

**Motivations: Semiconducteurs III-V et optique non-linéaire d'ordre 2**

- © Grands  $X^{(2)}$ , technologie mature (optique intégrée), sources laser puissantes
- © Forte dispersion de l'indice optique  $\rightarrow$  Accord de phase difficile

- ? matériaux artificiels fortement biréfringents
- ? optimisation de  $X^{(2)}$

Approche proposée dans SUB-SUP:

- Conception de matériaux artificiels,
- Modélisation atomistique de la réponse diélectrique,
- Croissance MBE

**Idée directrice:**

Superréseaux **\*\*sans atome commun\*\*** d'ultra courte période, compris comme des matériaux 3D artificiels avec une maille fortement anisotrope:

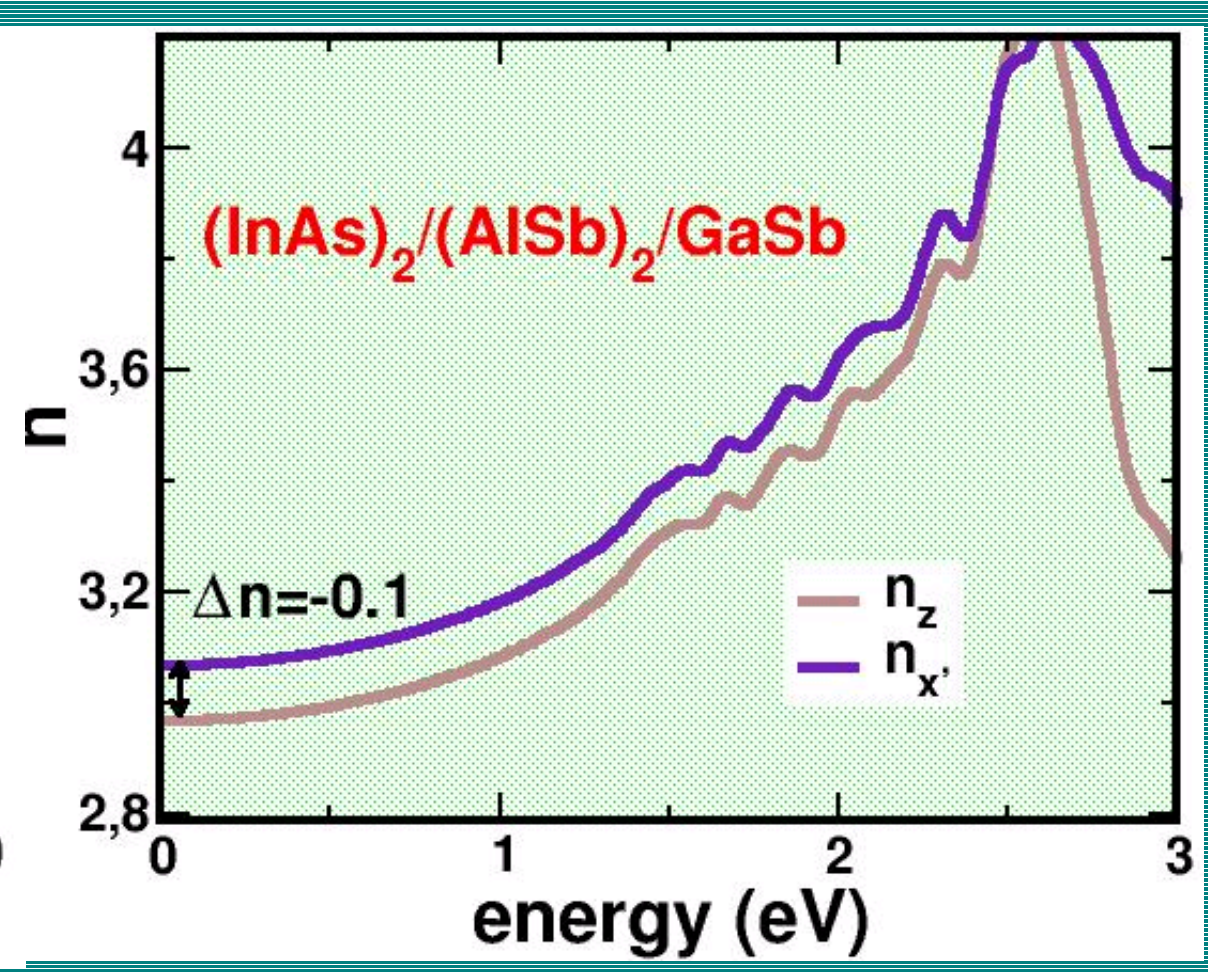
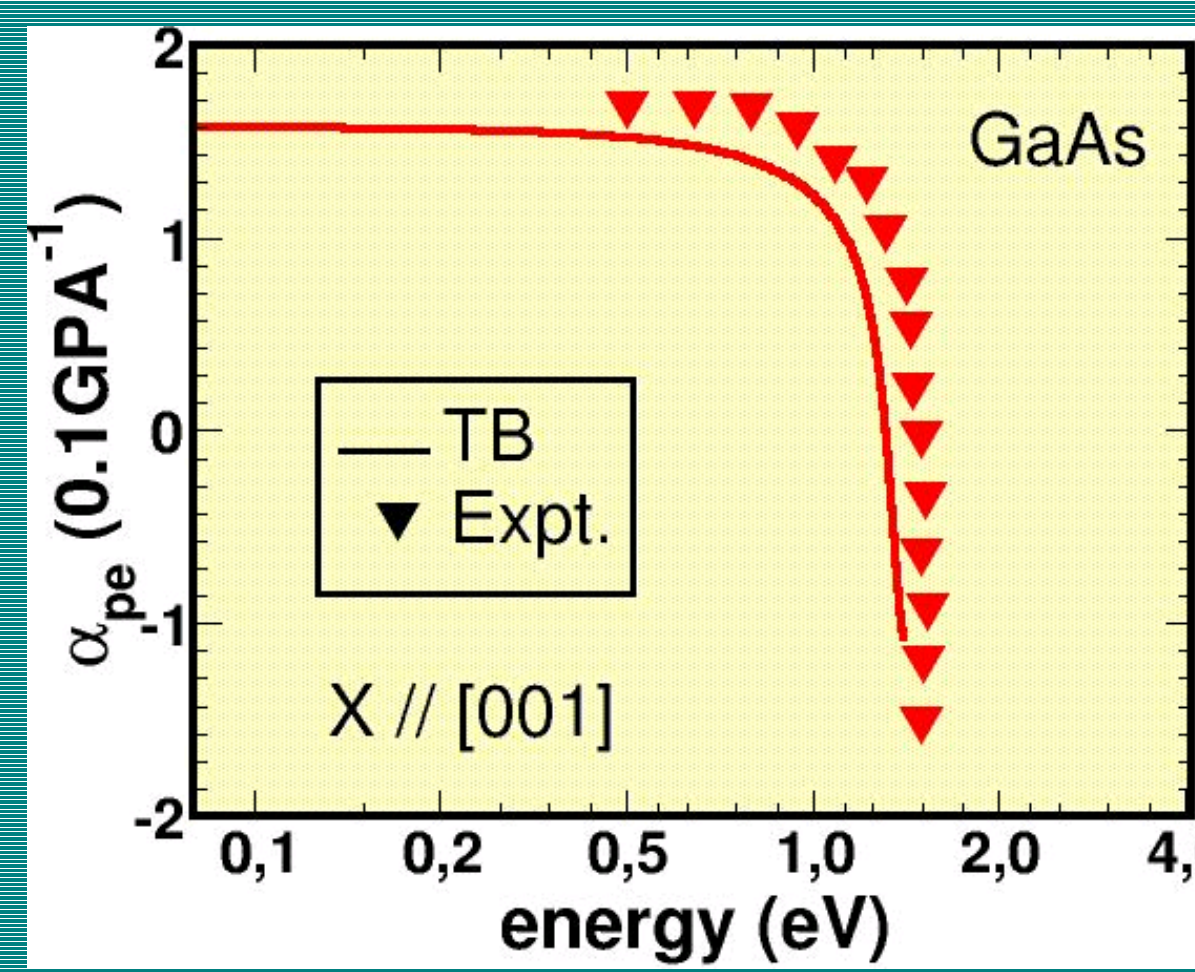
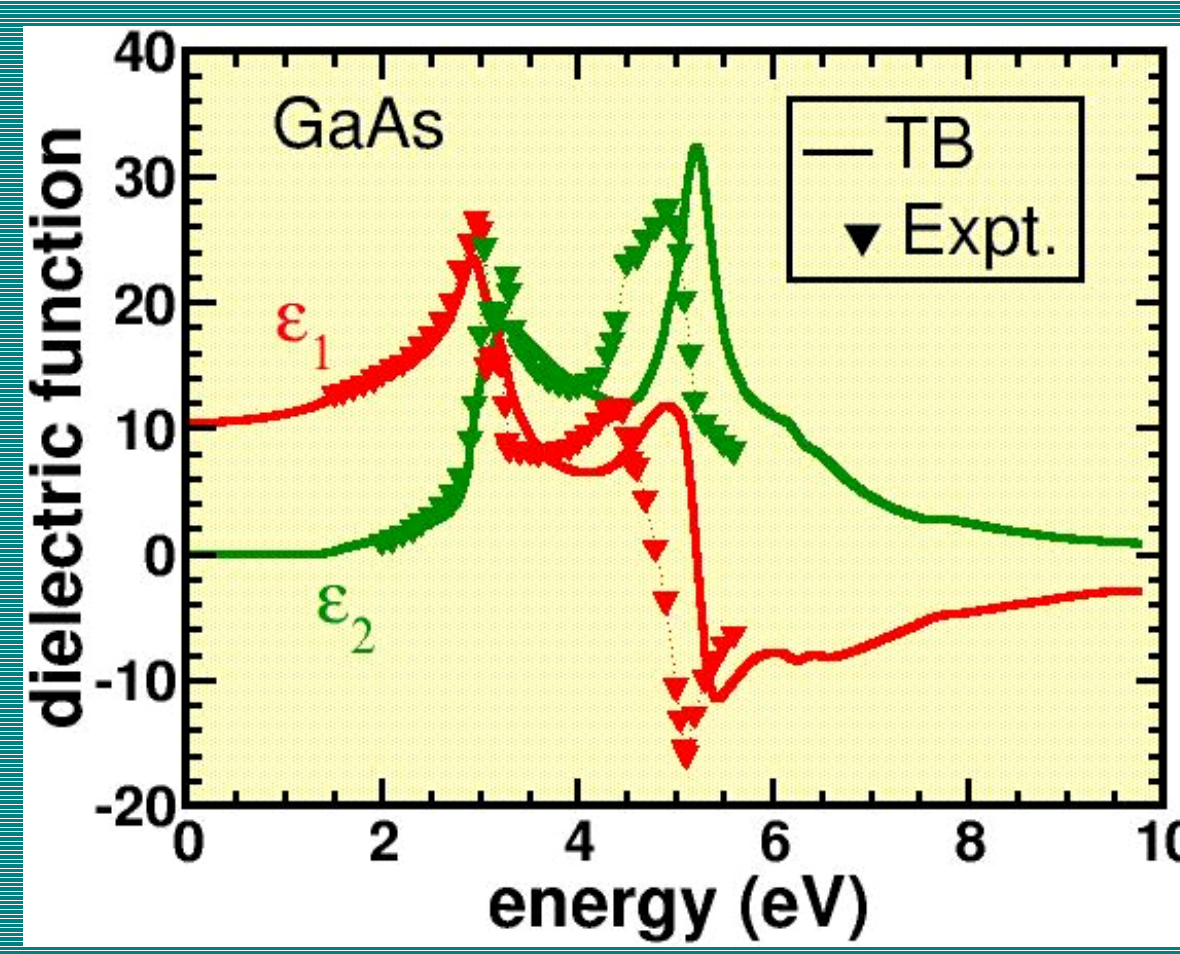
Nature des atomes, liaisons chimiques contraintes



