



Étude des effets des perturbations extérieures sur les propriétés optoélectroniques des boîtes quantiques couplées à base de GaAs

A. Ed-Dahmouny

► To cite this version:

A. Ed-Dahmouny. Étude des effets des perturbations extérieures sur les propriétés optoélectroniques des boîtes quantiques couplées à base de GaAs. Physique [physics]. Laboratoire des systèmes intelligents, des géo-ressources et des énergies renouvelables, Faculté des Sciences et Techniques de Fès Maroc, 2023. Français. \langle NNT : \rangle . \langle tel-04223379 \rangle

HAL Id: tel-04223379

<https://hal.science/tel-04223379v1>

Submitted on 29 Sep 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



HAL Authorization

| Nom et Prénom | Grade | Etablissement | Qualité |
|---------------------|-------|-----------------------------|-----------------------|
| Pr. Mohamed KEROUAD | PES | Univ. UMI, FS Meknès | Président |
| Pr. Ali AHAITOUF | PES | Univ. USMBA, FST Fès | Rapporteur |
| Pr. Khalid RAHMANI | PH | UM5, ENS Rabat | Rapporteur |
| Pr. Haddou EL-GHAZI | PH | UH-II, ENSAM, Casablanca | Rapporteur |
| Pr. Karoum LIMAME | PH | CRMEF, Fès | Examineur |
| Pr. Nabil ZEIRI | PH | Univ. Monastir, FS, Tunisie | Examineur |
| Pr. Carlos A. DUQUE | PES | UdeA, Medellín, Colombia | Invité |
| Pr. Najia ES-SBAI | PES | Univ. USMBA, FST Fès | Directeur de thèse |
| Pr. Ahmed SALI | PH | Univ. USMBA, FSDM Fès | Co-Directeur de thèse |

RÉSUMÉ

Ce travail de thèse porte sur l'étude des propriétés électroniques et optiques d'une impureté donneur confinée dans une structure quantique couplée formée de l'alliage semi-conducteur GaAs avec un confinement tridimensionnel formé par la couche $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$ et soumis à l'effet de perturbations externes. Nous avons utilisé la technique variationnelle et la méthode des éléments finis (MEF) dans l'ensemble des travaux de cette thèse pour déterminer les niveaux d'énergie et calculer l'énergie de liaison du donneur. Les calculs ont été effectués dans le cadre de l'approximation de la masse effective et d'une bande parabolique. Afin de représenter les propriétés optiques couvertes par cette recherche, les niveaux d'énergie déterminés sont combinés avec les fonctions d'onde nécessaires pour modéliser : la variation des coefficients d'absorption optique (CAOs) et les changements d'indice de réfraction (CIRs) ; la polarisabilité ; la section efficace de photoionisation (SEP) et le décalage de Stark. Tout d'abord, nous avons examiné les effets de la variation des paramètres géométriques d'une structure à double boîtes quantiques (DBQs), de la position de l'impureté, de la pression hydrostatique et de la température sur l'énergie de liaison (E_b), les coefficients d'absorption optique (CAOs) et les changements de l'indice de réfraction (CIRs) d'un électron interagissant avec une impureté donneur. Nos résultats révèlent que l'énergie de liaison augmente presque linéairement avec la pression hydrostatique et diminue avec la température pour chaque position de l'impureté donneur. L'amplitude des pics de résonance des réponses optiques (CAOs et CIRs) augmente lorsque la largeur de la barrière est accrue. Nous avons ensuite effectué une étude théorique de la section efficace de photoionisation et de la polarisabilité sous l'influence de la pression hydrostatique, du champ électrique et de la position de l'impureté. Nous avons observé que l'amplitude de la SEP pour une impureté augmente à mesure que la pression augmente autour du centre de la boîte quantique. Ce résultat est compatible avec le changement de l'énergie de liaison lorsque la pression augmente dans ce système. Par rapport à la pression hydrostatique, le champ électrique a l'effet inverse sur la SEP, avec un décalage vers le rouge substantiel lorsque le champ électrique augmente. La polarisabilité à l'intérieur de la boîte augmente lentement à mesure que la pression hydrostatique augmente. En outre, la polarisabilité d'une impureté proche du bord de la barrière change brusquement en fonction du champ électrique. Ensuite, nous avons réalisé une étude de la variation du décalage Stark et de la SEP d'un donneur confiné dans une boîte quantique cœur/coquille ellipsoïdale pour les deux formes de BQs ellipsoïdales - oblate et prolata - sous l'influence d'un champ électrique spatial, en tenant compte de son intensité et de sa direction. La méthode des éléments finis est utilisée pour générer les niveaux d'énergie discrets et nous évaluons alors les énergies des transitions entre le niveau fondamental du donneur ($1s^{imp}$) et les trois premiers états non-dégénérés de l'électron ($1s^0$, $2s^0$ et $2p^0$). Nous avons révélé que la SEP décrivant la transition de l'état fondamental de l'impureté donneur ($1s^{imp}$) à l'un des états de la sous-bande de conduction ($1s^0$, $2s^0$ et $2p^0$) est affectée par la forme des boîtes quantiques et du champ électrique. Nous avons montré que la variation des paramètres internes et externes peut contrôler le décalage Stark qui, à son tour, affecte la SEP.

Mots clé : Double boîtes quantiques ; impureté donneur ; boîte quantique ellipsoïdale ; cœur/coquille, pression hydrostatique ; température ; énergie de liaison ; coefficient d'absorption ; indice de réfraction ; section efficace de photoionisation ; décalage Stark ; polarisabilité.

ABSTRACT

This thesis work focuses on the computational study of the electronic and optical properties of a donor impurity confined in a coupled quantum structure based on the GaAs semiconductor alloy with a three-dimensional confinement formed by the $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$ layer and subjected to the effect of external perturbations. For our calculations, which were carried out under the effective mass approximation, we employed the variational approach in Chapters II and III and the finite element method (FEM) in Chapter IV. The following subjects are of special interest to us throughout the thesis : the investigation of binding energy and energy levels; variations of optical absorption coefficients (OACs) and adjustments in refractive index (RICs); polarizability; photoionization cross section (PICS); and Stark shift. The binding energy (E_b), optical absorption coefficients (OACs) and refractive index changes (RICs) of an electron interacting with a donor impurity were first investigated. To do this, we varied the geometrical parameters of a double quantum dot structure (DQDs), impurity position, hydrostatic pressure and temperature. Our results reveal that the binding energy increases almost linearly with hydrostatic pressure and decreases with temperature for each donor impurity position. The amplitude of the resonance peaks of the optical responses (OACs and RICs) increases as the barrier width L_b is increased. Then, under the influence of hydrostatic pressure, an electric field and the donor impurity, we conducted a theoretical analysis of the PICS and polarizability. We found that when the pressure increases near the quantum dot's center, the magnitude of the PICS for an impurity grows. This outcome is in line with how binding energy changes as the system's pressure rises. The electric field affects the PICS in the opposite way from hydrostatic pressure, with a significant *red-shift* as the electric field strength increases. As the hydrostatic pressure rises, the polarizability inside the dot gradually increases. In addition, the polarizability of an impurity near the edge of the barrier changes abruptly as a function of the electric field. Finally, we performed a study of the variation of the Stark shift and PICS of a donor confined in an ellipsoidal core/shell quantum dot for the two shapes of ellipsoidal QDs—oblate and prolate—under the influence of a spatial electric field, taking into account its strength and direction. The discrete energy levels are produced by the FEM approach and the transitions between the donor ground level ($1s^{imp}$) and the first three nondegenerate electron states ($1s^0$, $2s^0$ and $2p^0$) are the subject of our study. We proved that the electric field and the shape of the quantum dots have an impact on the PICS representing the transition from the donor impurity's ground state ($1s^{imp}$) to one of the conduction subband states ($1s^0$, $2s^0$, or $2p^0$). We have demonstrated that the Stark shift, which in turn influences the PICS, can be controlled by varying internal and external factors.

Keywords : Double quantum dots; donor impurity; ellipsoidal quantum dot; core/shell; hydrostatic pressure; temperature; binding energy; absorption coefficient; refractive index; photoionization cross section; Stark shift; polarizability.

REMERCIEMENT

*Cette thèse a été réalisée dans le cadre d'une codirection entre la Faculté des Sciences et Techniques de Fès (FST-USMBA) et la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz (FSDM-USMBA). Le travail a été effectué au sein de l'équipe Énergies Renouvelables et Développement Durable (ER2D), laboratoire **S**ystèmes **I**ntelligents, **G**éoressources et **É**nergies **R**enouvelables (SIGER).*

Au terme de la rédaction de cette thèse, je suis convaincu qu'il ne s'agit pas d'un travail unique. En effet, je n'aurais pu terminer mon travail de doctorat sans le soutien et l'assistance d'un grand nombre de personnes, avec leurs conseils, leur orientation et leur bonne humeur, qui m'ont permis d'avancer dans cette délicate période d'apprentissage. À cet égard, je tiens à exprimer ma gratitude aux messieurs et mesdames qui ont contribué à ma thèse d'une manière ou d'une autre :

J'ai le plus grand respect et les plus grands remerciements pour mes directeurs de thèse :

*En premier lieu, je tiens à remercier vivement ma directrice de thèse Madame **Najia ES-SBAI**, enseignante-chercheuse à la Faculté des Sciences et Techniques (FST) de Fès, pour ses conseils, ses encouragements. Et surtout, je tiens à la remercier pour ses compétences scientifiques et les nombreuses possibilités qu'il m'a offertes. Merci du fond de mon cœur.*

*Je souhaite également exprimer ma sincère reconnaissance à mon co-directeur de thèse, Monsieur **Ahmed SALI**, professeur de l'enseignement supérieur à la Faculté des Sciences Dhar El-Mahraz (FSDM), de m'avoir accueilli au sein de son groupe de recherche et de mettre à ma disposition toutes les ressources techniques et didactiques nécessaires pour réaliser ce projet dans un esprit de créativité et de confiance. Je lui exprime toute ma profonde gratitude et ma reconnaissance pour le temps qu'il m'a consacré et la disponibilité dont il a fait preuve. Il m'a fait largement profiter de ses compétences scientifiques. Sincèrement, merci pour votre apport scientifique et humain lors des différentes étapes de la recherche.*

*Je tiens aussi à remercier sincèrement Monsieur **Mohamed KEROUAD**, professeur et responsable de l'équipe de recherche Physique de la Matière Condensée et Modélisation des Systèmes à la Faculté des Sciences de Meknès, Université Moulay Ismail, pour avoir accepté d'assurer la présidence du jury et pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail. Le fait qu'il soit le président du jury est un privilège pour moi.*

*J'adresse des remerciements particuliers à Monsieur **Ali AHAITOUF** directeur de notre Laboratoire SIGER et Professeur à Georgia Tech-Lorraine à Metz en France. Je le remercie pour son accueil au sein du laboratoire, pour son assistance administrative qu'il m'a apportée durant toutes ces années, aussi pour son acceptation d'être rapporteur de ce travail.*

*J'adresse tous mes remerciements à Monsieur **Khalid RAHMANI** professeur de l'enseignement supérieur à École Normale Supérieure de Rabat, membre du Laboratoire de Recherche en Physique et Sciences de l'Ingénieur (LRPSI), Faculté Polydisciplinaire, Université Sultan Moulay Slimane, BeniMellal, et Monsieur **Haddou EL GHAZI**, professeur à l'École Nationale Supérieure des Arts et Métiers de Casablanca pour avoir accepté d'être rapporteurs et membres du jury de soutenance de cette thèse. J'apprécie leurs points de vue et leurs conseils avisés.*

*Je tiens à remercier l'examineur, Monsieur **Karoum LIMAME**, professeur au centre régional d'éducation et de formation de Fès, pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de juger ce travail.*

J'avais de la chance d'avoir collaboré avec des scientifiques connus à l'échelle internationale. J'adresse mes vifs remerciements à nos collaborateurs :

*Monsieur **Nabil ZEIRI**, professeur au Département de Physique, Faculté des Sciences de Monastir, Tunisie. Je n'oublierai jamais l'impact positif qu'il a eu sur mon parcours de recherche.*

En effet, sans sa contribution, ma recherche aurait certainement été moins riche.

*Monsieur **Carlos Alberto DUQUE**, professeur à Institut de physique, Faculté des Sciences Exactes et Naturelles, Université d'Antioquia UdeA, Colombie. Grâce à ses aides, son expertise et son soutien continu, j'ai pu mener à bien ce projet de recherche.*

*J'adresse mes salutations les plus chaleureuses à mes collègues de l'équipe de recherche : **Reda ARRAOUI, Abdelghani FAKKAHI, Mohammed JAOUANE, Hamza AZMI et Kamal El-Bakkari**. Merci mes frères pour tous les moments difficiles et joyeux que nous avons passés ensemble. Vous m'avez certainement soutenu au fil des années de recherche. Bonne chance à tous mes chères collègues.*

Enfin rien de tout cela, n'aurait été possible sans le soutien de mes parents, de mes frères et de mes sœurs. Je suis très reconnaissant envers eux tous, pour le soutien ainsi que le support moral qu'ils m'ont apporté.

DÉDICACE

Avec une grande fierté, je dédie ce travail :

A ma mère, pour son amour et ses sacrifices

*A mon père, pour son soutien, son affection et la
confiance qu'il m'a accordé*

*A mon grand amour, mon fils Iyad. Je t'aime mon petit
cœur*

*A la mémoire de mon grand-père Bouchta. ALLAH
accorde la paix à son âme*

A mes chères sœurs Karima, Fatima-Zahrae et Hajar

*A mes chers frères Aziz, Kamal, Amine, Khalid et
Mohamed*

TABLE DES MATIÈRES

| | |
|---------------------------------------------------------------------------|----------|
| Résumé | i |
| Abstract | ii |
| Remerciement | iii |
| Dédicace | v |
| Table des matières | vii |
| Liste des figures | xii |
| Liste des tableaux | xiii |
| Symboles | xiii |
| Abréviations | xv |
| Introduction générale | 1 |
| Bibliographie | 4 |
| 1 GÉNÉRALITÉS SUR LES NANOSTRUCTURES À BASE DES SEMI- CONDUCTEURS | 5 |
| 1.1 Introduction | 5 |
| 1.2 Généralités sur les semi-conducteurs | 6 |
| 1.2.1 Généralités | 6 |
| 1.2.2 Regroupement des familles semi-conducteurs | 6 |
| 1.3 Etats électroniques dans les hétérostructures semi-conductrices | 13 |
| 1.3.1 Formalisme de la fonction enveloppe | 15 |
| 1.3.2 Propriétés physico-chimiques de l'arséniure de gallium | 17 |
| 1.3.3 Théorie des états électroniques des impuretés et états excitoniques | 20 |
| 1.4 Nanostructures basées sur les semi-conducteurs de type <i>III-V</i> | 23 |
| 1.4.1 Phénomène de confinement quantique | 23 |
| 1.4.2 Généralités sur les hétérostructures à basse dimension | 25 |
| 1.4.3 Nanostructures couplées | 26 |
| 1.4.4 Nanostructures de type cœur/coquille | 27 |
| 1.5 Techniques de synthèse des hétérostructures | 31 |
| 1.5.1 Lithographie | 32 |
| 1.5.2 Méthodes de la croissance auto-organisée | 33 |
| 1.6 Intérêt et applications des boîtes quantiques | 36 |
| 1.7 Techniques de résolution numériques utilisés | 39 |
| 1.7.1 Approximation de la masse effective (AME) | 39 |
| 1.7.2 Formalisme de la méthode variationnelle de Ritz | 40 |
| 1.7.3 Formalisme de la méthode des éléments finis | 41 |
| 1.7.4 Supports informatiques utilisés | 42 |
| 1.8 Conclusion | 45 |

| | |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| Bibliographie | 46 |
| 2 PROPRIÉTÉS OPTOÉLECTRONIQUES D'UN DONNEUR CONFINÉ DANS UNE DOUBLE BOÎTE QUANTIQUE | 55 |
| 2.1 Introduction | 55 |
| 2.2 Formalisme général | 59 |
| 2.2.1 Hamiltonien du système sous l'effet de la pression et de la température | 59 |
| 2.2.2 États électroniques et énergie de liaison d'une impureté confinée dans une double boîte quantique | 63 |
| 2.2.3 Coefficients d'absorption optiques et les indices de réfraction d'une impureté confinée dans une double boîte quantique | 64 |
| 2.3 Résultats numériques et discussion | 68 |
| 2.4 Conclusion | 80 |
| Bibliographie | 82 |
| 3 POLARISABILITÉ ET SECTION EFFICACE DE PHOTOIONISATION D'UN DONNEUR CONFINÉ DANS UNE DOUBLE BOÎTE QUANTIQUE | 88 |
| 3.1 Introduction | 88 |
| 3.2 Formalisme général | 90 |
| 3.2.1 Hamiltonien du système sous l'effet de la pression hydrostatique et d'un champ électrique axial | 90 |
| 3.2.2 Choix des fonctions d'onde et états électroniques | 93 |
| 3.2.3 Polarisabilité et section efficace de photoionisation | 93 |
| 3.3 Résultats numériques et discussion | 95 |
| 3.4 Conclusion | 103 |
| Bibliographie | 104 |
| 4 DÉCALAGE STARK ET SECTION EFFICACE DE PHOTOIONISATION D'UN DONNEUR CONFINÉ DANS UNE BOÎTE QUANTIQUE ELLIPSOÏDALE CŒUR/COQUILLE | 108 |
| 4.1 Introduction | 108 |
| 4.2 Formalisme général | 111 |
| 4.2.1 Hamiltonien du système sous l'effet de la pression hydrostatique et d'un champ électrique axial | 111 |
| 4.2.2 Décalage Stark et section efficace de photoionisation | 113 |
| 4.3 Résultats numériques et discussion | 115 |
| 4.4 Conclusion | 123 |
| Bibliographie | 124 |
| Conclusion générale | 130 |
| Liste des publications | 133 |
| Liste des communications | 136 |

TABLE DES FIGURES

| | | |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1.1 | Classification des matériaux selon leur résistivité électrique à 300 K [1]. . . | 6 |
| 1.2 | Niveaux d'énergie dans l'atome isolé et la formation des bandes d'énergie dans un cristal. | 7 |
| 1.3 | (a) Schéma descriptif de la formation des bandes d'énergie en fonction de la distance interatomique a_0 , (b) pour les électrons d'atomes de Si arrangés en mailles cristallines de type diamant. | 8 |
| 1.4 | Structures de bande d'un certain nombre de semi-conducteurs représentatifs. GaN, GaAs et CdSe sont à BI direct et GaP, Si et Ge sont des semi-conducteurs à BI indirect. Le haut de la BV est choisi comme niveau d'énergie zéro pour des raisons de commodité uniquement. Par rapport à un électron libre dans le vide, les cristaux ont différentes échelles d'énergie. | 9 |
| 1.5 | Structure de bande d'un semi-conducteur à gap (a) direct et (b) indirect [2]. | 9 |
| 1.6 | Énergie de la BI en fonction du paramètre de maille de certains alliages semi-conducteurs [5]. | 11 |
| 1.7 | Organigramme présentant les différents types de semi-conducteurs organiques à l'état cristallin. | 13 |
| 1.8 | Niveaux d'énergie continus et discrets au voisinage d'un atome dopant dans un semi-conducteur. | 14 |
| 1.9 | Schéma de la maille Zinc-Blende du GaAs. Le paramètre de maille a est double de la distance entre deux plans atomiques identiques qui constituent une monocouche [17]. | 19 |
| 1.10 | Structure de bande de GaAs : (a) calcul $\vec{k} \cdot \vec{p}$ sur l'ensemble de la zone de Brillouin, (b) approximation parabolique au voisinage de $\vec{k} = \vec{0}$ en Γ [23]. . | 19 |
| 1.11 | Diagramme de bande d'énergie de GaAs avec différents types d'impuretés [25]. | 22 |
| 1.12 | Modèle de PQ à l'hétérojonction AlGaAs/GaAs/AlGaAs, avec $E_{g1} = E_{c1} - E_{v1}$ et $E_{g2} = E_{c2} - E_{v2}$ sont les largeurs des BIs du matériau de la barrière et du matériau du puits, respectivement, [27]. | 23 |
| 1.13 | DOS pour des particules ayant trois (massif, 3D), deux (PQ, 2D), un FQ, 1D) et zéro (BQ, 0D) degrés de liberté spatiale. | 25 |
| 1.14 | (a) Intersection en forme de T de deux PQs en coupe transversale. Les contours sont des lignes de densité de charge constante correspondant aux électrons spatialement confinés dans le FQ [29]. (b-c) Vue latérale des multicouches GaAs/AlGaAs développées dans des substrats en forme de tétraèdre [30]. . | 26 |
| 1.15 | Classification des BQs cœur/coquille en fonction de la bande interdite et de l'alignement des bandes. Ici, la BQ cœur/coquille est représentée comme (a) Type I (b) Type I inversé (c) Type II (d) Type II inversé (e) Quasi Type II [38]. | 29 |

| | | |
|------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 1.16 | Représentation schématique de l'alignement de la bande électronique pour différentes classes de système BQ cœur/coquille et les fonctions d'onde électronique (or clair) et trou (rouge) dans différents rectangles correspondent à la position de la bande de conduction et de valence du cœur (centre) et de la coquille matériaux (extérieurs), respectivement : (a) type-I; (b) inverse de type I; (c) type II; (d) quasi-type II. (e) Représentation schématique de la synthèse des BQs colloïdaux à cœur/coquille, d'abord les BQs à cœur peuvent être synthétisés via une approche d'injection à chaud ou d'échange de cations (côté gauche), puis une structure cœur/coquille (côté droit) synthétisée par la croissance de la coquille sur les cœurs des BQs via échange de cations/SILAR ou combinaison de l'échange de cations et de l'approche SILAR. | 30 |
| 1.17 | Différentes étapes de la lithographie à faisceau d'électrons pour obtenir une nanostructure de silicium à partir d'un substrat de la silice [42]. | 32 |
| 1.18 | Image de croissance par mode Stranski-Krastanov de BQs InAs/GaAs par microscopie à force atomique [47]. | 34 |
| 1.19 | Croissance de structures 1D à l'aide de la technique VLS [49]. | 34 |
| 1.20 | Schéma de principe des BQs épitaxiées sur un PQ étroit. L'excitation optique peut créer des excitons 2D dans les PQs et des excitons 0D confinés dans les BQs [50]. | 35 |
| 1.21 | Représentation schématique des étapes fondamentales de transport et de réaction sous-jacentes à EPVOM [53]. | 36 |
| 1.22 | Exemple de "maillage" - une discrétisation du domaine sur lequel la EDP est définie. Chaque polygone est un « élément fini », avec des fonctions de base définies sur eux. L'ombrage de chaque polygone représente l'amplitude associée à la fonction appuyée sur chaque élément fini [67]. | 41 |
| 1.23 | Logos des langages de programmation utilisés dans les calculs numériques. | 43 |
| 1.24 | Logos de Maple TM et COMSOL-Multiphysics. Deux interfaces de modélisation et de programmation formel sont utilisés. | 43 |
| 1.25 | Les logos de OriginPro ^R et ParaView. Deux logiciels de traitement et d'analyse de données qui sont utilisés au projet. | 44 |
| 1.26 | Organigramme des procédures de calcul. | 45 |
| 2.1 | Représentation schématique d'une hétérostructure DBQ avec le potentiel de confinement correspondant $V(x)$ dépendant de x | 60 |
| 2.2 | Schéma des transitions électroniques d'une absorption optique : 1, 1a-absorption intrinsèque ; 2, 2a-absorption par des porteurs de charges libres ; 3, 3a-absorption par des impuretés de la zone la plus proche ; 3b, 3c-absorption par des impuretés ; 4-absorption entre bandes ; 5-absorption excitonique par excitation ; 5a-absorption excitonique par décroissance optique des excitons [32]. | 66 |
| 2.3 | Spectre d'absorption des semi-conducteurs. Un spectre d'absorption schématique $\alpha(\hbar\omega)$ de semi-conducteurs massifs. Les encarts représentent les différentes transitions d'état lors de l'absorption de photons [33]. | 67 |

| | | |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 2.4 | Énergie de liaison à l'état fondamental d'un donneur en fonction de la position de l'impureté dans une DBQ symétrique GaAs/Al _η Ga _{1-η} As pour trois valeurs de pression et deux concentrations de η de l'aluminium. Les résultats sont pour $T = 4\text{ K}$ avec $L_b = 0.5 a^*$, $L_d = 1.0 a^*$, et $L_y = L_z = 2.0 a^*$. Les dimensions de la structure rapportées seront à $P = 0$ | 69 |
| 2.5 | Énergie de liaison d'un donneur en fonction de la température dans une DBQ symétrique GaAs/Al _η Ga _{1-η} As pour deux valeurs de η. Les résultats sont pour $P = 20\text{ kbar}$ avec $L_b = 0.25 a^*$, $L_d = 0.75 a^*$, et $L_y = L_z = 1.0 a^*$. Pour les étiquettes 1, 2, 3 et 4, voir la Fig. (2.1). Les dimensions de la structure rapportées seront à $P = 20\text{ kbar}$ | 70 |
| 2.6 | Énergie de liaison d'un donneur en fonction de la pression uniaxiale dans une DBQ GaAs/Al _{0,3} Ga _{0,7} As symétrique, avec $L_b = 0,5 a^*$ (lignes pleines) et $L_b = 0,25 a^*$ (lignes pointillées). Les résultats sont pour $T = 100\text{ K}$, $L_d = 0,5 a^*$, et $L_y = L_z = 1,0 a^*$. Pour les étiquettes 1, 2, 3 et 4, voir la Fig. (2.1). Les deux dimensions rapportées sont à $P = 0$ | 71 |
| 2.7 | Éléments de matrice dipolaires (M_{fi}) en fonction de la position de l'impureté dans une DBQ symétrique GaAs/Al _{0,3} Ga _{0,7} As pour plusieurs valeurs de température et de pression. Les résultats sont pour $L_d = 1.0 a^*$, $L_b = 0.5 a^*$, et $L_y = L_z = 1.0 a^*$ | 72 |
| 2.8 | CAOs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total pour un donneur confiné dans une DBQ symétrique GaAs/Al _{0,3} Ga _{0,7} As en fonction de l'énergie du photon incident. Les étiquettes correspondent aux trois positions de l'impureté comme dans la Fig. (2.1). L'étiquette pour la position 1 est absente conformément à la valeur zéro de l'élément de matrice dipôle rapportée dans la Fig. (2.7). | 73 |
| 2.9 | CAOs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'un donneur située au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie du photon incident pour trois largeurs différentes de la barrière centrale. | 74 |
| 2.10 | CAOs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'une impureté donneur située au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie des photons incidents pour deux largeurs différentes de la boîte. | 75 |
| 2.11 | CAOs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'une impureté donneur située au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie photonique incidente pour trois valeurs de pression uniaxiale différentes. | 76 |
| 2.12 | CAOs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'un donneur situé au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie des photons incidents pour trois valeurs de température différentes. | 77 |
| 2.13 | CIRs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'un donneur situé au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie des photons incidents pour trois valeurs de pression uniaxiale différentes. | 78 |
| 2.14 | CIRs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'un donneur situé au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie des photons incidents pour trois valeurs de température différentes. | 79 |
| 2.15 | Coefficients de CIRs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'un donneur située au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie du photon incident pour deux largeurs de barrière centrale différentes. | 79 |

| | | |
|-----|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 3.1 | Représentation schématique d'une DBQ et profil du potentiel de confinement correspondant $V(z,P)$ le long de l'axe z | 90 |
| 3.2 | Amplitude de la DDP $ \varphi(z) ^2$ le long de la direction z , pour l'état fondamental d'un électron dans une DBQ GaAs/Al _{0.3} Ga _{0.7} As, avec $L_x=L_y=1a^*$ et $L_b=L_d=0.5a^*$. Les résultats dans (a) sont pour $F=0, 40$ et 60 kV/cm et sans pression hydrostatique externe appliquée $P=0$. Les résultats dans (b) sont pour $P=0, 10, 30$ kbar et le champ électrique est fixé à 0 kV/cm. | 95 |
| 3.3 | Énergie de liaison d'une impureté en fonction du champ électrique appliqué dans une DBQ symétrique GaAs/Al _{0.3} Ga _{0.7} As. Les étiquettes 1, 2, 3 et 4 représentent les différentes positions occupées par l'impureté. | 97 |
| 3.4 | Énergie de liaison à l'état fondamental de l'impureté dans une DBQ symétrique GaAs/Al _{0.3} Ga _{0.7} As en fonction de la position de l'impureté le long de la direction de croissance de l'hétérostructure. Trois valeurs de champs électriques appliqués sont considérées : $F=0, F=10$ kV/cm et $F=20$ kV/cm avec $P=0$ | 98 |
| 3.5 | Polarisabilité de l'impureté dans une DBQ symétrique GaAs/Al _{0.3} Ga _{0.7} As en fonction du champ électrique et à deux valeurs distinctes de la pression hydrostatique : $P=0$ et $P=12$ kbar. Les positions de l'impureté sont représentées par les chiffres 1, 2 et 3, qui correspondent respectivement au centre de la barrière, au bord de la barrière et au centre de la boîte. | 99 |
| 3.6 | Polarisabilité des impuretés α dans la DBQ symétrique GaAs/Al _{0.3} Ga _{0.7} As en fonction de l'emplacement des impuretés le long de la direction de croissance pour deux valeurs différentes de l'intensité du champ électrique : $F=10$ kV/cm et $F=20$ kV/cm. Les résultats sont pour $P=0$, et les dimensions de la structure sont $(L_b, L_d)=(0.5a^*, 0.5a^*)$ et $(L_x, L_y)=(1a^*, 1a^*)$ | 100 |
| 3.7 | SEP $\sigma(\hbar\omega)$ d'une impureté donneur dans une DBQ symétrique GaAs/Al _{0.3} Ga _{0.7} As en fonction de l'énergie des photons, pour deux valeurs distinctes du champ électrique. Les emplacements des impuretés sur le bord de la barrière, le centre de la boîte, et le bord de la boîte sont désignés par les nombres 2, 3, et 4, respectivement. La taille de l'hétérostructure représentée dans l'illustration. | 101 |
| 3.8 | SEP $\sigma(\hbar\omega)$ d'une impureté donneur dans une DBQ symétrique GaAs/Al _{0.3} Ga _{0.7} As en fonction de l'énergie photonique pour deux valeurs hydrostatiques distinctes. Les emplacements des impuretés sur le bord de la barrière, le centre de la boîte, et le bord de la boîte sont désignés par les nombres 2, 3, et 4, respectivement. La taille de l'hétérostructure est représentée dans l'illustration. | 102 |
| 4.1 | Vue $2D$ de la structure BQECC oblate (a) et prolata (b) étudiée, ainsi que du profil du potentiel de confinement le long de la direction $(1\ 0\ 0)$ | 111 |
| 4.2 | Tracés $2D$ des trois DDP des trois premiers états électroniques d'un électron confiné dans une BQECC oblate sans impureté, pour deux valeurs de l'intensité du champ électrique F et $\alpha=0, \pi/2$ | 116 |
| 4.3 | Tracés $2D$ des trois DDP des trois premiers états électroniques d'un électron confiné au centre de la BQECC prolata sans impureté, pour deux valeurs de l'intensité du champ électrique F et $\alpha=0, \pi/2$ | 117 |

| | | |
|-----|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 4.4 | Dépendance des énergies de liaison de l'état fondamental (a) , du premier (b) et du second (c) états excités de l'impureté confinée au centre de la BQECC en fonction de l'intensité du champ électrique pour deux angles α et pour deux degrés d'ellipticité β | 118 |
| 4.5 | Décalage Stark ΔE_b^n d'énergie de liaison pour l'impureté donneur confiné au centre de la BQECC au niveau d'énergie $n=1s, 2s$ et $2p$, dépend de deux valeurs d'angle du champ électrique : (a) $\alpha = 0$ et (b) $\alpha = \pi/2$ pour deux formes de BQECC : oblate β_1 et prolata β_2 | 119 |
| 4.6 | Variation de la force de l'oscillateur P_{if} pour les transitions entre l'état fondamental de l'impureté donneur et les trois premiers états électroniques en fonction du champ électrique pour deux angles α et deux formes de BQECC : (a) oblate β_1 et (b) prolata β_2 | 120 |
| 4.7 | SEP des transitions entre l'état fondamental de l'impureté au centre de la BQECC et les trois premiers états électroniques en fonction de l'énergie du photon $\hbar\omega$ pour une forme oblate (β_1) avec trois valeurs du champ électrique (a) et deux valeurs de l'angle α pour $F=100$ kV/cm (b) | 121 |
| 4.8 | SEP des transitions entre l'état fondamental de l'impureté au centre de la BQECC et les trois premiers états électroniques en fonction de l'énergie du photon incidente $\hbar\omega$ pour une forme prolata (β_2) avec trois valeurs du champ électrique (a) et deux valeurs de l'angle α avec $F=100$ kV/cm (b) | 122 |

LISTE DES TABLEAUX

| | | |
|-----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 1.1 | Propriétés du GaAs à température ambiante ($T=300\text{ K}$). | 18 |
| 1.2 | Tableau récapitulatif des principaux matériaux semi-conducteurs utilisés dans les composants et dispositifs photoniques modernes et leurs situation actuelle et les tendances et prévisions d'utilisation, extrait de Ref. [65]. . . | 38 |
| 4.1 | Demi-axes ellipsoïdaux du cœur et de la coquille utilisés dans la modélisation, ainsi que les valeurs γ_j et β_j pour les deux formes. Les dimensions sont données en (nm). | 115 |

SYMBOLES

| | | | |
|-------------------------|---------------------------------------------------------|--------------|-----------------------------------------------|
| E_c | Bas de la bande de conduction | δ | Fonction delta de Dirac |
| E_g | Bande interdite | H | Hamiltonien |
| E_v | Bas de la bande de valence | V_0 | Hauteur de la barrière de potentiel |
| \vec{F} | Champ électrique | I | Intensité de la lumière |
| ξ_{eff} | Champ électrique effectif | Γ | Largeur de raie de l'impureté hydro- génée |
| q | Charge électrique | ∇^2 | Opérateur de Laplace |
| e | Charge élémentaire | τ_{fi} | Temps de relaxation |
| α_T | Coefficient d'absorption totale | F | Intensité du champ électrique |
| $\alpha^{(1)}$ | Coefficient d'absorption linéaire | ϵ_0 | Permittivité du vide |
| $\alpha^{(3)}$ | Coefficient d'absorption nonlinéaire | α | Polarisabilité |
| η | Concentration d'Aluminium | σ | Section efficace de photoionisation |
| \hbar | Constante de Planck réduite | \vec{r} | Vecteur de coordonnées |
| α_{FS} | Constante de structure fine | \vec{k} | Vecteur d'ondes |
| ϵ_ν | Constante diélectrique du matériau | c | Vitesse de la lumière dans le vide |
| M_{if} | Élément de la matrice dipolaire de la transition i-f | V | Volume |
| E_F | Énergie de Fermi | m^* | Masse effective |
| E_n | Énergie des électrons au niveau n | m_0 | Masse de la particule au repos |
| E_i | Énergie d'ionisation | m_e | Masse de l'électron dans le vide |
| E_f | Énergie d'un état final | β | Degré d'ellipticité |
| E_i | Énergie d'un état initial | n_i | Indice de réfraction |
| E | Énergie d'une particule | ρ | Densité tridimensionnelle de photons |
| V | Énergie potentielle | N | Flux de photons |
| ψ, Ψ | Fonction d'onde | p | Opérateur de momentum |
| $P_{0 \rightarrow n}^n$ | Force de l'oscillateur de la transition 0-n | P | Pression/ Pression uniaxiale |
| | | T | Température |

ABRÉVIATIONS

| | |
|------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------|
| GaAs Arséniures de gallium | DFQ Double fil quantique |
| AlGaAs Arséniure d'aluminium-gallium | BC Bande de conduction |
| BC Bande de conduction | BV Bande de valence |
| BV Bande de valence | BI Bande interdite |
| BI Bande interdite | LED Diode électroluminescente |
| SILAR Méthode d'adsorption et de réaction successives sur couche ionique | IR Infrarouge |
| EJM Épitaxie par jets moléculaire | UV Ultraviolet |
| EPVOM Croissance épitaxiale en phase va- peur aux organométalliques | CAO Coefficient d'absorption optique |
| VLS Croissance vapeur-liquide-solide | CIR Changement d'indice de réfraction |
| DOS Densité des états électroniques | SEP Section efficace de photoionisation |
| BQ Boîte quantique | DDP Densité de probabilité |
| PQ Puits quantique | AME Approximation de la masse effective |
| FQ Fil quantique | BQECC Boîte quantique elliptique cœur/coquille |
| BQC Boîte quantique colloïdale | MEF Méthode des éléments finis |
| DBQ Double boîte quantique | BQCC Boîte quantique cœur/coquille |
| DPQ Double puits quantique | EDP Équation aux dérivées partielles |

INTRODUCTION GÉNÉRALE

L'histoire de la nanotechnologie remonte à la fin des années 1950 et au début des années 1960, lorsque les scientifiques ont commencé à comprendre et à explorer les propriétés originales des matériaux à l'échelle nanométrique. Cependant, le terme "nanotechnologie" a été inventé pour la première fois par le physicien K. Eric Drexler dans son livre de 1986 "Engines of Creation" [1]. Au cours des décennies suivantes, les progrès de la microscopie et de la science des matériaux ont permis de synthétiser et d'étudier des matériaux à l'échelle nanométrique et leurs propriétés, entraînant une croissance et un développement rapides dans le domaine des nanotechnologies.

