys* 13:085012
- Steiner T (2004) Semiconductor nanostructures for optoelectronic applications. *Sens Rev* 24:320–320
- Sugawara M, Willardson RK, Weber ER (1999) Self-assembled InGaAs/GaAs quantum dots. In: Sugawara M (ed) *Semiconductors and semimetals*, vol 60. Academic Press, San Diego, pp 1–350
- Sugawara M, Mukai K, Nakata Y, Ishikawa H, Sakamoto A (2000) Effect of homogeneous broadening of optical gain on lasing spectra in self assembled  $In_xGa_{1-x}As/GaAs$  quantum dot lasers. *Phys Rev B* 61:7595–7603
- Sugawara M, Hatori N, Ebe H, Ishida M (2005) Modeling room temperature lasing spectra of 1.3  $\mu$ m self-assembled InAs/GaAs quantum dot lasers: homogeneous broadening of optical gain under current injection. *J Appl Phys* 97:43523–43527
- Usharani K, Balu AR, Nagarethinam VS, Suganya M (2015) Characteristic analysis on the physical properties of nanostructured Mg-doped CdO thin films—doping concentration effect. *Prog Nat Sci Mater Int* 25:251–257
- Vasheghani Farahani SK, Muñoz-Sanjósé V, Zúñiga-Pérez J, McConville CF, Veal TD (2013) Temperature dependence of the direct band gap and transport properties of CdO. *Appl Phys Lett* 102:022102. <https://doi.org/10.1063/1.4775691>
- Xu Q, Zhang XW, Fan WJ, Li SS, Xia JB (2008) Electronic structures of wurtzite ZnO, BeO, MgO and p-type doping in  $Zn_{1-x}Y_xO$  ( $Y = Mg, Be$ ). *Comput Matter Sci* 44:72–78
- Yan Q, Rinke P, Winkelkemper M, Qteish A, Bimberg D, Scheffler M, Van de Walle CG (2012) Strain effects and band parameters in MgO, ZnO, and CdO. *Appl Phys Lett* 101:152105
- Yu KM, Mayer MA, Speaks DT, He H, Zhao R, Hsu L, Mao SS, Haller EE, Walukiewicz W (2012) Ideal transparent conductors for full spectrum photovoltaics. *J Appl Phys* 111:123505
- Zhu YZ, Chen GD, Ye H, Walsh A, Moon CY, Wei Su-Huai (2008) Electronic structure and phase stability of MgO, ZnO, CdO, and related ternary alloys. *Phys Rev B* 77:245209

# Simulation of electronic and optical properties of ZnO/MgZnO quantum dot laser

S. TALEB\*, B. SOUDINI, I. LAGRAA, H. ABID

*Applied Materials Laboratory (AML), University of Sidi Bel Abbès, Sidi Bel Abbès, Algeria*

In this work we report a modeling and numerical simulation of the carrier dynamics of ZnO/MgZnO of quantum dot lasers (QDLs). Our calculations are carried out by solving the set of seven rate equations for carriers and photons at four energy states using the fourth order of Runge-Kutta method in MATLAB software. Many properties of QDLs such as the photon density, output power and the small signal modulation response versus the time and injection current have been studied and discussed for the ground state (GS), first excited state (ES1), and second excited state (ES2). The modeling simulation validity is verified by comparison with other works. This work shows the advantage of ZnO/MgZnO QDLs to enhance the properties of laser.

(Received October 25, 2017; accepted April 8, 2019)

*Keywords:* Quantum dot laser, ZnO/MgZnO, Rate equations model

## 1. Introduction

Quantum dot (QD) is a semiconductor-based structure where the excitons are strongly confined in the three dimensions of space (3D), which induces a finer state density than in conventional structures. Discrete levels are created in QD by this confinement, that gives the QD properties similar to those of an atom, so we can consider the QDs as artificial atoms [1]. Until the mid 1980s, lasers with a thick active region of several microns were dominated the market. But it was only with the introduction of quantum well laser diodes and the sharp reduction in threshold current densities of the order of 40 to 50 A / cm<sup>2</sup> [2], obtained first by ZI Alferov, Nobel Prize in 2000, and the market for laser diodes exploded. In 1982, Y. Arakawa and H. Sakaki [3], of the University of Tokyo, theoretically studied the 3D confinement effect in the active area of QDs. QDLs have attracted much attention in recent years [4-6] because they present an excellent properties such as lower transparency current density [7], temperature insensitivity [8], high material gain [9], as well as high differential gain [10-11], and reduced linewidth enhancement factor (LEF or  $\alpha H$  -factor) at the lasing wavelength [12]. These superiorities mentioned of QDLs make them attractive configurations to be employed on the laser and communications promising optical fibers devices..Among the wide-gap semiconductors that received great attention in the last years, Zinc Oxide (ZnO) and its ternary alloys. ZnO is an II-VI compound semiconductor with a hexagonal wurtzite structure. In the last few years, ZnO gets much attention for its application in various fields such as in the area of green, blue, and ultraviolet (UV) light-emitting diodes (LEDs), semiconductor optical amplifier (SOA), and lasers [13-16], transparent high power electronics, optical waveguides and solar cells [17-18]. In addition, their potential advantages over III-V nitrides, such as substrate

availability, comparatively simpler growth and processing technologies, and larger exciton binding energy (60 meV against 25 meV for GaN) [19-20] even at room temperature which promotes the excitonic recombination [21].