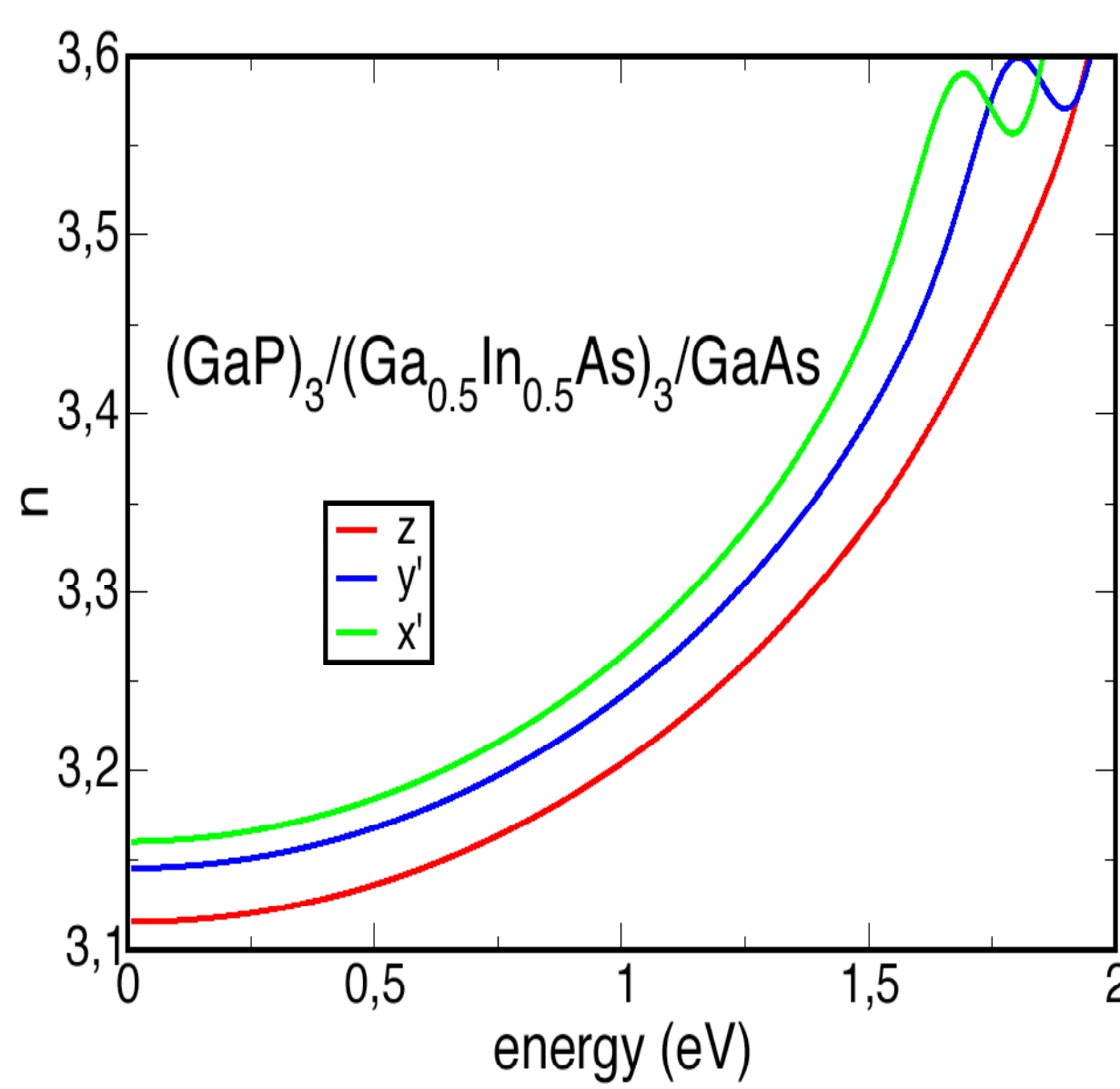
**Les défis de la modélisation:**

- ? calcul de la fonction diélectrique des matériaux massifs
- ? calcul de leur réponse piezo-optique
- ? Applicabilité de la méthode aux hétérostructures