Parmi les jalons clés de l'histoire des nanotechnologies, citons que la première observation de la quantification des niveaux d'énergie dans un puits quantique en 1974 a ouvert la voie à l'adaptation de la fonction d'onde électronique dans une dimension à l'échelle du nanomètre [2], conduisant à la production de nouveaux matériaux électroniques mais aussi magnétiques. La découverte de l'effet de "confinement quantique" dans les années 1980, qui a montré que les propriétés des particules semi-conductrices pouvaient être contrôlées et ajustées en modifiant leur taille. Dans les années 1990, le développement de nouvelles techniques de fabrication telles que la lithographie par faisceau d'électrons et l'épitaxie par jet moléculaire [3, 4] a permis de produire des dispositifs à l'échelle nanométrique avec une précision et une exactitude élevée, comme les boîtes quantiques d'arséniure de gallium GaAs. Alors, qu'entend-on par une boîte quantique ?

Les boîtes quantiques sont des structures semi-conductrices à l'échelle nanométrique qui présentent des propriétés optiques et électroniques originales en raison de leur bande interdite réglable en taille. Le développement des boîtes quantiques remonte aux années 1980, lorsque les scientifiques ont observé pour la première fois l'effet de confinement quantique dans les nanostructures semi-conductrices III-V. Depuis lors, des progrès significatifs ont été réalisés dans la synthèse, la caractérisation et l'application des boîtes quantiques dans des domaines tels que l'électronique, la biomédecine et les énergies renouvelables [5, 6]. Aujourd'hui, les boîtes quantiques sont utilisées dans une large gamme de produits, des téléviseurs LCD aux sondes d'imagerie du cancer.

Ce mémoire s'inscrit dans le contexte de l'émergence rapide de plusieurs types de boîtes quantiques. En effet, l'objectif de notre travail est de décrire et d'étudier deux types différents de boîtes quantiques couplées à base de l'arséniure de gallium GaAs : les boîtes quantiques de type cœur/coquille et deux boîtes quantiques rectangulaires couplées horizontalement. Cette étude correspond à la détermination des différentes propriétés opto-électroniques de ces systèmes. Nos calculs sont basés sur deux méthodes : la méthode des éléments finis (MEF) et l'approche variationnelle.

Ce travail de thèse est réparti comme suit :

Dans le **premier chapitre**, nous donnons un bref aperçu des matériaux semi-conducteurs massif jusqu'aux nanostructures et certaines des méthodes de développement de ces structures, ainsi que les différents approximations analytiques et méthodes numériques utilisés : la méthode variationnelle et la méthode des éléments finis dans le contexte de l'approximation de la masse effective. Ensuite, nous présentons quelques propriétés optiques des nanostructures semi-conductrices, en particulier des boîtes quantiques couplées, ainsi que de leurs domaines d'application. La fin de ce chapitre est dédiée à la présentation des techniques de résolution numérique et des approches analytiques utilisées dans les différents chapitres de notre thèse.

Dans le **deuxième chapitre**, nous nous intéresserons aux boîtes quantiques de section rectangulaire couplées horizontalement. Nous examinons, brièvement, l'influence de la pression et de la température sur les coefficients d'absorption optique et les changements d'indices de réfraction. Pour atteindre cet objectif, la technique variationnelle est utilisée comme approche numérique pour déterminer les niveaux d'énergie discrets avec un choix approprié de la fonction d'onde test, ceci dans le cadre de l'approche de la masse effective.

Le **troisième chapitre** examine l'association entre le champ électrique et la pression uniaxiale et leurs effets sur l'énergie de liaison, la polarisabilité et la section efficace de photo-ionisation d'une impureté donneur confinée dans une hétérostructure à double boîte quantique en GaAs/ $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$. Nous avons fixé la fraction d'aluminium à 30 %, et nous avons négligé l'effet de croisement Γ -X de l'alliage GaAs/AlGaAs.

Nous porterons notre attention, dans le **quatrième chapitre** sur l'étude des effets simultanés du champ électrique spatial et du degré d'ellipticité du cœur et de la coquille sur les propriétés optoélectroniques : énergie de liaison, force d'oscillateur, décalage Stark et

section efficace de photoionisation d'un donneur confiné au centre d'une boîte quantique ellipsoïdale de type cœur/coquille à base de GaAs/AlGaAs, pour les trois premières transitions. Les calculs sont effectués sur la base de la méthode des éléments finis.

Nous terminons cette thèse par une **conclusion générale**, suivie de quelques points de vue et des perspectives exprimés de manière réfléchie.

Bibliographie

- [1] E. Drexler, “Engines of creation : The coming era of nanotechnology,” *Anchor*, (1987).
- [2] R. Dingle, W. Wiegmann, and C. H. Henry, “Quantum States of Confined Carriers in Very Thin $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}-\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Heterostructures,” *Physical Review Letters*, vol. 33, pp. 827–830, 9 (1974). [Online]. Available : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.33.827>
- [3] I. Suemune, K. Uesugi, and S. Ganapathy, “MOMBE Growth and Characterization of III–V–N Compounds and Application to InAs Quantum Dots,” *Dilute Nitride Semiconductors*, pp. 137–155, 1 (2005).
- [4] K. Asakawa, N. Ozaki, S. Ohkouchi, Y. Sugimoto, and N. Ikeda, “Advanced Growth Techniques of InAs-system Quantum Dots for Integrated Nanophotonic Circuits,” *Handbook of Self Assembled Semiconductor Nanostructures for Novel Devices in Photonics and Electronics*, pp. 529–551, 1 (2008).
- [5] W. E. Huni, S. Karrakchou, Y. Halfaya, M. Arif, M. B. Jordan, R. Puybaret, T. Ayari, H. Ennakrachi, C. Bishop, S. Gautier, A. Ahaitouf, P. L. Voss, J. P. Salvestrini, and A. Ougazzaden, “Nanopyramid-based absorber to boost the efficiency of InGaN solar cells,” *Solar Energy*, vol. 190, pp. 93–103, (2019). [Online]. Available : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0038092X19307613>
- [6] M. Lahbabi, A. Ahaitouf, M. Fliyou, E. Abarkan, J. P. Charles, A. Bath, A. Hoffmann, S. E. Kerns, and D. V. K. Jr., “Analysis of electroluminescence spectra of silicon and gallium arsenide p-n junctions in avalanche breakdown,” *Journal of Applied Physics*, vol. 95, no. 4, pp. 1822–1828, 01 (2004). [Online]. Available : <https://doi.org/10.1063/1.1643188>

GÉNÉRALITÉS SUR LES NANOSTRUCTURES À BASE DES SEMI- CONDUCTEURS

1.1 Introduction

L'étonnante percée réalisée dans les nanosciences a permis la création de multiples applications des nanostructures dans divers domaines. Les nanomatériaux semi-conducteurs, en particulier, constituent des systèmes essentiels dans tous les domaines des nanotechnologies. En réalité, ces nanostructures semi-conductrices présentent des caractéristiques étonnantes à la fois attrayantes et distinctes de celles du matériau dans son état massif. En effet, du fait de la forte diminution des dimensions, les niveaux d'énergie présentent un spectre discret qui se situe entre celui de l'atome et celui du semi-conducteur massif.

Les caractéristiques optiques et électriques des nanostructures sont également altérées par l'effet de taille quantique. Les puits quantiques (PQs), les fils quantiques (FQs) et les boîtes quantiques (BQs) sont des exemples de ces nanostructures. Ces systèmes de faible dimension permettent le confinement spatial des porteurs de charge (électrons et trous), ce qui entraîne la création de caractéristiques physiques uniques qui favorisent des applications complexes pour ces structures par rapport aux matériaux à l'état massif.

Nous aborderons dans ce chapitre les généralités sur les semi-conducteurs du massif jusqu'aux nanostructures, ensuite, nous présentons les différentes méthodes de synthèse des hétérostructures. Nous discutons brièvement quelques applications technologiques des nanostructures, ainsi que les approches de la résolution numérique.

1.2 Généralités sur les semi-conducteurs

1.2.1 Généralités

Un cristal est un matériau caractérisé par un arrangement périodique et ordonné des atomes dans un espace à trois dimensions. Une structure cristalline est composée essentiellement d'une unité élémentaire appelée maille, un ensemble d'atomes disposés d'une façon spécifique et régulière, et d'un réseau. Les propriétés spectroscopiques d'un matériau représentent la signature de sa structure électronique, d'où on peut classer les matériaux solides, selon leurs résistivités, en trois grandes catégories qui sont les isolants, les semi-conducteurs et les métaux, comme indiqué dans la Fig. (1.1) ci-dessous [1] :

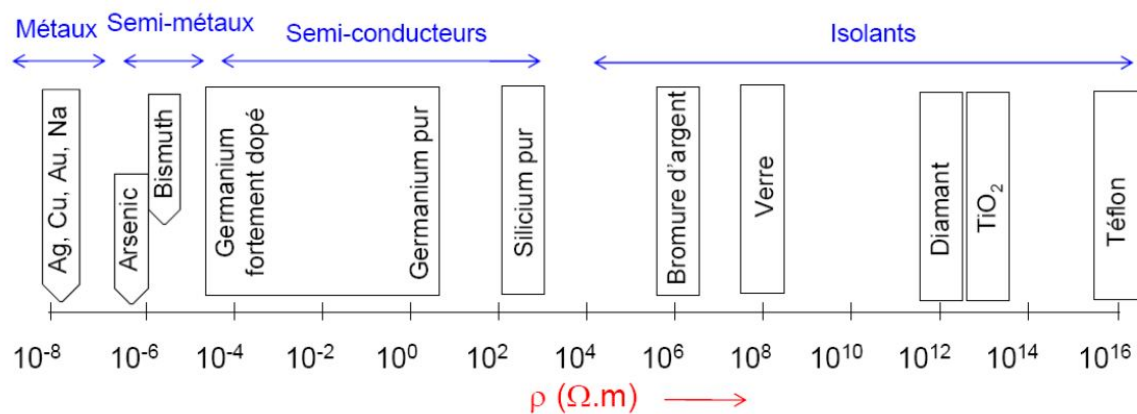


FIGURE 1.1 – Classification des matériaux selon leur résistivité électrique à 300 K [1].

1.2.2 Regroupement des familles semi-conducteurs

1.2.2.1 Semi-conducteur massif

Dans un cristal semi-conducteur massif, les porteurs de charge sont libres de se mouvoir selon les trois directions de l'espace. Une structure cristalline massive est composée essentiellement d'une unité élémentaire appelée maille, un ensemble d'atomes disposés d'une façon spécifique et régulière, et d'un réseau. Pour définir la forme et la taille d'une unité, six constantes sont nécessaires, à savoir 3 longueurs axiales et trois angles inter-axiaux. Dans un solide, les atomes, séparés par des distances très petites témoignent d'un recouvrement de leurs orbitales atomiques qui interagissent fortement entre elles. En passant de l'échelle atomique à l'échelle du matériau massif, on passe en réalité d'un diagramme en énergie sous forme de niveaux discrets à des structures de bandes d'énergie (Fig. (1.2)). Les

états des électrons à l'intérieur de ces bandes sont dits alors délocalisés et possèdent l'invariance de translation le long du cristal. Une conséquence immédiate est la naissance d'une bande d'énergie interdite aux électrons pour certains types de matériaux, la largeur de cette bande dépend (entre autre) de la distance interatomique a_0 (Fig. (1.3)(a)). L'énergie de cette bande interdite (BI), notée E_g est égale à l'espacement entre le haut de la bande de valence (BV), E_v , et le bas de la bande de conduction (BC), E_c . Il convient de noter que l'énergie de cette bande interdite est souvent appelée "gap". Cette figure montre que lorsque la liaison est plus courte (a_0 diminue), la bande interdite devient plus importante (E_g augmente).

$$E_g = E_c - E_v \quad (1.1)$$

Ces matériaux peuvent être classés selon le remplissage des bandes et la valeur du gap en isolants, semi-conducteurs et conducteurs. La Fig. (1.2) représente un schéma théorique du processus de formation des bandes d'énergie pour un cristal.

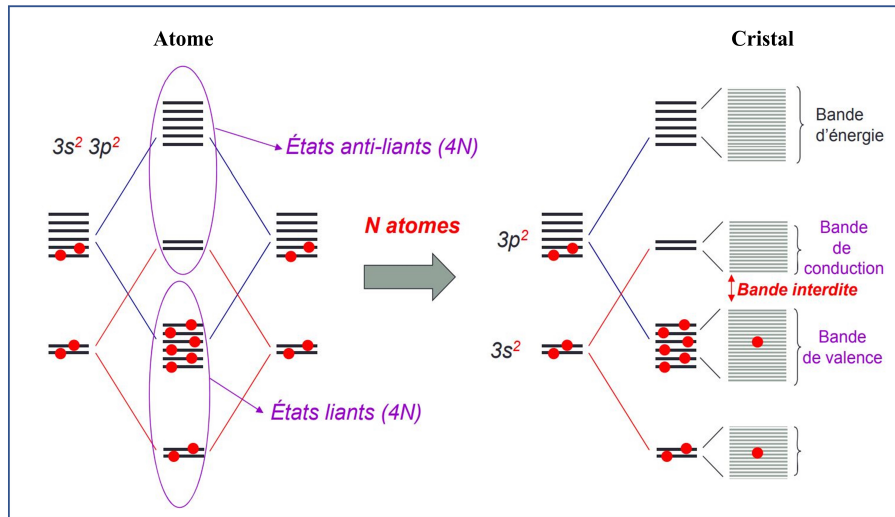


FIGURE 1.2 – Niveaux d'énergie dans l'atome isolé et la formation des bandes d'énergie dans un cristal.

Un matériau semi-conducteur, à l'état de repos, possède une faible énergie de BI ($E_g < 5$ eV). En effet, sa BV est remplie alors que sa BC est totalement dépourvue d'électrons. C'est un comportement purement isolant à 0 K. En excitant ce type de matériau (chauffage, irradiation lumineuse, dopage, ...) il est possible de faire migrer certains électrons de la BV vers la BC et de générer ainsi des particules "libres" qui participeront à la conduction électrique par plusieurs processus dépendant de la nature des bandes d'énergie. La BC et la BV se chevauchent pour un matériau conducteur, ce qui signifie qu'il n'y a pas de bande d'énergie interdite pour les électrons. Ces électrons, qualifiés de libres, contribuent à la conducti-

tivité électrique. La Fig. (1.3(b)) montre un exemple de la formation de ces bandes pour les électrons d'atomes de Si arrangés en mailles cristallines de type diamant en fonction de la distance inter-atomique, où on constate qu'il a une formation d'une BI $E_g = E_c - E_v = 1.1$ eV.

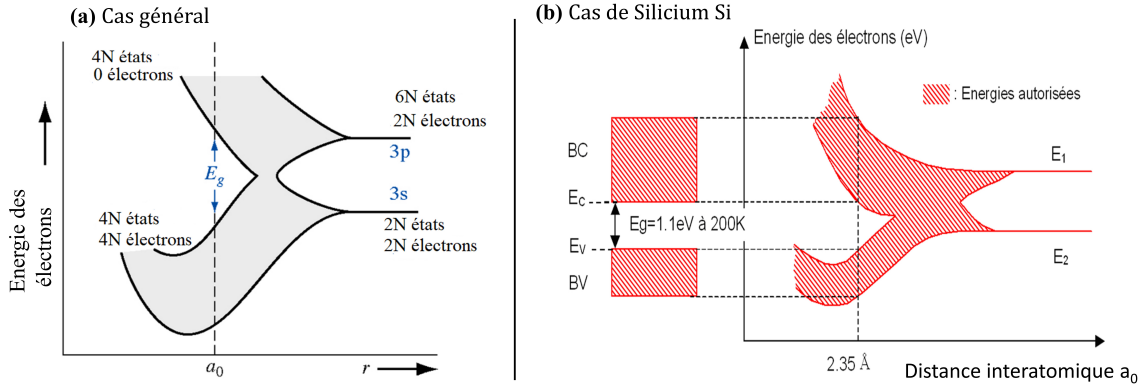


FIGURE 1.3 – (a) Schéma descriptif de la formation des bandes d'énergie en fonction de la distance interatomique a_0 , (b) pour les électrons d'atomes de Si arrangés en mailles cristallines de type diamant.

La relation entre l'énergie et le nombre d'onde d'un électron pour différentes bandes, généralement présentées sous forme graphique, est appelée «structure de bande». Pour les vrais cristaux, il s'agit d'une fonction multi-vallée assez compliquée contenant de nombreuses bandes et branches. La masse effective des électrons ne peut pas être considérée comme une constante, elle semble dépendre de l'énergie et diffère pour diverses branches (appelées «vallées», c'est-à-dire des minima locaux dans la BC. Dans un certain nombre de cas, la masse effective des électrons doit être décrite comme un tenseur de second rang. Cela signifie que l'accélération acquise par un électron diffère en direction de la force appliquée. Notamment, en optique, les événements à proximité immédiate des extrêmes de la BV et de la BC sont les plus importants. Les structures de bande d'un certain nombre de semi-conducteurs "photoniquement importants" sont esquissées sur la Fig. (1.4). On peut voir que pour GaN, GaAs et CdSe les extrêmes des bandes BV et BC ont le même nombre d'onde. Ceux-ci sont appelés « semi-conducteurs à gap direct ». Contrairement à ceux-ci, pour les cristaux de Si, Ge et GaP, le sommet de la BV ne coïncide pas en valeur k avec le minimum le plus bas de la BC. Ces types de cristaux sont généralement appelés «semi-conducteurs à gap indirect».

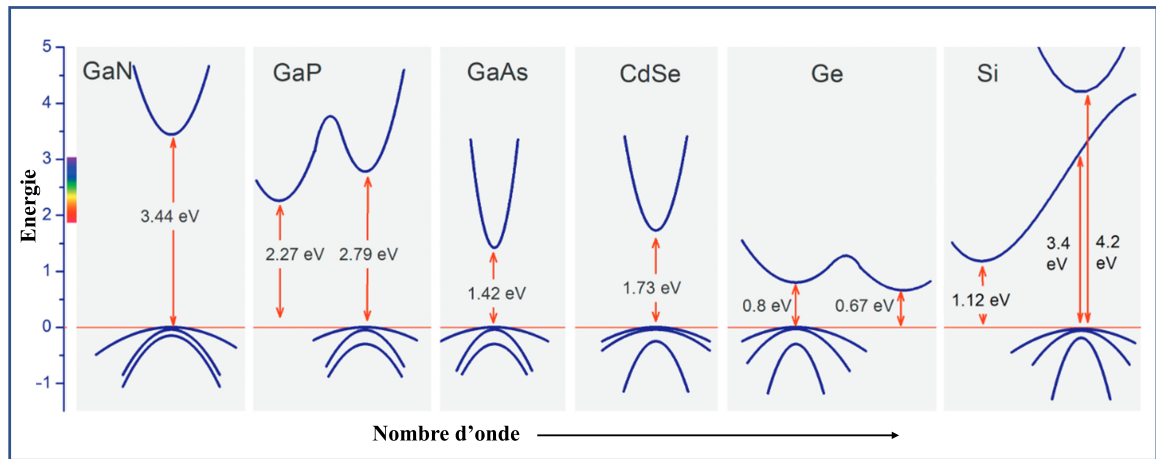


FIGURE 1.4 – Structures de bande d'un certain nombre de semi-conducteurs représentatifs. GaN, GaAs et CdSe sont à BI direct et GaP, Si et Ge sont des semi-conducteurs à BI indirect. Le haut de la BV est choisi comme niveau d'énergie zéro pour des raisons de commodité uniquement. Par rapport à un électron libre dans le vide, les cristaux ont différentes échelles d'énergie.

En général, La plupart des semi-conducteurs III-V comme le GaAs possède une structure de bande à gap direct où le maximum de la BV et le minimum de la BC se trouvent au même point c'est à dire ayant le même vecteur d'onde k dans la zone de Brillouin (Fig. (1.5)(a)). Ainsi, les électrons ayant une énergie égale à l'énergie du gap (E_g) passe de la BV à la BC sans changer leur quantité de mouvement. Dans ce cas, la probabilité de génération et de recombinaison de pair d'électron-trou est importante.

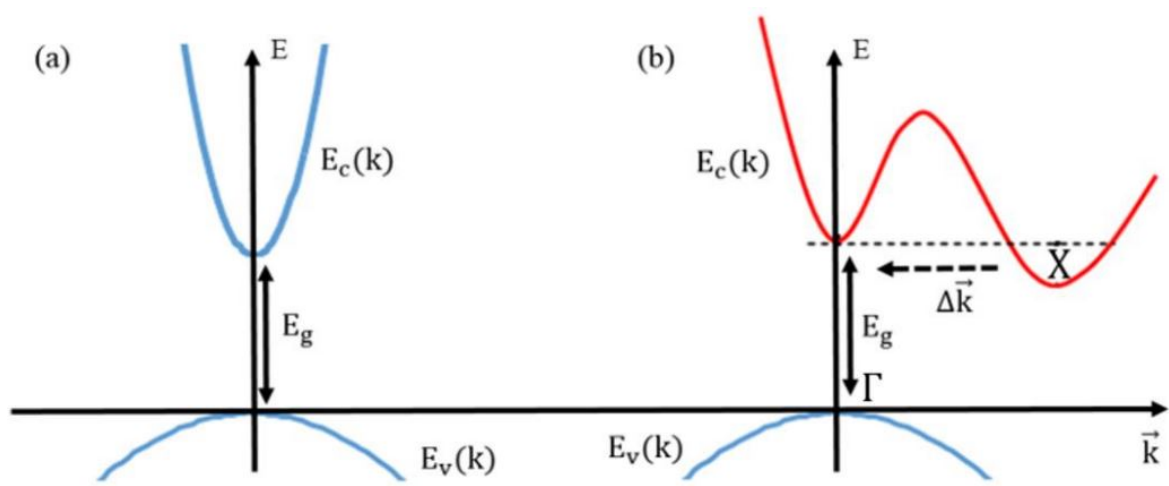


FIGURE 1.5 – Structure de bande d'un semi-conducteur à gap (a) direct et (b) indirect [2].

Les semi-conducteurs IV comme Si ont une structure de bande à gap indirect. Contrairement aux semi-conducteurs III-V, les deux bandes (BV et BC) se trouvent sur deux vecteurs d'ondes différents. Alors la recombinaison d'un électron et d'un trou de vecteurs d'ondes différents représentés dans la Fig. (1.5)(b) (électron en X (courbe rouge) et trou en Γ (courbe

bleu)) doit nécessairement se faire par l'intermédiaire d'un phonon en changeant sa quantité de mouvement $\mathbf{k}=\hbar \cdot \Delta \mathbf{k}$ afin de conserver le moment cristallin du réseau.

1.2.2.2 Les hétérostructures semi-conductrices

Dans un semi-conducteur massif, les électrons se répartissent dans les bandes d'énergie permises (conduction et valence) qui sont séparées par une BI (aussi appelée gap). Les porteurs de charges libres (électrons et trous) sont libres de se déplacer selon les trois directions de l'espace. Grâce aux performances des techniques de croissances, il est devenu possible d'élaborer des hétérostructures semi-conductrices ayant des propriétés optiques et électroniques très modifiées par rapport aux matériaux massifs. Ce type d'hétérostructures de basse dimensionnalité est fabriqué par empilement des matériaux de gaps de valeurs différentes. Une hétérostructure est un assemblage de couches de matériaux différents afin de créer des interfaces entre les différents matériaux qui peuvent modifier les propriétés électroniques et optiques des matériaux individuels. Les modèles d'hétérostructures comprennent ceux obtenus par la croissance d'une couche d'un matériau semi-conducteur à faible gap entre deux couches de matériaux semi-conducteurs ayant des gaps plus importants. La discontinuité entre les bandes d'énergie dans les deux matériaux crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs (électron et trou) dans ces nanostructures. Pour avoir une hétérojonction de grande qualité, il existe cependant certains critères à cette technique, en particulier, il faut que les paramètres de maille des deux matériaux soient proches assurant ainsi une structure cristalline parfaite. Si le désaccord de maille est trop important, l'énergie élastique emmagasinée par le dépôt va conduire à la formation de dislocations ou à des structures tridimensionnelles à la surface. La Fig. (1.6) représente le diagramme de l'énergie de la BI de certains alliages semi-conducteurs en fonction du paramètre de maille. D'après ce diagramme, on observe que GaAs est un matériau rayonne à des longueurs d'onde supérieures à la région visible, c'est-à-dire dans l'infrarouge, ayant un très bon accord de maille avec le AlAs. Cependant, l'ajout d'aluminium au GaAs avec une concentration η , produisant $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$, déplace la longueur d'onde dans la région rouge du spectre. Cette caractéristique serait donc parfaitement adapté au développement de dispositifs optoélectroniques fonctionnant dans cette gamme de longueurs d'onde comme les diodes et lasers à luminescence rouge [3] ainsi que pour la croissance de cellules solaires en accord de maille avec le GaAs [4].

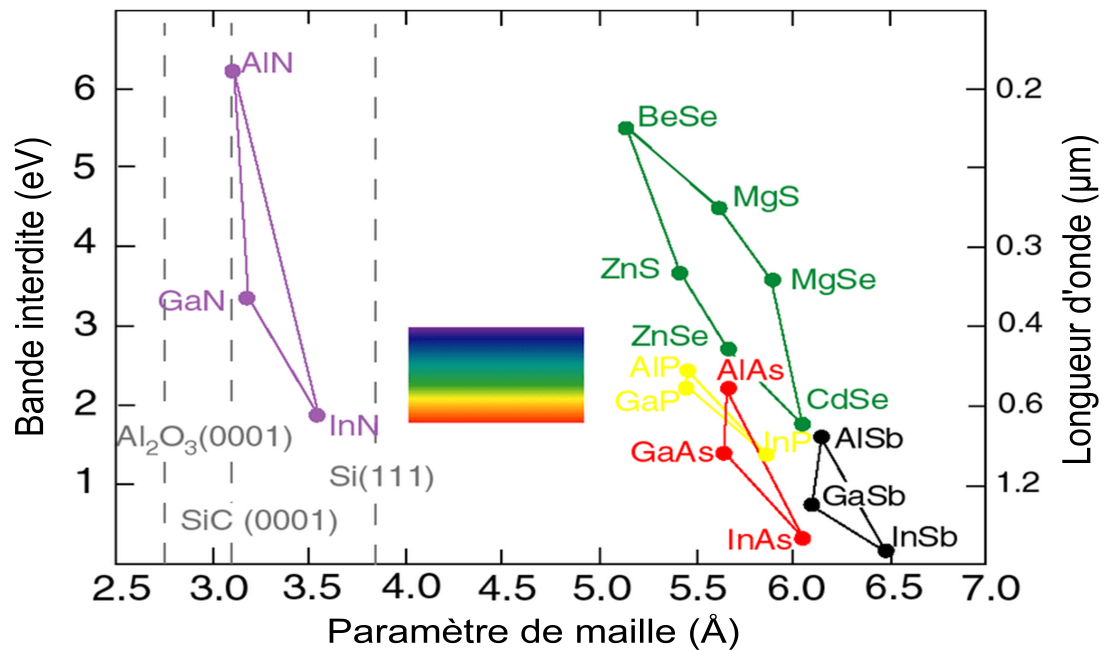


FIGURE 1.6 – Énergie de la BI en fonction du paramètre de maille de certains alliages semi-conducteurs [5].

A ce stade, on peut différencier les hétérostructures à base de semi-conducteurs selon deux critères essentiels :

1.2.2.2.1 Classification par dimensionnalité des nanostructures : Cette classification des nanomatériaux est basée sur le nombre de dimensions d'un matériau qui se situent en dehors de l'échelle nanométrique (<100 nm).

2D : Les nanostructures bidimensionnelles présentent une morphologie plane ou en forme de feuille. Elles sont souvent composées d'une seule couche ou de quelques couches d'atomes, formant une structure bidimensionnelle. Cette catégorie comprend principalement les puits quantiques, super-réseaux et miroirs de Bragg.

1D : Ces nanostructures ont une forme allongée bien définie le long d'une seule direction, tandis que les deux autres dimensions restent relativement petites et confinées. Cette catégorie comprend les nanotubes, les nanorods et les fils quantiques.

0D : Dans ces nanomatériaux, toutes les dimensions sont mesurées à l'échelle nanométrique (aucune dimension n'est supérieure à 100 nm). Les porteurs de charge (électrons et trous) sont confinés dans les trois dimensions de l'espace. Les nanomatériaux 0D les plus connus sont les boîtes quantiques, les nanoparticules et les cristaux photoniques.

1.2.2.2.2 Classification par composition chimique : Les matériaux semi-conducteurs peuvent être classés sur la base de leur composition chimique (inorganique ou organique) et sur la base de leur structure (semi-conducteurs cristallins, amorphes et liquides, ces derniers ne sont pas considérés ici). Dans la plupart des applications pratiques, des semi-conducteurs cristallins inorganiques sont utilisés, qui sont divisés en plusieurs groupes de base [6], ils peuvent être classés selon les sous-catégories suivantes :

Semi-conducteurs mono-éléments : Dans le tableau périodique des éléments de Mendeleïev, il est possible de ne trouver que quelques éléments simples, qui sont des semi-conducteurs. Les semi-conducteurs mono-éléments les plus importants se trouvent parmi les éléments du groupe IV : le carbone (C dans l'état graphite, diamant et d'autres formes), le silicium (Si), le germanium (Ge), l'étain gris (α -Sn). Les semi-conducteurs les plus importants du groupe IV sont Ge et Si qui ont un réseau cristallin de type diamant. Ensemble, ils peuvent former des séries continues de solutions solides Ge-Si qui ont également des propriétés semi-conductrices.

Semi-conducteurs composés : La structure cristalline de nombreux composés semi-conducteurs est caractérisée par des liaisons covalentes entre les atomes ainsi que par un réseau cristallin de type diamant ou bien de type Zinc-blende. Par conséquent, ces composés sont appelés semi-conducteurs de type diamant. Les composés binaires ($A^{III}B^V$ et $A^{II}B^{VI}$) ont joué un rôle essentiel dans de nombreuses avancées technologiques. Ils possèdent des propriétés électroniques, optiques et thermiques uniques qui les destinent à des applications dans les domaines de l'électronique, de l'optoélectronique, de la photovoltaïque, etc. Les technologies modernes des semi-conducteurs utilisent également des composés chimiques ternaires et encore plus complexes. Les semi-conducteurs de type diamant ont des propriétés similaires et peuvent créer des solutions solides isovalentes entre eux. Dans ces solutions solides, en changeant la composition d'un composé, il est possible de contrôler (en douceur et dans une très large gamme) des propriétés importantes des semi-conducteurs, y compris la BI et la mobilité des porteurs de charge. Cela ouvre une possibilité supplémentaire d'optimisation des paramètres du dispositif et permet une meilleure coordination des caractéristiques physiques des divers composants de l'équipement électronique.

Composés binaires : C'est une classe spécifique de composés de deux éléments différents, généralement des groupes III et V ou des groupes II et VI du tableau périodique. Les exemples les plus courants de composés semi-conducteurs binaires comprennent les composés III-V tels que l'arséniure de gallium (GaAs), le phosphure d'indium (InP) et le nitrure de gallium (GaN), ainsi que les composés II-VI tels que l'oxyde de zinc (ZnO), le sulfure de cadmium (CdS) et le tellure de cadmium (CdTe). Ces composés présentent souvent une mobilité électronique élevée, ce qui signifie que les électrons peuvent se déplacer dans le matériau avec un minimum de dispersion et de résistance.

Composés ternaires : Peuvent également avoir des propriétés semi-conductrices. Les plus importants d'entre eux sont les cuprites (CuAlS_2 , CuInS_2 , CuSbS_2 , CuFeSe_2), les composés à base de zinc (ZnSiAs_2 , ZnGeAs_2), le plomb (PbBiSe_2), le cadmium (CdHgTe) et autres. Les composés ternaires de type $A^{II}B^{IV}C^V$ sont généralement cristallisés dans un réseau de chalcopyrite ; ils peuvent également former des solutions solides les uns avec les autres. Les représentants typiques sont CdSnAs_2 , CdGeAs_2 et ZnSnAs_2 .

Avec plus de détails, tous ces groupes peuvent être organisés dans cet organigramme :

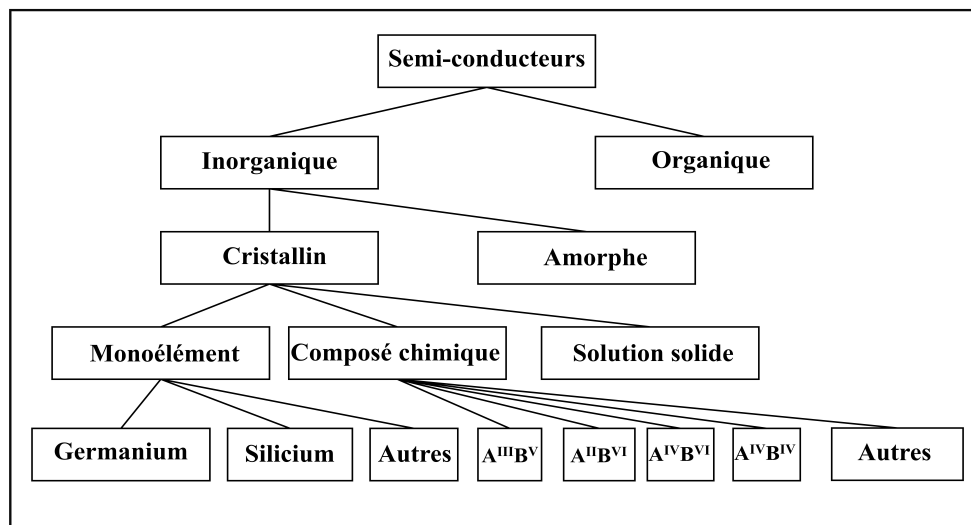


FIGURE 1.7 – Organigramme présentant les différents types de semi-conducteurs organiques à l'état cristallin.

1.3 Etats électroniques dans les hétérostructures semi-conductrices

Des perturbations faibles et à longue portée de symétrie cristalline parfaite peuvent être causées, par exemple, par un champ électrique externe, ou par la présence d'un atome

dopant chargé. La Fig. (1.8) montre schématiquement le potentiel de réseau perturbé en présence d'un atome dopant chargé positivement.

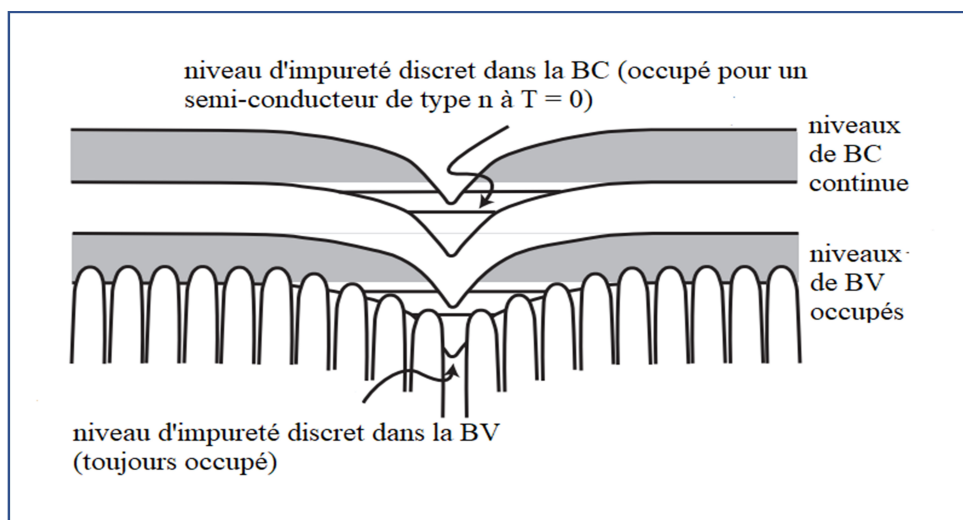


FIGURE 1.8 – Niveaux d'énergie continus et discrets au voisinage d'un atome dopant dans un semi-conducteur.