In this paper, ZnO/Mg<sub>0.3</sub>Zn<sub>0.7</sub>O QDs are considered as an active region in a QD laser consisting of four energy levels for confined carriers. We assumed that all QDs are uniform according to the theoretical and experimental studies performed in references [22-24]. We have considered lens-shape ZnO QDs of diameter D=20 nm, height H=10 nm, and an MgZnO wetting layer of a thickness of 1 nm. In our study, we assumed that QDs are spaced enough to avoid the quantum tunneling effects, and the homogeneous and inhomogeneous effects are ignored. The QD include three energy states with two-fold degenerate ground state (GS) and double four-fold degenerate excited state (ES1, ES2). The numerical model used for ZnO/MgZnO QDL is based on a set of coupled rate equations, which consists of four energy states where three of them are joined in lasing. We used the 4<sup>th</sup> order of Runge-Kutta method in MATLAB software, to extract the laser characteristics such as output power-current (P-I), gain, time variation of the photon densities, the output power and the intensity modulation response.

## 2. Theoretical model

We have considered four energy levels which are belong to wetting layer (WL), second and first excited states (ES2) and (ES1), and the ground state (GS). The energy levels of the active region in QD laser for conduction band are shown in Fig.1. Fig. 1 shows the principle carrier dynamics in the conduction band as the cascade relaxation model of ZnO/MgZnO. The carriers are injected directly into the tank of the WL creating

consequently an injection current  $I$ . A portion of the pairs electron-hole created is captured on the second ES2 with a time of relaxation ( $\tau_{WL-ES2}$ ) while the other part recombines spontaneously. The carriers occupying the ES2 can then relax on ES1, escape into the tank of wetting layer ( $\tau_{ES2-WL}$ ) or recombine radiatively. The carriers already relaxed on ES1 can be released on the excited state ( $\tau_{ES1-ES2}$ ), recombine spontaneously or relax on the

ground state GS ( $\tau_{ES1-GS}$ ). A part of these last reissued carriers on the excited state ( $\tau_{GS-ES1}$ ), and the rest perform decay due to the spontaneous and Auger effects ( $\tau_r$ ), or contribute in stimulated recombination and generate laser photons (through the analysis of carrier dynamics within the QD).

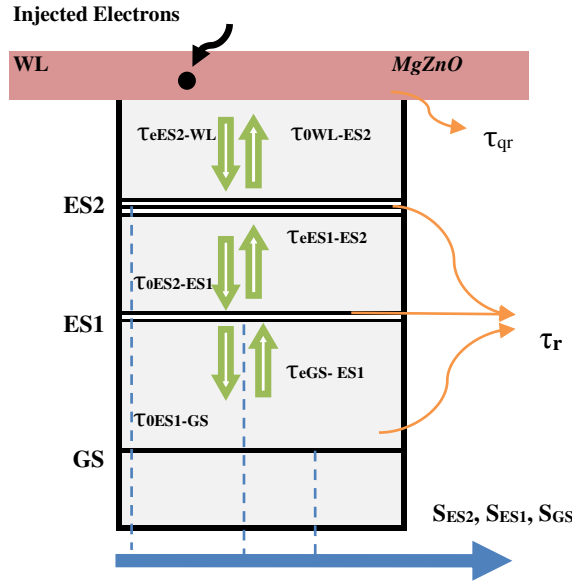


Fig. 1. Energy diagram of the laser active region of MgZnO/ZnO with the diffusion, recombination, and relaxation processes.

The QD laser numerical model is based on the seven coupled rate equations, through an analysis of carrier dynamics inside the QD. This model is divided into two types of equations: the first for electrons and the second for photons. The rate equations can be written as follow [25-26]:

$$\frac{dS_{GS}}{dt} = -\frac{S_{GS}}{\tau_s} + \Gamma v_g g_{GS} (2f_{GS} - 1) S_{GS} + \beta_{sp} \frac{N_{GS}}{\tau_{sp}} \quad (1)$$

$$\frac{dS_{ES1}}{dt} = -\frac{S_{ES1}}{\tau_s} + \Gamma v_g g_{ES1} (2f_{ES1} - 1) S_{ES1} + \beta_{sp} \frac{N_{ES1}}{\tau_{sp}} \quad (2)$$

$$\frac{dS_{ES2}}{dt} = -\frac{S_{ES2}}{\tau_s} + \Gamma v_g g_{ES2} (2f_{ES2} - 1) S_{ES2} + \beta_{sp} \frac{N_{ES2}}{\tau_{sp}} \quad (3)$$

$$\frac{dN_{GS}}{dt} = -\frac{N_{GS}}{\tau_r} - \Gamma v_g g_{GS} (2f_{GS} - 1) S_{GS} - \frac{N_{GS}}{\tau_{eGS}} (1 - f_{ES1}) + \frac{N_{ES1}}{\tau_{0ES1-GS}} (1 - f_{GS}) \quad (4)$$

$$\frac{dN_{ES1}}{dt} = -\frac{N_{ES1}}{\tau_r} - \Gamma v_g g_{ES1} (2f_{ES1} - 1) S_{ES1} + \frac{N_{GS}}{\tau_{eGS}} (1 - f_{ES1}) - \frac{N_{ES1}}{\tau_{0ES1-GS}} (1 - f_{GS}) + \frac{N_{ES2}}{\tau_{eES2-ES1}} (1 - f_{ES1}) - \frac{N_{ES1}}{\tau_{eES1}} (1 - f_{ES2}) \quad (5)$$

$$\frac{dN_{ES2}}{dt} = -\frac{N_{ES2}}{\tau_r} - \Gamma v_g g_{ES2} (2f_{ES2} - 1) S_{ES2} - \frac{N_{ES2}}{\tau_{eES2}} + \frac{N_{WL}}{\tau_c} (1 - f_{ES2}) - \frac{N_{ES2}}{\tau_{0ES2-ES1}} (1 - f_{ES1}) + \frac{N_{ES1}}{\tau_{eES1}} (1 - f_{ES2}) \quad (6)$$