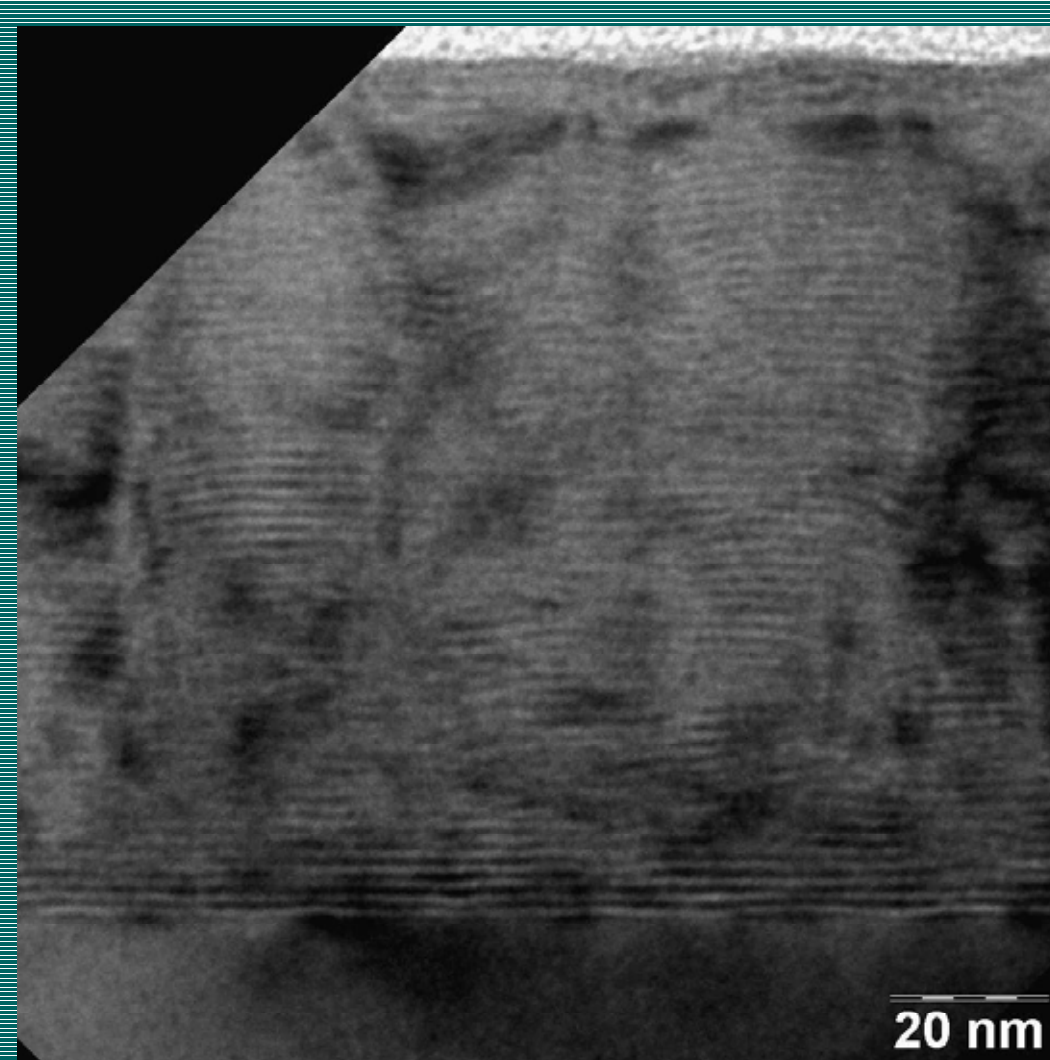
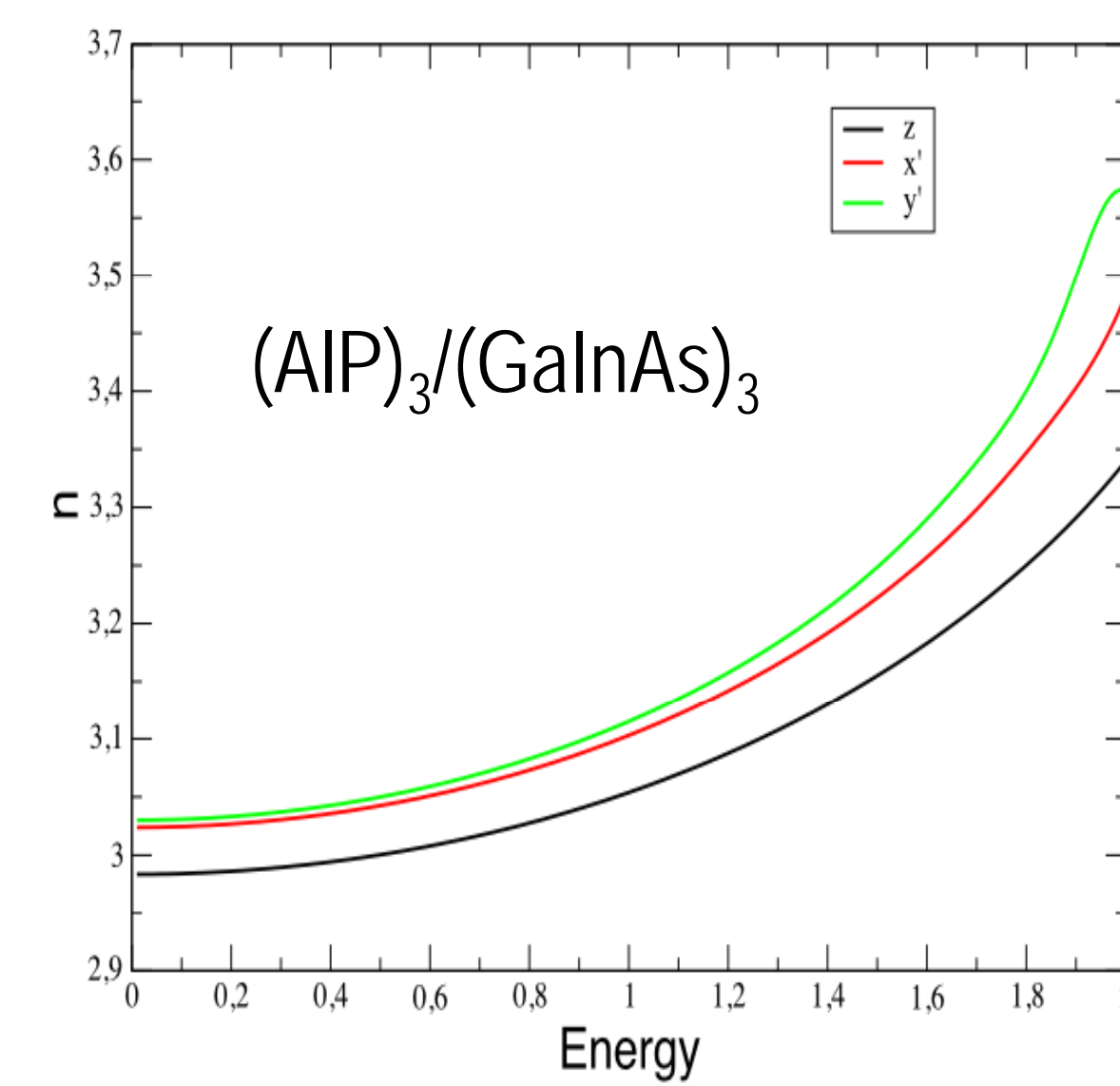
Méthode des liaisons fortes à base étendue SP3D5S\*



Après exploration numérique d'un grand nombre de configurations, nous obtenons une conclusion empirique très simple : dans la plupart des cas, la biréfringence du super réseau est la moyenne des piezo-biréfringences des différentes couches pondérée par leurs épaisseurs



dispersions d'indice calculées pour deux USPSLs répondant à l'ensemble du cahier des charges:  $Gap > 1.7$  eV,  $\delta n > 0.6$



Croissance difficile avec déstabilisation du front de croissance et apparitions de fortes oscillations dans le cas de GaP/GaInAs

Ordre quasi parfait dans le cas de AlP/GaInAs: la faible mobilité de surface des atomes d'Al empêche la déstabilisation du front de croissance