Il existe un certain nombre de méthodes différentes pour déterminer les états propres dans les bandes des hétérostructures semi-conductrices dans le cas d'une perturbation interne ou externe. Ces méthodes diffèrent essentiellement par l'ensemble des fonctions de base utilisées comme point de départ, en fonction du type de perturbation. Des physiciens ont utilisés les états de Bloch comme une base des états [7], les techniques *ab initio* avec des hypothèses faibles et peu de paramètres modifiables, ont été développées pour identifier les états propres dans les hétérostructures semi-conductrices. Ils ont été utilisés avec succès pour calculer plusieurs caractéristiques solides. Certaines qualités sont simplifiées et exprimées en termes de paramètres qui sont trouvés en ajustant les données expérimentales pour économiser de l'argent. Ces calculs incorporant des paramètres modifiés empiriquement sont appelés modèles empiriques [8]. Plusieurs modèles empiriques ont été suggérés pour prédire les états propres dans les hétérostructures semi-conductrices, mais seuls trois qui sont largement utilisés pour analyser les nanostructures semi-conductrices : l'approche pseudopotentiel [9], la méthode des liaisons fortes [10] et la méthode $\mathbf{k.p}$ [11].

La technique du pseudopotentiel et la méthode des liaisons étroites sont des modèles atomistiques qui incorporent plusieurs caractéristiques atomistiques, mais la méthode $\mathbf{k.p}$ exclut toute caractéristique atomistique. Dans tous les cas, les paramètres d'entrée nécessaires sont souvent établis de manière empirique en ajustant une série d'essais. Cependant, ces pa-

ramètres peuvent également être obtenus à l'aide de calculs de premier principe ou, dans certains cas, par un mélange de calculs atomistiques et d'ajustement empirique. Ces modèles, qui donnent une relation de dispersion d'énergie sur toute la zone de Brillouin, ont une limitation en ce sens qu'ils ne fournissent pas d'expressions explicites pour interpréter les données expérimentales, telles que la masse effective, la force de l'oscillateur, etc. Nous travaillerons dans le deuxième chapitre dans le cadre de l'approximation de la fonction d'enveloppe et la discussion sera restreinte à une perturbation d'une BC parabolique avec un minimum à Γ comme le cas du GaAs, ces approches ont été largement utilisées dans les travaux antérieurs des encadrants de cette thèse [12].

1.3.1 Formalisme de la fonction enveloppe

La majorité des modèles de structure électronique de nanocristaux sont basés sur l'approximation de masse effective, dans laquelle les états d'un semi-conducteur confiné sont décrits à l'aide de la méthode de la fonction enveloppe. Le problème des électrons interagissant entre eux et avec les noyaux d'un solide est très délicat à résoudre. Avant de poser une fonction enveloppe adéquate, passons en revue deux approximations majeures qui ont été proposées pour trouver une solution : l'approximation de Born-Oppenheimer et l'approximation de Hartree-Fock :

1.3.1.1 Approximation de Born-Oppenheimer

Cette approximation consiste à découpler le mouvement des électrons de celui des noyaux, en estimant que leur mouvement est beaucoup plus lent que celui des électrons : on les considère comme fixes dans l'étude du mouvement des électrons de la molécule. On traite alors les distances internucléaires comme des paramètres. Dans ce cas, l'énergie cinétique des noyaux peut être ignorée et l'énergie potentielle décrivant leur interaction devient une constante qui peut être choisie comme nouvelle origine des énergies. Elle a une conséquence calculatoire immédiate, qu'on appelle hypothèse adiabatique. Pour mieux comprendre le contexte de cette méthode, considérons un système à deux corps, l'atome d'hydrogène par exemple, où il y a une interaction Coulombienne entre un électron et un proton. On peut toujours ramener l'étude du mouvement de deux corps à celui d'un seul corps, dit "mobile fictif", dans le référentiel du centre de masse. Le centre de masse est ici pratiquement

confondu avec le proton puisque la masse d'un proton plus grande que celle de l'électron ($m_p \gg m_{e^-}$). Par ailleurs, la masse μ de notre mobile fictif est pratiquement celle de l'électron :

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_{e^-}} + \frac{1}{m_p} \quad (1.2)$$

L'idée de cette approximation est de ramener un problème à deux corps à un problème d'un seul corps 'fictif' et de traiter le mouvement électronique et le mouvement nucléaire dans les molécules séparément où la résolution analytique exacte de l'équation de Schrödinger est possible. Cette approximation peut être généralisé à une molécule diatomique, dont les noyaux, qui sont considérés comme ponctuels vis-à-vis de l'étendue du mouvement des électrons, sont distants d'une longueur R . Lorsque le système est généralisé à N corps, la difficulté persiste et une solution analytique devient presque impossible.

1.3.1.2 Approximation de Hartree-Fock

Cette approximation a été proposée pour simplifier grandement et résoudre une problématique à N corps en interaction, elle consiste à remplacer l'interaction de chaque électron de l'atome avec tous les autres par l'interaction avec un champ moyen créé par les noyaux et la totalité des autres électrons, c'est-à-dire que l'électron se déplace indépendamment dans un champ moyen créé par les autres électrons et noyaux. Cette approche permet de ramener un problème de N électrons à un problème à un électron dans un potentiel périodique $V(r)$.

Avec ces deux approximations, l'équation de Schrödinger caractérisant le déplacement de l'électron dans un cristal sous l'influence d'un potentiel perturbateur $U(\mathbf{r})$ s'écrit [13] :

$$[H_0 - U(\mathbf{r})] \Psi_n(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \Psi_n(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

où H_0 est l'hamiltonien du réseau non perturbé qui s'écrit comme suit :

$$H_0 = \frac{P^2}{2m_e} + V(r) \quad (1.4)$$

Nous développons les fonctions d'ondes $\Psi_n(\mathbf{r})$ sur la base des états de Bloch, comme solution de l'équation (1.3) :

$$\Psi_n(\mathbf{r}) = \sum_{n,\mathbf{k}} F_n(\mathbf{k}) \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.5)$$

Or, les états propres $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ de cette particule confinée ‘électron’ dans un cristal non perturbé sont des solutions de l’Hamiltonien périodique H_0 (1.4), écrit comme ondes planes modulées ayant la périodicité du réseau [14] :

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.6)$$

La solution correspondante à ces états propres de Bloch s’écrit dans le cadre de l’approximation de la masse effective aux extrémités des bandes comme les relations de dispersion suivantes :

$$E_n(\mathbf{k}) = E_{n0} + \frac{\hbar^2 k}{2m_e^*} \quad (1.7)$$

en introduisant la fonction enveloppe $F(\mathbf{r}) = \sum_{n,\mathbf{k}} a_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, on aboutit à l’équation de Schrödinger dans sa forme finale et dans l’approximation de la fonction enveloppe :

$$\sum_{n,\mathbf{k}} \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) [E_n(\mathbf{k}) - E + U(\mathbf{r})] F_n(\mathbf{k}) = 0 \quad (1.8)$$

où nous avons multiplié par $\psi_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r})$ et intégré sur \mathbf{r} , après nous utilisons l’orthogonalité des états de Bloch pour introduire les éléments matriciels du potentiel perturbateur $U_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}}$:

$$U_{n'\mathbf{k}',n\mathbf{k}} = \iiint d^3r \psi_{n'\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.9)$$

Les références suivantes [15, 16] fournissent plus de détails sur le calcul de la fonction enveloppe.

1.3.2 Propriétés physico-chimiques de l’arséniure de gallium

La préparation de nanostructures semi-conductrices via différentes techniques est un domaine d’intérêt considérable depuis la dernière décennie. Parmi tous les autres semi-conducteurs, en particulier ceux de la classe III-V, notre étude se concentre sur l’arséniure de gallium (GaAs). Le GaAs est un semi-conducteur III-V complexe composé de l’élément le gallium (Ga) de la colonne III et l’élément de l’arsenic (As) de la colonne V du tableau périodique des éléments. Cet alliage binaire a d’abord été créé par la société Goldschmidt en 1929, mais les premières propriétés électroniques de ce semi-conducteur ne furent démontrées qu’en 1952 [17]. Ce composant ayant une BI directe à $T = 300$ K de 1,42 eV a attiré beaucoup d’attention en raison de sa large gamme d’applicabilité dans la physique des dispositifs. GaAs est considéré comme l’un des candidats les plus appropriés pour la fabrication de dispositifs photovoltaïques [18], d’hétérostructures, de lasers à semi-conducteurs [19] et

de diodes électroluminescentes [20]. La BI du GaAs augmente à l'échelle nanométrique, ce qui entraînera un déplacement de la gamme spectrale des dispositifs photovoltaïques tels que les cellules solaires et, par conséquent, il peut être utilisé dans une large gamme spectrale. Il est bien connu que les matériaux avec une BI plus grande ont des tensions de circuit ouvert et des facteurs de remplissage plus élevés, tandis que les matériaux à faible BI tels que GaAs conduisent à un courant photoélectrique élevé, ce qui entraîne une augmentation de l'efficacité de la cellule solaire. En outre, le GaAs sont l'un des matériaux les plus appropriés pour fabriquer une cellule solaire [21]. En effet, il possède un certain nombre de propriétés structurelles, thermiques et électriques spécifiques, que nous résumons dans le tableau (1.1) dressé ci-dessous [22] :

TABLE 1.1 – Propriétés du GaAs à température ambiante ($T=300\text{ K}$).

| Propriété | Valeur |
|-----------------------------------|---------------------------------------------|
| Structure cristalline | Zinc blende |
| Paramètre de maille | 5,65 Å |
| Densité | 5,32 g.cm ⁻³ |
| Densité atomique | 4,5.10 ²² atomes/cm ³ |
| Masse molaire | 144,64 g |
| Coefficient d'expansion thermique | 5,8.10 ⁻⁶ K ⁻¹ |
| Chaleur spécifique | 0,327 J/g.K |
| Constante diélectrique | 12.85 |
| Mobilité des électrons (non dopé) | 8500 cm ² /V.s |
| Mobilité des trous (non dopé) | 400 cm ² /V.s |
| Point de fusion | 1238 °C |

L'arséniure de gallium comme la plupart des matériaux III-V cristallise dans la structure sphalérite dite "Zinc Blende" présentée sur la Fig. (1.9). Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (C, Ge, Si, etc.), est constituée de deux sous réseaux cubique face centrée (*cfc*), l'un est occupé par des anions de la V^{eme} colonne, l'autre par des cations de la III^{eme} colonne, décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale, c'est-à-dire $a\sqrt{3}/4$, où a représente le paramètre de maille du matériau. Celui-ci vaut 5,653 Å pour le GaAs.

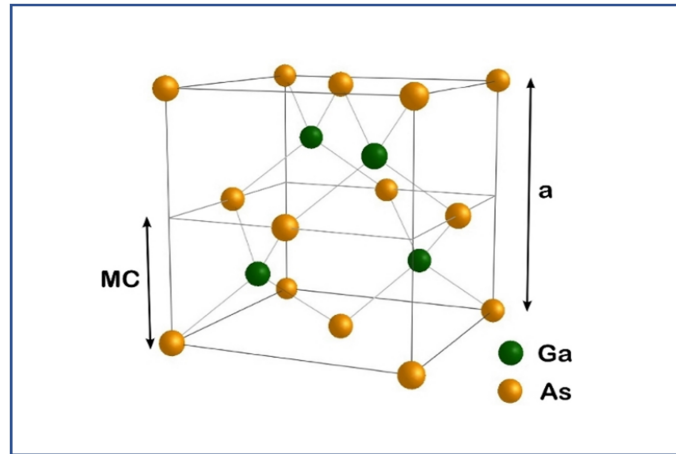


FIGURE 1.9 – Schéma de la maille Zinc-Blende du GaAs. Le paramètre de maille a est double de la distance entre deux plans atomiques identiques qui constituent une monocouche [17].

Dans les hétérostructures, il y a 8 électrons extérieurs par unité de cellule qui contribuent aux liaisons chimiques et aux propriétés électroniques. Les orbitales de chaque atome (s -like ou p -like) s'hybrident avec une orbitale de l'atome voisin, ce qui donne deux niveaux : un niveau de liaison et un niveau d'antiliason.

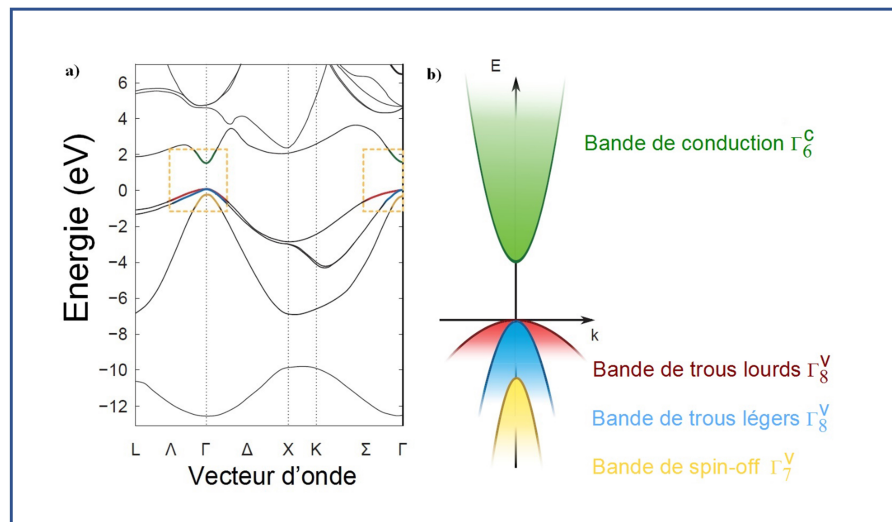


FIGURE 1.10 – Structure de bande de GaAs : (a) calcul $\vec{k} \cdot \vec{p}$ sur l'ensemble de la zone de Brillouin, (b) approximation parabolique au voisinage de $\vec{k} = \vec{0}$ en Γ [23].

Les orbitales de type s et de type p de chaque atome de Gallium "Ga" s'hybrident avec les orbitales des atomes d'Arsénium "As" et forment des liaisons covalentes tétraédriques de type sp^3 : 4 orbitales liantes et 4 orbitales antiliantes. Les quatre orbitales liantes donnent lieu à quatre bandes d'énergie, chacune deux fois dégénérée de spin et forment la BV. De ce fait, dans les matériaux III-V, les liaisons atomiques ne sont pas simplement covalentes comme dans le Silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. La Fig. (1.10) représente la structure de bande électronique du GaAs.

On observe que le minimum absolu de la BC se situe au centre de la zone de Brillouin (appelée point Γ). Comme nous le verrons, de telles différences ont un fort impact sur leurs propriétés optiques (voir la Fig. (1.10) ci-dessus.

1.3.3 Théorie des états électroniques des impuretés et états excitoniques

Le rôle des porteurs de charge mobiles est un facteur clé dans le fonctionnement des dispositifs à semi-conducteurs. Ces porteurs libres sont fournis par le dopage des semi-conducteurs avec certains types d'impuretés. Les propriétés électriques et optiques des semi-conducteurs peuvent donc être ajustées en introduisant ("dopage") des porteurs de charge dans le matériau, qui agissent comme des impuretés [24]. Cependant, certaines autres impuretés et certains défauts cristallins ont souvent des effets néfastes sur les performances du dispositif. Ces impuretés et défauts créent des niveaux d'énergie discrets dans la BI du semi-conducteur hôte et exercent diverses influences (utiles ou néfastes) sur les caractéristiques du semi-conducteur. Il est donc très important de connaître la structure électronique des impuretés et des états de défaut dans les semi-conducteurs.

Les impuretés peu profondes peuvent être traitées théoriquement en utilisant l'approximation de la masse effective et le modèle de l'atome d'hydrogène. L'électron excédentaire se déplace sur une orbite autour de l'ion d'impureté en raison de l'interaction Coulombienne entre eux dans le cristal hôte, tout comme l'atome d'hydrogène. Le potentiel de Coulomb est beaucoup plus faible que celui de l'atome d'hydrogène en raison de l'effet d'écran des électrons de valence (changement de la distribution des électrons de valence autour de l'ion d'impureté) dans le réseau cristallin. Le potentiel de Coulomb s'écrit comme suit :

$$U_C(\mathbf{r}) = \frac{Ze^2}{\varepsilon_r \mathbf{r}} \quad (1.10)$$

où Z est le nombre de valence de l'ion d'impureté, e la charge élémentaire, ε_r la constante diélectrique du matériau semi-conducteur et \mathbf{r} est le vecteur position entre l'électron et l'ion d'impureté. l'effet de polarisation électrique est effectivement représenté par la constante diélectrique ε_r .

Ainsi, l'électron est très faiblement lié à l'ion d'impureté (très faible énergie de liaison) et sa fonction d'onde s'étend dans la large gamme du réseau cristallin. Par conséquent, l'électron

se déplace en ressentant à la fois le potentiel périodique du cristal et le potentiel de Coulomb. L'effet du potentiel périodique sur le mouvement des électrons est bien décrit en termes de "masse effective" m^* , c'est-à-dire que les électrons dans le potentiel périodique du cristal se comportent comme s'ils étaient des électrons libres, leur masse m^* étant différente de celle m_0 dans le vide. Par conséquent, les électrons dans l'orbite autour des ions d'impureté peu profonds peuvent être considérés comme des électrons avec une masse effective m^* se déplaçant dans le potentiel de Coulomb $U_C(\mathbf{r})$. L'équation fondamentale de Schrödinger pour ces électrons s'écrit comme suit :

$$[H_0 + U_C(\mathbf{r})]\Psi_n(\mathbf{r}) = E_n \Psi_n(\mathbf{r}) \quad (1.11)$$

L'Hamiltonien H_0 caractérise le déplacement de l'électron et $\Psi_n(\mathbf{r})$ la fonction d'onde, développée par les fonctions de Bloch ou leurs transformées de Fourier (les fonctions de Wannier), mentionné précédemment dans l'équation (1.5), et substituée dans l'équation. On obtient ainsi l'équation suivante :

$$[H_0 + U_C(\mathbf{r})]\psi_n(\mathbf{r}) = E_n \psi_n(\mathbf{r}) \quad (1.12)$$

L'équation ci-dessus est pour le cas de la BC isotrope (dans laquelle la masse effective est la même pour toutes les orientations du cristal). La solution de cette équation est bien connue pour 'l'atome d'hydrogène'. Les états électroniques de l'atome d'hydrogène sont spécifiés par le nombre quantique principal n , le nombre quantique du moment angulaire l , le nombre quantique magnétique m et le nombre quantique du spin s .

L'état où $n = 1$ et $l = 0$ est appelé l'état $1s$ (l'état fondamental : l'état de la plus basse énergie). Les états de plus haute énergie (les états excités) sont donc appelés états $2s$ ($n = 2$, $l = 0$), $2p$ ($n = 2$, $l = 1$), $3s$ ($n = 3$, $l = 0$), $3p$ ($n = 3$, $l = 1$), $3d$ ($n = 3$, $l = 2$) et ainsi de suite. Les énergies E_n de ces états obtenus à partir de l'équation ci-dessus sont données comme suit :

$$E_n = \frac{-E_0}{n^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1.13)$$

$$E_0 = (\varepsilon_0/\varepsilon_r)^2 (m^*/m_0) E_R$$

E_R est l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène nommée la constante de Rydberg. Dans la Fig. (1.11), les niveaux d'impuretés peu profonds sont représentés schématiquement dans le cas d'ions donneur et accepteur.

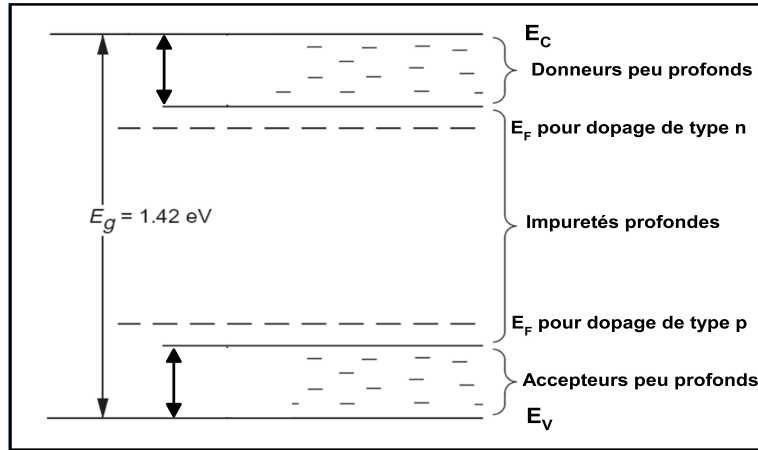


FIGURE 1.11 – Diagramme de bande d'énergie de GaAs avec différents types d'impuretés [25].

Après excitation optique, un électron déplacé de la BV à la BC laisse derrière lui une quasi-particule de charge positive : le trou, ce qui crée une paire électron-trou appelée exciton. Après désexcitation, l'électron et le trou vont se recombiner en émettant un photon dont l'énergie est égale à l'énergie du gap. C'est le phénomène de la fluorescence. Ceci dit, lors d'une transition interbande, l'électron et le trou photo-crées sont couplés par l'interaction Coulombienne (c'est un état lié). Cette attraction modifie largement le profil d'absorption, en autorisant des transitions optiques à des énergies inférieures à la largeur de la BI. Normalement, sans cette interaction Coulombienne, les transitions optiques ne seraient autorisées qu'à des énergies égales ou supérieures à la largeur de la BI du matériau puits. Cependant, grâce à l'interaction électron-trou, des transitions optiques interbandes peuvent se produire à des énergies inférieures à la largeur de la BI.

Pendant la phase de l'excitation, les électrons migrent de la BV à la BC et vice-versa en vertu de l'énergie thermique apportée par la nature de la sollicitation extérieure. Lors de la recombinaison radiative, il y a conservation de l'énergie et conservation du vecteur d'onde \vec{k} . Dans le cas des semi-conducteurs à gap direct, la recombinaison est donc directe et se fait sans changement de vecteur d'onde tandis que pour les semi-conducteurs à gap indirect, lorsqu'un électron émet un photon, il doit forcément émettre ou absorber un phonon ayant la possibilité d'avoir un vecteur d'onde avec le même ordre de grandeur que celui des électrons, il permet le passage de l'électron du niveau le plus bas de la BC au plus haut niveau de la BV. Dans le cas des semi-conducteurs à gap direct, le taux d'émission des photons est beaucoup plus élevé d'où leur importance dans le domaine optoélectronique.

L'énergie fondamentale de l'exciton n'est que la différence d'énergie entre le premier état excité de l'électron dans la BC et le premier niveau du trou dans la BV et elle s'écrit :

$$E_{ex} = E_{1s}^e - E_{1s}^h \quad (1.14)$$

Cette énergie dépend fortement de la taille de la nanostructure comme déjà montré dans des travaux antérieurs [26]. On note que, l'exciton se caractérise par sa masse réduite :

$$\mu = \frac{m_0}{\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}} \quad (1.15)$$

où m_0 est la masse de l'électron libre et $m_{e(h)}^*$ représente la masse effective de l'électron (trou). Son rayon de Bohr a_B qui renseigne sur sa taille : c'est la moitié de la distance moyenne séparant l'électron du trou, il dépend du matériau utilisé. Le régime de confinement est déterminé par la valeur de ce rayon de Bohr.

1.4 Nanostructures basées sur les semi-conducteurs de type III-V

1.4.1 Phénomène de confinement quantique

Pour éclairer ce concept fondamental, commençons par considérer l'exemple le plus simple de nanostructure de faible dimension, appelé PQ semi-conducteur [7]. Ce dernier correspond à une tranche nanométrique d'un matériau à petit gap A (e.g. GaAs) entouré de part et d'autre d'un matériau à grand gap B (e.g. AlGaAs).

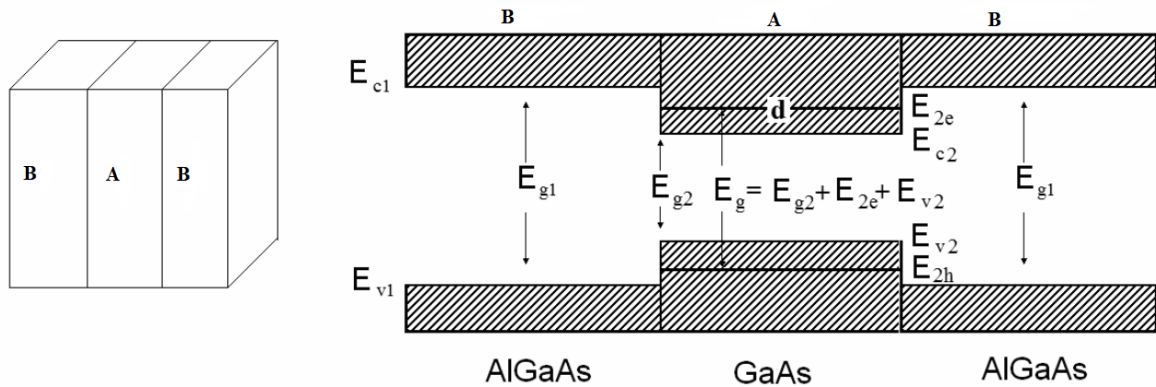


FIGURE 1.12 – Modèle de PQ à l'hétérojonction AlGaAs/GaAs/AlGaAs, avec $E_{g1} = E_{c1} - E_{v1}$ et $E_{g2} = E_{c2} - E_{v2}$ sont les largeurs des BIs du matériau de la barrière et du matériau du puits, respectivement,[27].

En raison de la valeur de décalage de bande identique aux deux interfaces, à l'échelle

macroscopique, les électrons de conduction et les trous connaîtront un profil de potentiel de puits carré ; par conséquent, le mouvement du porteur - toujours libre le long du plan d'interface - sera spatialement confiné dans la tranche manométrique du matériau A . Puisque dans cet exemple les électrons sont caractérisés par un sous-espace de mouvement libre bidimensionnel, de telles nanostructures à PQs sont également appelées bidimensionnelles systèmes ($D=2$).

Sur le plan mathématique, la théorie du confinement quantique prédit que l'effet de confinement se produit lorsque les dimensions du matériau semi-conducteur sont de l'ordre de la longueur d'onde de Broglie associée à l'électron, cette longueur d'onde vaut :

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{P} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e^*\varepsilon}} \quad (1.16)$$

avec : m_e^* la masse effective de l'électron libre dans la bande de conduction (BC), \hbar la constante de Planck réduite, et ε l'énergie de l'électron à son état propre. Ce phénomène conduit à la réduction de degré de liberté des porteurs et a un impact sur la densité de ses états électroniques notée DOS, définie pour toute bande donnée v , comme :

$$g(\epsilon) = \sum_k \delta(\epsilon - \epsilon_{k,v}) \equiv \frac{d}{d\epsilon} N_v(\epsilon) \quad [J^{-1}.m^{-3}] \quad (1.17)$$

où $N_v(\epsilon)$ est le nombre d'états dans la bande, par unité de volume, d'énergie inférieure à ϵ . Pour mieux illustrer la classification des nanostructures en se basant sur DOS, nous montrons dans la Fig. (1.13) le DOS correspondant à une famille idéale de nanostructures GaAs/AlAs (massif (3D), PQ (2D), FQ (1D), et BQ (0D)) pour les électrons. Nous notons, selon la Fig. (1.13), que la géométrie spécifique de la nanostructure joue également un rôle dans la variation de sa DOS. En effet, la DOS des porteurs de charge confinées dans les nanostructures tend à se discriminer au fur et à mesure que l'ordre de confinement augmente, jusqu'à atteindre un confinement dans les trois directions dans le cas d'une BQ, où la DOS se présente sous la forme d'une succession de pics de Dirac. Alors, le scénario rapporté dans cette figure confirme que la dimensionnalité D de la nanostructure examinée et, inversement, le degré de confinement peuvent être déterminés sans ambiguïté à partir du DOS correspondant.

De plus, dans les nanostructures à base des semi-conducteurs, le confinement quantique est assuré par la discontinuité de la BI aux interfaces (voir la Fig. (1.12)). Pour les structures

qui satisfont aux conditions de confinement énoncées par l'équation (1.17), le mouvement des porteurs de charge est restreint et quantifié le long de la direction de confinement, ce qui donne lieu à une série de niveaux d'énergie discrets plutôt qu'à une bande d'énergie continue observée dans les matériaux massifs. Cette quantification des niveaux d'énergie est un résultat direct de l'effet de confinement quantique.

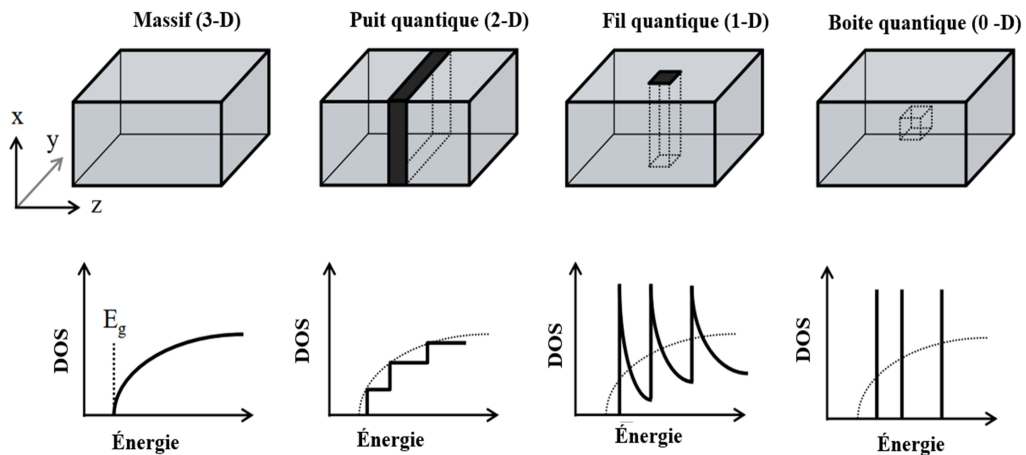


FIGURE 1.13 – DOS pour des particules ayant trois (massif, 3D), deux (PQ, 2D), un FQ, 1D) et zéro (BQ, 0D) degrés de liberté spatiale.

1.4.2 Généralités sur les hétérostructures à basse dimension

Comme prévu, la technologie moderne des semi-conducteurs a ouvert la voie à la fabrication massive d'hétérostructures dites semi-conductrices, obtenues en combinant correctement différents matériaux semi-conducteurs au sein d'un même processus de croissance. L'échelle spatiale typique des matériaux constitutifs peut varier de l'échelle micrométrique à l'échelle nanométrique, auquel cas de telles hétérostructures - également appelées « nanostructures » - peuvent présenter de véritables effets de mécanique quantique en raison du confinement spatial des porteurs induit par la discontinuité des bandes aux différentes interfaces semi-conductrices.

Grâce aux progrès impressionnants et continus de la nanotechnologie de la croissance épitaxiale, en plus des PQs ($D=2$), au cours des deux dernières décennies, il a été possible de fabriquer des nanostructures de dimensionnalité inférieure, à savoir des FQs ($D=1$) et des BQs ($D=0$) [28]. D'une manière générale, les FQs semi-conducteurs sont des nanostructures où les électrons et/ou les trous sont soumis à un profil de confinement bidimensionnel et sont donc autorisés à se déplacer librement à l'intérieur d'un objet nanométrique en forme de fil

uniquement. Parmi les diverses réalisations expérimentales de systèmes FQs, il convient de mentionner le fil en forme de T à base de GaAs confiné par AlGaAs, représentés sur la Fig. (1.14)-(a), qui est considéré parmi les premières nanostructures réalisées. Le concept de T - initialement proposé par Leona Esaki et ses collègues [28] - a été réalisé expérimentalement via la méthode dite de surcroissance du bord clivé ‘cleaved-edge overgrowth method’, une technique d’épitanie par jets moléculaire (EJM) qui utilise une repousse de haute qualité sur le bord clivé d’un échantillon multicouche (voir la sous-section : ‘Synthèse des différents BQs’).

Comme j’ai mentionné précédemment, à l’opposé des PQs et des FQs, dans les BQs semi-conducteurs (voir Fig. (1.14) (b-c)) - souvent appelés macroatomes semi-conducteurs, les électrons et les trous sont soumis à un potentiel de confinement tridimensionnel, et donc il n’y a absolument aucune direction de mouvement libre ; comme nous le verrons, cette caractéristique clé donne lieu à des spectres d’énergie à un seul électron partiellement discrets, jamais présents pour les systèmes de dimensionnalité supérieure, comme les PQs et les FQs.

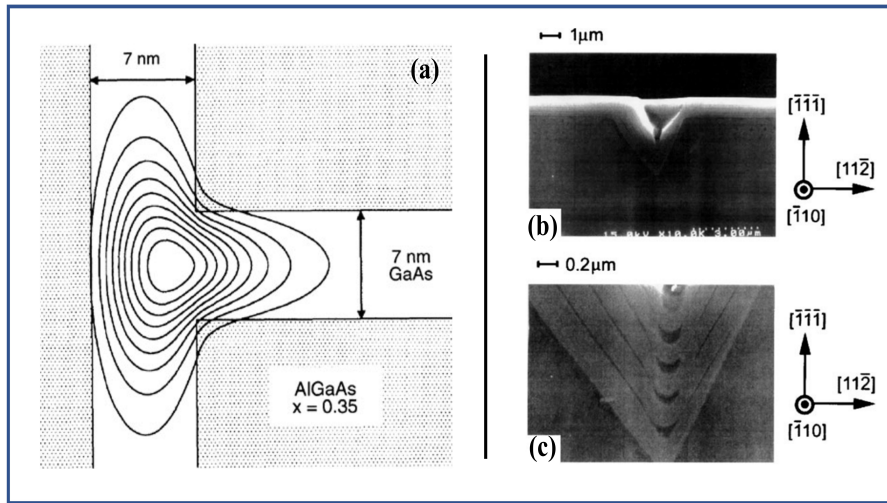


FIGURE 1.14 – (a) Intersection en forme de T de deux PQs en coupe transversale. Les contours sont des lignes de densité de charge constante correspondant aux électrons spatialement confinés dans le FQ [29]. (b-c) Vue latérale des multicouches GaAs/AlGaAs développées dans des substrats en forme de tétraèdre [30].

1.4.3 Nanostructures couplées

Les nanostructures couplées font référence à deux structures nanométriques ou plus qui sont physiquement ou chimiquement liées ensemble afin de créer de nouvelles

propriétés ou fonctions qui ne sont pas présentes dans les composants individuels. Ces structures peuvent être constituées d'une variété de matériaux, tels que des métaux, des semi-conducteurs et des polymères, et peuvent être de différentes formes et tailles. Le couplage de ces structures peut conduire à de nouvelles propriétés électroniques, optiques ou magnétiques et peut être utilisé dans un large éventail d'applications, telles que le stockage d'énergie, la détection et l'imagerie biomédicale. Il peut également se présenter sous la forme d'un système hybride composé de deux ou plusieurs matériaux différents aux propriétés différentes qui sont assemblés pour créer un nouveau système. Il existe de nombreux types de nanostructures couplées, notamment [31] :

1. **Nanostructures hybrides** : elles sont constituées de deux ou plusieurs types de matériaux différents, tels qu'un semi-conducteur et un métal.
2. **Nanostructures cœur-coquille** : elles sont constituées d'un matériau cœur entouré d'un matériau coquille.
3. **Nanostructures de super-réseau** : elles sont constituées de couches de différents matériaux empilées les unes sur les autres.
4. **Hétérostructures** : elles sont constituées de deux ou plusieurs types de matériaux différents, mais avec des orientations et des interfaces de réseau cristallin spécifiques.
5. **Nanostructures hybrides organiques-inorganiques** : Elles sont composées à la fois de matériaux organiques et inorganiques.
6. **Nanostructures auto-assemblées** : elles sont formées par l'auto-organisation d'atomes ou de molécules.
7. **Nanostructures dopées** : elles sont composées d'un matériau avec des impuretés ou des dopants ajoutés pour modifier les propriétés du matériau.

Ce ne sont là que quelques-uns des nombreux types de nanostructures couplées qui peuvent être créées. Les propriétés spécifiques et les applications de ces structures dépendent des matériaux utilisés et de la façon dont ils sont combinés.