$$\frac{dN_{WL}}{dt} = n_i \frac{I}{q} - \frac{N_{WL}}{\tau_{qr}} + \frac{N_{ES2}}{\tau_{eES2}} - \frac{N_{WL}}{\tau_c} (1 - f_{ES2}) \quad (7)$$

where  $N_{WL}$ ,  $N_{ES2}$ ,  $N_{ES1}$ , and  $N_{GS}$  are carrier densities in WL and the discrete levels of the quantum dot ES2, ES1 and GS, respectively.  $S_{ES2}$ ,  $S_{ES1}$ , and  $S_{GS}$  show the density of photons in ES2, ES1 and GS, respectively. The

terms  $-\frac{S_{ES2}}{\tau_s}$ ,  $-\frac{S_{ES1}}{\tau_s}$ , and  $-\frac{S_{GS}}{\tau_s}$  represent photon decay rates in ES2, ES1 and GS, respectively. In these terms,  $\tau_s^{-1}$  is the photon lifetime and it is given by

$$\tau_s^{-1} = c/n_r(\alpha + \ln(1/R_1R_2)/2L) \quad (8)$$

where  $n_r$  is the refractive index of the active region,  $\alpha$  is the internal loss of cavity,  $R_1$  and  $R_2$  are the cavity mirror reflectivity's,  $L$  is the cavity length, and  $c$  is the speed of light.

$\beta_{sp}N_m/\tau_{sp}$  indicates the photon generation rates provided by spontaneous recombination in the level  $m$  ( $m=GS$ , ES1 or ES2), with  $\beta_{sp}$  is spontaneous emission coupling factor, and  $\tau_{sp}$  is spontaneous recombination time.  $\Gamma v_g g_{GS}(2f_{GS}-1)S_{GS}$  and  $\Gamma v_g g_{ES1/ES2}(2f_{ES1/ES2}-1)S_{ES1/ES2}$  define photon generation rate and carrier decay rate due to stimulated emission, where  $\Gamma$  is optical confinement factor,  $v_g$  is group velocity, and  $g_m$  is gain of level  $m$  which is given by

$$g_m = \frac{k_m}{1 + \dot{\delta}_m S_m} \quad (9)$$

with  $\dot{\delta}_m$  is the gain factor written by

$$\dot{\delta}_m = \frac{q^2 p_{cv}^2 \tau_s \Gamma}{4\hbar V_a n_r m_0^2 \dot{\delta}_0 E_m \Gamma_{hom}} \quad (10)$$

and

$$k_m = \frac{2\pi q^2 \hbar \mu_m \xi p_{cv}^2}{cn_r m_0^2 \dot{\delta}_0 V_d \gamma_0 E_m} \quad (11)$$

where  $\gamma_0$  is the inhomogeneous broadening coefficient and  $\xi$  is the coverage of dots given by  $\xi = N_d V_d$  with  $N_d$  is the dot density, and  $V_d$  is the dot volume  $V_d = 2\pi(D/2)^2 H/3$ .

In the expression of gain factor,  $V_a$  is the active region volume and  $\Gamma_{hom}$  is the homogeneous broadening. The square of transition matrix element is given as  $|p_{cv}|^2 = |I_{cv}|^2 M^2$ , where  $I_{cv}$  represents the overlap

integral between the envelope functions of an electron and a hole, and  $M^2 = \frac{m_0^2 E_g (E_g + \Delta)}{12m_e (E_g + 2\Delta/3)}$  with  $E_g$  is the

band gap,  $m_e$  is the electron effective mass,  $\Delta$  is the spin-orbit interaction energy of the QD material. The terms  $-\frac{N_m}{\tau_r}$  and  $-\frac{N_{WL}}{\tau_{qr}}$  are decay rates of carrier density in

level  $m$  and WL, respectively,  $-N(1-f)/\tau_e$  indicate to the carrier escape rate from the current level to higher level, and  $\tau_e$  is carrier escape time. By the same,

$N(1-f)/\tau_0$  and  $-N(1-f)/\tau_0$  are carrier relaxation rates from higher level to current level and from current level to lower level, respectively.  $\tau_0$ , is the relaxation time. In addition,  $\frac{N_{WL}}{\tau_c}(1-f_{ES2})$  means the carrier

capture rate from WL to ES2, where  $\tau_c$  is carrier capture time. We define  $f_m$  as carrier occupation probability of level  $m$  (effect Pauli-blocking principle on the carriers transfer from one level to another), with  $f_m = N_m / \mu_m N_D$ ,  $N_D$  represents the total number of QDs, and  $\mu_m$  represents degeneracy of level  $m$ . By definition  $n_i$  as coefficient of injected current rate,  $I$  pumping current and  $q$  is unit charge. The expression of the different relaxation times is written as follows:

$$\tau_{eGS} = \mu_{ES1} / \mu_{GS} \tau_{ES1-GS} e^{(E_{ES1}-E_{GS})/k_B T} \quad (12)$$

$$\tau_{eES1} = \mu_{ES2} / \mu_{ES1} \tau_{ES2-ES1} e^{(E_{ES2}-E_{ES1})/k_B T} \quad (13)$$

$$\tau_{ES1-GS} = \tau_{0ES1-GS} / 1 - f_{GS} \quad (14)$$

$$\tau_{ES2-ES1} = \tau_{0ES2-ES1} / 1 - f_{ES1} \quad (15)$$

The parameters related to the bulk materials applied and all parameters used in our simulation are listed in Tables 1 and 2, respectively.

Table 1. ZnO and MgO parameters used in the present work

	a (Å)	c (Å)	Eg (eV)	b (eV)	$m_e$	$\epsilon_0$	$\Delta_{so}(me)$	$\Delta_{cr}(me)$
ZnO	3.25 [27]	5.205 [27]	3.37 [28]	--	0.23 $m_0$ [27]	8.1 [29]	13.59 [27]	38 [27]
MgO	3.199 [30]	4.11 [31]	5.289 [32]	0.87 [32]	0.28 $m_0$ [33]	9.6 [34]	32.169 [35]	317.2 [35]

Table 2. Some parameters used in the simulation

Symbols	Definitions	Values
Carrier injection rate	$n_i$	0.9
Optical confinement factor	$\Gamma$	0.01
Spontaneous emission coupling factor	$\beta_{sp}$	$1 \times 10^{-4}$
Optical loss	$\alpha_l$	$6 \times 10^2 \text{ m}^{-1}$
Cavity's reflectivity of mirrors	$R_1, R_2$	0.3
Decay time in WL	$\tau_{qr}$	$5 \times 10^{-9} \text{ s}$
Decay time in es2 ES1 GS	$\tau_r$	$5 \times 10^{-9} \text{ s}$
Carrier capture time from WL to ES2	$\tau_c$	$2 \times 10^{-12} \text{ s}$
Relaxation from ES2 to ES1	$\tau_{0ES2-ES1}$	$2 \times 10^{-12} \text{ s}$
Relaxation time for ES1 to GS	$\tau_{0ES1-GS}$	$12 \times 10^{-12} \text{ s}$
Spontaneous recombination time	$\tau_{sp}$	$5 \times 10^{-10} \text{ s}$
Degeneracy	$\mu_{GS}, \mu_{ES1}, \mu_{ES2}$	2, 4, 6
Cavity width	w	$1 \times 10^{-5} \text{ m}$
Active region length	L	$15 \times 10^{-4} \text{ m}$
Homogenous broadening factor	$\Gamma_{hom}$	$1 \times 10^{-2} \text{ eV}$
Inhomogeneous broadening factor	$\gamma_0$	$2 \times 10^{-2} \text{ eV}$
Energy Separation ES2-ES1	$E_{ES2} - E_{ES1}$	0.058 eV
Energy Separation ES1-GS	$E_{ES1} - E_{GS}$	0.053 eV

To study the modulation of response QDL, the rate equations are linearized by a modified small-signal analysis [36]. Considering  $I$ ,  $N_n$  ( $n=WL$  or  $ES1$  or  $ES2$  or  $GS$ ) and  $S_m$  as dynamic variables and in order to simplify the model,  $g_m$  are assumed to be constant. The current modulation and the corresponding carrier and photon variations are as follows:

$$\begin{aligned} I(t) &= I_1 e^{j\omega t} \\ N_n(t) &= N_{n,1} e^{j\omega t} \\ S_m(t) &= S_{m,1} e^{j\omega t} \end{aligned} \quad (16)$$

where  $\omega$  is the modulation frequency.

Using (12) in the differential rate equations, we obtain the matrix A:

$$A = \begin{bmatrix} A11 + j\omega & 0 & 0 & A14 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A22 + j\omega & 0 & 0 & A25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A33 + j\omega & 0 & 0 & A36 & 0 \\ A41 & 0 & 0 & A44 + j\omega & A45 & 0 & 0 \\ 0 & A52 & 0 & A54 & A55 + j\omega & A56 & 0 \\ 0 & 0 & A63 & 0 & A65 & A66 + j\omega & A67 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A76 & A77 + j\omega \end{bmatrix} \quad (17)$$

$$A * \begin{bmatrix} S_{GS,1} \\ S_{ES1,1} \\ S_{ES2,1} \\ N_{GS,1} \\ N_{ES1,1} \\ N_{ES2,1} \\ N_{WL,1} \end{bmatrix} = \frac{n_i \mathbf{II}}{\mathbf{q}} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

with

$$\begin{aligned} A11 &= -\frac{1}{\tau_s} - \Gamma v_g g_{GS} (2f_{GS} - 1), & A14 &= -\frac{\beta_{sp}}{\tau_{sp}} - \frac{2\Gamma v_g g_{GS}}{\mu_{GS} N_D} S_{GS}, & A22 &= -\frac{1}{\tau_s} - \Gamma v_g g_{ES1} (2f_{ES1} - 1), \\ A25 &= -\frac{\beta_{sp}}{\tau_{sp}} - \frac{2\Gamma v_g g_{ES1}}{\mu_{ES1} N_D} S_{ES1}, & A33 &= \frac{1}{\tau_s} - \Gamma v_g g_{ES2} (2f_{ES2} - 1), & A36 &= -\frac{\beta_{sp}}{\tau_{sp}} - \frac{2\Gamma v_g g_{ES2}}{\mu_{ES2} N_D} S_{ES2}, \\ A41 &= \Gamma v_g g_{GS} (2f_{GS} - 1), & A44 &= \frac{1}{\tau_r} + \frac{2\Gamma v_g g_{GS}}{\mu_{GS} N_D} S_{GS} + \frac{(1 - f_{ES1})}{\tau_{eGS}} + \frac{1}{\tau_{0ES1-GS} \mu_{GS} N_D} N_{ES1}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
A45 &= -\frac{N_{GS}}{\tau_{eGS}\mu_{ES1}N_D} - \frac{1-f_{GS}}{\tau_{0ES1-GS}}, & A52 &= \Gamma v_g g_{ES1} (2f_{ES1} - 1), & A54 &= -\frac{(1-f_{ES1})}{\tau_{eGS}} + \frac{N_{ES1}}{\tau_{0ES1-GS}\mu_{GS}N_D}, \\
A55 &= \frac{1}{\tau_r} + \frac{2\Gamma v_g g_{ES1}}{\mu_{ES1}N_D} S_{ES1} + \frac{N_{GS}}{\tau_{eGS}\mu_{ES1}N_D} + \frac{1-f_{GS}}{\tau_{0ES1-GS}} + \frac{N_{ES2}}{\tau_{eES2-ES1}\mu_{ES1}N_D} + \frac{1-f_{ES2}}{\tau_{eES1}}, \\
A56 &= -\frac{1-f_{ES1}}{\tau_{eES2-ES1}} - \frac{N_{ES1}}{\tau_{eES1}\mu_{ES2}N_D}, & A63 &= \Gamma v_g g_{ES2} (2f_{ES2} - 1), & A65 &= -\frac{N_{ES2}}{\tau_{0ES2-ES1}\mu_{ES1}N_D} - \frac{1-f_{ES2}}{\tau_{eES1}}, \\
A66 &= \frac{1}{\tau_r} + \frac{2\Gamma v_g g_{ES2}}{\mu_{ES2}N_D} S_{ES2} + \frac{1}{\tau_{eES2}} + \frac{N_{WL}}{\tau_{c\mu_{ES2}N_D}} + \frac{1-f_{ES1}}{\tau_{0ES2-ES1}} + \frac{N_{ES1}}{\tau_{eES1}\mu_{ES2}N_D}, & A67 &= -\frac{1-f_{ES2}}{\tau_c}, \\
A76 &= -\frac{1}{\tau_{eES2}} - \frac{N_{WL}}{\tau_c\mu_{ES2}N_D}, & A77 &= \frac{1}{\tau_{qr}} + \frac{1-f_{ES2}}{\tau_c}
\end{aligned}$$