1.4.4 Nanostructures de type cœur/coquille

1.4.4.1 Généralités

Les nanostructures semi-conductrices de type cœur/coquille, dite *core/shell* en anglais, sont une classe de matériaux qui ont des propriétés intermédiaires entre celles des petites

molécules individuelles et celles des semi-conducteurs cristallins. Ils sont uniques en raison de leurs propriétés facilement modulables grâce à leurs tailles. Ces nanostructures sont composées d'un cœur (noyau) de BQ et une coquille d'un matériau semi-conducteur distinct de celui du noyau. Le cœur et la coquille sont généralement composés de semi-conducteurs du type II-VI, IV-VI et III-V, avec des configurations telles que GaAs/AlGaAs, CdS/ZnS, CdSe/ZnS, CdSe/ZnSe, CdSe/CdS, InAs/CdSe, etc...[32]. La coquille offre une protection contre les changements environnementaux, le contrôle précis de la taille, la forme et la composition du noyau et de la coquille permet le contrôle de la longueur d'onde d'émission sur une large gamme de longueurs d'onde. Ces matériaux ont trouvé leurs applications dans la fabrication des nano-cellules photovoltaïques [33], les systèmes biologiques [34], les diodes [35], les capteurs électroniques [36] et dans le domaine de l'optique [37]. Les nanocristaux semi-conducteurs colloïdaux, appelés aussi BQs, sont constitués de nanoparticules semi-conductrices de l'ordre de quelques nanomètres de diamètre qui ont généralement un ligand organique lié à leur surface. Ces nanomatériaux sont utilisés dans les diodes, photoniques, photovoltaïques, et dans les dispositifs nanométriques émettant de la lumière (LEDs), leurs propriétés optiques et électroniques dépendent de la taille des nanocristaux. Les points quantiques sont aussi une alternative populaire aux colorants organiques tels que des étiquettes fluorescentes pour l'imagerie biologique et la détection en raison de leurs petites tailles, l'émission accordable, et la photo-stabilité. Les propriétés radiatives (phénomène de photoluminescence) des BQs résultent de la recombinaison des paires électrons-trous par une voie radiative ou bien non radiative. Les recombinaisons radiatives des électrons impliquent la détente à partir de la BC à la BV en émettant des photons de longueurs d'onde correspondant à la BI du semi-conducteur. Les recombinaisons non radiatives peuvent se produire par la libération d'énergie par émission de phonons ou par recombinaison de type Auger. Dans ce régime, la taille et les effets de confinement quantique conduisent à une augmentation de la largeur de la BI avec des niveaux d'énergie quantifiés. Les niveaux d'énergie quantifiés observés dans les BQs conduisent à des structures électroniques qui sont intermédiaires entre les molécules simples qui ont un simple gap (HOMO-LUMO) et les semi-conducteurs massifs présentant un spectre d'énergie continu dans leurs structures de bande.

1.4.4.2 Classification des boîtes quantiques cœur/coquille et leurs stabilité

En fonction des BIs et de la position relative des niveaux d'énergie électronique des semi-conducteurs impliqués, la coquille peut avoir différentes fonctions dans la nanostructure cœur-coquille. Sur les Figs. (1.15) et (1.16) (a-d), les composés II-VI et III-V généralement utilisés comme couches de cœur et de coquille dans BQ cœur/coquille, et leurs décalages de bande électroniques relatifs sont indiqués. Trois cas peuvent être distingués, dans la synthèse de nanocristaux cœur/coquille dénommés alignement de bande de type I, de type I-inversé et de type II.

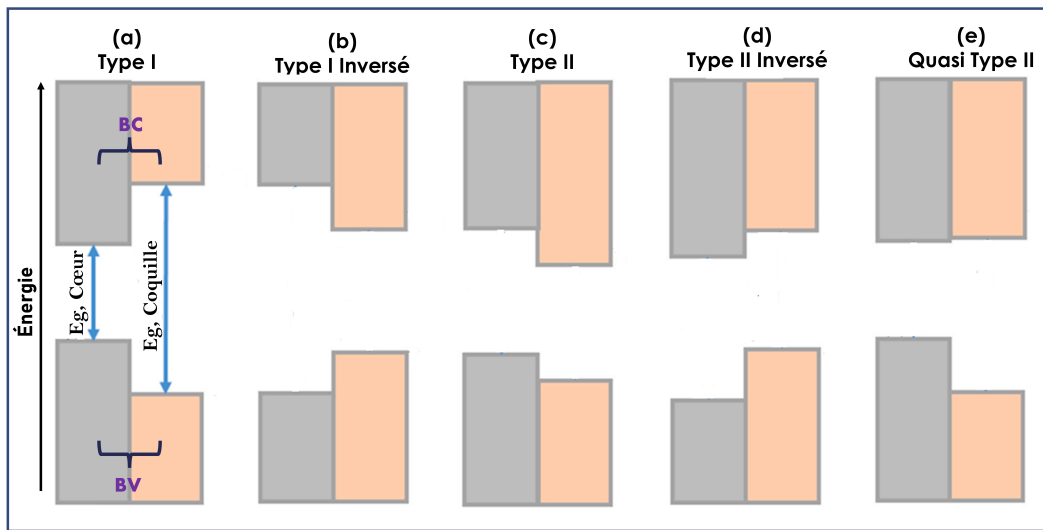


FIGURE 1.15 – Classification des BQs cœur/coquille en fonction de la bande interdite et de l'alignement des bandes. Ici, la BQ cœur/coquille est représentée comme (a) Type I (b) Type I inversé (c) Type II (d) Type II inversé (e) Quasi Type II [38].

Ici, la bande interdite est notée E_g et les bords de la bande de conduction et de valence sont représentés respectivement par V_{BC} et V_{BV} .

Stabilité des boîtes quantiques colloïdaux (BQCs) recouverts d'un ligand organique est limitée en raison de l'interaction mutuelle entre les atomes de surface des BsQ et les ligands organiques. Par conséquent, la conception et la croissance épitaxiale de la coquille sur le cœur de la BQ est une approche efficace pour améliorer la passivation de surface, ce qui entraîne une réduction significative des pièges/défauts de surface et améliore à la fois le rendement quantique de photoluminescence et la stabilité à long terme vers le milieu environnant. Le choix des matériaux cœur/coquille ainsi que la cristallisation de la couche de coquille dans la même structure ou un petit décalage de réseau avec la structure du cœur sont les paramètres les plus importants pour la conception et la synthèse des BQs

cœur/coquille. Comme le décalage de réseau plus élevé crée la déformation et la formation d'états de défauts à l'interface cœur/coquille ou à l'intérieur de la coquille, ce qui agit comme des états de pièges pour la couche photogénérée et réduit le rendement quantique global de photoluminescence. De plus, une réactivité et une sélectivité élevées des matériaux de coquille sont requises pour la synthèse de BQ cœur/coquille de haute qualité.

Les BQs à cœur/coquille ont le plus souvent été synthétisées selon une approche en deux étapes : d'abord la synthèse de BQ à cœur colloïdal via des approches de co-précipitation ou d'injection à chaud suivies d'une purification et d'une redispersion dans un solvant organique pour la croissance de la coquille.

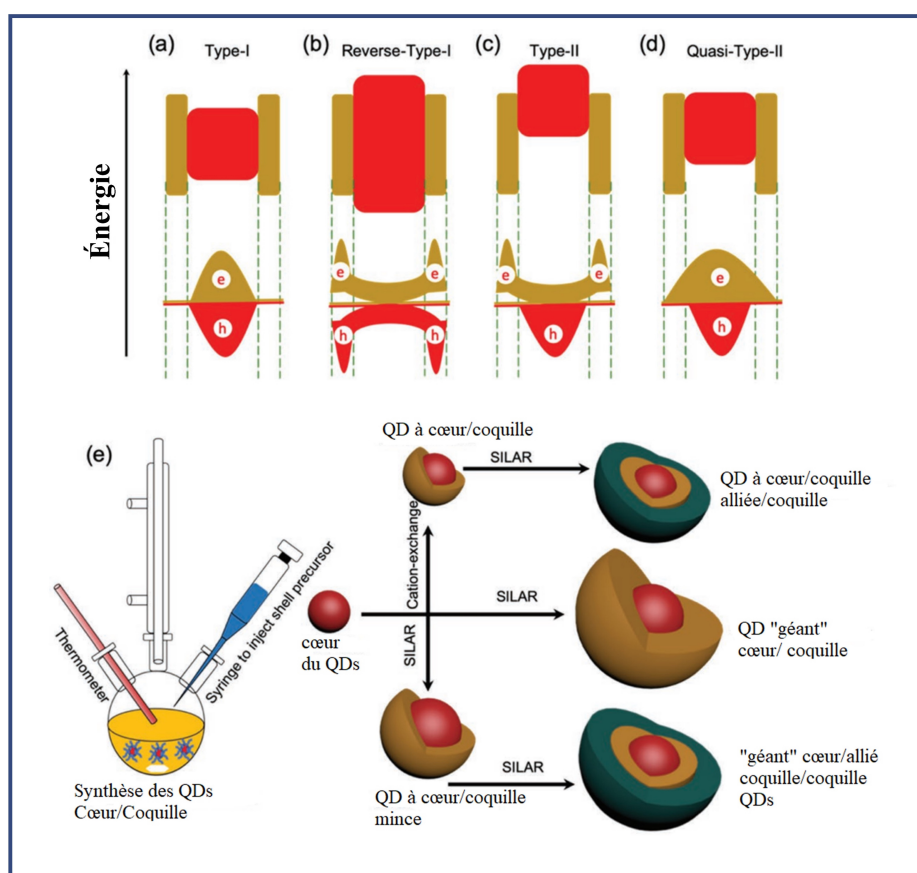


FIGURE 1.16 – Représentation schématique de l'alignement de la bande électronique pour différentes classes de système BQ cœur/coquille et les fonctions d'onde électronique (or clair) et trou (rouge) dans différents rectangles correspondent à la position de la bande de conduction et de valence du cœur (centre) et de la coquille matériaux (extérieurs), respectivement : (a) type-I; (b) inverse de type I; (c) type II; (d) quasi-type II. (e) Représentation schématique de la synthèse des BQs colloïdaux à cœur/coquille, d'abord les BQs à cœur peuvent être synthétisés via une approche d'injection à chaud ou d'échange de cations (côté gauche), puis une structure cœur/coquille (côté droit) synthétisée par la croissance de la coquille sur les cœurs des BQs via échange de cations/SILAR ou combinaison de l'échange de cations et de l'approche SILAR.

Pour la croissance de la coquille sur les BQs pré-synthétisés du cœur, plusieurs ap-

proches ont été rapportées telles que l'injection d'un mélange de précurseur cationique et anionique à la température de croissance dite échange de cations ou l'injection alternative de précurseurs cationiques et anioniques dite la méthode d'adsorption et de réaction successives sur couche ionique, dite SILAR. Dans l'approche d'échange de cations, le précurseur cationique du matériau de la coquille a été introduit lors de la croissance de la coquille, qui remplace progressivement le cation dans les BQs à cœur. La taille globale des BQs cœur/coquille résultants ne change pas de manière significative par rapport aux BQs cœur de départ (Fig. (1.16)-(e)). Alors que dans l'approche SILAR, l'épaisseur de la coquille développée sur les cœurs des BQs peut être contrôlée en modifiant la quantité ajoutée de précurseurs de coquille, le temps de croissance et la température de croissance. La taille globale des BQs cœur/coquille synthétisés via SILAR est augmentée et dépend du nombre de couches de coquille (Fig. (1.16)-(e)). Généralement, pour éviter une nucléation homogène du matériau de la coquille et une maturation incontrôlée des BQs à cœur, la température de croissance de la coquille (T_2) est généralement inférieure à la température (T_1) utilisée pour la synthèse des BQs à cœur. De plus, un contrôle précis de l'injection des précurseurs de carapace a été effectué au moyen d'un pousse-seringue. La concentration de la dispersion des cœurs des BQs est également nécessaire pour injecter des précurseurs de coquille afin d'obtenir l'épaisseur de coquille souhaitée.

1.5 Techniques de synthèse des hétérostructures

Auparavant, dans ce chapitre, il a été mentionné que les techniques avancées de croissance cristalline comme l'épitaxie par jets moléculaire (EJM) et la croissance épitaxiale en phase vapeur aux organométalliques (EPVOM) ont permis de fabriquer des semi-conducteurs en couches 2D avec une précision à l'échelle atomique, comme les PQs et les super-réseaux. Cependant, réduire encore plus la dimensionnalité des semi-conducteurs dans les puits et les BQs, ainsi que les FQs n'était pas facile. Au départ, la fabrication des puits et des BQs était principalement basée sur la structuration latérale d'hétérostructures 2D en utilisant une combinaison de techniques de lithographie et de gravure chimique. En plus d'une faible densité, le traitement ultérieur de la lithographie entraîne souvent de la contamination, la formation de défauts sur les interfaces et une non-uniformité de taille. Dans les paragraphes

suivants, nous présentons un résumé des techniques de croissance des BQs les plus utilisées dans la fabrication des hétérostructures semi-conducteurs :

1.5.1 Lithographie

C'est une technique employée dans l'industrie des semi-conducteurs pour reproduire une image de masque sur un substrat, tel qu'une plaquette de silicium, pour créer des circuits intégrés (CI) [39]. Les expériences initiales ont étudié les BQs qui ont été formées par lithographie à faisceau d'électrons des GaAs/AlGaAs [40] et InGaAs/InP [41] PQs étroits. La méthode de base consiste à recouvrir le substrat d'un matériau réactif à la lumière appelé la résine photosensible, puis de l'exposer à une source lumineuse à motif, tel qu'un masque ou un réticule, qui durcit ou attaque sélectivement la résine. Ensuite, on grave le substrat pour éliminer le matériau indésirable, laissant ainsi le circuit intégré reproduit. Le procédé est répété plusieurs fois pour construire les couches du CI, on peut voir clairement ce processus dans la Fig. (1.17). Il existe plusieurs types de méthodes de lithographie, dont la photolithographie, la lithographie à faisceau d'électrons et la lithographie par rayons X.

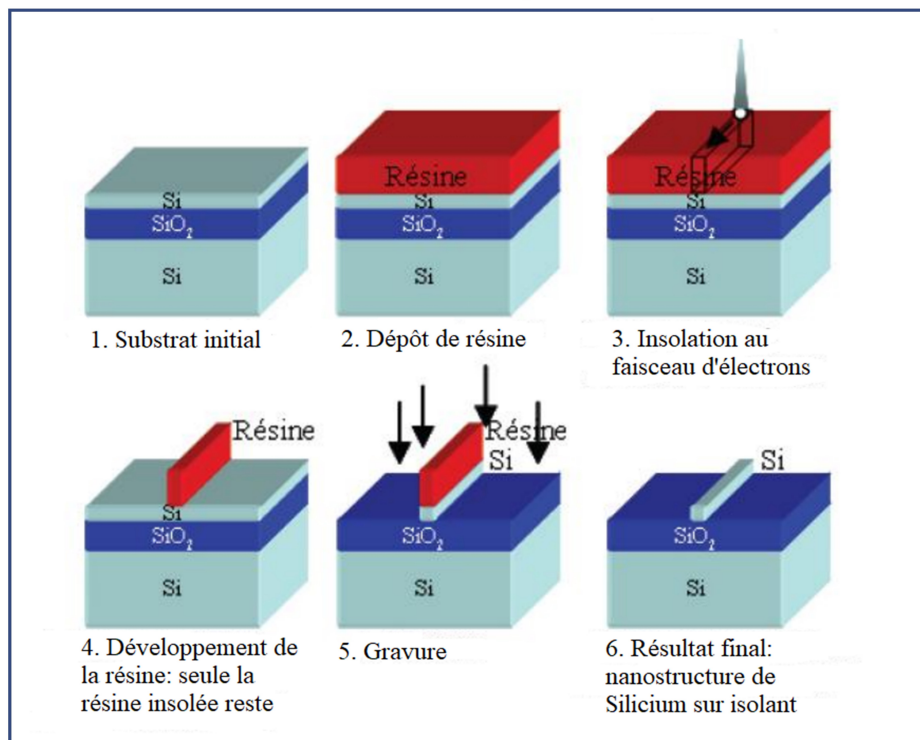


FIGURE 1.17 – Différentes étapes de la lithographie à faisceau d'électrons pour obtenir une nanostructure de silicium à partir d'un substrat de la silice [42].

1.5.2 Méthodes de la croissance auto-organisée

La croissance auto-organisée est une technique utilisée dans la fabrication de nanostructures, qui sont des structures avec au moins une dimension à l'échelle nanométrique (généralement entre 1 et 100 nm). La technique implique l'utilisation d'un substrat et d'un matériau précurseur, qui sont mis en contact dans des conditions spécifiques qui favorisent l'auto-organisation du matériau précurseur en une nanostructure souhaitée. Il existe plusieurs méthodes et modes différents qui relèvent de la croissance auto-organisée, notamment :

1.5.2.1 Mode de croissance Stransky-Krastanov

Ce mode de croissance est le plus fréquemment utilisé pour la réalisation de BQs de type III-V [43]. Les BQs auto-organisées peuvent être produites par EJM ou par EPVOM pour plusieurs systèmes hétérostructurés semi-conducteurs tels que GaAs/AlGaAs, InAs/GaAs, InGaAs/GaAs, InAlAs/AlGaAs ou Ge/Si [44]. L'élaboration de la majorité des hétérostructures par croissance auto-organisée est fondée sur le mode de croissance «Stranski-Krastanov». Mais, quelle est la base de ce mode de croissance auto-organisé ? Il s'agit d'une combinaison des deux modes Volmer-Weber [45] et Frank-Vander Merwe [46] qui se base sur la technique de transition du 2D vers le 3D. Après une croissance bi-dimensionnelle initiale (dépôt de quelques monocouches d'un matériau A fortement contraint sur un substrat B présentant un fort désaccord de maille), un changement de mode de croissance est observé lorsque la formation d'îlots devient favorable sur le plan énergétique. Après que la couche déposée a été réorganisée en îlots, une nouvelle couche de matériau B (substrat de départ) est déposée pour uniformiser la taille des îlots et les encapsuler. Ce qui entraîne un confinement vertical des porteurs. Cette transition du mode de croissance 2D vers 3D est causée par la relaxation de l'énergie élastique accumulée dans une hétérostructure contrainte. Si la croissance se poursuit, on observe une coalescence des îlots. Ce phénomène est à l'origine de la formation de structures auto-organisées et de ondulations dans les structures à contraintes compensées. Il y a également une couche résiduelle communément appelée couche de mouillage. Une image spectroscopique de la croissance selon le mode Stranski-Krastanov de BQs InAs/GaAs par microscopie à force atomique est présentée sur la Fig. (1.18).

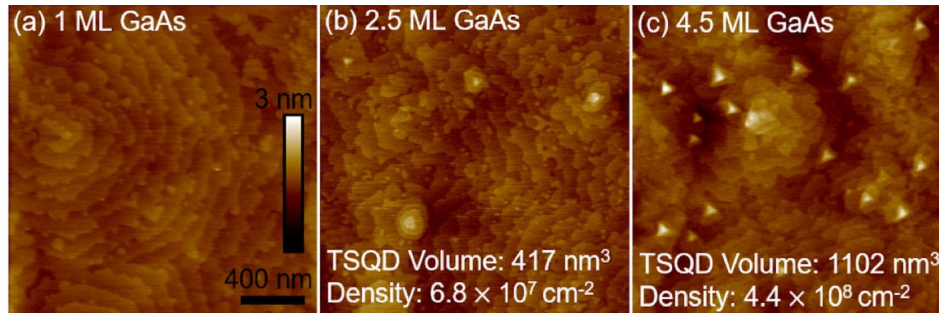


FIGURE 1.18 – Image de croissance par mode Stranski-Krastanov de BQs InAs/GaAs par microscopie à force atomique [47].

1.5.2.2 Croissance vapeur-liquide-solide (VLS)

Méthode utilisée pour la croissance de nanofils semi-conducteurs, cette méthode de croissance est basée sur l'utilisation d'un catalyseur métallique et d'une vapeur contenant initialement le matériau semi-conducteur, le contact entre cette vapeur et le matériau catalyseur nous donne un état de transition liquide-solide, puis un phénomène de nucléation et la croissance de nanofils semi-conducteurs à partir de la gouttelette de catalyseur s'enclenche. Cette technique nous permet de contrôler la taille, la composition et la structure cristalline des nanofils et est largement utilisée dans la recherche en nanotechnologie et en électronique [48]. La Fig. (1.19) ci-dessous présente les différentes étapes de cette technique.

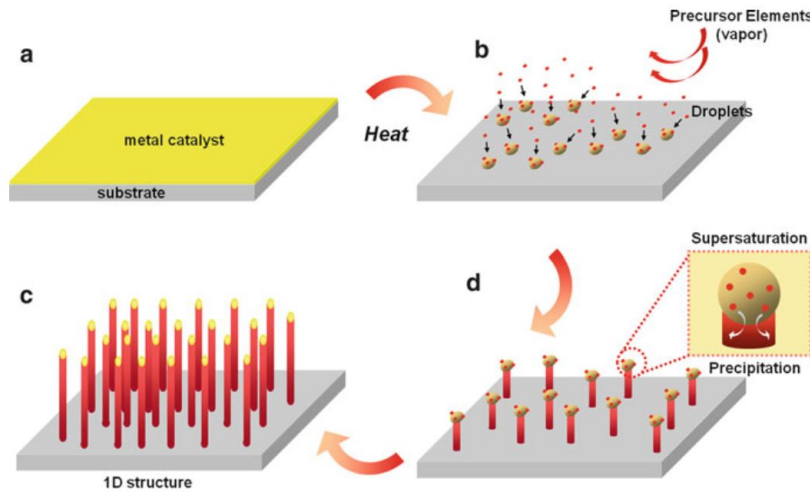


FIGURE 1.19 – Croissance de structures 1D à l'aide de la technique VLS [49].

1.5.2.3 Épitaxie par jet moléculaire (EJM)

C'est une méthode utilisée pour faire croître des films semi-conducteurs avec une précision atomique. Les BQs de la meilleure qualité sont généralement développées à l'aide

de la technique d'épitaxie par jet moléculaire, où GaAs est déposé couche par couche sur AlGaAs [30]. Si la couche de GaAs est déposée de manière uniforme et recouverte d'une autre couche d'AlGaAs, la nanostructure représente un PQ. Cependant, des îlots de GaAs peuvent se former au-dessus d'un PQ mince. L'échantillon est alors recouvert d'une couche d'AlGaAs, enveloppant les îlots, ce qui donne une nanostructure puits-boîte quantique (well quantique-dot), qui est représentée dans le diagramme schématique de la Fig. (1.20).

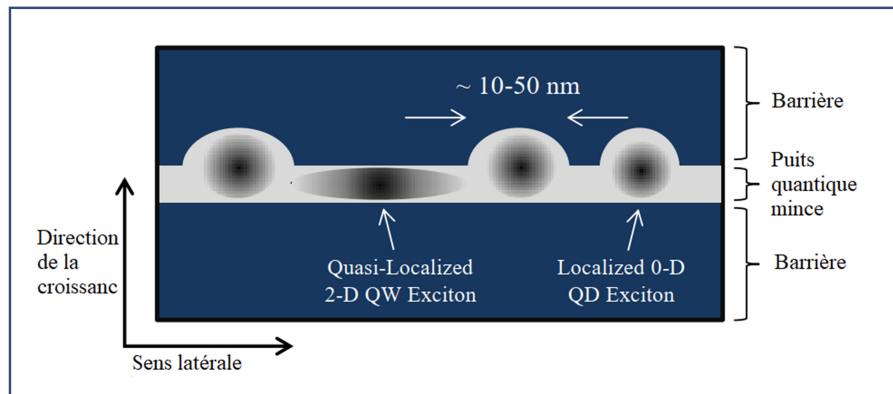


FIGURE 1.20 – Schéma de principe des BQs épitaxiées sur un PQ étroit. L'excitation optique peut créer des excitons 2D dans les PQs et des excitons 0D confinés dans les BQs [50].

1.5.2.4 Croissance épitaxiale en phase vapeur aux organométalliques (EPVOM) :

Une méthode utilisée pour faire croître des films minces d'une large gamme de matériaux. L'EPVOM fait croître de nouvelles couches avec la même structure cristalline (c'est-à-dire la structure du réseau et l'orientation cristalline) que le substrat en dessous, ce qui permet la croissance de couches épitaxiales séquentielles de composition de matériau variable. Cette opération permet la croissance d'une grande variété de matériaux contrairement aux autres techniques de la croissance auto-organisée et est donc une méthode très polyvalente. La procédure EPVOM peut être divisée en les étapes suivantes, telles que décrites par Dapkus et Lohani [51, 52] :

- Transport de masse des réactifs/précurseurs dans la chambre de réaction vers la surface du substrat par un gaz porteur.
- Réactions de surface impliquant la décomposition thermique des réactifs, c'est-à-dire la séparation d'un composé en ses éléments via l'énergie thermique, suivie d'une adsorption/désorption, d'une diffusion en surface et d'une nucléation.
- Croissance de nouvelles couches, une monocouche bidimensionnelle à la fois.

- Élimination des sous-produits de la chambre de réaction.

Le processus de la méthode EPVOM est récapitulé dans la Fig. (1.21) :

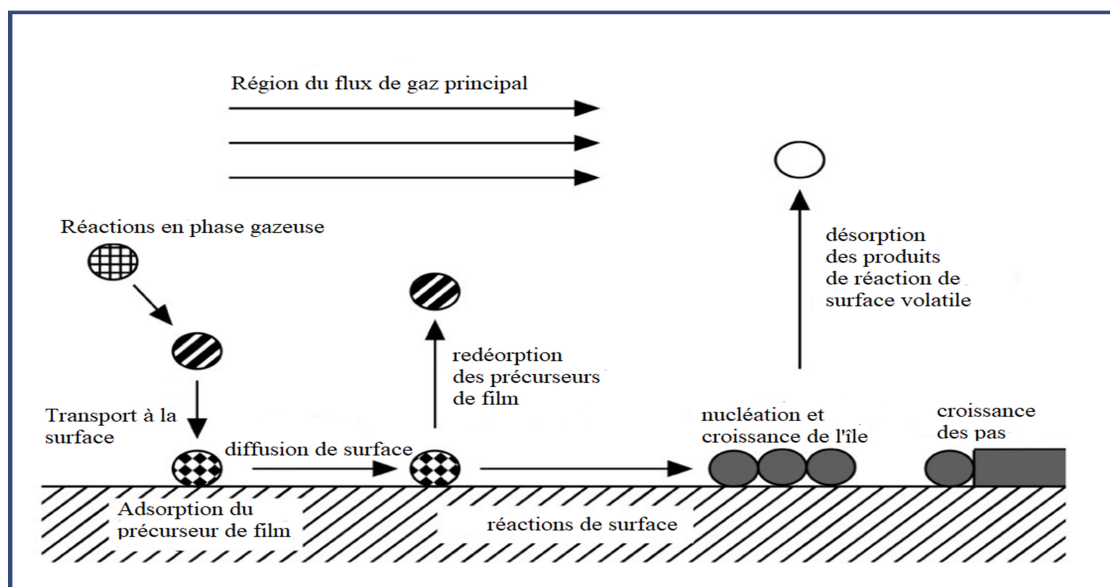


FIGURE 1.21 – Représentation schématique des étapes fondamentales de transport et de réaction sous-jacentes à EPVOM [53].

En général, le but de la croissance auto-organisée est de créer des nanostructures précises et bien contrôlées en utilisant des techniques relativement simples et peu coûteuses. Ces techniques ont de nombreuses applications potentielles dans des domaines tels que l'électronique, l'optoélectronique et le stockage d'énergie.

1.6 Intérêt et applications des boîtes quantiques

Les BQ à base de semi-conducteurs, tout comme les atomes individuels, peuvent présenter un comportement quantique, y compris des niveaux d'énergie quantifiés et des transitions électroniques discrètes. Cela les rend extrêmement intéressants pour diverses applications, notamment dans les domaines de l'électronique, de l'optique et de l'informatique quantique. Les BQs à base de semi-conducteurs sont considérés comme l'équivalent à l'état solide des systèmes atomiques, avec peut-être quelques avantages notables en ce qui concerne la conception et les performances des dispositifs fonctionnels.

Par rapport aux vapeurs atomiques chaudes ou aux gaz froids, la polyvalence des BQs pour une large gamme d'applications découle de la possibilité de régler leurs propriétés électroniques et optiques en modifiant leur taille et leur composition et de leurs forts moments dipolaires de transition optique. Ces avantages sont apparents dans les premières applica-

tions des BQs comme sources et détecteurs de lumière classiques. Au milieu des années 1990, Shoji et al. [54] ont démontré un laser à semi-conducteur insensible à la température, à faible seuil de courant et à gain élevé, fabriqué à partir d'une seule de InGaAs/GaAs BQ. Après environ un an, des dispositifs accordables en longueur d'onde et fonctionnant à température ambiante ont été mis au point [55] et, en cinq ans, le gain optique et l'émission stimulée ont été démontrés dans des nanocristaux colloïdaux [56]. Le développement de lasers de sources de lumière incohérente et de photodétecteurs [57] à base de BQs a ouvert la voie à des dispositifs dont les longueurs d'onde de détection et d'exploration s'étendent de l'ultraviolet à l'infrarouge, au profit de la science fondamentale et des applications commerciales. Cinq ans après les premières expériences sur les mono-BQs, Solomon et al. [58] ont révélé que des BQs auto-assemblés en InAs/GaAs dans des couches adjacentes s'alignaient spatialement et se couplaient par effet tunnel de fonction d'onde si l'espacement entre les couches était inférieur à une épaisseur critique. Deux ans plus tard, Bonadeo et al. ont démontré le contrôle optique cohérent de la fonction d'onde excitonique dans un seul BQ à fluctuation interfaciale GaAs/AlGaAs en utilisant des impulsions picosecondes verrouillées en phase pour préparer et manipuler l'état quantique de l'exciton [59]. Ces deux travaux ont entraîné un changement de paradigme dans le domaine de l'optique quantique et ont laissé entrevoir la possibilité d'une informatique quantique basée sur les BQs. En effet, la plupart des critères de DiVincenzo pour l'informatique quantique, à savoir la préparation de l'état, le contrôle et la manipulation cohérents, et la lecture de l'état, ont été démontrés dans les BQs [60]. Alors que les BQs colloïdaux (BQCs) semi-conducteurs obtenus par croissance épitaxiale [61] sont principalement utilisés en opto-électronique. Les BQCs synthétisés chimiquement ont été développés pour des applications allant du marquage biologique et des nanocapteurs d'ADN [62] à la photovoltaïque [63]. Au cours de la dernière décennie, les BQCs se sont révélées prometteuses en tant qu'absorbeurs pour les dispositifs photovoltaïques, avec la possibilité d'augmenter l'efficacité maximale atteignable jusqu'à 66%. Le fort confinement dans les BQCs, qui sont généralement beaucoup plus petits que les excitons de masse, permet d'augmenter le rendement jusqu'à 66% [64].

TABLE 1.2 – Tableau récapitulatif des principaux matériaux semi-conducteurs utilisés dans les composants et dispositifs photoniques modernes et leurs situation actuelle et les tendances et prévisions d'utilisation, extrait de Ref. [65].

| Matériau | Situation actuelle | Tendances et prévisions |
|-----------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------|
| GaN, GaInN | LED bleues, UV et blanches haute puissance, lasers pour disques DVD et Blu-ray haute densité | Progrès dans les applications en cours |
| GaAs, GaAlAs, GaInAs, GaAlInP, GaInAsP | Lasers dans CD, DVD, imprimantes laser, LED IR, photodétecteurs proche IR-Vis, communication par fibre optique, cellules solaires à coût élevé pour des applications critiques (espace) | Progrès dans des nouvelles applications en cours |
| Si | Détecteurs, incl. Matrices CCD dans les caméras vidéo et photo, les cellules solaires | Dispositifs électroluminescents, modulateurs électro-optiques |
| GaP et GaInAlP | LED vertes (jaunes) basse consommation | |
| Ge et SiGe | Détecteurs IR (obsolètes) | Lasers infrarouge lointain et THz (cascade quantique) |
| CdTe et CdHgTe | Détecteurs infrarouges lointains incl. caméras de vision nocturne | Cellules solaires |
| CdSe, CdS | Photorésistances | Nanophotonique colloïdale incl., LED, lasers |
| ZnO et ZnMgO | Détecteurs UV | LEDs UV et lasers, contacts transparent |
| ZnSe | LED bleues et lasers de faible puissance | Progrès dans les applications en cours |
| PbS, PbSe | Détecteurs IR | Modulateurs & commutateurs optiques et électro-optiques |

1.7 Techniques de résolution numériques utilisés

La résolution analytique exacte de l'équation de Schrödinger en présence d'une impureté et sous l'impact des perturbations extérieures est impraticable en raison du grand nombre de potentiels mis en jeu tels que l'interaction Coulombienne électron-impureté, le potentiel créé par les champs extérieurs (électrique et magnétique par exemple), ainsi que les différentes corrections prises en compte comme : la variation de pression appliqué, variation de la température, la discontinuité des constantes diélectriques à travers des milieux : puits, barrière et milieu d'immersion du système, l'anisotropie des bandes, Parmi les méthodes d'optimisation les plus utilisées pour déterminer les énergies et les fonctions enveloppes propres de l'hétérostructure on peut citer : la méthode variationnelle de Rayleigh–Ritz, la méthode des différences finies, la méthode de la densité DFT, les matrices de transfert, les éléments finis ou la théorie $\tilde{k} \cdot \tilde{p}$.

1.7.1 Approximation de la masse effective (AME)

La structure de bande pour un solide cristallin parfait correspond à la relation de dispersion entre l'énergie des états électroniques stationnaires $E_n(K)$ et le vecteur d'onde \vec{k} . Elle est en général obtenue en résolvant l'équation de Schrödinger dans l'approximation du problème à un électron, qui consiste à traiter le mouvement de chacun des électrons dans le potentiel des ions et le potentiel d'interaction moyen avec les autres électrons. L'Hamiltonien d'un électron s'écrit :

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (1.18)$$

Puisque H est une fonction périodique présente la même périodicité du réseau cristallin, ces états propres sont des fonctions de Bloch, s'écrit sous la forme suivante :

$$\Phi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \cdot \exp(i \cdot \vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (1.19)$$

où $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ est une fonction périodique qui a la périodicité du réseau direct et n désigne l'indice de la bande. Alors, en tout point, la dépendance d'une énergie de particule $E_n(\vec{k})$ vis-à-vis de son nombre d'onde k (et, par conséquent, de son impulsion $p = \hbar k$), pour satisfaire la condition d'onde stationnaire :

$$\frac{dE}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dp} = 0 \quad (1.20)$$

En général, la solution de l'équation de Schrödinger se fait au centre et aux bords de la première zone de Brillouin du cristal, où la relation de la dispersion $E(k)$ se développe en série de Taylor :

$$E(k) = E_0 + k \left. \frac{dE}{dk} \right|_{k=k_0} + \frac{1}{2} k^2 \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=k_0} + \dots \quad (1.21)$$

se réduit à une loi parabolique $E(k)$:

$$E(k) = \frac{1}{2} k^2 \left. \frac{d^2 E}{dk^2} \right|_{k=0} \quad (1.22)$$

En mettant $E_0 = 0$, c'est-à-dire en comptant l'énergie à partir du point extrême et en omettant les dérivées d'ordre supérieur dans la série. Cela devient possible en rappelant que les extrema correspondent aux ondes stationnaires, i.e. : $\left. \frac{dE}{dk} \right|_{k=0} = 0$

La loi parabolique $E(k)$ (1.22) signifie que la masse effective de la particule considérée peut être formellement introduite au voisinage de chaque extremum de la fonction $E(k)$ comme suit :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \equiv \frac{d^2 E}{dp^2} = cst \quad (1.23)$$

Ce modèle est connu sous le nom de modèle de Ben Daniel-Duke [66].

1.7.2 Formalisme de la méthode variationnelle de Ritz

La méthode variationnelle, dite de Ritz, à travers l'histoire, s'est avérée être une méthode très efficace pour calculer les énergies de liaison d'un système quantique en minimisant l'hamiltonien pour trouver ces valeurs propres [24] dans le cas de l'incapacité des méthodes analytiques. Il a été possible d'estimer par ce biais, l'énergie de l'électron ou même d'une impureté à l'état fondamental ou bien dans ses états excités confinée dans une hétérostructure. Cette méthode est basée sur le bon choix d'une fonction d'essai non normalisé $\varphi(\lambda_n)$, qui dépend de certains paramètres variationnels λ_n , et nous minimisons l'équation (1.12) en fonction de ces paramètres :

$$E(\lambda_n) = \frac{\langle \varphi | H | \varphi \rangle}{\langle \varphi | \varphi \rangle} \quad (1.24)$$

où H est l'hamiltonien du système. L'observation clé sur laquelle la méthode variationnelle est basée est que l'état fondamental est l'état parmi toutes les fonctions d'onde admissibles qui a la plus petite valeur d'espérance de l'énergie. Bien sûr, trouver la valeur attendue de l'énergie pour toutes les fonctions d'onde possibles reste une tâche impossible. Mais un type

générique de fonction d'onde qui devrait être capable de bien approcher l'état fondamental, dans des conditions appropriées. Normalement, des conditions appropriées signifient que l'approximation ne sera bonne que si divers paramètres apparaissant dans la fonction d'onde approximative sont bien choisis.

1.7.3 Formalisme de la méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis (MEF) est une technique numérique puissante largement utilisée dans de nombreux domaines de la physique, y compris la mécanique quantique. La MEF est particulièrement utile pour résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps, qui décrit le comportement des systèmes quantiques. Dans cette application, la MEF est utilisée pour discrétiser le système en un nombre fini d'éléments, nommées 'mesh', puis résoudre les équations résultantes à l'aide de techniques numériques. De plus, la MEF peut être utilisée pour étudier des systèmes quantiques en présence de champs externes, tels que des champs électromagnétiques ou des phonons [67]. Dans l'ensemble, la MEF est un outil précieux pour étudier les systèmes quantiques nanométriques et comprendre la physique sous-jacente de ces systèmes. L'idée de base derrière la méthode est de diviser le domaine de l'équation aux dérivées partielles (EDP) en petits morceaux gérables appelés "maillage" (voir la figure ci-dessous), puis d'approximer la solution de la EDP dans chaque élément à l'aide d'un ensemble de fonctions de base. La solution est alors obtenue en rassemblant les solutions approchées de tous les éléments, à l'aide d'un ensemble d'équations algébriques appelées "équations aux éléments finis".

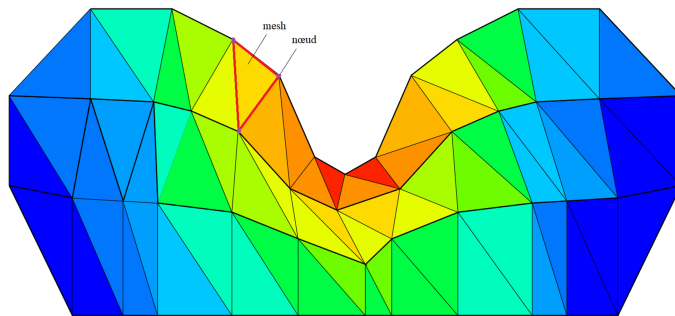


FIGURE 1.22 – Exemple de "maillage" - une discrétisation du domaine sur lequel la EDP est définie. Chaque polygone est un « élément fini », avec des fonctions de base définies sur eux. L'ombrage de chaque polygone représente l'amplitude associée à la fonction appuyée sur chaque élément fini [67].

Plus en détail, le processus de la MEF peut être décomposé en plusieurs étapes :

- Discrétisation du domaine : le domaine de l'EDP est divisé en un nombre fini d'éléments non superposés. Ce processus est connu sous le nom de maillage.
- Sélection des fonctions de base : un ensemble de fonctions de base est choisi pour chaque élément, qui est utilisé pour approximer la solution dans cet élément. Il peut s'agir de polynômes, de fonctions trigonométriques ou d'autres types de fonctions.
- Détermination de la matrice de rigidité de l'élément : la matrice de rigidité de l'élément, qui décrit la relation entre les déplacements nodaux et les forces nodales au sein d'un élément, est déterminée à l'aide des fonctions de base choisies et des propriétés de l'élément.
- Assemblage de la matrice de rigidité globale : les matrices de rigidité des éléments sont assemblées dans une matrice de rigidité globale, qui décrit la relation entre les déplacements nodaux et les forces nodales pour l'ensemble du système.
- Solution des équations aux éléments finis : la matrice de rigidité globale est résolue, ainsi que toutes les autres équations nécessaires, pour obtenir les déplacements nodaux et les forces nodales.
- Post-traitement : la solution est ensuite évaluée à tous les points souhaités dans le domaine, à l'aide de techniques d'interpolation, pour obtenir les variables de champ d'intérêt, telles que la contrainte et la déformation.

En effet, la MEF peut être appliquée à un large éventail de problèmes, y compris l'analyse structurelle linéaire et non linéaire, le transfert de chaleur, la dynamique des fluides et l'électromagnétisme.

1.7.4 Supports informatiques utilisés

Nous avons utilisé dans notre projet une variété d'outils informatiques repartis entre : langages de programmation, langages formels et logiciels de traitement et d'analyse de données scientifiques, dans le paragraphe suivant, nous présentons ces différents outils :

1.7.4.1 Langages de programmation

Nos calculs numériques analytiquement non résolus sont effectués sur la base de deux langages de programmation principaux, en particulier Python pour la modélisation des propriétés opto-électroniques, l'analyse des données et la conception des figures. Nous avons

également utilisé Fortran pour certaines parties critiques en termes de performance du projet, comme la minimisation des énergies en calcul variationnel. Tous ces langages ont été choisis pour leurs forces spécifiques et leur facilité d'utilisation pour les tâches pour lesquelles ils ont été utilisés.



FIGURE 1.23 – Logos des langages de programmation utilisés dans les calculs numériques.

1.7.4.2 Progiciels formels

Nous avons utilisé des progiciels mathématiques formels pour effectuer une large gamme de calculs et de simulations de nos hétérostructures. En fait, avec un bon choix de maillage, nous avons utilisé COMSOL-Multiphysics [68] pour résoudre l'équation de Schrödinger pour une variété de potentiels et pour calculer des propriétés telles que les niveaux d'énergie, les fonctions d'onde et les probabilités de transition. Ces calculs nécessitent l'initialisation des conditions aux limites de Dirichlet et de Von Neumann. De plus, nous avons utilisé Maple pour des calculs symboliques tels que le calcul de commutateurs et d'opérateurs de construction, ainsi que pour la visualisation de systèmes mécaniques quantiques tels que le traçage de fonctions d'onde et de densités de probabilité. De plus, Maple [69] peut être utilisé pour résoudre des équations différentielles transcendantes afin de trouver les constantes de normalisation des fonctions d'onde.



FIGURE 1.24 – Logos de MapleTM et COMSOL-Multiphysics. Deux interfaces de modélisation et de programmation formel sont utilisés.

1.7.4.3 Les logiciels de traitement et d'analyse de données

Les logiciels de traitement et d'analyse de données peuvent être extrêmement utiles dans l'étude des propriétés optiques des nanostructures. Ces outils permettent aux chercheurs de traiter et d'analyser efficacement de grandes quantités de données, telles que des mesures spectroscopiques, qui sont collectées lors des expériences ou bien le traçage et le traitement des courbes avec une grande efficacité. Cela peut inclure des éléments tels que l'ajustement des données aux modèles, la visualisation des données et l'identification des modèles et des tendances dans les données. De plus, le logiciel peut être utilisé pour simuler les propriétés optiques des nanostructures, ce qui peut aider les chercheurs à mieux comprendre et prévoir leur comportement. Dans l'ensemble, les logiciels de traitement et d'analyse de données peuvent être un outil précieux pour faire avancer l'étude des propriétés optiques des nanostructures.

Pour notre étude, nous avons utilisé de manière continue le logiciel OriginPro [70] pour tracer et analyser les courbes en 2D et 3D, ainsi que nous avons utilisé ParaView [71] version 5.10.1 open-source pour analyser les densités de probabilité dans des hétérostructures.

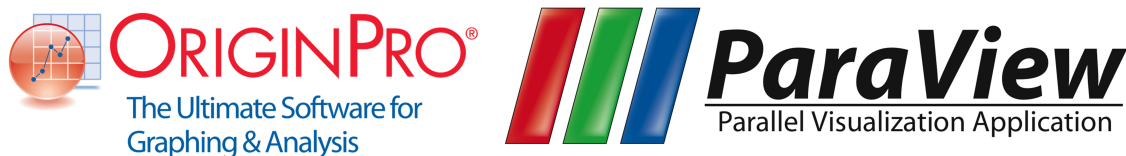


FIGURE 1.25 – Les logos de OriginPro^R et ParaView. Deux logiciels de traitement et d'analyse de données qui sont utilisés au projet.

En effet, la plupart du travail ici concerne les structures à base de BQs dans un modèle 3D, c'est pourquoi cela est utilisé comme exemple pour présenter les procédures de calcul. En général, les calculs peuvent être séparés en deux sections, comme illustré à la Fig. (1.26) : calculs des états électroniques et d'impuretés à l'aide de COMSOL-Multiphysics et post-traitement de ces résultats (c'est-à-dire niveaux d'énergie et fonctions d'onde) pour les propriétés optiques dans l'environnement Python ou bien Fortran.

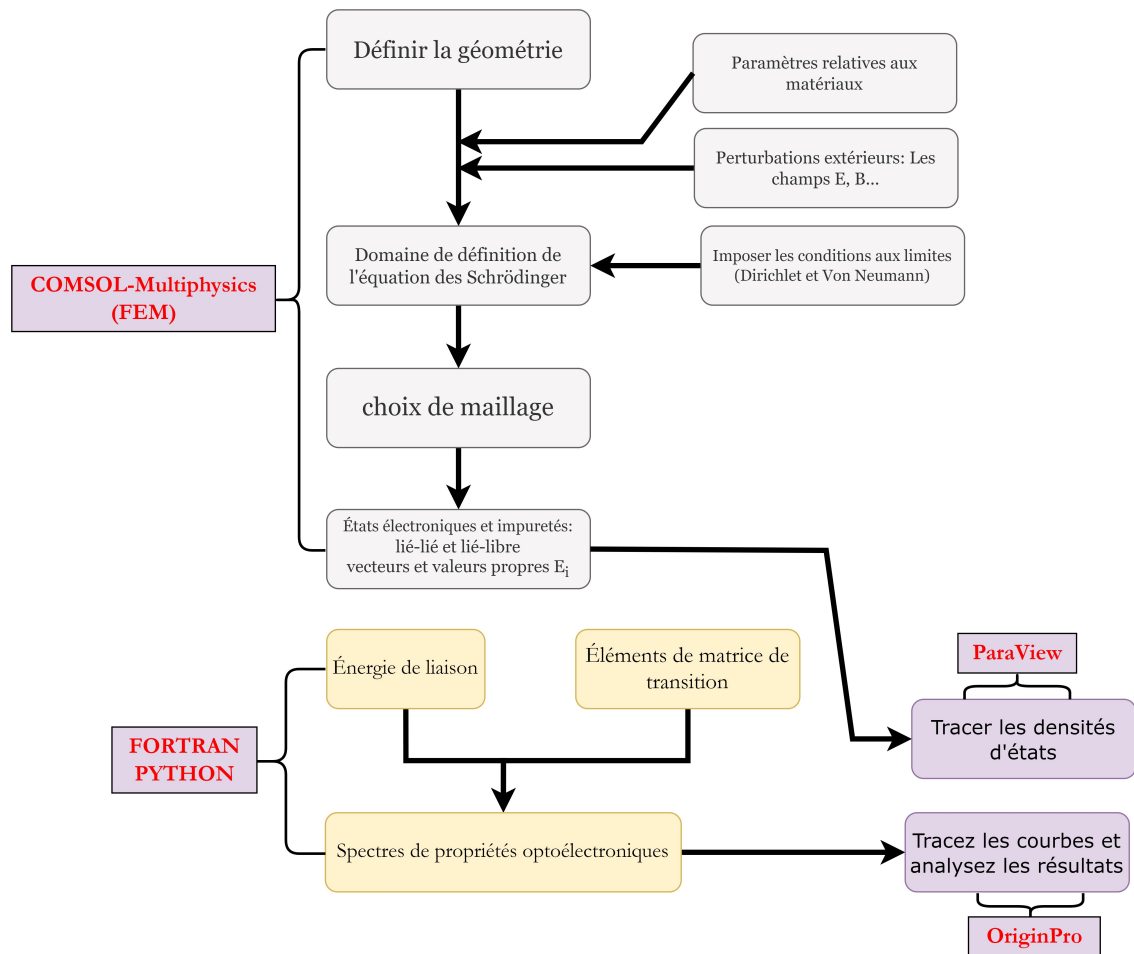


FIGURE 1.26 – Organigramme des procédures de calcul.

1.8 Conclusion

Ce chapitre offre une introduction générale aux caractéristiques des semi-conducteurs massifs ainsi qu'aux hétérostructures à base de semi-conducteurs. Nous nous sommes particulièrement concentrés sur les nanostructures doubles, en abordant leur classification détaillée, les différents types de ces structures et les méthodes de construction les plus couramment utilisées. De plus, nous avons exploré les nombreux intérêts et applications de ces nanostructures, en soulignant l'utilisation d'outils informatiques pour réaliser des simulations calculatoires. Cette approche permet de mieux comprendre les propriétés et les comportements de ces nanostructures, ouvrant ainsi de nouvelles perspectives pour leur utilisation dans divers domaines technologiques.

Bibliographie

- [1] J. Schoenleber, “Thèse : Electrodéposition et caractérisations de nanofils thermoélectriques $\text{Bi}_{0.5}\text{Sb}_{1.5}\text{Te}_3$ dans des matrices mésoporeuses en polycarbonate,” *Université Lorraine*, (2014). [Online]. Available : <https://www.researchgate.net/publication/304013810>
- [2] H. Mehdi, “Thèse : Etude de la passivation du GaAs(100) par nitruration par plasma N_2 sous ultra-vide.” *Université de Clermont Auvergne, École universitaire de physique et d’ingénierie, École doctorale des sciences fondamentales*, (2018). [Online]. Available : <https://www.researchgate.net/publication/332493436>
- [3] T. Mano, T. Kuroda, M. Yamagiwa, G. Kido, K. Sakoda, N. Koguchi, T. Mano, T. Kuroda, M. Yamagiwa, G. Kido, K. Sakoda, and N. Koguchi, “Lasing in GaAs/AlGaAs self-assembled quantum dots Lasing in GaAs/AlGaAs self-assembled quantum dots,” vol. 183102, pp. 10–13, (2012).
- [4] B. Paquette, “Thèse : Croissance de matériaux et structures semiconductrices appliqués aux cellules photovoltaïques à très haute concentration par épitaxie par jets chimiques,” *Université de Sherbrooke Faculté de génie Département de génie mécanique*, (2015).
- [5] A. E. Willner, R. L. Byer, C. J. Chang-Hasnain, S. R. Forrest, H. Kressel, H. Kogelnik, G. J. Tearney, C. H. Townes, and M. N. Zervas, “Optics and photonics : Key enabling technologies,” vol. 100. Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., 5 (2012), pp. 1604–1643.
- [6] Y. M. Poplavko, “Semiconductors,” *Electronic Materials*, pp. 409–508, (2019). [Online]. Available : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780128157800000086>
- [7] G. Bastard, “Quantum-size effects in the continuum states of semiconductor quantum wells,” *Physical Review B*, vol. 30, pp. 3547–3549, (1984).
- [8] P. Y. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors : Physics and Materials Properties, 4th Edition*. Springer Berlin, Heidelberg, (2010). [Online]. Available : <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-00710-1>

-
- [9] A. J. Williamson and A. Zunger, "Pseudopotential study of electron-hole excitations in colloidal free-standing InAs quantum dots," *Physical Review B*, vol. 61, pp. 1978–1991, 1 (2000). [Online]. Available : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.61.1978>
- [10] J. C. Slater and G. F. Koster, "Simplified LCAO Method for the Periodic Potential Problem," *Physical Review*, vol. 94, pp. 1498–1524, 6 (1954). [Online]. Available : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.94.1498>
- [11] T. B. Bahder, "Eight-band model of strained zinc-blende crystals," *Physical Review B*, vol. 41, pp. 11 992–12 001, 6 (1990). [Online]. Available : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.41.11992>
- [12] K. El-Bakkari, A. Sali, E. Iqraoun, A. Rezzouk, N. Es-Sbai, and M. O. Jamil, "Effects of the temperature and pressure on the electronic and optical properties of an exciton in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum ring," *Physica B : Condensed Matter*, vol. 538, pp. 85–94, 6 (2018).
- [13] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *MÉCANIQUE QUANTIQUE - TOME 1*. EDP Sciences, (2018). [Online]. Available : <https://doi.org/10.1051/978-2-7598-2285-0>
- [14] G. Bastard, "Hydrogenic impurity states in a quantum well : A simple model," *Physical Review B*, vol. 24, pp. 4714–4722, (1981).
- [15] D. L. Smith and C. Mailhot, "Theory of semiconductor superlattice electronic structure," *Reviews of Modern Physics*, vol. 62, pp. 173–234, 1 (1990). [Online]. Available : <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.62.173>
- [16] S. R. White and L. J. Sham, "Electronic Properties of Flat-Band Semiconductor Heterostructures," *Physical Review Letters*, vol. 47, pp. 879–882, 9 (1981). [Online]. Available : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.47.879>
- [17] J. S. Blakemore, "Semiconducting and other major properties of gallium arsenide," *Journal of Applied Physics*, vol. 53, pp. R123–R181, 10 (1982). [Online]. Available : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.331665>
- [18] O. Mangla and S. Roy, "Synthesis of gallium arsenide nanostructures for solar cell applications," *Materials Letters*, vol. 274, 9 (2020).

- [19] K. L. Jahan, A. Boda, I. V. Shankar, C. N. Raju, and A. Chatterjee, “Magnetic field effect on the energy levels of an exciton in a GaAs quantum dot : Application for excitonic lasers,” *Scientific Reports*, vol. 8, 12 (2018).
- [20] M. Premkumar, M. Arun, S. S. Priya, D. Kalaiarasi, and R. Prathipa, “Characteristics of gallium arsenide (GaAs) light emitting diode for wireless systems,” *Materials Today : Proceedings*, (2021).
- [21] M. Al-Hattab, L. Moudou, L. Moulaoui, Y. Chrafi, A. Najim, M. Khenfouch, O. Bajjou, and K. Rahmani, “Numerical Simulation of CdS/GaSe Solar Cell Using SCAPs Simulation Software,” O. M. Said and Castillo, Eds. Springer International Publishing, (2023), pp. 315–325.
- [22] M. Levinstein, S. Rumyantsev, and M. Shur, Eds., *Handbook Series on Semiconductor Parameters*. World Scientific, London, (1996), vol. 1-2.
- [23] S. Azaizia, “Alliages à base de GaAs pour applications optoélectroniques et spintroniques,” *Doctorat de l’université de Toulouse*, (2018). [Online]. Available : <https://www.researchgate.net/publication/329773003>
- [24] R. L. Greene and K. K. Bajaj, “Shallow impurity centers in semiconductor quantum well structures,” *Journal of Chemical Information and Modeling*, vol. 53, pp. 1103–1108, (1985).
- [25] S. Kayali, “GaAs Material Properties,” *JPL Publication*, pp. 25–96, 12 (1996).
- [26] B. Gerlach, J. Wüsthoff, M. O. Dzero, and M. A. Smondyrev, “Exciton binding energy in a quantum well,” *Physical Review B*, vol. 58, pp. 10 568–10 577, 10 (1998). [Online]. Available : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.58.10568>
- [27] V. Pokropivny, “Introduction to nanomaterials and nanotechnology,” *Tartu University Press*, (2007).
- [28] Y. Chang, L. L. Chang, and L. Esaki, “A new one-dimensional quantum well structure,” *Applied Physics Letters*, vol. 47, pp. 1324–1326, 12 (1985). [Online]. Available : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.96268>

- [29] W. Wegscheider, L. N. Pfeiffer, M. M. Dignam, A. Pinczuk, K. W. West, S. L. McCall, and R. Hull, "Lasing from excitons in quantum wires," *Physical Review Letters*, vol. 71, pp. 4071–4074, 12 (1993). [Online]. Available : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.71.4071>
- [30] T. Tsujikawa, S. Mori, H. Watanabe, M. Yoshita, H. Akiyama, R. V. Dalen, K. Onabe, H. Yaguchi, Y. Shiraki, and R. Ito, "Fabrication and optical properties of GaAs/AlGaAs quantum dot grown in tetrahedral-shaped recesses on GaAs (111)B substrates by MOVPE," *Physica E : Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 7, pp. 308–316, 5 (2000).
- [31] M. L. Kerfoot, A. O. Govorov, C. Czarnocki, D. Lu, Y. N. Gad, A. S. Bracker, D. Gammon, and M. Scheibner, "Optophotonics with coupled quantum dots," *Nature Communications*, pp. 2–7, (2014).
- [32] J. A. Stride and F. Mirnajafizadeh, "A Brief Review on Core/shell Quantum Dots," *SDRP Journal of Nanotechnology and Material Science*, vol. 3, pp. 121–126, (2020).
- [33] G. S. Selopal, H. Zhao, Z. M. Wang, and F. Rosei, "Core/Shell Quantum Dots Solar Cells," *Advanced Functional Materials*, vol. 30, 3 (2020).
- [34] D. Vasudevan, R. R. Gaddam, A. Trinchì, and I. Cole, "Core-shell quantum dots : Properties and applications," pp. 395–404, 7 (2015).
- [35] A. Ahaitouf, H. Srour, S. O. S. Hamady, N. Fressengeas, A. Ougazzaden, and J. Salvestrini, "Interface state effects in GaN Schottky diodes," *Thin Solid Films*, vol. 522, pp. 345–351, (2012), eMRS 2011 symp Q. [Online]. Available : <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0040609012010668>
- [36] X. Zhang, Q. Qu, A. Zhou, Y. Wang, J. Zhang, R. Xiong, V. Lenders, B. B. Manshian, D. Hua, S. J. Soenen, and C. Huang, "Core-shell microparticles : From rational engineering to diverse applications," 1 (2022).
- [37] M. R. S. Mir, M. E. Yazdanshenas, and H. Zare, "Synthesis of color-tunable CdTe/CdS :Mn core-shell nanocrystal emitters," *Physica B : Condensed Matter*, vol. 557, pp. 23–26, 3 (2019).

- [38] A. Sahu and D. Kumar, “Core-Shell Quantum Dots : A review on classification, materials, application, and theoretical modeling,” *Journal of Alloys and Compounds*, p. 166508, 7 (2022). [Online]. Available : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0925838822028997>
- [39] K. Asakawa, N. Ozaki, S. Ohkouchi, Y. Sugimoto, and N. Ikeda, “Advanced Growth Techniques of InAs-system Quantum Dots for Integrated Nanophotonic Circuits,” *Handbook of Self Assembled Semiconductor Nanostructures for Novel Devices in Photonics and Electronics*, pp. 529–551, 1 (2008).
- [40] K. Kash, A. Scherer, J. M. Worlock, H. G. Craighead, and M. C. Tamargo, “Optical spectroscopy of ultrasmall structures etched from quantum wells,” *Applied Physics Letters*, vol. 49, pp. 1043–1045, 10 (1986). [Online]. Available : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.97466>
- [41] H. Temkin, G. J. Dolan, M. B. Panish, and S. N. G. Chu, “Low-temperature photoluminescence from InGaAs/InP quantum wires and boxes,” *Applied Physics Letters*, vol. 50, pp. 413–415, 2 (1987). [Online]. Available : <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.98159>
- [42] M. Diarra, “Thèse : Etude théorique de nanofils semiconducteurs,” *Université des Sciences et Technologie de Lille, Editions Universitaires Européennes*, p. 144, (2010). [Online]. Available : <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00432564>
- [43] I. Suemune, K. Uesugi, and S. Ganapathy, “MOMBE Growth and Characterization of III–V–N Compounds and Application to InAs Quantum Dots,” *Dilute Nitride Semiconductors*, pp. 137–155, 1 (2005).
- [44] O. Abouzaid, H. Mehdi, M. Martin, J. Moeyaert, B. Salem, S. David, A. Souifi, N. Chauvin, J. Hartmann, B. Ilahi, D. Morris, A. Ahaitouf, A. Ahaitouf, and T. Baron, “O-Band Emitting InAs Quantum Dots Grown by MOCVD on a 300 mm Ge-Buffered Si (001) Substrate,” *Nanomaterials*, vol. 10, no. 12, 2020. [Online]. Available : <https://www.mdpi.com/2079-4991/10/12/2450>

- [45] L. Qu and X. Peng, "Control of Photoluminescence Properties of CdSe Nanocrystals in Growth," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 124, pp. 2049–2055, 2 (2002).
- [46] C. de Mello Donegá, S. G. Hickey, S. F. Wuister, D. Vanmaekelbergh, and A. Meijerink, "Single-Step Synthesis to Control the Photoluminescence Quantum Yield and Size Dispersion of CdSe Nanocrystals," *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 107, pp. 489–496, 12 (2002).
- [47] C. F. Schuck, S. K. Roy, T. Garrett, Q. Yuan, Y. Wang, C. I. Cabrera, K. A. Grossklaus, T. E. Vandervelde, B. Liang, and P. J. Simmonds, "Anomalous Stranski-Krastanov growth of (111)-oriented quantum dots with tunable wetting layer thickness," *Scientific Reports*, vol. 9, p. 18179, (2019). [Online]. Available : <https://doi.org/10.1038/s41598-019-54668-z>
- [48] P. Gentile, D. Gaboriau, D. Aradilla, and S. Sadki, "Croissance Vapeur-Liquide-solide (VLS) de nanostructures silicium fortement dopé utilisées comme électrodes de μ -supercondensateurs," in *Journée Electrochimie Alpes*, Grenoble, France, Oct. (2015). [Online]. Available : <https://hal-cea.archives-ouvertes.fr/cea-01998336>
- [49] G. C. Yi, "Semiconductor Nanostructures for Optoelectronic Devices : Processing, Characterization and Applications," *NanoScience and Technology*, vol. 58, (2012).
- [50] G. Moody, "Confinement Effects on the Electronic and Optical Properties of Semiconductor Quantum Dots Revealed with Two-Dimensional Coherent Spectroscopy," *Faculty of the Graduate School of the University of Colorado in partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy Department of Physics*, (2013).
- [51] P. D. Dapkus, "A critical comparaison of MOCVD and MBE for heterojunction devices," *Journal of Crystal Growth*, vol. 68, pp. 345–355, (1984).
- [52] J. Lohani, S. Sapra, and R. Tyagi, "Effect of pressure and time on the self catalyzed growth of epitaxial GaAs nanostructures by MOCVD," *Vacuum*, vol. 164, pp. 343–348, (2019).

- [53] X. Yan, F. Tang, Y. Wu, B. Li, X. Zhang, and X. Ren, “Growth of isolated InAs quantum dots on core-shell GaAs/InP nanowire sidewalls by MOCVD,” *Journal of Crystal Growth*, vol. 468, pp. 185–187, 6 (2017).
- [54] H. Shoji, K. Mukai, N. Ohtsuka, M. Sugawara, T. Uchida, and H. Ishikawa, “Lasing at Three-Dimensionally Quantum-Confined Sublevel of Self-organized In_{0.5}Ga_{0.5}As Quantum Dots by Current Injection,” *IEEE PHOTONICS TECHNOLOGY LETTERS*, vol. 7, (1995).
- [55] D. Bimberg, N. N. Ledentsov, M. Grundmann, N. Kirstaedter, O. G. Schmidt, M. H. Mao, V. M. Ustinov, A. Y. Egorov, A. E. Zhukov, P. S. Kopév, Z. I. Alferov, S. S. Ruvimov, U. Gösele, and J. Heydenreich, “InAs–GaAs Quantum Pyramid Lasers : In Situ Growth, Radiative Lifetimes and Polarization Properties,” *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 35, p. 1311, 2 (1996). [Online]. Available : <https://iopscience.iop.org/article/10.1143/JJAP.35.1311>
- [56] V. I. Klimov, A. A. Mikhailovsky, S. Xu, A. Malko, J. A. Hollingsworth, C. A. Leatherdale, H.-J. Eisler, and M. G. Bawendi, “Optical Gain and Stimulated Emission in Nanocrystal Quantum Dots,” *Science*, vol. 290, no. 5490, pp. 314–317, (2000). [Online]. Available : <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.290.5490.314>
- [57] G. Konstantatos, I. Howard, A. Fischer, S. Hoogland, J. Clifford, E. Klem, L. Levina, and E. H. Sargent, “Ultrasensitive solution-cast quantum dot photodetectors,” *Nature*, vol. 442, pp. 180–183, 7 (2006).
- [58] G. S. Solomon, J. A. Trezza, A. F. Marshall, and J. S. H. Jr., “Vertically Aligned and Electronically Coupled Growth Induced InAs Islands in GaAs,” *Physical Review Letters*, vol. 76, pp. 952–955, 2 (1996). [Online]. Available : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.76.952>
- [59] N. H. Bonadeo, J. Erland, D. Gammon, D. Park, D. S. Katzer, and D. G. Steel, “Coherent Optical Control of the Quantum State of a Single Quantum Dot,” *Science*, vol. 282, pp. 1473–1476, 11 (1998), doi : 10.1126/science.282.5393.1473. [Online]. Available : <https://doi.org/10.1126/science.282.5393.1473>

- [60] D. P. Divincenzo, "Quantum Computation," vol. 270, pp. 255–261, 10 (1995).
- [61] M. S. Skolnick and D. J. Mowbray, "Self-assembled semiconductor quantum dots : Fundamental Physics and Device Applications," *Annual Review of Materials Research*, vol. 34, pp. 181–218, 7 (2004). [Online]. Available : <https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.34.082103.133534>
- [62] C. Y. Zhang, H. C. Yeh, M. S. T. Kuroki, and T. H. Wang, "Single-quantum-dot-based DNA nanosensor," *Nature Materials*, vol. 4, pp. 826–831, (2005).
- [63] K. S. Leschkies, R. Divakar, J. Basu, E. Enache-Pommer, J. E. Boercker, C. B. Carter, U. R. Kortshagen, D. J. Norris, and E. S. Aydil, "Photosensitization of ZnO nanowires with CdSe quantum dots for photovoltaic devices," *Nano Letters*, vol. 7, pp. 1793–1798, 6 (2007).
- [64] A. J. Nozik, M. C. Beard, J. M. Luther, M. Law, R. J. Ellingson, and J. C. Johnson, "Semiconductor quantum dots and quantum dot arrays and applications of multiple exciton generation to third-generation photovoltaic solar cells," *Chemical Reviews*, vol. 110, pp. 6873–6890, 11 (2010).
- [65] S. V. Gaponenko and H. V. Demir, "Electrons in potential wells and in solids," *Applied Nanophotonics*, p. 9–51, (2018).
- [66] F. Rossi, "Theory of Semiconductor Quantum Devices : Microscopic Modeling and Simulation Strategies," *Springer Heidelberg Dordrecht London New York*.
- [67] A. Montanaro and S. Pallister, "Quantum algorithms and the finite element method," *Physical Review A*, vol. 93, 3 (2016).
- [68] "COMSOL Multiphysics, v. 5.4. COMSOL AB, Stockholm, Sweden." (1998). [Online]. Available : www.comsol.com/blogs
- [69] M. Horbatsch, D. Styer, S. R. McKay, and W. Christian, "Quantum Mechanics Using Maple," *Computers in Physics*, vol. 11, p. 165, (1997).

- [70] L. A. Deschenes and A. D. A. Vanden Bout University of Texas, “Origin 6.0. Scientific Data Analysis and Graphing Software Origin Lab Corporation,” *Journal of the American Chemical Society*, pp. 9567–9568, 9.
- [71] A. H. Squillacote, D. E. Demarle, J. Ahrens, C. Law, B. Geveci, K. Moreland, and B. King, “The paraview guide paraview guide.” [Online]. Available : <http://www.paraview.org>.

PROPRIÉTÉS OPTOÉLECTRONIQUES D'UN DONNEUR CONFINÉ DANS UNE DOUBLE BOÎTE QUANTIQUE

2.1 Introduction

Au cours de l'immense progrès technologique des nanotechnologies, il est devenu possible de fabriquer des structures semi-conductrices ultra-petites appelées nanostructures quantiques, telles que les BQs, où les porteurs sont confinés dans les trois directions de l'espace. Comme les structures BQ présentent des caractéristiques atomiques telles que des spectres d'énergie discrets et une densité d'états de type delta, elles sont souvent appelées "atomes artificiels" [1]. Ces systèmes ont donc suscité un grand intérêt de la part des chercheurs. Grâce aux progrès des techniques de croissance, la construction d'une nouvelle classe d'hétérostructures appelée DBQ est devenue possible ; ces structures sont formées par le couplage de deux BQs en série et ont suscité un intérêt considérable tant sur le plan expérimental que théorique [2, 3] car elles servent de lien entre les BQs simples et les super-réseaux. Le transport électronique est régi par le mécanisme de blocage de Coulomb et les phénomènes d'effet tunnel à un seul électron. La présence d'une barrière centrale dans l'hétérostructure séparant les deux BQs permet également de créer des nouvelles transitions optiques entre les bandes et les interbandes. Ces différentes transitions offrent un large éventail d'applications potentielles pour les dispositifs optoélectroniques et les applications d'information quantique. Il a été démontré que les BQs couplés peuvent être traités

comme des "molécules diatomiques artificielles" [4]. Avec le développement rapide de la technologie fine, l'ingénierie des matériaux nous permettra de fabriquer des nanostructures couplées de différents types à l'aide d'une série de techniques physiques, telles que le dépôt chimique en phase vapeur métal-organique, l'épitaxie en phase liquide, et l'épitaxie par faisceau moléculaire [5, 6]. De plus, les nanostructures démontrent un large éventail de phénomènes, couvrant des caractéristiques allant du métal à l'isolant, et elles possèdent une polyvalence exceptionnelle dans le domaine technologique. Elles sont utilisées dans des dispositifs micro et nanoélectroniques, optoélectroniques ainsi que dans le domaine optique, notamment dans la conception de lasers, de capteurs et de nano-cellules solaires [7–9]. Le fonctionnement de ces différents dispositifs repose sur les nouvelles propriétés électriques, optiques et magnétiques qui apparaissent sur les matériaux semi-conducteurs à l'échelle nanométrique.

Dans ce sens vient cette étude, qui a pour objectif d'analyser les effets conjoints de la température T et de la pression uniaxiale P sur les propriétés optoélectroniques d'une impureté donneur peu profonde située dans une DBQ GaAs/Al $_{\eta}$ Ga $_{1-\eta}$ As, où η représente la concentration de l'aluminium dans l'alliage barrière. Cette analyse portera notamment sur la variation de l'énergie de liaison de l'état fondamental E_b , des coefficients d'absorption optique linéaire $\alpha^{(1)}(\omega)$, non linéaire du troisième ordre $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ et total $\alpha_T(\omega, I)$, ainsi que des coefficients de changements d'indice de réfraction (CIRs) linéaire $\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r}$, non linéaire $\frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r}$ et total $\frac{\Delta n(\omega, I)}{n_r}$. En vue de déterminer leur influence, il sera nécessaire d'ajuster les variables des paramètres géométriques de la structure (L_b, L_d) ainsi que de les positions particuliers de l'impureté donneur.

Comme on sait, l'impureté donneur peu profond joue un rôle crucial dans les matériaux semi-conducteurs. En bref, la conductivité d'un semi-conducteur est augmentée de plusieurs ordres de grandeur lorsqu'une impureté donneur peu profond est présente. En outre, en raison de l'interaction considérable entre le profil du potentiel de confinement et les effets des impuretés, la présence d'impuretés modifie considérablement le spectre énergétique et les caractéristiques optiques des systèmes de nanostructures. Pour déterminer l'énergie de liaison des impuretés, G. Bastard [10] a été le premier à traiter théoriquement l'état d'impureté hydrogénoïde dans un PQ de GaAs, en supposant une barrière de potentiel infinie. Depuis, de nombreux auteurs ont pris en compte la barrière de potentiel finie

dans les BQs [11] et dans les DBQs [12]. Un grand nombre d'articles ont montré que le potentiel de puits fini a un effet observable sur les propriétés électroniques et optiques de l'impureté hydrogéoïde, par rapport au puits infini, en particulier dans les nanostructures semi-conductrices minces [13–16].

Les effets du confinement quantique et des perturbations externes telles que la pression et la température sur les états donneurs peu profonds dans les structures quantiques couplées ont été présentés par certains travaux expérimentaux antérieurs ainsi que par des études théoriques [14, 17–19]. En utilisant une méthode variationnelle, Liu et al. [3] ont examiné les effets de la contrainte de compression externe sur l'énergie de liaison des impuretés à faible profondeur dans les structures DBQs. La densité de probabilité des électrons et l'énergie de liaison de l'état fondamental pour l'impureté hydrogéoïde dans les DBQs confinés dans le potentiel de confinement gaussien ont été étudiées théoriquement par Wang [12]. Les résultats ont indiqué que l'énergie de liaison en fonction de la distance entre les centres des deux BQs a une valeur minimale au centre de chaque boîte. Dans un système formé d'alliage GaAs/GaAlAs à double barrière, Smith et al. [20] ont étudié l'effet de la pression hydrostatique sur l'effet tunnel résonnant entre les états X. En utilisant une approche variationnelle, Raigoza et al. [17] ont examiné l'effet de la pression hydrostatique sur la densité de probabilité et l'énergie de liaison des impuretés donneurs peu profondes distribuées aléatoirement dans deux PQs reliées par une barrière de potentiel finie et limitées par des barrières de potentiel infinies. Bai et al. [19] ont réalisé une étude théorique des effets d'une contrainte de compression uniaxiale externe sur l'énergie de liaison des impuretés donneurs peu profondes dans des fils symétriques à double PQs, en tenant compte des effets de la dispersion des bandes Γ -X et du décalage de la masse effective des électrons dans les matériaux puits et barrière.