To obtain the small signal carrier in each state, we can apply the *Cramer rule* as follows

$$S_{GS,1} = \frac{\begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 & A14 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A22+J\omega & 0 & 0 & A25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A33+J\omega & 0 & 0 & A36 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A44+J\omega & A45 & 0 & 0 \\ 0 & A52 & 0 & A54 & A55+J\omega & A56 & 0 \\ 0 & 0 & A63 & 0 & A65 & A66+J\omega & A67 \\ \frac{n_i \Pi}{q} & 0 & 0 & 0 & 0 & A76 & A77+J\omega \end{vmatrix}}{\det A},$$

$$S_{ES1,1} = \frac{\begin{vmatrix} A11+J\omega & 0 & 0 & A14 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A33+J\omega & 0 & 0 & A36 & 0 \\ A41 & 0 & 0 & A44+J\omega & A45 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A54 & A55+J\omega & A56 & 0 \\ 0 & 0 & A63 & 0 & A65 & A66+J\omega & A67 \\ 0 & \frac{n_i \Pi}{q} & 0 & 0 & 0 & A76 & A77+J\omega \end{vmatrix}}{\det A},$$

$$S_{ES2,1} = \frac{\begin{vmatrix} A11+J\omega & 0 & 0 & A14 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A22+J\omega & 0 & 0 & A25 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & A36 & 0 \\ A41 & 0 & 0 & A44+J\omega & A45 & 0 & 0 \\ 0 & A52 & 0 & A54 & A55+J\omega & A56 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A65 & A66+J\omega & A67 \\ 0 & 0 & \frac{n_i \Pi}{q} & 0 & 0 & A76 & A77+J\omega \end{vmatrix}}{\det A}$$

With  $\det A$  is the determinant of the matrix  $A$ .

### 3. Simulation results and discussions

Fig. 2 shows the dynamic behavior of the photons of ZnO/MgZnO QD laser for three levels of QD (GS, ES1 and ES2) with various injected currents ( $I = 0.01, 0.02, 0.03$  and  $0.05$  A). From this figure we can see that the time delay decreases with the increase of the pumping current. This variation means that the effective carrier lifetime is reduced [37]. This analysis is clearer in Fig. 3, which represents photon density as a function of electron density

of GS. As shown in Fig. 2 a, b, and c, the photon density for the three levels increases until stable states. Before this stability we can see rating relaxation oscillations in the early stages of flow of injection. This is due to additional carriers created by the injection current inside quantum dots. Moreover, when we increase the intensity of injection current, the threshold current decreases. We also note that the intensity of the photon generated at the GS level is higher than at ES1 and ES2.

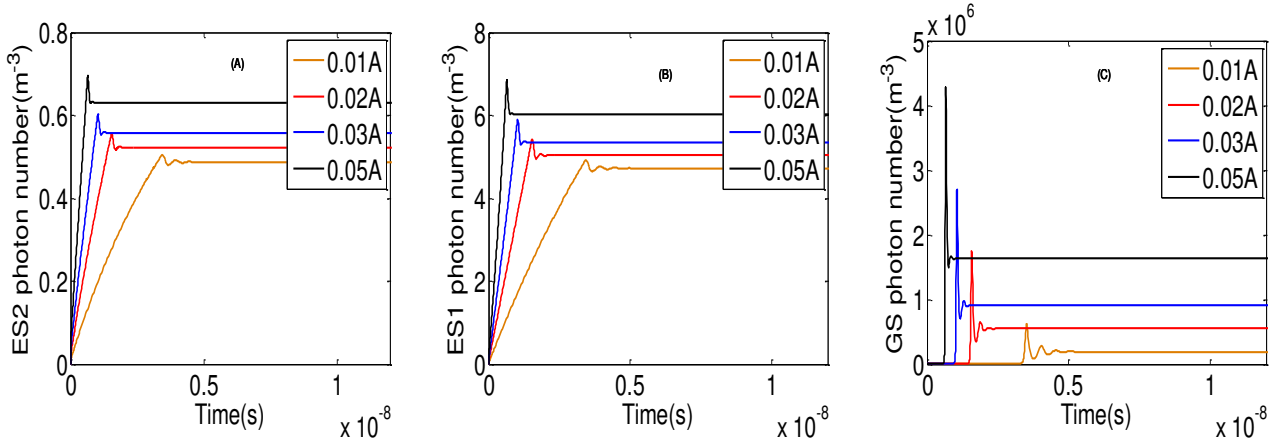


Fig. 2. Time variation of photon density for the (A) ES2, (B) ES1 and (C) GS states for different injection currents  $I=0.01, 0.02, 0.03$ , and  $0.05$  A.

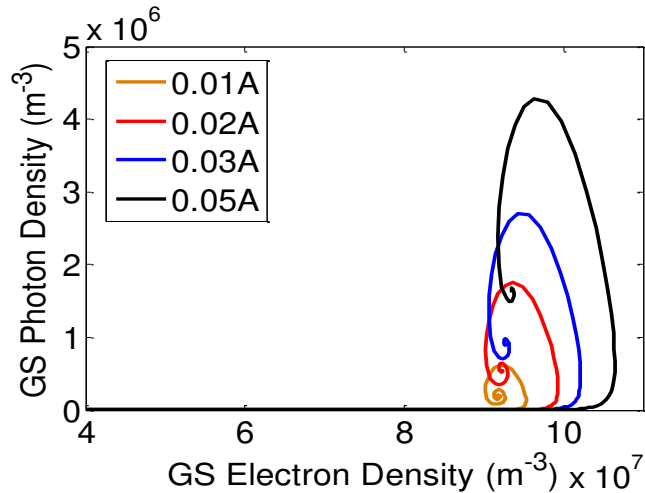


Fig. 3. Photon density vs. electron density of GS

#### 3.1. Output power

The output power of different states  $m$  is given by:

$$P_{\text{out}-m} = S_m E_m / \tau_s \quad (18)$$

Fig. 4 exhibits the output power of ZnO/MgZnO QD laser for three discrete levels (GS, ES1 and ES2) as a function of time for different injected current ( $I = 10, 20, 30$  and  $50$  mA). It was clear that the structure presents a higher output power at GS level (Fig. 4 c) than the others levels (Fig. 4 a and b) whatever the value of the injected

current  $I$ . In the three parts the value of the power is directly proportional to the intensity of the injection. On the other hand, we can observe that the switching times decrease with the increase of current injection.

After the current injection, the carriers of GS start to emit photons until the GS related emission output gets saturation. At this moment, the carriers of ES1 emit photons similarly until the saturation and then ES2 starts emission. Fig. 5 displays the output power characteristic curve versus injection currents where we have considered the threshold current  $I_{\text{th}}$  equals to  $10^{-13}$ ,  $0.56$  and  $4.1$  A for the GS, ES1 and ES2, respectively.

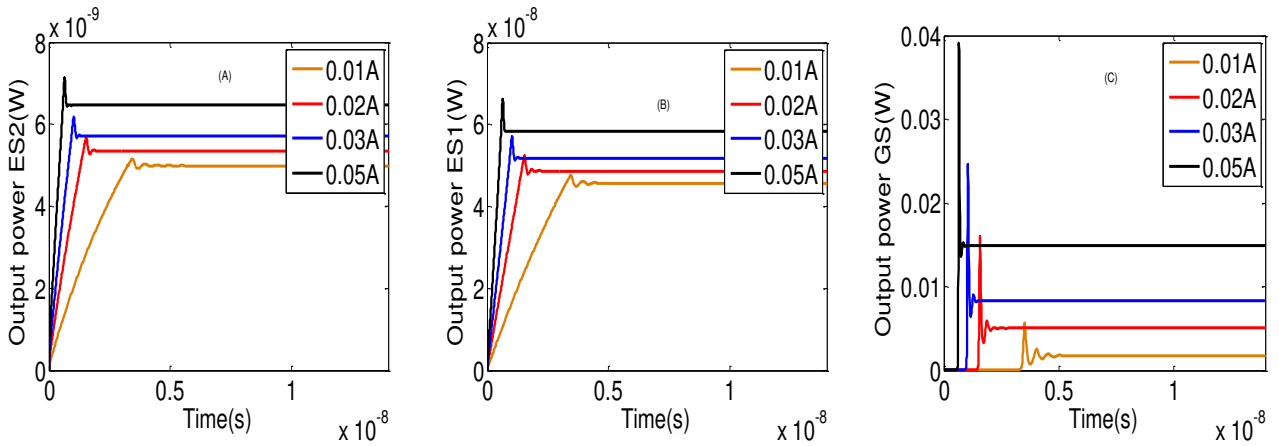


Fig. 4. Laser output power vs. time for the (a) ES2, (b) ES1 and (c) GS states for different injection currents  $I = 0.01, 0.02, 0.03,$  and  $0.05$  A

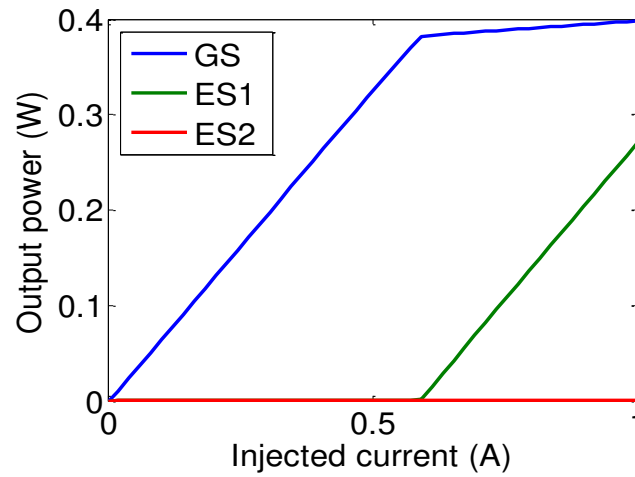


Fig. 5. Output power characteristic curve vs. injection currents

### 3.2. Optical gain

The optical gain for different levels  $m$  is written:

$$Gain_m = \frac{\Gamma K_m \left( \frac{2N_m}{\mu_m N_D} - 1 \right)}{1 + \partial_m S_m} \quad (19)$$