Dans la littérature, de nombreux travaux théoriques traitent des propriétés optiques des impuretés donneurs pour différentes hétérostructures couplées. Récemment, de nombreuses études sur les propriétés optiques des nanostructures formées par des multicouches de différentes géométries ont été publiées dans des ouvrages considérables [21–23], démontrant clairement la distinction entre les multicouches et les structures simples. Baghrmian et al. [24, 25] ont étudié les propriétés optiques linéaires et non linéaires du troisième ordre d'une impureté donneur confinée dans des anneaux quantiques doubles, en tenant compte

des effets combinés de la concentration en aluminium et de la pression hydrostatique. Karimi et al. ont calculé les propriétés optiques intersous-bandes linéaires et non linéaires pour des BQ sphériques multicouches sans [26] et avec un champ électrique appliqué dans des PQs semi-paraboliques doubles [27]. Keshavarz et al. [28] ont optimisé les propriétés optiques linéaires et non linéaires associées aux transitions entre les bandes pour des PQs rectangulaires doubles asymétriques en utilisant l'approche d'optimisation par essaim de particules (en anglais : Particle Swarm Optimization PSO). Barseghyan et al. [29] ont étudié théoriquement les effets simultanés d'un champ laser intense, d'un champ magnétique stationnaire homogène et des paramètres structurels sur le spectre d'absorption optique intrabande dans une molécule DBQ bidimensionnelle. Les résultats montrent que la position du pic et l'intensité de l'absorption peuvent être régulées par un champ magnétique et un champ laser intense, ainsi que par la variation des paramètres structurels, du champ laser intense et par la variation des paramètres structurels du système.

Compte tenu de l'état de l'art présenté ci-dessus, nous considérons que le problème des BQs couplés est un sujet de recherche où des questions restent encore sans réponse. Il existe un manque important d'information sur les effets des impuretés dans les hétérostructures doubles de dimension zéro. Lorsqu'il s'agit d'un modèle de dopage à un seul donneur, il est crucial de prendre en compte l'effet de la position de l'impureté, que ce soit dans le puits ou dans la barrière, ainsi que son influence sur l'énergie de liaison de l'état fondamental. Ces aspects revêtent une importance particulière dans la compréhension des mécanismes de dopage et des propriétés électroniques des systèmes. La localisation précise de l'impureté et son interaction avec son environnement peuvent avoir un impact significatif sur les propriétés du matériau, et donc, une analyse approfondie de ces facteurs est nécessaire pour une caractérisation précise des états liés et de leurs effets sur les performances du système. Associées à l'état fondamental d'un électron confiné dans une structure double en présence et en l'absence d'impuretés, certaines propriétés optiques non linéaires peuvent être étudiées, telles que le coefficient d'absorption optique et les variations relatifs de l'indice de réfraction pour un rayonnement incident résonant avec une polarisation le long de la direction de croissance de l'hétérostructure.

En outre, les connaissances sur les changements de propriétés optiques provoqués par les variations de température et les effets de la pression uniaxiale sur le système sont encore

très insuffisantes. Comprendre comment ces facteurs influencent l'ensemble des propriétés optiques constitue un domaine de recherche crucial. Les variations de température peuvent induire des changements significatifs dans les coefficients optiques d'une nanostructure DBQ, tandis que les effets de la pression uniaxiale peuvent également engendrer des modifications subtiles mais importantes dans les propriétés optiques du système. Approfondir notre compréhension de ces interactions est essentiel pour exploiter pleinement le potentiel de ces nanostructures et pour développer des applications plus performantes dans des conditions environnementales variables.

Il est bien connu que le problème de Coulomb dans un système à zéro dimension n'a généralement pas de solution exacte, et il est donc nécessaire de recourir à différentes méthodes numériques pour trouver les solutions aux équations différentielles. L'une des méthodes qui a démontré son efficacité est la méthode variationnelle, en particulier avec des fonctions d'essai d'un paramètre variationnel. Tout ce qui est soulevé ici est d'une grande nouveauté et il n'existe pas de rapports complets dans la littérature où sa phénoménologie est expliquée. Il est clair que cette nouveauté justifie l'investigation que nous décrivons. Cette étude sera certainement une source de motivation pour d'autres chercheurs, tant théoriciens qu'expérimentateurs, dans le domaine des nanostructures couplées à dimension zéro en présence d'une impureté donneur et sous les effets de la pression uniaxiale et de la température.

2.2 Formalisme général

2.2.1 Hamiltonien du système sous l'effet de la pression et de la température

La nanostructure que nous étudions, deux BQs à couplage horizontale et symétrique, est illustrée à la Fig. (2.1), avec une description détaillée des différentes dimensions du système et de la fonction de potentiel de confinement. Le paramètre L_d correspond à la largeur d'une boîte, le paramètre L_b est l'épaisseur de matériau barrière $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$ qui est localisée entre les deux BQs, tandis que L_c définie par $L_c = \frac{L_b}{2} + L_d$ est un coefficient dont nous avons besoin pour simplifier les calculs. Nous choisissons l'origine du système de coordonnées au centre de la barrière centrale.

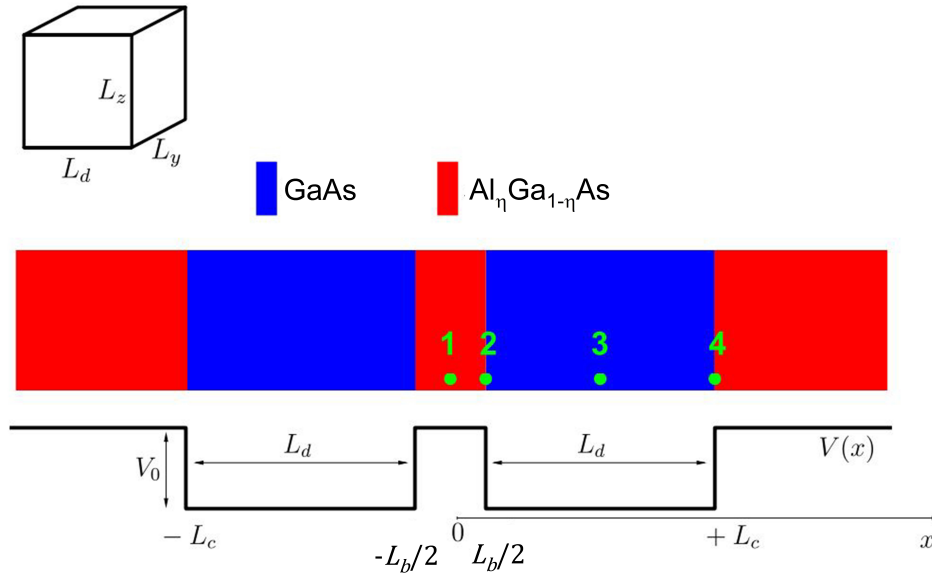


FIGURE 2.1 – Représentation schématique d’une hétérostructure DBQ avec le potentiel de confinement correspondant $V(x)$ dépendant de x .

Les étiquettes 1, 2, 3 et 4 correspondent à l’impureté donneur située, respectivement, au centre de la barrière, au bord de la barrière, au centre de la boîte droite et au bord de la boîte droite. La section transversale des boîtes est donnée par les dimensions L_y et L_z . Les dimensions des deux boîtes dans la direction x sont L_d , tandis que dans la même direction, la largeur de la barrière centrale est L_b . Le potentiel de confinement est nul à l’intérieur de la région des boîtes et a la valeur V_0 ailleurs.

Dans l’approximation de la masse effective, l’Hamiltonien d’une impureté hydrogénoïde donneur peu profonde dans un DBQ GaAs/ $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$ rectangulaire symétrique sous l’influence de la température et d’une pression uniaxiale a la forme suivante :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_{d,b}^*(\eta, P, T)} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon_{d,b}(\eta, P, T)r} + V(r, P, T) \quad (2.1)$$

où $r = \sqrt{(x - x_i)^2 + y^2 + z^2}$ est la distance entre l’électron, de position (x, y, z) , et l’impureté donneur, dont la position est donnée par $(x_i, 0, 0)$. Les indices d et b réfèrent, respectivement, aux matériaux de la boîte GaAs et les matériaux de barrière $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$. Les paramètres $m_{d,b}^*(\eta, P, T)$ et $\epsilon_{d,b}(\eta, P, T)$ dépendants de la température et de la pression uniaxiale sont la masse effective de l’électron de bande de conduction parabolique et la constante diélectrique statique.

Pour des raisons de calcul, nous normalisons l’équation (2.1) en unités de système atomique, dans lesquelles l’énergie correspond au Rydberg effectif, $R_d = \frac{e^2}{2a^*\epsilon_d}$, où a^* est le rayon de

Bohr effectif comme unité de longueur et donné par $a^* = \frac{\varepsilon_d \hbar^2}{m_d^* e^2}$. Dans ces unités, l'Hamiltonien dans l'équation (2.1) peut être réécrit comme suit :

$$H^* = -\frac{m_d^*(P, T)}{m_{d,b}^*(\eta, P, T)} \nabla^2 - \frac{\varepsilon_d}{\varepsilon_{d,b}(\eta, P, T)} \frac{2}{\sqrt{(x - x_i)^2 + y^2 + z^2}} + \frac{V(r, P, T)}{R_d} \quad (2.2)$$

où $V(r, P, T)$ est le potentiel de confinement dépendant de la pression uniaxiale et de la température, qui est donné par :

$$V(r, P, T) = \begin{cases} V_0(P, T, \eta), & \text{pour } |x| \leq \frac{L_b(P)}{2}, |x| > L_c(P), |y| \leq \frac{L_y}{2}, |z| \leq \frac{L_z}{2} \\ 0, & \text{pour } \frac{L_b(P)}{2} < |x| < L_c(P), |y| < \frac{L_y}{2}, |z| < \frac{L_z}{2} \\ \infty, & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (2.3)$$

Ici, $V_0(P, T, \eta)$ est la hauteur de la barrière finie dépendante de la température, de la pression et de la fraction molaire d'aluminium η dans la couche d' $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$, donnée par la relation suivante [30] :

$$V_0(P, T, \eta) = 0.658 \times \Delta E_g^\Gamma(\eta, P, T) \quad (2.4)$$

où $\Delta E_g^\Gamma(\eta, P, T)$ est la différence de l'énergie de gap entre les matériaux GaAs et $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$, elle est exprimée en eV par [30] :

$$\Delta E_g^\Gamma(\eta, P, T) = 1.155\eta + 0.37\eta^2 - 1.3 \times 10^{-2}\eta [GPa^{-1}] P - 1.15 \times 10^{-4}\eta [K^{-1}] T \quad (2.5)$$

De plus, $L_b(P)$ est la largeur de la barrière centrale dépendante de la pression uniaxiale et $L_d(P) = L_c(P) - L_b(P)/2$ est la taille de la boîte le long de la direction de croissance de la structure. Finalement, L_y et L_z sont, respectivement, les dimensions de la BQ dans les directions y et z . Dans ce travail, nous négligeons les effets de la pression uniaxiale sur les directions (Oy) et (Oz) . Les dimensions $L_b(P)$, $L_d(P)$ et $L_c(P)$ peuvent être obtenues pour une structure cristalline dérivée de la structure cubique à faces centrées (zinc-blende) d'un volume V avec une pression uniaxiale appliquée en considérant la variation de fraction du volume :

$$L_{b,d,c}(P) = L_{b,d,c}(0)[1 - (S_{11} + 2 S_{12}) P] \quad (2.6)$$

où $S_{11} = 1.16 \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$ et $S_{12} = -3.7 \times 10^{-4} \text{ kbar}^{-1}$ sont les constantes élastiques du GaAs et $L_{b,d,c}(0)$ sont les dimensions correspondantes à une pression uniaxiale nulle.

La masse effective de l'électron dépendante de la pression et de la température pour une BQ de GaAs peut être obtenue à partir de l'expression suivante [30] :

$$m_d^*(P, T) = m_0 \left[1 + E_P^\Gamma \left(\frac{2}{E_g^\Gamma(P, T)} + \frac{1}{E_g^\Gamma(P, T) + \Delta_0} \right) \right]^{-1} \quad (2.7)$$

où m_0 est la masse de l'électron libre, $E_P^\Gamma = 7.51$ eV est l'énergie liée à la quantité de mouvement, et $\Delta_0 = 0.341$ eV est la séparation spin-orbite de la BV du GaAs. Dans l'expression ci-dessus, P est exprimée en kbar et la température T en K. $E_g(P, T)$ est l'écart énergétique du GaAs dépendante de la température et de la pression au point Γ , en eV, donné par la formule suivante [31] :

$$E_g^\Gamma(P, T) = E_g^\Gamma(0, T) + 10.7 \times 10^{-3} P \quad (2.8)$$

où $E_g^\Gamma(0, T)$ est l'écart d'énergie à pression nulle, et également en eV, est déterminé par :

$$E_g^\Gamma(0, T) = 1.519 - \frac{5.405 \times 10^{-4} T^2}{T + 204} \quad (2.9)$$

La masse effective des électrons au niveau de la couche barrière en fonction de la pression uniaxiale et de la température s'exprime comme suit [31] :

$$m_b^*(\eta, P, T) = m_d^*(P, T) + 0.083 \eta m_0 \quad (2.10)$$

Les constantes diélectriques statiques dépendantes de la température et de la pression des matériaux de la boîte et de la barrière, $\varepsilon_d(P, T)$ et $\varepsilon_b(\eta, P, T)$, sont données par [30] :

$$\varepsilon_d(P, T) = \begin{cases} 12.74 \exp[-1.67 \times 10^{-3} P] \exp[9.4 \times 10^{-5}(T - 75.6)], & \text{pour } T \leq 200 \text{ K} \\ 13.18 \exp[-1.73 \times 10^{-3} P] \exp[20.4 \times 10^{-5}(T - 300)], & \text{pour } T > 200 \text{ K} \end{cases} \quad (2.11)$$

et

$$\varepsilon_b(x, P, T) = \varepsilon_d(P, T) - 3.12 \eta \quad (2.12)$$

2.2.2 États électroniques et énergie de liaison d'une impureté confinée dans une double boîte quantique

2.2.2.1 Choix de la fonction d'essai

Pour étudier l'interaction électron-impureté à l'intérieur de la DBQ et trouver les niveaux électroniques appropriés, nous choisissons la fonction d'onde variationnelle séparable de la forme suivante [3] :

$$\psi(x, y, z) = N \varphi(x, y, z) \phi(r) \quad (2.13)$$

où N est la constante de normalisation, $\phi(r) = \exp(-\lambda r)$ est la partie hydrogénoïde, et λ est le paramètre variationnel. Les états propres liés à l'Hamiltonien de l'équation (2.2), sans le terme de potentiel d'impureté, sont donnés par $\varphi(x, y, z)$ comme suit :

$$\varphi(x, y, z) = \begin{cases} \cos\left(\frac{\pi y}{L_y}\right) \cos\left(\frac{\pi z}{L_z}\right) f(x), & \text{pour } |y| \leq \frac{L_y}{2}; |z| \leq \frac{L_z}{2} \\ 0, & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (2.14)$$

où $\cos\left(\frac{\pi y}{L_y}\right)$ et $\cos\left(\frac{\pi z}{L_z}\right)$ décrivent les fonctions d'onde de la première sous-bande ($n_y=1$ et $n_z=1$), respectivement, dans les directions y et z .

Dans l'équation (2.14), $f(x)$ est la fonction d'onde de l'état fondamental de l'électron dans la direction x , évaluée analytiquement comme suit :

$$f(x) = \begin{cases} A \exp[k_2(x + L_c)], & \text{pour } x \leq -L_c \\ -B \sin[k_1(x + L_b/2)] + C \cos[k_1(x + L_b/2)], & \text{pour } -L_c < x < -L_b/2 \\ \cosh(k_2 x), & \text{pour } |x| \leq L_b/2 \\ B \sin[k_1(x - L_b/2)] + C \cos[k_1(x - L_b/2)], & \text{pour } L_b/2 < x < L_c \\ A \exp[-k_2(x + L_c)], & \text{pour } x \geq L_c \end{cases} \quad (2.15)$$

où les coefficients A , B et C peuvent être obtenus à partir des conditions de continuité pour les fonctions propres et leurs dérivées aux interfaces du système.

L'énergie correspondante de l'état fondamental, en unités atomiques, associée à la fonction propre $\varphi(x, y, z)$ peut être exprimée comme suit :

$$E_0 = \left(\frac{\pi}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{L_z}\right)^2 + E_x \quad (2.16)$$

où E_x est la valeur propre associée à $f(x)$, qui peut être obtenue par l'équation transcendante :

$$2 \cos(L_d \sqrt{E_x}) + \left[\gamma_2 \sqrt{\gamma_1 \left(\frac{V_0}{E_x} - 1 \right)} - \frac{1}{\gamma_2 \sqrt{\gamma_1 \left(\frac{V_0}{E_x} - 1 \right)}} \right] \sin(L_d \sqrt{E_x}) - \left[\gamma_2 \sqrt{\gamma_1 \left(\frac{V_0}{E_x} - 1 \right)} - \frac{1}{\gamma_2 \sqrt{\gamma_1 \left(\frac{V_0}{E_x} - 1 \right)}} \right] \sin(L_d \sqrt{E_x}) \exp(-L_b \sqrt{\gamma_1 (V_0 - E_x)}) = 0 \quad (2.17)$$

où $\gamma_1 = m_b/m_d$; $\gamma_2 = 1/\gamma_1$; $k_1 = \sqrt{E_x}$, et $k_2 = \sqrt{\gamma_1(V_0 - E_x)}$.

2.2.2.2 Énergie de liaison de l'impureté donneur

Définition : Lorsqu'une impureté est introduite dans une BQ, l'interaction entre cette impureté et les électrons confinés dans la nanostructure conduit à la formation d'un état lié. L'énergie de liaison d'une impureté dans une BQ peut être définie comme la différence d'énergie de l'électron en absence de l'impureté et l'énergie de l'état lié (énergie de l'impureté).

On définit l'énergie de liaison par la méthode variationnelle comme la différence entre l'énergie du système en tenant pas compte l'interaction de Coulomb E_0 et la valeur minimale de l'Hamiltonien mentionné dans l'équation (2.2).

$$E_b = E_0 - \min \langle \psi(x, y, z) | H^* | \psi(x, y, z) \rangle \quad (2.18)$$

L'énergie de liaison d'une impureté dans une BQ dépend de divers facteurs tels que la taille et la forme de la structure, les propriétés de l'impureté et la densité des électrons dans la boîte.

2.2.3 Coefficients d'absorption optiques et les indices de réfraction d'une impureté confinée dans une double boîte quantique

2.2.3.1 Coefficients d'absorption optiques (CAOs)

La loi de Beer-Lambert stipule que si une lumière d'intensité I_0 est incidente sur un matériau qui absorbe, l'intensité va décroître à l'intérieur du matériau comme $I(z) = I_0 e^{-\alpha z}$. Ici, α est le coefficient d'absorption, en unités de longueur inverse. Généralement, l'unité

utilisée pour α est le cm^{-1} . Si nous prenons un morceau de semi-conducteur massif, GaAs par exemple, et à l'aide d'une source de lumière accordable, on obtient le spectre d'absorption $\alpha(\hbar\omega)$ par la mesure α en fonction de l'énergie des photons $\hbar\omega$. Ce coefficient d'absorption optique se divise en deux types : linéaire et non-linéaire.

En bref, le coefficient d'absorption linéaire, souvent être désigné par $\alpha^{(1)}(\omega)$, dans quelle il mesure la lumière absorbée de manière linéaire. Il est proportionnel à la partie imaginaire de l'indice de réfraction complexe du matériau. Le coefficient d'absorption linéaire est souvent utilisé pour caractériser la quantité de lumière absorbée par un matériau de manière simple et prévisible. $\alpha^{(1)}(\omega)$ peut s'écrire comme suit [24] :

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_r}} \frac{\sigma_s |M_{fi}|^2 \hbar \Gamma_{fi}}{(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar \Gamma_{fi})^2} \quad (2.19)$$

Le coefficient d'absorption non linéaire, quant à lui, décrit comment les propriétés d'absorption du matériau changent de manière non linéaire lorsque l'intensité de la lumière incidente augmente. Ce coefficient dépend de l'intensité de la lumière incidente I et peut varier de manière significative lorsque l'intensité lumineuse est modifiée. L'absorption non linéaire peut être due à divers mécanismes, notamment l'absorption à deux photons, l'absorption de porteurs libres, etc. Le coefficient d'absorption non linéaire est souvent désigné par $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ et donné ainsi par la relation suivante [24] :

$$\alpha^{(3)}(\omega, I) = -2\omega \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon_r}} \left(\frac{I}{\epsilon_0 n_r c} \right) \frac{\sigma_s |M_{fi}|^4 \hbar \Gamma_{fi}}{[(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar \Gamma_{fi})^2]^2} \left[1 - \frac{\delta_{fi}^2}{4 |M_{fi}|^2} \frac{3 E_{fi}^2 - 4 \hbar\omega E_{fi} + (\hbar\omega)^2 - (\hbar \Gamma_{fi})^2}{E_{fi}^2 + (\hbar \Gamma_{fi})^2} \right] \quad (2.20)$$

où $M_{fi} = \langle i | e x | f \rangle$ représente les éléments de la matrice de dipôle pour un rayonnement incident polarisé dans la direction x , dont l'énergie est égale à $\hbar\omega$, entre les états initial $|i\rangle$ et final $|f\rangle$ et $\delta_{fi} = |M_{ff} - M_{ii}|$ est la différence des éléments de la matrice dipôle entre l'état $|i\rangle$ et l'état $|f\rangle$.

Le coefficient d'absorption optique total $\alpha_T(\omega, I)$ d'une nanostructure est la somme des deux termes linéaire et non linéaire :

$$\alpha_T(\omega, I) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I), \quad (2.21)$$

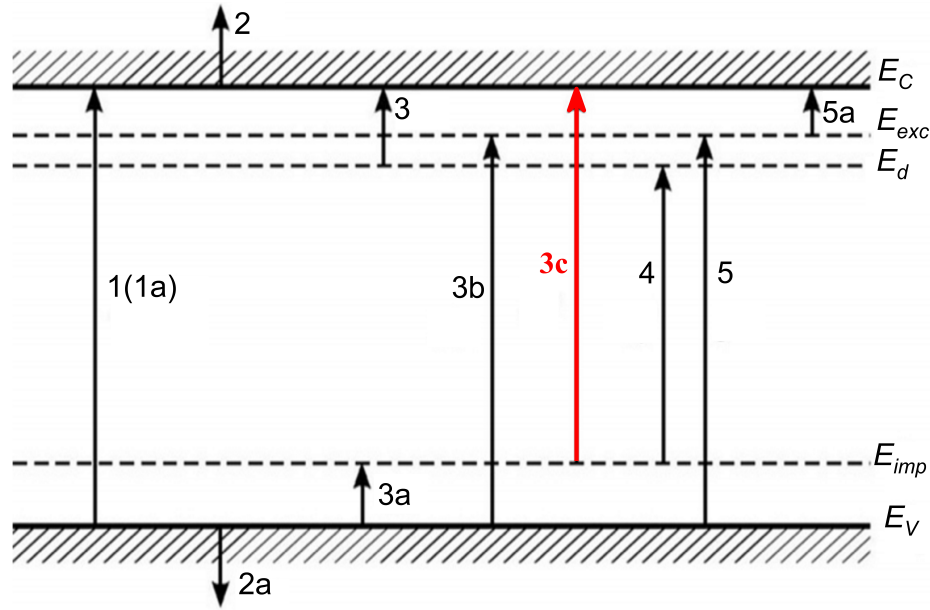


FIGURE 2.2 – Schéma des transitions électroniques d'une absorption optique : 1, 1a-absorption intrinsèque ; 2, 2a-absorption par des porteurs de charges libres ; 3, 3a-absorption par des impuretés de la zone la plus proche ; 3b, 3c-absorption par des impuretés ; 4-absorption entre bandes ; 5-absorption excitonique par excitation ; 5a-absorption excitonique par décroissance optique des excitons [32].

Une théorie des phénomènes optiques dans les semi-conducteurs est développée en fonction de l'analyse des spectres d'absorption de la lumière de différents mécanismes d'interaction des ondes lumineuses avec un cristal. Comme l'absorption de la lumière est associée à la transformation de l'énergie du photon en une autre forme d'énergie dans un cristal, la classification des mécanismes d'absorption est conditionnée par les états énergétiques du réseau semi-conducteur (Fig. (2.2)). Ce diagramme de transition électronique répertorie les différents mécanismes fondamentaux d'absorption de la lumière.

Le spectre d'absorption de la plupart des semi-conducteurs ressemble à ce qui est illustré dans le schéma de la Fig. (2.3). Dans ce chapitre, nous ne nous intéresserons qu'à l'étude de l'absorption inter-bande (Transition 3, Fig. (2.2)), particulièrement, celles due aux transitions entre les niveaux d'impureté dans la bande interdite et les niveaux électroniques dans la bande de conduction BC (Transition 3c, Fig. (2.2)). En cas d'absorption de la lumière par une impureté, ses photons interagissent avec l'impureté, les ionisant ou les excitant. Ces transitions contribueront à l'absorption au-delà du bord d'absorption, dans la gamme des grandes longueurs d'onde d'un spectre.

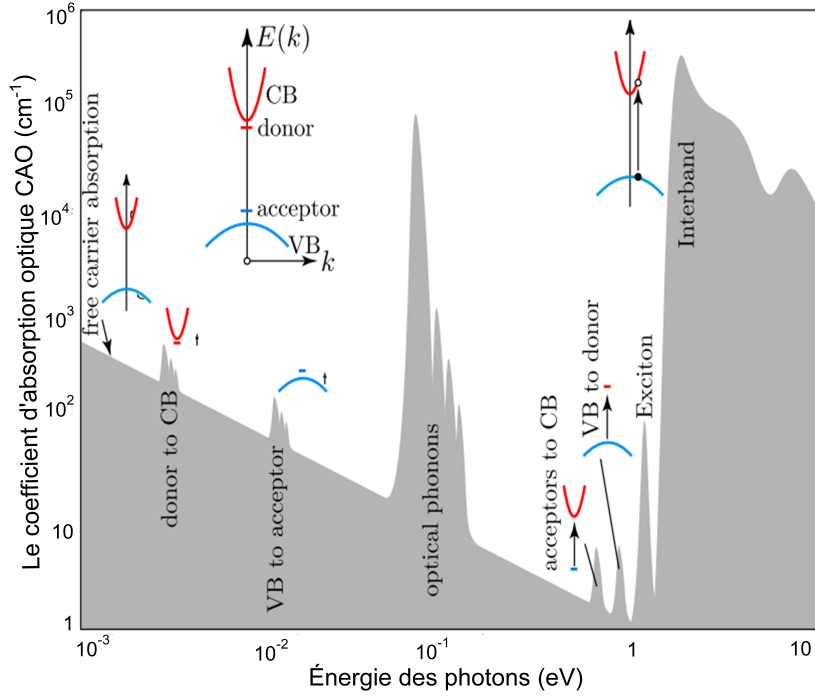


FIGURE 2.3 – Spectre d'absorption des semi-conducteurs. Un spectre d'absorption schématisé $\alpha(\hbar\omega)$ de semi-conducteurs massifs. Les encarts représentent les différentes transitions d'état lors de l'absorption de photons [33].

2.2.3.2 Changements d'indice de réfraction (CIRs)

Les changements d'indice de réfraction (CIRs) pour les BQs font référence aux altérations de la vitesse de la lumière lorsqu'elle traverse le matériau de la nanostructure qui sont induites par des facteurs externes tels que des changements de température, de pression ou du milieu environnant. Les termes linéaire et non linéaire de l'CIR sont donnés par les relations suivantes :

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} = \frac{\sigma_s |M_{fi}|^2}{2 n_r^2 \varepsilon_0} \left[\frac{E_{fi} - \hbar\omega}{(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{fi})^2} \right] \quad (2.22)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r} = & -\frac{\sigma_s |M_{fi}|^2}{4 n_r^3 \varepsilon_0} \frac{\mu c I}{[(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{fi})^2]^2} [4(E_{fi} - \hbar\omega) |M_{fi}|^2 \\ & - \frac{\delta_{fi}^2}{(E_{fi}^2 + \hbar\Gamma_{fi})^2} \{ (E_{fi} - \hbar\omega)[E_{fi}(E_{fi} - \hbar\omega) - (\hbar\Gamma_{fi})^2] - (\hbar\Gamma_{fi})^2(2E_{fi} - \hbar\omega) \}] \end{aligned} \quad (2.23)$$

L'CIR total peut être écrit comme suit :

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n_r} = \frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} + \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r}. \quad (2.24)$$

Nous avons utilisé les paramètres suivants dans les équations précédentes :

σ_s est la densité d'électrons divisée par le volume occupé.

I est l'intensité du champ électromagnétique incident.

μ est la perméabilité du système.

n_r est l'indice de réfraction relatif du semi-conducteur.

ϵ_0 est la constante diélectrique du vide.

$\hbar\omega$ est l'énergie du photon incident.

$\Gamma_{fi} = \frac{1}{\tau_{fi}}$ est l'élément de matrice non diagonale connue sous le nom du "taux de relaxation" d'états finaux et initiaux, il est défini comme étant l'inverse du temps de relaxation τ_{fi} .

2.3 Résultats numériques et discussion

Pour calculer l'énergie de liaison d'une impureté donneur, nous avons utilisé la méthode variationnelle pour minimiser l'énergie du donneur par rapport au paramètre variationnel. Pour les calculs numériques, nous avons utilisé le matériau GaAs pour les régions des boîtes et le matériau $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$ pour les régions de barrière. Les résultats numériques ont été présentés en utilisant les unités atomiques effectives, le Rydberg des électrons $R_d = 5.303 \text{ meV}$ pour les énergies et le rayon effectif de Bohr $a^* = 10.354 \text{ nm}$ pour les dimensions en longueur (notez bien que, ces deux valeurs sont données pour une pression nulle et une température, $T = 4 \text{ K}$). Les CAO linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'une DBQ sont obtenus en m^{-1} en utilisant les paramètres suivants : [34, 35] : $\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$, $n_r = 3,2$ (cette valeur pour une pression nulle et un régime de basse température), $\tau_{fi} = 1/\Gamma_{fi} = 0.14 \text{ ps}$, $\sigma_s = 5.0 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$, $\mu = 4\pi \times 10^{-7} \text{ T m A}^{-1}$, $c = 3.0 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$.

La Fig. (2.4) montre l'énergie de liaison à l'état fondamental d'une impureté donneur peu profonde confinée dans une DBQ GaAs/ $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$ symétrique en fonction de la position de l'impureté. Deux valeurs de la pression uniaxiale et de la concentration en aluminium ont été considérées avec $T = 0$, $L_b = 0.5 a^*$, et $L_d = 1.0 a^*$. De toutes les courbes, il ressort clairement que l'énergie de liaison présente une symétrie autour de la barrière centrale. De

plus, l'énergie de liaison de l'état fondamental a une valeur minimale lorsque l'impureté est située à la position 1 (voir Fig. (2.1)).

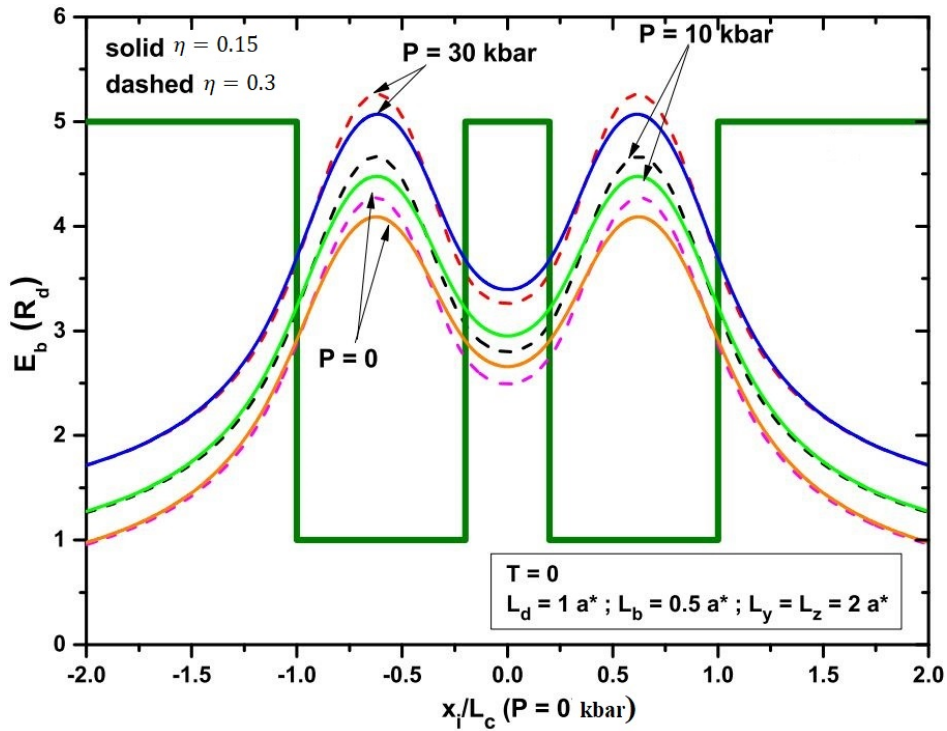


FIGURE 2.4 – Énergie de liaison à l'état fondamental d'un donneur en fonction de la position de l'impureté dans une DBQ symétrique GaAs/Al_ηGa_{1-η}As pour trois valeurs de pression et deux concentrations de η de l'aluminium. Les résultats sont pour $T = 4$ K avec $L_b = 0.5 a^*$, $L_d = 1.0 a^*$, et $L_y = L_z = 2.0 a^*$. Les dimensions de la structure rapportées seront à $P = 0$.

Ce comportement est dû à l'affaiblissement de l'interaction de Coulomb en raison de la grande distance électron-impureté. Lorsque l'impureté se déplace de la position 1 vers la position 3, l'énergie de liaison augmente progressivement et atteint une valeur maximale autour du centre de la boîte. Nous pouvons expliquer ce comportement par la localisation de la fonction d'onde près de l'impureté où la densité de probabilité est maximale. Ensuite, l'énergie de liaison diminue rapidement lorsque l'impureté est proche de la position 4. Quelle que soit la position de l'impureté, lorsque la pression appliquée augmente, la constante diélectrique et les largeurs de boîte et de barrière diminuent considérablement, ce qui entraîne un accroissement de confinement de l'électron, et donc une augmentation de l'énergie de liaison. Pour chaque valeur de la pression, lorsque l'impureté est située à la position 3, lorsque η augmente, la hauteur de la barrière augmente, conduisant à plus de confinement électronique, ceci donne une énergie de liaison plus dominante. Contrairement au cas précédent, lorsque nous nous déplaçons vers la position 1, E_b diminue, lorsque η augmente en raison de la diminution du confinement quantique électronique.

Dans la Fig. (2.5), nous présentons la variation de l'énergie de liaison de l'état fondamental en fonction de la température pour les quatre positions particuliers d'impureté (voir Fig. (2.1)) et deux valeurs de la concentration en aluminium η avec $P = 20$ kbar.

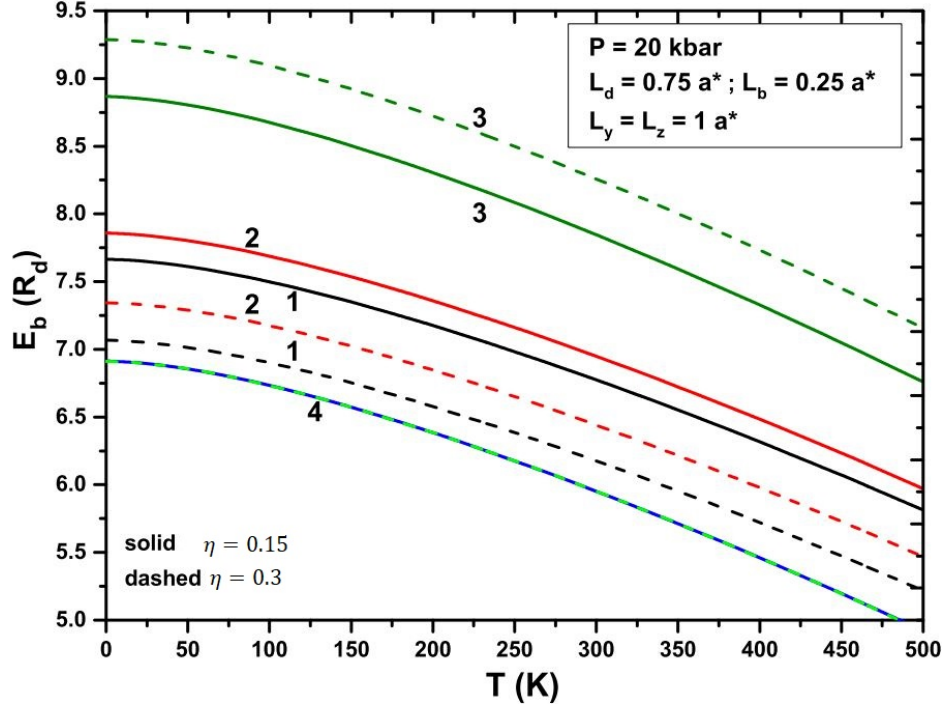


FIGURE 2.5 – Énergie de liaison d'un donneur en fonction de la température dans une DBQ symétrique $\text{GaAs}/\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$ pour deux valeurs de η . Les résultats sont pour $P = 20$ kbar avec $L_b = 0.25 a^*$, $L_d = 0.75 a^*$, et $L_y = L_z = 1.0 a^*$. Pour les étiquettes 1, 2, 3 et 4, voir la Fig. (2.1). Les dimensions de la structure rapportées seront à $P = 20$ kbar.