Fig. 6 shows the gain characteristic versus injection currents for the three energy states (GS, ES1 and ES2). At low currents, we notice that the gain is negative for all three energy levels where the GS state reached the saturation of about  $\sim 2 \times 10^4$   $\text{cm}^{-1}$  before the ES1 and ES2 levels.

Fig. 7 represents the low signal modulation response versus modulation frequency under the effect of injected current  $I$  ( $I = 0.01, 0.02, 0.03$  and  $0.05$  A) for GS, ES1, and ES2 states. It can be seen that the increase of the current injection leads to a 3dB modulation bandwidth for the

three levels. The optical power inside the cavity boots with injection current, which produces a higher relaxation frequency and therefore the bandwidth modulation, is extended.

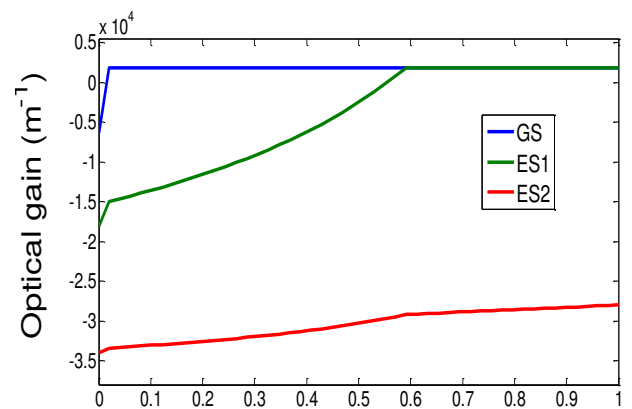


Fig. 6. Gain characteristic curve vs. injection currents

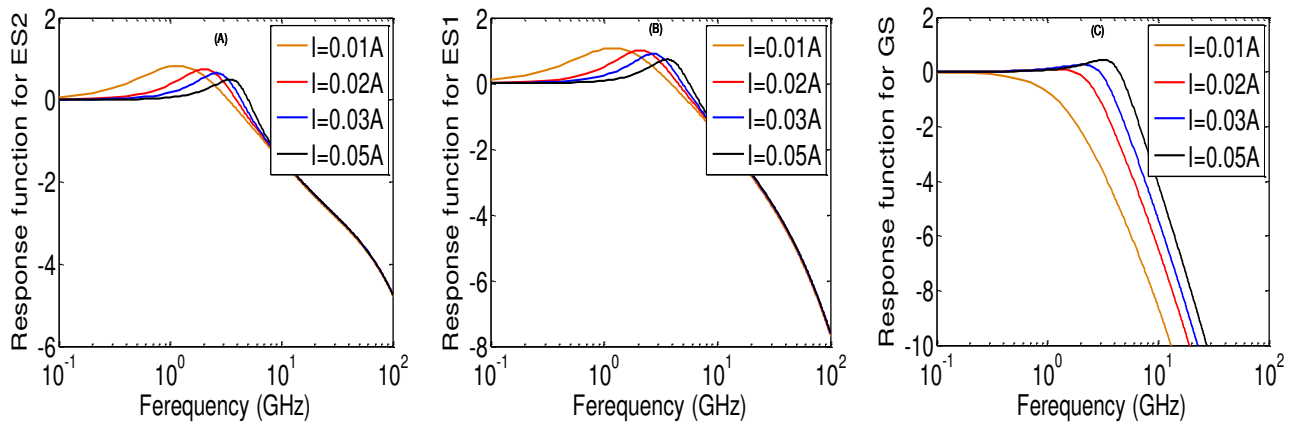


Fig. 7. Small signal modulation response at various injection currents  $I$  for (A) ES, (B) ES2, and (C) GS states

#### 4. Conclusion

In this paper, the internal mechanism of ZnO/MgZnO QDL has been numerically modeled and simulated. Our results have shown that by increasing the injection current, the switching-on and stability time decrease. Furthermore, the threshold currents and the photon densities for three levels (GS, ES1 and ES2) increase until get saturation. The immediate consequence of this resulting effect is the higher relaxation frequency and therefore the extension of the bandwidth modulation. Finally, the obtained results show that ZnO/MgZnO QDL presents promising properties compared to those obtained for InAs/GaAs [25].

#### Acknowledgements

The research contained in this paper has been supported by the Applied Material Laboratory (AML), university Research center, University Djillali Liabes of Sidi BelAbbes, Algeria.