D'après la figure, on peut voir clairement que lorsque la température augmente, l'énergie de liaison de l'état fondamental du donneur diminue pour toutes les positions d'impuretés. Ce résultat peut être expliqué par l'augmentation de la constante diélectrique, la diminution de la masse effective et la hauteur de la barrière potentielle. Nous notons également que pour $T > 200$ K, l'énergie de liaison diminue plus rapidement que pour $T \leq 200$ K. Pour le détail de la constante diélectrique dans les deux régimes de température, voir l'équation (2.11). Ces résultats sont en bon accord avec les travaux précédemment rapportés dans les Refs. [19, 36].

Lorsque l'impureté est positionnée au centre de la BQ droite, il a été observé que l'énergie de liaison augmente avec la concentration d'aluminium η . En revanche, pour une impureté située dans la barrière centrale (positions 1 et 2), la concentration en aluminium η a un effet inverse sur l'énergie de liaison. De plus, pour l'impureté localisée à la position 4, la fraction molaire η n'affecte pas l'énergie de liaison, indiquant ainsi que la barrière de potentiel n'exerce pas d'influence significative sur l'énergie de liaison de l'impureté à cette

position.

Dans la Fig. (2.6), nous illustrons l'énergie de liaison du donneur à l'état fondamental pour plusieurs positions d'impureté dans une DBQ GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As symétrique en fonction de la pression et en considérant deux largeurs de la barrière centrale.

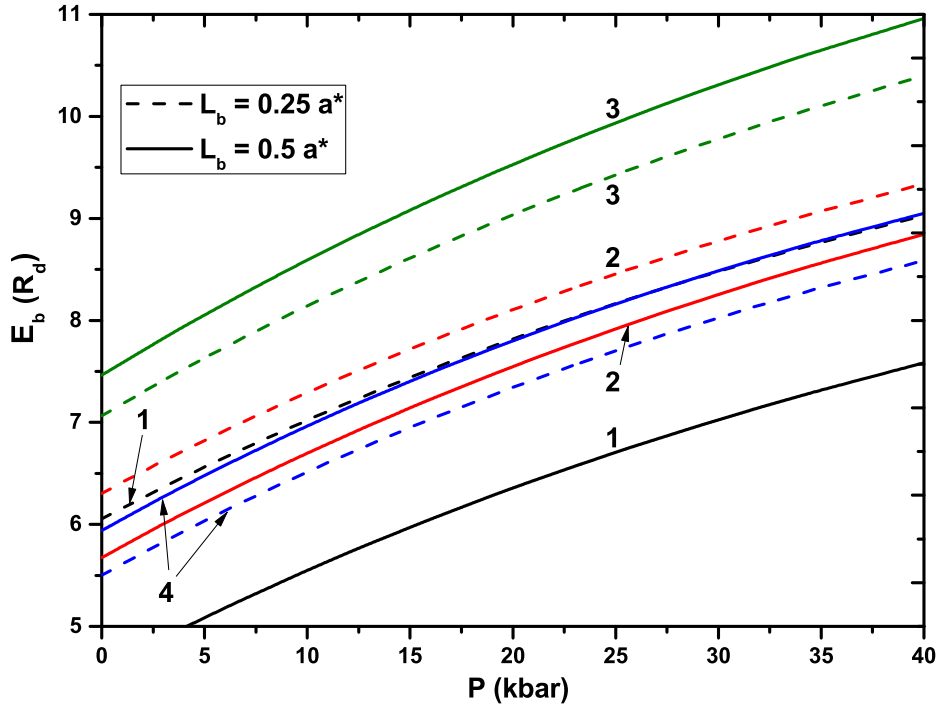


FIGURE 2.6 – Énergie de liaison d'un donneur en fonction de la pression uniaxiale dans une DBQ GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As symétrique, avec $L_b = 0,5 a^*$ (lignes pleines) et $L_b = 0,25 a^*$ (lignes pointillées). Les résultats sont pour $T = 100 \text{ K}$, $L_d = 0,5 a^*$, et $L_y = L_z = 1,0 a^*$. Pour les étiquettes 1, 2, 3 et 4, voir la Fig. (2.1). Les deux dimensions rapportées sont à $P = 0$.

Dans le régime de basse pression, pour chaque courbe, l'énergie de liaison du donneur augmente linéairement avec la pression. Lorsque la pression augmente, les masses effectives des électrons augmentent ainsi que la constante diélectrique et la taille du système diminuent, ce qui entraîne un confinement supplémentaire. Par conséquent, l'énergie de liaison augmente. Ce comportement est en bon accord avec les études de Refs. [2, 3, 17, 19]. Pour l'impureté à la position 3, on observe que l'énergie de liaison pour $L_b = 0.5 a^*$ est plus élevée que pour $L_b = 0.25 a^*$. Ceci est dû au faible couplage entre les deux boîtes lorsque la largeur de la barrière est grande ; par conséquent, l'énergie de liaison de l'état fondamental augmente. Il faut également noter que l'énergie de liaison dans cette position est toujours plus élevée que pour les positions 1, 2 et 4. Lorsque l'impureté est localisée à la position 1, l'énergie de liaison du donneur diminue avec l'augmentation de la largeur de la barrière. La raison physique peut être expliquée par l'augmentation de la distance électron-impureté,

ce qui diminue l'interaction de Coulomb. Pour l'impureté à la position 2, nous observons le même comportement que dans le cas d'une impureté située à la position 1, c'est-à-dire que l'énergie de liaison pour $L_b = 0.25 a^*$ est plus grande que pour $L_b = 0.5 a^*$. À la position 4, on observe une similarité dans la variation de l'énergie de liaison du donneur par rapport à la largeur de la barrière centrale L_b , par rapport à celle d'une impureté située à la position 3. En d'autres termes, lorsque L_b augmente, l'énergie de liaison augmente également et conserve la même pente lors de la variation de P . L'augmentation de E_b est attribuée au découplage des deux boîtes lorsque la largeur de la barrière centrale L_b augmente, ce qui entraîne une réduction de l'effet tunnel et un confinement plus prononcé de l'impureté. En d'autres termes, lorsque L_b augmente, l'impureté se retrouve davantage confinée dans une boîte quantique isolée.

La Fig. (2.7) montre les éléments de la matrice dipolaire $|M_{fi}|$ en fonction de la position de l'impureté donneur peu profonde dans une DBQ GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As symétrique pour deux valeurs de température et de pression.

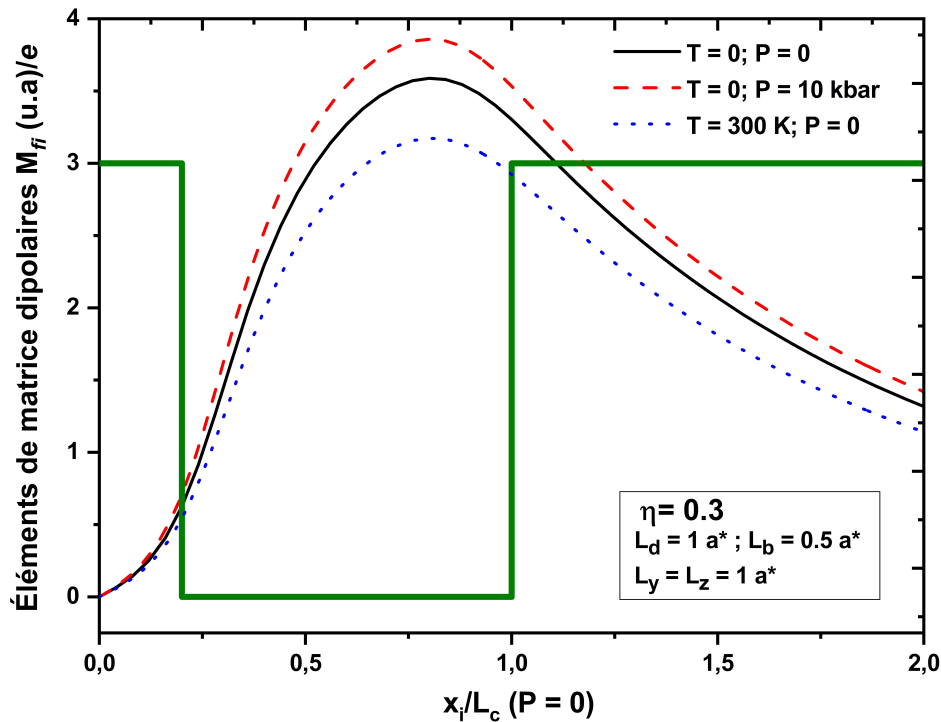


FIGURE 2.7 – Éléments de matrice dipolaires (M_{fi}) en fonction de la position de l'impureté dans une DBQ symétrique GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As pour plusieurs valeurs de température et de pression. Les résultats sont pour $L_d = 1.0 a^*$, $L_b = 0.5 a^*$, et $L_y = L_z = 1.0 a^*$.

Sur cette figure, nous pouvons voir que l'élément de matrice dipolaire disparaît lorsque l'impureté se trouve à la position 1, qu'il a une valeur maximale autour de la position 3 et qu'il diminue lorsque l'impureté se déplace vers la position 4. De plus, on constate qu'une

augmentation de la pression et une diminution de la température entraînent une augmentation de l'amplitude de $|M_{fi}|$.

Sans application ni de pression uniaxiale ni de température, nous présentons sur la Fig. (2.8) les CAO linéaire, non linéaire du troisième ordre et total pour une impureté dans une DBQ GaAs/ $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ symétrique en fonction de l'énergie du photon incident pour différentes positions d'impuretés donneurs peu profondes. Veuillez prendre note que les étiquettes présentes sur cette figure indiquent les positions de l'impureté, comme illustré dans la Fig. (2.1). Dans les figures suivantes, les coefficients linéaires sont représentés par des lignes continues, les coefficients non linéaires par des lignes en pointillés, et les coefficients totaux par des lignes en pointillés.

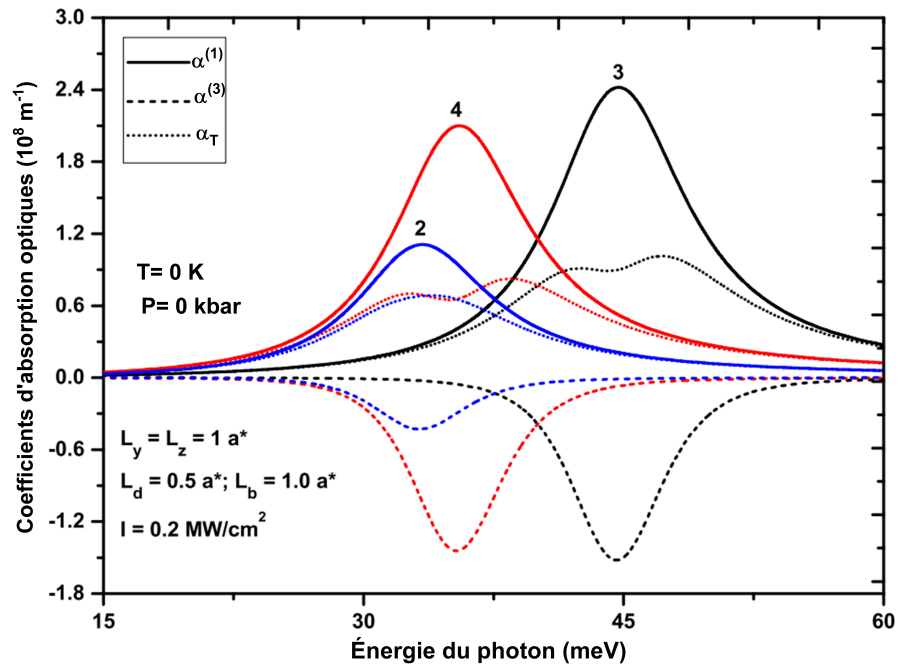


FIGURE 2.8 – CAO linéaire, non linéaire du troisième ordre et total pour un donneur confiné dans une DBQ symétrique GaAs/ $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ en fonction de l'énergie du photon incident. Les étiquettes correspondent aux trois positions de l'impureté comme dans la Fig. (2.1). L'étiquette pour la position 1 est absente conformément à la valeur zéro de l'élément de matrice dipôle rapportée dans la Fig. (2.7).

Les résultats sont donnés pour une taille de nanostructure fixe avec une intensité lumineuse incidente égale à 0.2 MW/cm^2 . Comme le montre cette figure, pour chaque position d'impureté, le coefficient d'absorption optique linéaire est positif et l'amplitude de son pic de résonance est supérieure à celle du cas non linéaire dont la valeur est négative. Pour une impureté située près du centre de la barrière, la position 1, nous observons l'absence des CAO. Ceci est dû au fait que $|M_{fi} = 0|$, comme déjà mentionné précédemment dans la

Fig. (2.7). Lorsque l'impureté donneur se déplace du centre de la boîte (3) vers le bord de la barrière (2) ou vers le bord de la boîte (4), les amplitudes des pics de résonance des CAO linéaire, non linéaire et total deviennent plus petites et leur position se déplacent vers les basses énergies (décalage vers le rouge). Ce décalage est dû à la diminution de l'énergie de liaison de l'état fondamental lorsque l'impureté est déplacée du centre de la boîte vers ses extrémités (voir la Fig. (2.4)). De plus, la baisse des amplitudes est liée à la diminution de $|M_{fi}|$. Le comportement du CAO total, en fonction de l'énergie du photon d'excitation pour différentes positions de l'impureté est similaire à celui trouvé dans d'autres structures BQs [37].

La Fig. (2.9) illustre les CAO linéaire, non linéaire du troisième ordre et totaux dans une DBQ GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As symétrique en fonction de l'énergie des photons incidents, pour deux valeurs de la barrière centrale et en l'absence d'effets de pression et de température. L'impureté est située au centre de la boîte droite, $x_i = \frac{L_b + L_d}{2}$.

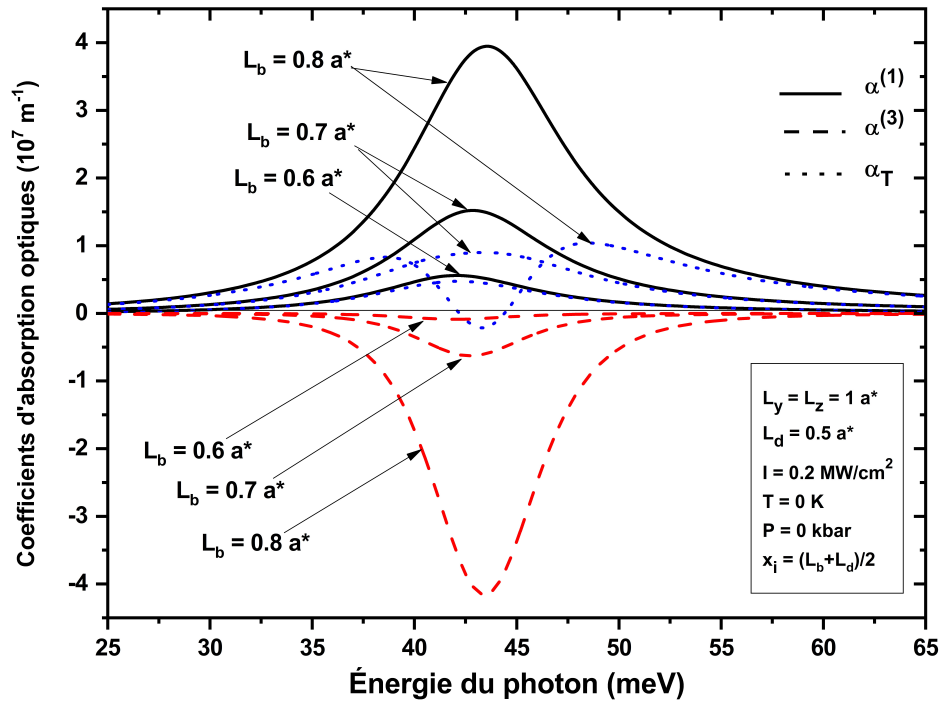


FIGURE 2.9 – CAO linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'un donneur située au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie du photon incident pour trois largeurs différentes de la barrière centrale.

Sur cette figure, nous pouvons clairement voir qu'une petite fluctuation dans la largeur de la barrière entraîne un grand changement dans les trois CAO, ce qui indique qu'ils sont extrêmement dépendants de la largeur de la barrière. Lorsque L_b augmente, l'amplitude des pics de résonance des CAO linéaire, non linéaire du troisième ordre et total augmente.

Cet effet est dû à l'augmentation du facteur $|M_{fi}|$ avec l'augmentation de la largeur de la barrière. Un autre aspect qui mérite d'être mentionné est que lorsque la largeur de la barrière diminue, le pic de résonance des trois coefficients se déplace légèrement vers des énergies plus basses. Ce comportement est dû à la diminution de E_b avec la diminution de L_b [3]. Ces résultats sont cohérents avec les travaux précédents dans les systèmes PQs doubles [38, 39].

La Fig. (2.10) illustre la variation des CAO linéaires, non linéaires du troisième ordre et totaux en fonction de l'énergie des photons pour deux valeurs de largeur de boîte $L_d=0.8a^*$ et $L_d=1.0a^*$. Nous étudions la situation lorsque l'impureté est située au centre de la boîte droite.

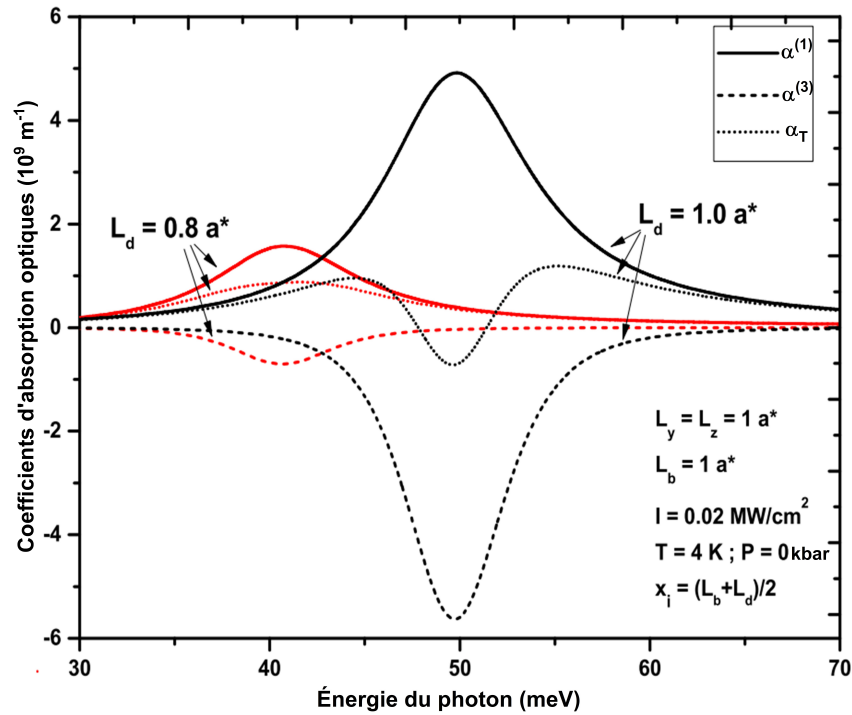


FIGURE 2.10 – CAO linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'une impureté donneur située au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie des photons incidents pour deux largeurs différentes de la boîte.

Comme le montre la figure, les pics de résonance des trois coefficients se déplacent vers une énergie plus faible, ce qui entraîne un décalage vers le rouge, et leur amplitude augmente, en valeur absolue, avec l'augmentation de la largeur des boîtes. Ceci est justifié par le fait que l'augmentation de la largeur de la boîte diminue la valeur de l'énergie de liaison de l'état fondamental, comme discuté précédemment [17]. Pour $L_d = 1.0a^*$, comme la différence entre les CAO linéaire et non linéaire sont minimums, le pic de résonance du CAO total se divise en deux pics distincts, ce phénomène est connu sous le nom : effet de

blanchiment "bleaching effect" [40]. Les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux précédemment rapportés dans le cas où l'impureté est au centre des PQs doubles symétriques et asymétriques [39, 41, 42].

Examinons maintenant l'effet de la pression uniaxiale sur les propriétés optiques. Dans la Fig. (2.11), les CAO linéaire, non linéaire du troisième ordre et total sont tracés en fonction de l'énergie photonique incidente pour trois valeurs distinctes de la pression, et pour des valeurs fixes de température et de taille de la structure. On suppose que l'impureté se trouve au centre de la BQ droite, $x_i = \frac{L_b + L_d}{2}$. Il est facile de constater que les CAO sont fortement liées à la pression. Nous pouvons constater que lorsque la pression augmente, l'amplitude des pics de résonance pour les trois courbes augmente en valeur absolue et un décalage vers le bleu des pics de CAO est observé. La raison de ce comportement peut être expliquée par l'augmentation de E_{fi} (voir Fig. (2.6)) et de $|M_{fi}|$ (voir Fig. (2.7)) avec la pression uniaxiale.

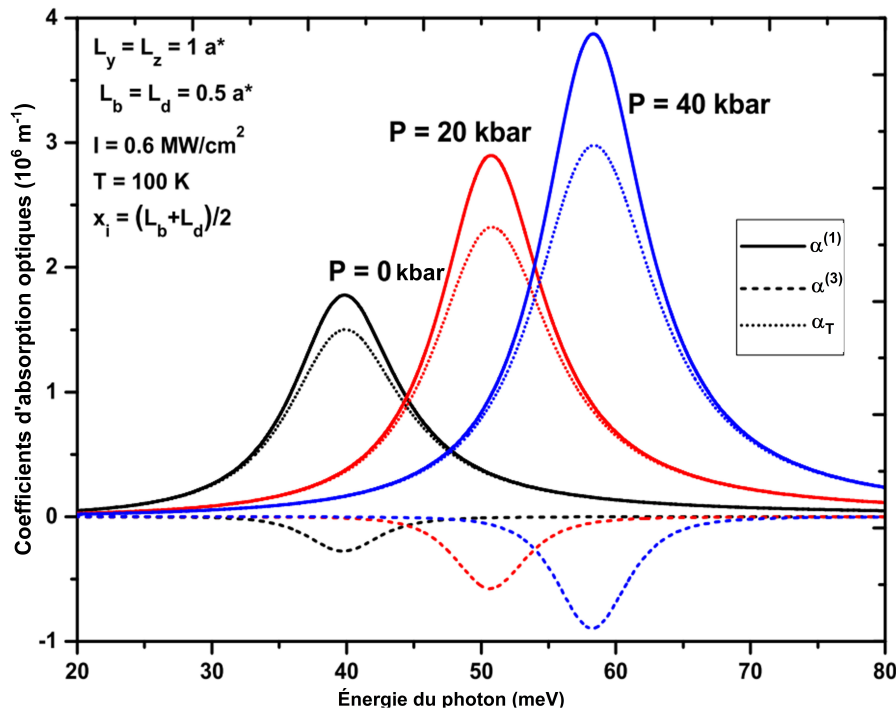


FIGURE 2.11 – CAO linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'une impureté donneur située au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie photonique incidente pour trois valeurs de pression uniaxiale différentes.

Dans la Fig. (2.12), nous traçons les CAO linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'une impureté hydrogénoïde dans un système DBQ en fonction de l'énergie du photon pour plusieurs valeurs de température à pression nulle. Nous supposons que l'impureté est positionnée au centre de la BQ où $x_i = \frac{L_b + L_d}{2}$.

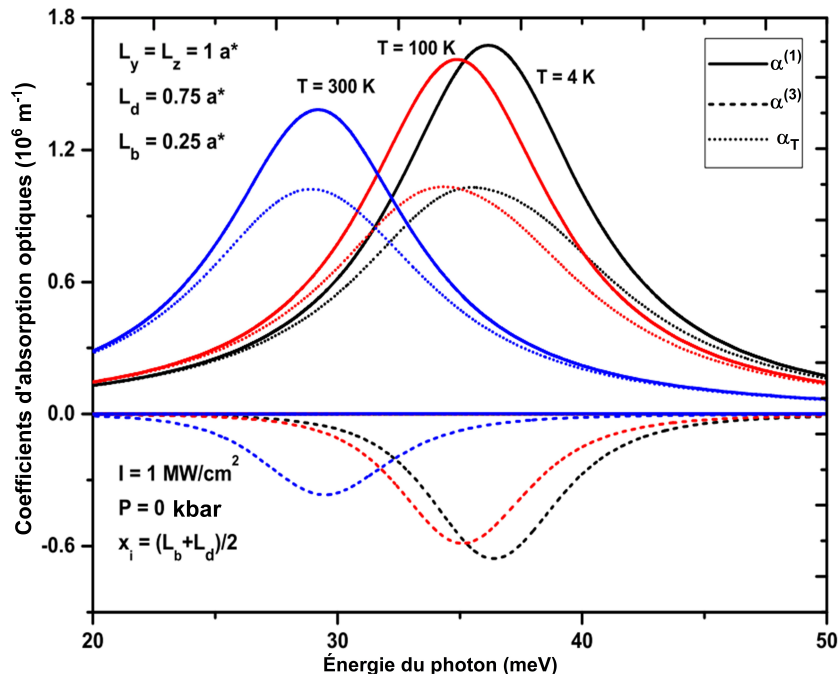


FIGURE 2.12 – CAOs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'un donneur situé au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie des photons incidents pour trois valeurs de température différentes.

Comme on sait, la température a un effet opposé à celui de la pression, c'est-à-dire que pour une taille de nanosystème donnée, il est évident que l'amplitude des pics de résonance des trois CAOs diminue lorsque T augmente en valeur absolue et que ces pics se déplacent vers des énergies plus faibles (décalage vers le rouge). Cela pourrait être lié à la diminution de E_{fi} (Fig. (2.5)) et de $|M_{fi}|$ (Fig. (2.7)) lorsque la température augmente [39, 43].

Dans la Fig. (2.13), nous traçons les coefficients de CIRs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'une impureté située au centre de la BQ droite dans une DBQ GaAs/Al_{0,3}Ga_{0,7}As symétrique en fonction de l'énergie du photon incident pour trois valeurs de pression différentes et l'impureté située au point 3 (voir Fig. (2.1)). La figure montre que pour une valeur donnée de la pression, le CIR linéaire est positif, alors que le CIR non linéaire est négatif. Nous mentionnons que le CIR total est positif, car le terme linéaire est supérieur au terme d'ordre 3 en valeur absolue. De plus, on peut voir que chaque courbe de CIR a deux valeurs extrêmes [44]. Comme le photon est substantiellement absorbé, la région située entre ces valeurs extrêmes est connue sous le nom de zone de dispersion anormale et est décrite comme une bande d'absorption. La même figure révèle que les pics de résonance des trois CIRs se déplacent notamment vers une énergie photonique plus élevée avec l'augmentation de la pression, ce qui entraîne un décalage vers le bleu. Une augmentation visible de

l'intensité du pic de résonance est observée avec une augmentation de P , ce qui est principalement dû à la dépendance de la pression uniaxiale de l'élément de matrice dipolaire montré dans la Fig. (2.7). Les résultats sont en bon accord avec ceux des Refs. [45, 46].

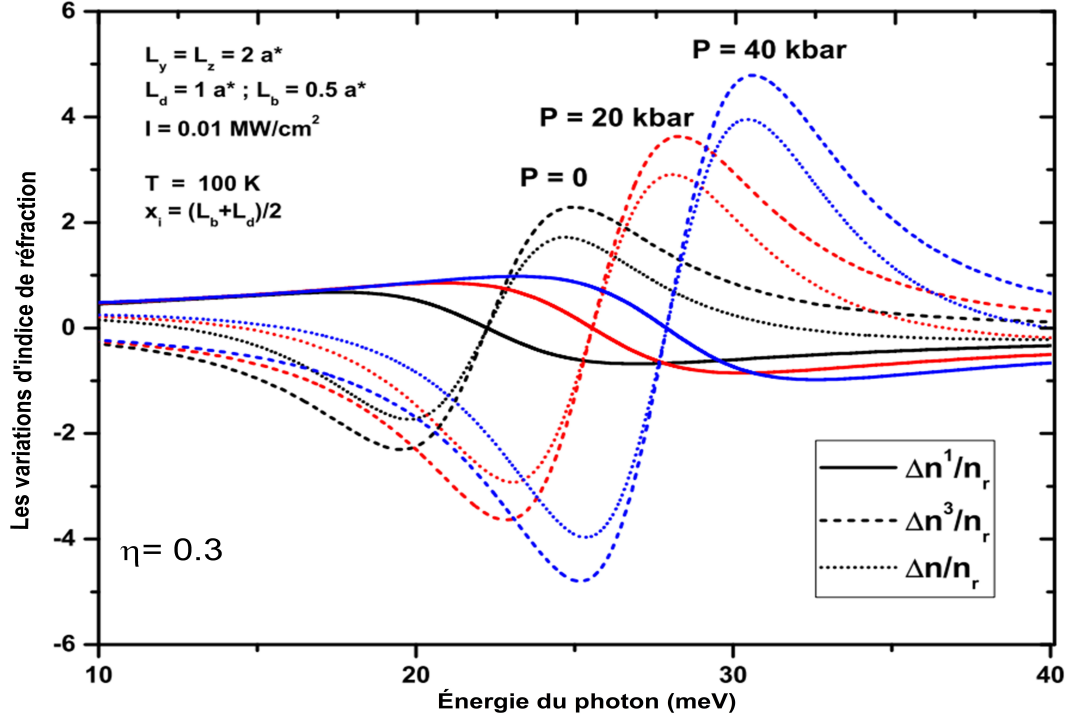


FIGURE 2.13 – CIRs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'un donneur situé au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie des photons incidents pour trois valeurs de pression uniaxiale différentes.

En présence d'une impureté située au centre de la BQ droite, $x_i = \frac{L_b + L_d}{2}$, où la pression est fixée à 30 kbar, la Fig. (2.14) illustre les coefficients de CIRs linéaire, non linéaire et total en fonction de l'énergie photonique pour trois températures distinctes. Comme on peut le voir sur le graphique, les amplitudes des pics de résonance des trois coefficients diminuent et se déplacent vers les faibles énergies avec l'augmentation de T . Ce comportement peut être expliqué de la même manière que les CAO correspondants. Lorsque l'on compare les Figs. (2.13) et (2.14), on constate que la température a l'effet inverse de celui de la pression sur les CIRs. Ces résultats sont en accord avec ceux rapportés dans la Réf. [47] pour une impureté hydrogénoïde dans une BQ en forme de disque.

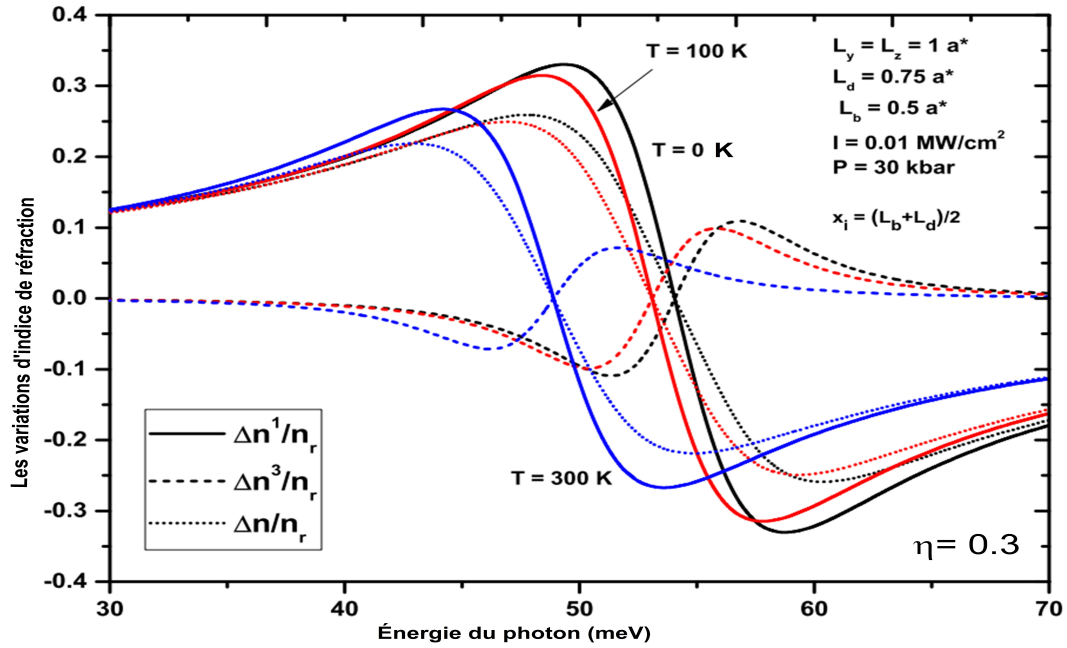


FIGURE 2.14 – CIRs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'un donneur situé au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie des photons incidents pour trois valeurs de température différentes.

Enfin, pour deux valeurs de la largeur de barrière, L_b , la Fig. (2.15) illustre la dépendance linéaire, non linéaire et total des CIRs en fonction de l'énergie des photons incidents. On peut noter que la largeur de barrière a le même effet que les CAO, c'est-à-dire que l'augmentation de la largeur de barrière conduit à une augmentation significative de l'amplitude des CIRs, en valeur absolue, et à un léger décalage des positions des pics de résonance.

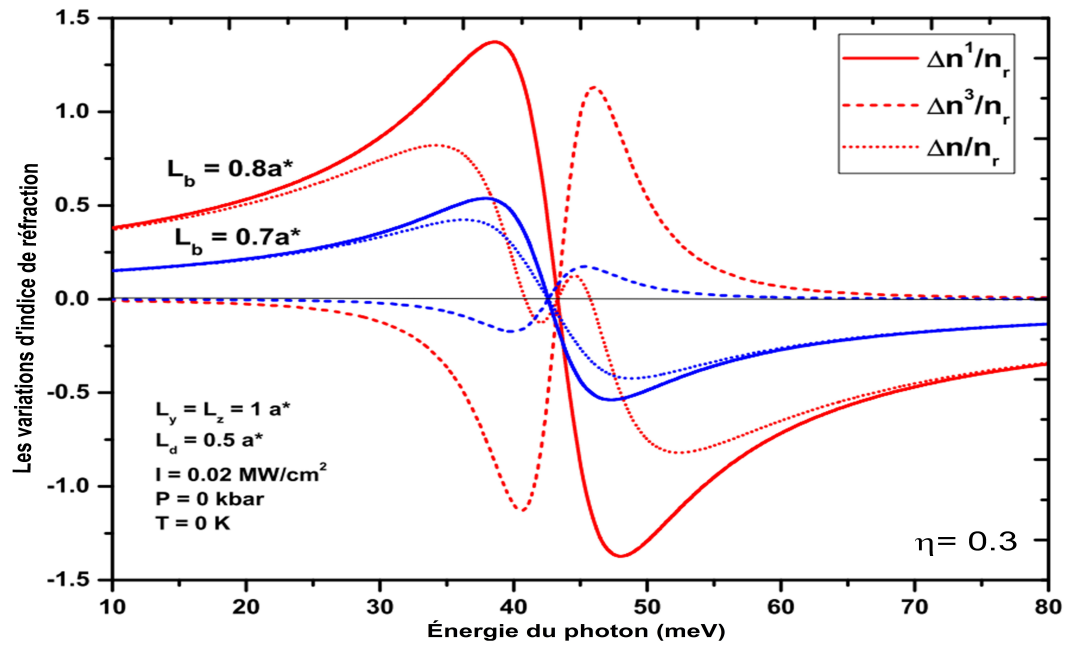


FIGURE 2.15 – Coefficients de CIRs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total d'un donneur située au centre de la BQ droite en fonction de l'énergie du photon incident pour deux largeurs de barrière centrale différentes.

2.4 Conclusion

En résumé, nous avons étudié l'impact de la pression uniaxiale et de la température sur l'énergie de liaison de l'état fondamental, les CAO linéaire, non linéaire du troisième ordre et total, et les CIRs d'une impureté hydrogénoïde confinée dans une nanostructure DBQ symétrique avec une barrière de potentiel finie. Les calculs ont été effectués en utilisant une approche variationnelle. D'après nos résultats, il a été constaté que l'énergie de liaison augmente avec la pression uniaxiale et diminue avec la température pour les quatre positions d'impureté donneur choisies. De plus, l'énergie de liaison atteint une valeur maximale lorsque l'impureté est confinée au centre d'une des deux boîtes. Lorsque la largeur de la barrière est augmentée, on observe une augmentation de l'amplitude des pics de résonance des réponses optiques (CAOs et CIRs). De plus, lorsque l'impureté se déplace vers le centre de la BQ, l'interaction entre les électrons et l'impureté devient plus prononcée. Cela se traduit par une augmentation de l'amplitude des pics de résonance et un déplacement vers des énergies plus élevées (décalage vers le bleu) des positions des pics de résonance des coefficients.