#### References

- [1] T. Steiner, *Sensor Review* **24**(3), 320 (2004).
- [2] Z. I. Alferov, S. V. Ivanov, P. S. Kopev, N. N. Ledentsov, M. E. Lutsenko, M. I. Nemenov, B. Y. Meltser, V. M. Ustinov, S. V. Shaposhnikov, *Sov. Phys. Semicond.* **24**, 92 (1990).
- [3] Y. Arakawa, H. Sakaki, *Appl. Phys. Lett.* **40**, 939 (1982).
- [4] E. U. Rafailov, M. A. Cataluna, E. A. Avrutin, *Physics and Devices*, Wiley, New York, 2011.
- [5] M. Sugawara, R. K. Willardson, E. R. Weber, *Semiconductors and Semimetals*, Academic Press (1999).
- [6] M. Gioannini, A. Sevega, I. Montrosset, *Opt. Quantum Electron* **38**(4), 381 (2006).
- [7] G. T. Liu, A. Stintz, H. Li, K. J. Malloy, L. F. Lester, *Electron. Lett.* **35**(14), 1163 (1999).
- [8] S. S. Mikhrin, A. Kovsh, I. Krestnikov, A. Kozhukhov, D. Livshits, N. Ledentsov, Y. M. Shernyakov, I. Novikov, M. Maximov, V. Ustinov, *Semicond Sci Technol.* **20**(5), 340 (2005).
- [9] M. V. Maximov, N. N. Ledentsov, *Nanoscience and Nanotechnology*, CRC Press, 3109 (2004).
- [10] P. Bhattacharyya, A. A. Avrutin, A. C. Bryce, J. H. Marsh, D. Bimberg, F. Heinrichsdorff, V. M. Ustinov, S. V. Zaitsev, N. N. Ledentsov, P. S. Kopev, Z. I. Alferov, A. I. Onischenko, E. P. O'Reilly, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **5**(3), 648 (1999).
- [11] P. Bhattacharyya, D. Klotzkin, O. Qasaimeh, W. Zhou, S. Krishna, D. Zhu, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron* **6**(3), 426 (2000).
- [12] M. T. Crowley, N. A. Naderi, H. Su, F. Grillot, L. F. Lester, *Laser, Semiconductors and Semimetals: Advances Semiconductor Lasers* **86**, 371 (2012).
- [13] S. Kalusniak, S. Sadofev, J. Puls, F. Hannenberger, *Laser Photon. Rev.* **3**, 233 (2009).
- [14] Y. S. Choi, J. W. Kang, D. K. Hwang, S. J. Park, *IEEE Trans. Electron. Dev.* **57**(1), 26 (2010).
- [15] M. A. Al-Mossawi, A. G. Al-Shatravi, A. H. Al-Khursan, *Insciencas J.* **2**, 52 (2012).
- [16] M. Abdullah, A. H. Al-Khursan, R. A. Al-Ansari, *Recent Patents on Electrical Engineering* **2**, 226 (2009).
- [17] S. J. Pearton, D. P. Norton, K. Ip, Y. W. Heo, T. Steiner, *Superlattices Microstruct.* **34** (1-2), 3 (2003).
- [18] W. W. Wenas, A. Yamada, K. Takahashi, M. Yoshino, M. Konagai, *J. Appl. Phys.* **70**, 7119 (1991).
- [19] Z. K. Tang, G. K. L. Wong, P. Yu, M. Kawasaki, A. Ohtomo, H. Koinuma, Y. Segawa, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 3270 (1998).
- [20] B. K. Sonawane, M. P. Bhole, D. S. Patil, *Optoelectron. Adv. Mat.* **2**(11), 714 (2008)
- [21] T. Makino, C. H. Chia, N. T. Tuan, H. D. Sun, Y. Segawa, M. Kawasaki, A. Ohtomo, K. Tamura, H. Koinuma, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 975 (2000).
- [22] M. Gioannini, *IEEE Journal of Quantum Electronics* **42**(3), 331 (2006).

- [23] M. Zielinski, M. Korkusiński, P. Hawrylak, *Physical Review B* **81**(8), 085301 (2010).
- [24] H. Jiang, J. Singh, *Applied Physics Letters* **71**(22), 3239 (1997).
- [25] S. F. Lv, I. Montrosset, M. Gioannini, S. Song, J. Ma, *Optoelectronics Letters* **7**(2), 122 (2011).
- [26] M. Sugawara, K. Mukai, Y. Nakata, H. Ishikawa, A. Sakamoto, *Physical Review B* **61**, 7595 (2000).
- [27] W. Lambrecht, A. V. Rodina, S. Limpijumnong, B. Segall, B. K. Meyer, *Phys. Rev. B* **65**, 075207 (2002).
- [28] M. Goano, F. Bertazzi, M. Penna, E. Bellotti, *J. Appl. Phys.* **102**, 083709 (2007).
- [29] G. Coli, K. K. Bajaj, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 2861 (2001).
- [30] W. R. L. Lambrecht, S. Limpijumnong, B. Segall, *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.* **4S1**, G6.8 (1999).
- [31] Y. R. Ryu, T. S. Lee, J.A. Lubguban, A. B. Corman, H. W. White, J. H. Leem, M. S. Han, Y. S. Park, C. J. Youn, W. J. Kim, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 052103 (2006).
- [32] X. F. Fan, H. D. Sun, Z. X. Shen, J. L. Kuo, Y. M. Lu, *J. Phys: Condens. Matter* **20**, 235221 (2008).
- [33] V. Coleman, M. Buda, H. Tan, C. Jagadish, M. Phillips, K. Koike, S. Sasa, M. Inoue, M. Yano, *Semicond. Sci. Technol.* **21**, L25 (2006).
- [34] N. W. Emanetoglu, S. N. Muthukumar, P. Wu, R. H. Wittstruck, Y. Chen, Y. Lu, *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelect. Freq. Contr.* **50**, 537 (2003).
- [35] Q. Xu, X. W. Zhang, W. J. Fan, S. S. Li, J. B. Xia, *Compos. Mater. Sci.* **44**, 72 (2008).
- [36] C. Wang, F. Grillot, J. Even, *SPIE Photonics Europe*, Brussels, Belgium, (2012).
- [37] G. P. Agrawal, N. K. Dutta, Van Nostrand Reinhold, New York, 240 (1986).

---

\*Corresponding author: talebs2011@hotmail.fr