En outre, une augmentation de la pression (température) entraîne une augmentation (diminution) de l'amplitude des pics de résonance et un déplacement de la position du pic vers des énergies plus élevées (plus basses) à la fois pour les CAO et les CIRs. Pour une température et une pression fixes, les résultats indiquent que les CIRs linéaire, non linéaire du troisième ordre et total augmentent lorsque la concentration en aluminium augmente.

Enfin, il est important de faire quelques commentaires sur les avantages et les inconvénients du modèle théorique utilisé dans cette étude. Tout d'abord, en raison des dimensions des structures qui se situent dans la plage du rayon de Bohr effectif, les approximations de la masse effective et de la bande de conduction parabolique que nous utilisons dans nos calculs sont adéquates pour prendre en compte l'ensemble des effets du réseau cristallin sur les états confinés des électrons et l'impureté. Ces dimensions garantissent également la stabilité de la structure simulée et permettent de minimiser les effets de contrainte sur les interfaces. De plus, il convient de noter que les concentrations d'aluminium que nous avons utilisées, $\eta = 0.15$ et $\eta = 0.3$, sont choisies de manière à garantir que la structure étudiée reste de type I (dans ce cas, les électrons et les trous seront toujours situés dans la même

région de l'espace). Ainsi, la composition chimique ne perturbe pas la forme des bandes permises. Cependant, il est important de souligner que dans notre étude, un changement de bande interdite directe vers une bande interdite indirecte est impossible avec ces deux choix de fraction d'aluminium. Dans notre étude, nous avons adopté un modèle de potentiel de confinement infini dans la section transversale de la structure (yOz), ce qui signifie que les électrons se déplacent librement dans cette direction. En revanche, le long de l'axe de croissance, nous avons pris en compte des potentiels finis pour permettre le couplage entre les deux BQs. Cela permet de simplifier considérablement les calculs puisque dans ce cas, le Hamiltonien du problème d'un électron confiné dans la structure est séparable, comme indiqué dans les équations (2.13) et (2.14). Comme les dimensions de la structure sont de l'ordre du rayon de Bohr effectif, la pénétration des fonctions d'onde de l'électron dans la région de la barrière est relativement faible et le modèle infini dans la région transversale est une bonne approximation. Enfin, les effets Coulombiens ont été inclus par la méthode variationnelle en utilisant une fonction d'essai hydrogénoïde avec un paramètre variationnel. Cette fonction d'essai a montré ses avantages dans l'étude des systèmes de faible dimension 2D, 1D et 0D. Des calculs plus exacts pourraient être obtenus en utilisant d'autres méthodes pour résoudre les équations différentielles en absence et en présence d'impureté. Parmi elles, on peut citer par exemple l'utilisation de la méthode des éléments finis (MEF) et de la méthode des différences finies (MDF).

Bibliographie

- [1] M. A. Kastner, “Artificial Atoms,” *Physics Today*, vol. 46, pp. 24–31, (1993).
- [2] N. Raigoza, A. L. Morales, A. Montes, N. Porras-Montenegro, and C. A. Duque, “Stress effects on shallow-donor impurity states in symmetrical GaAs/Al_xGa_{1-x}As double quantum wells,” *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 69, pp. 1–8, (2004).
- [3] J. J. Liu, M. Shen, and S. W. Wang, “The influence of compressive stress on shallow-donor impurity states in symmetric GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs double quantum dots,” *Journal of Applied Physics*, vol. 101, pp. 1–6, (2007).
- [4] D. G. Austing, T. Honda, K. Muraki, Y. Tokura, and S. Tarucha, “Quantum dot molecules,” *Physica B : Condensed Matter*, vol. 249-251, pp. 206–209, (1998).
- [5] J. Lohani, S. Sapra, and R. Tyagi, “Effect of pressure and time on the self catalyzed growth of epitaxial GaAs nanostructures by MOCVD,” *Vacuum*, vol. 164, pp. 343–348, (2019).
- [6] Y. Al-Douri, M. M. Khan, and J. R. Jennings, “Synthesis and optical properties of II–VI semiconductor quantum dots : a review,” *Journal of Materials Science : Materials in Electronics*, vol. 34, p. 993, (2023). [Online]. Available : <https://doi.org/10.1007/s10854-023-10435-5>
- [7] O. Mangla and S. Roy, “Synthesis of gallium arsenide nanostructures for solar cell applications,” *Materials Letters*, vol. 274, 9 (2020).
- [8] M. A. Leontiadou, E. J. Tyrrell, C. T. Smith, D. E.-. Velazquez, R. Page, P. O’Brien, J. Miloszewski, T. Walsh, D. Binks, and S. Tomic, “Influence of elevated radiative lifetime on efficiency of CdSe/CdTe Type II colloidal quantum dot based solar cells,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 159, pp. 657–663, 1 (2017).
- [9] Y. S. Park, J. Roh, B. T. Diroll, R. D. Schaller, and V. I. Klimov, “Colloidal quantum dot lasers,” pp. 382–401, 5 (2021).

-
- [10] G. Bastard, "Hydrogenic impurity states in a quantum well : A simple model," *Physical Review B*, vol. 24, pp. 4714–4722, (1981).
 - [11] N. Porras-Montenegro and S. T. Perez-Merchancano, "Hydrogenic impurities in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots," *Physical Review B*, vol. 46, pp. 9780–9783, (1992).
 - [12] X. F. Wang, "Hydrogenic impurity in double quantum dots," *Physics Letters, Section A : General, Atomic and Solid State Physics*, vol. 364, pp. 66–69, (2007).
 - [13] H. El-Ghazi, I. Zorkani, and A. Jorio, "Stark effect-dependent of impurity-related nonlinear optical absorption of a (In,Ga)N-GaN spherical quantum dot," *Physica Scripta*, vol. 90, p. 35804, (2015). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1088/0031-8949/90/3/035804>
 - [14] R. En-Nadir, H. El-Ghazi, W. Belaid, M. Tihtih, H. Abboudi, I. Maouhoubi, A. Jorio, and I. Zorkani, "Intrasubband-related linear and nonlinear optical absorption in single, double and triple QW : the compositions, temperature and QW's number effects," *Philosophical Magazine*, vol. 103, pp. 547–560, (2023). [Online]. Available : <https://doi.org/10.1080/14786435.2022.2158385>
 - [15] K. Rahmani and I. Zorkani, "Magnetic and Electric Field Effects on the Binding Energy of a Shallow Donor in Quantum Dot – Quantum," vol. 11, pp. 35–39, (2009).
 - [16] A. L. Morales, A. Montes, S. Y. López, N. Raigoza, and C. A. Duque, "Donor-related density of states and polarizability in a GaAs-(Ga, Al)As quantum-well under hydrostatic pressure and applied electric field," *Physica Status Solidi Conferences*, vol. 656, pp. 652–656, (2003).
 - [17] N. Raigoza, A. L. Morales, and C. A. Duque, "Effects of hydrostatic pressure on donor states in symmetrical GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As double quantum wells," *Physica B : Condensed Matter*, vol. 363, pp. 262–270, (2005).
 - [18] A. L. Morales, N. Raigoza, A. Montes, N. Porras-Montenegro, and C. A. Duque, "Symmetric and asymmetric GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As double quantum well subjected to hydrostatic pressure and applied electric field," *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, vol. 241, pp. 3224–3230, (2004).

- [19] Z. G. Bai and J. J. Liu, “Stress effects on the binding energy of shallow-donor impurities in symmetrical GaAs/AlGaAs double quantum-well wires,” *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 19, pp. 0–13, (2007).
- [20] J. M. Smith, P. C. Klipstein, R. Grey, and G. Hill, “Under Elevated Hydrostatic Pressure,” *Physical Review B*, vol. 57, pp. 1746–1748, (1998).
- [21] M. Jaouane, A. Sali, A. Fakkahi, R. Arraoui, and F. Ungan, “The effects of temperature and pressure on the optical properties of a donor impurity in (In,Ga)N/GaN multilayer cylindrical quantum dots,” *Superlattices and Microstructures*, (2022).
- [22] M. Jaouane, A. Sali, A. Ezzarfi, A. Fakkahi, and R. Arraoui, “Study of hydrostatic pressure, electric and magnetic fields effects on the donor binding energy in multilayer cylindrical quantum dots,” *Physica E : Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 127, p. 114543, 3 (2021).
- [23] A. Fakkahi, A. Sali, M. Jaouane, and R. Arraoui, “Hydrostatic pressure, temperature, and electric field effects on the hydrogenic impurity binding energy in a multilayered spherical quantum dot,” *Applied Physics A : Materials Science and Processing*, vol. 127, 12 (2021).
- [24] H. M. Baghramyany, M. G. Barseghyan, A. A. Kirakosyan, R. L. Restrepo, and C. A. Duque, “Linear and nonlinear optical absorption coefficients in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs concentric double quantum rings : Effects of hydrostatic pressure and aluminum concentration,” *Journal of Luminescence*, vol. 134, pp. 594–599, (2013). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.jlumin.2012.07.024>
- [25] H. M. Baghramyany, M. G. Barseghyan, A. A. Kirakosyan, R. L. Restrepo, M. E. Mora-Ramos, and C. A. Duque, “Donor impurity-related linear and nonlinear optical absorption coefficients in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs concentric double quantum rings : Effects of geometry, hydrostatic pressure, and aluminum concentration,” *Journal of Luminescence*, vol. 145, pp. 676–683, (2014). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.jlumin.2013.08.061>

- [26] M. J. Karimi, G. Rezaei, and M. Nazari, "Linear and nonlinear optical properties of multilayered spherical quantum dots : Effects of geometrical size, hydrogenic impurity, hydrostatic pressure and temperature," *Journal of Luminescence*, vol. 145, pp. 55–60, (2014). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.jlumin.2013.07.046>
- [27] M. J. Karimi and A. Keshavarz, "Electric field effects on the linear and nonlinear intersubband optical properties of double semi-parabolic quantum wells," *Superlattices and Microstructures*, vol. 50, pp. 572–581, (2011). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.spmi.2011.08.018>
- [28] A. Keshavarz and N. Zamani, "Optimization of optical absorption coefficient in asymmetric double rectangular quantum wells by PSO algorithm," *Optics Communications*, vol. 294, pp. 401–404, (2013). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.optcom.2012.12.039>
- [29] M. G. Barseghyan, H. M. Baghramyan, L. M. Pérez, and D. Laroze, "Magnetic field effect on the electronic states and the intraband optical absorption spectrum of a laser dressed double quantum dot molecule," *Chinese Journal of Physics*, vol. 68, pp. 507–513, (2020).
- [30] A. Sali and H. Satori, "The combined effect of pressure and temperature on the impurity binding energy in a cubic quantum dot using the FEM simulation," *Superlattices and Microstructures*, vol. 69, pp. 38–52, 5 (2014).
- [31] K. El-Bakkari, A. Sali, E. Iqraoun, A. Rezzouk, N. Es-Sbai, and M. O. Jamil, "Effects of the temperature and pressure on the electronic and optical properties of an exciton in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum ring," *Physica B : Condensed Matter*, vol. 538, pp. 85–94, (2018). [Online]. Available : <https://doi.org/10.1016/j.physb.2018.03.010>
- [32] Y. M. Poplavko, "Semiconductors," *Electronic Materials*, pp. 409–508, (2019). [Online]. Available : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/B9780128157800000086>
- [33] J. Debdeep, "Quantum physics of semiconductor materials and devices," *Oxford University Press*, (2022).

- [34] G. A. Samara, “Temperature and pressure dependences of the dielectric constants of semiconductors,” *Physical Review B*, vol. 27, pp. 3494–3505, (1983).
- [35] S. Ortakaya and M. Kirak, “Hydrostatic pressure and temperature effects on the binding energy and optical absorption of a multilayered quantum dot with a parabolic confinement,” *Chinese Physics B*, vol. 25, (2016).
- [36] U. Yesilgul, S. Şakiroğlu, E. Kasapoğlu, H. Sari, and I. Sökmen, “The effects of temperature and hydrostatic pressure on the photoionization cross-section and binding energy of impurities in quantum-well wires,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 48, pp. 106–113, 7 (2010).
- [37] M. E. Haouari, A. Talbi, E. Feddi, H. El-Ghazi, A. Oukerroum, and F. Dujardin, “Linear and nonlinear optical properties of a single dopant in strained AlAs/GaAs spherical core/shell quantum dots,” *Optics Communications*, vol. 383, pp. 231–237, (2017). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.optcom.2016.09.019>
- [38] N. Zeiri, N. Sfina, S. A. B. Nasrallah, and M. Said, “Linear and non-linear optical properties in symmetric and asymmetric double quantum wells,” *Optik*, vol. 124, pp. 7044–7048, (2013). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijleo.2013.05.169>
- [39] H. Dakhlaoui, “Linear and nonlinear optical absorption coefficients and refractive index changes in GaN/Al_xGa_{1-x}N double quantum wells operating at 1.55 μm ,” *Journal of Applied Physics*, vol. 117, 4 (2015).
- [40] D. Ahn and S. L. Chuang, “Calculation of linear and nonlinear intersubband optical absorptions in a quantum well model with an applied electric field,” *IEEE Journal of Quantum Electronics*, vol. 23, (1987).
- [41] Z. H. Zhang, J. H. Yuan, K. X. Guo, and E. Feddi, “Effect of conduction band non-parabolicity on the nonlinear optical properties in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs double semi-V-shaped quantum wells,” *Materials*, vol. 12, pp. 1–11, (2018).
- [42] U. Yesilgul, “Linear and nonlinear intersubband optical absorption coefficients and refractive index changes in symmetric double semi-V-shaped quantum wells,”

- Journal of Luminescence*, vol. 132, pp. 765–773, (2012). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.jlumin.2011.10.016>
- [43] A. Bera and M. Ghosh, “Combined influence of hydrostatic pressure and temperature on interband emission energy of impurity doped quantum dots in presence of noise,” *Physica B : Condensed Matter*, vol. 500, pp. 24–31, (2016). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2016.07.023>
- [44] H. Ganjipour and G. Safarpour, “The effects of pressure and hydrogenic donor impurity on the linear and nonlinear optical properties of a GaAs/GaAlAs nanowire superlattice,” *Physica E : Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 74, pp. 496–504, (2015). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2015.07.033>
- [45] H. Taş and M. Şahin, “The electronic properties of a core/shell/well/shell spherical quantum dot with and without a hydrogenic impurity,” *Journal of Applied Physics*, vol. 111, (2012).
- [46] G. Rezaei, B. Vaseghi, and N. A. Doostimotlagh, “Linear and nonlinear optical properties of spherical quantum dots : Effects of hydrogenic impurity and conduction band non-parabolicity,” *Communications in Theoretical Physics*, vol. 57, pp. 485–489, (2012).
- [47] S. J. Liang and W. F. Xie, “The hydrostatic pressure and temperature effects on a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot,” *European Physical Journal B*, vol. 81, pp. 79–84, (2011).

POLARISABILITÉ ET SECTION EFFICACE DE PHOTOIONISATION D'UN DONNEUR CONFINÉ DANS UNE DOUBLE BOÎTE QUAN- TIQUE

3.1 Introduction

Au cours des dernières années, les structures de faible dimension basées sur des matériaux semi-conducteurs ont suscité un intérêt considérable dans le domaine de la physique de la matière condensée. Cela est en grande partie dû aux progrès rapides de l'informatique quantique et aux développements des techniques expérimentales, notamment dans le domaine de la croissance cristalline. Ces avancées ont permis d'explorer et de manipuler avec précision les propriétés des matériaux semi-conducteurs à l'échelle nanométrique. Ainsi, les structures de faible dimension sont devenues l'un des sujets d'étude les plus captivants et prometteurs, offrant de nouvelles perspectives pour des applications dans les domaines de l'électronique, de l'optoélectronique et de la spintronique. En effet, ces structures sont essentielles à la création de nouveaux dispositifs optoélectroniques à haute efficacité électrique, et leurs caractéristiques peuvent être contrôlées et modifiées par la gestion des perturbations externes appliquées [1–3]. Étant donné que l'existence d'une impureté peu profonde modifie à grande échelle la conductivité des nanostructures basées sur des semi-

conducteurs, qu'il s'agisse d'un PQ, d'un FQ ou d'une BQ, le problème des impuretés hydrogénoïdes est largement étudié sur la base des nanostructures [4–6].

Les propriétés optiques ont déjà fait l'objet de plusieurs recherches théoriques. Dans ce chapitre, nous nous concentrerons sur les caractéristiques optiques les plus essentielles, à savoir la section efficace de photoionisation (SEP) et la polarisabilité de l'impureté donneur. En ce qui concerne la SEP, elle a fait l'objet de peu de recherches expérimentales. La photoionisation des impuretés dans des couches de PQ multiples basées sur du GaAs obtenu par dépôt chimique en phase vapeur métallo-organique a été étudiée expérimentalement par Takikawa et al. [7]. Dans le cas des BQs, des PQs et des FQs, de nombreuses études théoriques ont été menées. Sali et al. ont publié plusieurs articles sur l'influence des géométries sur la SEP des nanostructures de faibles dimensions. Pour les modèles de puits infinis et finis, ils ont déterminé la SEP pour un PQ. Ils ont également évalué la SEP pour une impureté donneur hydrogénoïde dans un BQ de GaAs en fonction de la position de l'impureté et de la taille de la structure [8], et ont montré que la SEP était influencée par la taille de la BQ, la localisation de l'impureté et la concentration d'aluminium.

La polarisabilité d'une impureté piégée dans une structure de faible dimension est cependant cruciale, comme dans le cas des SEPs. Morales et al. [9] ont déterminé l'énergie de liaison et la polarisabilité d'une impureté donneur confinée dans un PQ de type GaAs/AlGaAs en fonction du champ électrique et de la pression hydrostatique. Ils ont montré que la polarisabilité suit de près le comportement de l'énergie de liaison, de sorte que pour de plus petites énergies de liaison, la polarisabilité est élevée, ce qui indique un nuage électronique plus délocalisé. Sous les effets combinés du champ magnétique et de la hauteur de la barrière potentielle, Zounoubi et al. [10] ont étudié la polarisabilité de l'état $1s$ pour une impureté confinée dans un FQ à section rectangulaire. Ils ont constaté que le champ magnétique réduit fortement la polarisabilité.

À notre connaissance, il existe très peu d'articles sur les propriétés optiques liées à l'impureté de type donneur, confinée dans des hétérostructures couplées sous diverses influences. Certains auteurs ont récemment étudié les polarisabilités et la variation de la SEP des impuretés dans des systèmes couplés tels que les DPQs [11–14], les DFQs [15, 16], et les DBQs [17–19] sous l'impact des perturbations externes et des paramètres structuraux. Morales et al. [20] ont calculé l'effet de la pression hydrostatique et des champs électriques externes ap-

pliqués le long de l'axe de croissance sur la SEP et la polarisabilité d'une impureté confinée dans un DPQs asymétrique. Ces résultats montrent que la polarisabilité peut être modifiée par l'application d'un champ électrique externe ou d'une pression hydrostatique. En dehors de l'effet de dispersion des bandes $\Gamma-X$ dans le matériau barrière, où une diminution de la SEP est prévue en raison du confinement réduit de la fonction d'onde de l'impureté, l'amplitude des pics de la SEP augmente avec l'augmentation de la pression et du champ électrique appliqué. C.M. Duque et al. [21] ont étudié la dépendance de la pression hydrostatique et du champ électrique appliqué dans le sens de la croissance de l'énergie de liaison pour une impureté donneur peu profonde dans un système de BQ multiples connectées verticalement. En conséquence, l'ajout d'une pression hydrostatique et d'un champ électrique affecte considérablement l'énergie de liaison, comme cela a été le cas dans de nombreuses expériences théoriques antérieures.

3.2 Formalisme général

3.2.1 Hamiltonien du système sous l'effet de la pression hydrostatique et d'un champ électrique axial

Dans ce chapitre, nous considérons notre structure sous l'action d'une pression hydrostatique et d'un champ électrique, nous choisissons la direction du champ le long de l'axe de croissance de la structure, comme le montre la Fig. (3.1). Le système est formé de deux BQs en matériau GaAs qui ont la même dimension et sont séparées par une barrière centrale en matériau AlGaAs. Les épaisseurs de la barrière et des boîtes sont indiquées dans la figure.

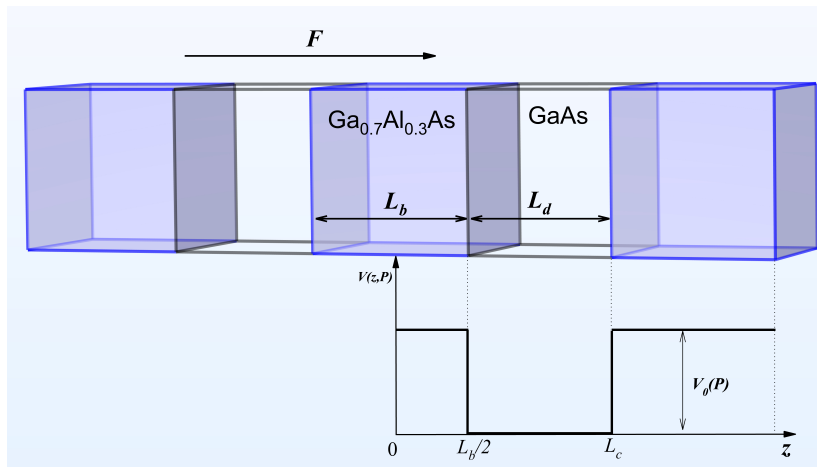


FIGURE 3.1 – Représentation schématique d'une DBQ et profil du potentiel de confinement correspondant $V(z,P)$ le long de l'axe z .

Sous l'influence simultanée d'une pression hydrostatique (P) et d'un champ électrique appliqué parallèlement à la direction de développement de l'hétérostructure (axe \hat{z}) $\vec{F} = F\hat{z}$, l'Hamiltonien d'une impureté donneur peu profonde confinée dans le système DBQ de la Fig. (3.1) prend la forme suivante :

$$H_{imp} = H_0 - \frac{e^2}{\epsilon_{d,b}(P, T) \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}} \quad (3.1)$$

H_0 est l'Hamiltonien du système en l'absence d'une impureté sous l'influence d'une pression hydrostatique et d'un champ électrique appliqué.

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_{d,b}^*(P, T)} \nabla^2 + V(\vec{r}, P, T) + |e|Fz \quad (3.2)$$

où $m_{d,b}^*(P, T)$ et $\epsilon_{d,b}(P, T)$ désignent respectivement la masse de l'électron dans la bande de conduction supposée parabolique et la constante diélectrique en fonction de la pression hydrostatique et de la température. Les indices d et b se réfèrent respectivement aux matériaux boîte quantique GaAs et barrière $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$.

Dans le matériau boîte quantique GaAs, la masse effective de l'électron est donnée par [22] :

$$m_d^*(P, T) = m_0 \left[1 + E_P^\Gamma \left(\frac{2}{E_g^\Gamma(P, T)} + \frac{2}{E_g^\Gamma(P, T) + \Delta_0} \right) \right]^{-1} \quad (3.3)$$

La masse effective de l'électron dans le matériau barrière $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$ est obtenue par une interpolation linéaire entre les composés GaAs et AlAs et donnée par :

$$m_b^*(\eta, P, T) = m_d^*(P, T) + 0.083 \eta m_0 \quad (3.4)$$

Dans le matériau GaAs, la constante diélectrique dépendante de la pression et de température est donnée par [23] :

$$\epsilon_d(P, T) = \begin{cases} 12.74 \exp[-1.73 \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1} P] \exp[9.4 \times 10^{-5}(T - 75.6)], & \text{pour } T \leq 200K \\ 13.18 \exp[-1.73 \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1} P] \exp[20.4 \times 10^{-5}(T - 300)], & \text{pour } T > 200K \end{cases} \quad (3.5)$$

Dans le matériau barrière $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$, la constante diélectrique obtenue par une interpolation linéaire de GaAs et AlAs est donnée par [23] :

$$\epsilon_b(\eta, P, T) = \epsilon_d(P, T) - 3.12 \eta \quad (3.6)$$

où $E_g^\Gamma(P, T)$ est l'énergie de gap pour la couche GaAs au point Γ en (eV), qui dépend de la température et de la pression [23] :

$$E_g^\Gamma(P, T) = [1.519 - \frac{5.105 \times 10^{-4} T^2}{T+204} + 1.26 \times 10^{-2} P - 3.77 \times 10^{-5} P^2] \text{ eV} \quad (3.7)$$

Dans les équations (3.5) et (3.7), P est en kbar et T en Kelvin ($T = 4 \text{ K}$ dans ce travail). Les expressions des largeurs de BQ $L_d(P)$ et de barrière $L_b(P)$ sont données par l'équation suivante [24] :

$$L_i(P) = L_i(0)[1 - (S_{11} + 2S_{12})P] \quad (3.8)$$

Cette dernière montre que les dimensions de l'hétérostructure dépendent de la pression. où $L_i(0)$ correspond à la largeur de BQ ou de barrière à la pression atmosphérique. $S_{11} = 1.16 \times 10^{-3} \text{ kbar}^{-1}$ et $S_{12} = -3.7 \times 10^{-4} \text{ kbar}^{-1}$ sont les constantes élastiques du matériau massif GaAs.

Le potentiel de confinement dépendant de la pression hydrostatique $V(r, P, T)$ peut être écrit sous la forme séparable suivante : $V(r, P, T) = V(x, P, T) + V(y, P, T) + V(z, P, T)$, où $V(z, P, T)$ est mentionné dans la Fig. (3.1), fournie par [18] :

$$V(r, P, T) = \begin{cases} V_0(P, T), & \text{pour } |z| \leq \frac{L_b(P)}{2}; |y| < \frac{L_y(P)}{2}; |x| < \frac{L_x(P)}{2} \\ 0, & \text{pour } \frac{L_b(P)}{2} < |z| < L_c(P); |y| < \frac{L_y(P)}{2}; |x| < \frac{L_x(P)}{2} \\ V_0(P, T), & \text{pour } |z| \geq L_c(P); |y| < \frac{L_y(P)}{2}; |x| < \frac{L_x(P)}{2} \\ \infty, & \text{pour } |z| \geq L_c(P); |y| \geq \frac{L_y(P)}{2}; |x| \geq \frac{L_x(P)}{2} \end{cases} \quad (3.9)$$

$V_0(P, 4K)$ représente la hauteur de la barrière en fonction de la pression P et de la température T appliquée à $T = 4 \text{ K}$ sans tenir compte de l'effet de la dispersion des bandes Γ -X, défini dans des travaux antérieurs [18], par la relation :

$$V_0(P, T) = 0.658 \times \Delta E_g^\Gamma(\eta, P, T) \quad (3.10)$$

où $\Delta E_g^\Gamma(\eta, P, T)$ est la différence de l'énergie de gap entre le matériau barrière AlGaAs et le matériau boîte GaAs.

Dans ce travail, on s'est limité au régime de faible pression où la transition d'un gap direct à un gap indirect n'est plus possible.

3.2.2 Choix des fonctions d'onde et états électroniques

De nombreuses recherches ont utilisé la méthode variationnelle de Hass pour calculer les états électroniques associés à des impuretés dans les hétérostructures semi-conductrices sous l'effet de la pression hydrostatique et du champ électrique extérieur, étant donné que l'équation de Schrödinger ne peut pas être résolue avec précision. Dans notre contexte, nous utiliserons une fonction d'onde d'essai de l'état fondamental de l'impureté associée à la première sous-bande correspondant au porteur confiné, pareil à une fonction d'onde d'atome d'hydrogène de l'état électronique $1s$ [25] :

$$\Psi_K(\vec{r}) = N_K \varphi(x, y, z) \exp \left[-K \cdot \left(\frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}{8\alpha^2} + \frac{(z - z_0)^2}{8\beta^2} \right) \right] \exp[r \cdot \gamma] \quad (3.11)$$

Le facteur K est défini de manière à prendre la valeur de 0 en l'absence d'impureté, et de 1 en présence de celle-ci. Les paramètres variationnels sont représentés par α , β et γ . La constante de normalisation de la fonction d'onde est N_K .

$\varphi(x, y, z)$ est l'état propre de l'Hamiltonien H_0 dans l'équation (3.2) en absence de potentiel Coulombien d'impureté, tel que défini par :

$$\varphi(x, y, z) = \cos \left(\frac{\pi x}{L_x(P)} \right) \cos \left(\frac{\pi y}{L_y(P)} \right) f(z) \quad (3.12)$$

où $f(z)$ est la fonction d'onde de l'état fondamental en l'absence d'impureté décrivant le confinement dans la direction de croissance de l'hétérostructure sous l'impact d'un potentiel fini. $f(z)$ est développé analytiquement dans le chapitre précédent, (Voir l'équation (2.15)).

L'énergie de liaison E_b de l'impureté donneur est définie par la méthode variationnelle comme étant la différence entre l'énergie de l'électron en absence et en présence de l'impureté :

$$E_b = \langle \Psi_0(\vec{r}) | H_0 | \Psi_0(\vec{r}) \rangle - \langle \Psi_1(\vec{r}) | H_{imp} | \Psi_1(\vec{r}) \rangle \quad (3.13)$$

3.2.3 Polarisabilité et section efficace de photoionisation

3.2.3.1 Polarisabilité d'une impureté confinée dans une nanostructure

Lorsqu'un champ électrique externe est appliqué sur une nanostructure, un moment dipolaire électrique est généré ce qui implique une déformation de la densité électronique dans la structure. Donc la polarisabilité d'une nanostructure fait référence à cette capacité

de déformation sous l'effet du champ électrique externe. En d'autres termes, la polarisabilité d'une nanostructure décrit la facilité avec laquelle elle peut être polarisée, ou à quel point elle peut être déformée de sa forme naturelle, lorsqu'elle est soumise à un champ électrique externe. Cette propriété est importante pour un large éventail d'applications, notamment en nanoélectronique, en optoélectronique et en détection, où elle peut être utilisée pour manipuler le comportement de la nanostructure en réponse à un champ électrique appliqué. La polarisabilité α de notre système où l'impureté est confinée peut être calculée à l'aide de paramètres variationnels, comme indiqué ci-dessous [9, 26] :

$$\alpha = \frac{-e}{F} \left[\langle \Psi_1(\vec{r}) | z | \Psi_1(\vec{r}) \rangle_{F \neq 0} - \langle \Psi_1(\vec{r}) | z | \Psi_1(\vec{r}) \rangle_{F=0} \right] \quad (3.14)$$

3.2.3.2 Section efficace de photoionisation d'une impureté confinée dans une nanostructure

La section efficace de photoionisation (SEP) d'une impureté confinée dans une nanostructure décrit la probabilité que l'impureté soit ionisée par un photon incident lorsqu'elle est localisée dans l'une des bandes de la nanostructure. Nous examinerons également la variation de la SEP, noté $\sigma(\hbar\omega)$, qui est définie comme suit [27] :

$$\sigma(\hbar\omega) = \left[\left(\frac{\xi_{eff}}{\xi_0} \right)^2 \frac{n_r}{\epsilon(P, T)} \right] \frac{4\pi^2}{3} \alpha_{FS} \hbar\omega \sum_f |\langle \Psi_0(\vec{r}) | r | \Psi_1(\vec{r}) \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (3.15)$$

La SEP d'un donneur dans une nanostructure peut être affectée par un certain nombre de facteurs, tels que la taille et la forme de la nanostructure, l'énergie du photon incident et les propriétés électroniques du milieu environnant. Il s'agit d'un paramètre important à prendre en compte dans la conception et l'optimisation des dispositifs nanostructurés qui reposent sur des processus de photoionisation, tels que les cellules solaires et les photodétecteurs.

Ici, $\left(\frac{\xi_{eff}}{\xi_0} \right)$ représente la proportion du champ électrique effectif d'une impureté par rapport à son champ moyen, et on suppose qu'elle est proche de l'unité [28]. n_r est l'indice de réfraction du matériau semi-conducteur. $\alpha_{FS} = \frac{e^2}{\hbar c}$ indique la constante de structure fine. $|\langle \Psi_0(\vec{r}) | r = z | \Psi_1(\vec{r}) \rangle|^2$ est l'élément de matrice du moment quadratique-dipolaire entre les

états propres initiaux et finaux $|\Psi_1\rangle$ et $|\Psi_0\rangle$. La fonction δ est remplacée par une Lorentzienne étroite, comme il est d'usage, en utilisant la relation suivante [27] :

$$\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) = \frac{\Gamma}{\pi \left[(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2 \right]} \quad (3.16)$$

où Γ est la largeur de raie de l'impureté hydrogénoïde, qui est égale à 0,4 meV.

3.3 Résultats numériques et discussion

Pour étudier l'effet du champ électrique sur la distribution de la fonction d'onde et pour une pression hydrostatatique appliquée nulle, nous examinons dans la Fig. (3.2)-(a) l'évolution de l'amplitude de la densité de probabilité (DDP) dépendante de z pour le niveau fondamental de l'électron dans la DBQ sous différents champs électriques appliqués.

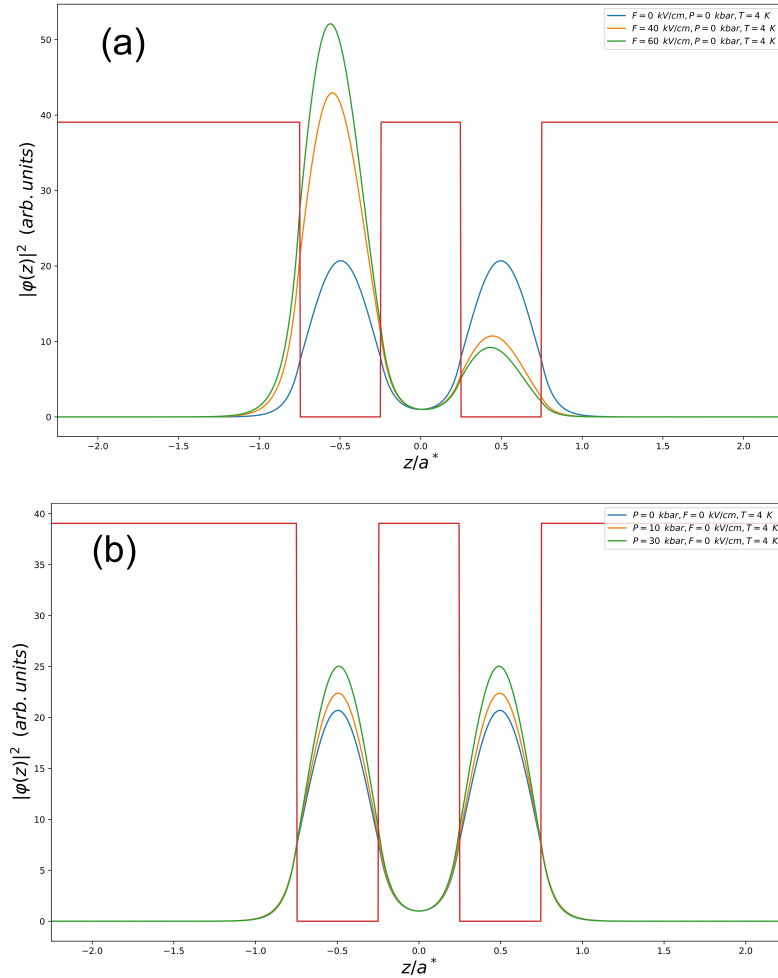


FIGURE 3.2 – Amplitude de la DDP $|\phi(z)|^2$ le long de la direction z , pour l'état fondamental d'un électron dans une DBQ GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As, avec $L_x=L_y=1a^*$ et $L_b=L_d=0.5a^*$. Les résultats dans (a) sont pour $F= 0, 40$ et 60 kV/cm et sans pression hydrostatatique externe appliquée $P= 0$. Les résultats dans (b) sont pour $P= 0, 10, 30$ kbar et le champ électrique est fixé à 0 kV/cm.

Nous constatons que l'amplitude de la DDP présente une symétrie autour de la barrière centrale en l'absence d'impureté et à $F = 0$, ainsi qu'une valeur maximale exactement au milieu des deux boîtes. Comme l'électron est poussé contre la direction du champ à mesure que l'intensité du champ augmente, la structure de la fonction d'onde se déforme, entraînant le déplacement du maximum de probabilité vers la boîte gauche pour $F = 40$ kV/cm et continue son augmentation pour $F = 60$ kV/cm, alors que l'inverse se produit simultanément pour la boîte droite. En revanche, la Fig. (3.2)-(b) montre l'évolution de l'amplitude de DDP en fonction de l'axe z pour le niveau fondamental de l'électron dans la DBQ pour diverses valeurs de pression hydrostatique sans la présence d'un champ électrique. Nous pouvons voir que les amplitudes sont symétriques pour toutes les valeurs de P en l'absence d'un champ électrique appliqué, ce qui implique que l'électron peut être détecté avec la même probabilité dans l'un ou l'autre des deux BQs, avec une valeur maximale exactement au centre des deux boîtes. En outre, une augmentation de la pression hydrostatique sur le système est clairement suivie d'une augmentation de l'amplitude de la densité à l'intérieur des deux boîtes. Ce comportement peut s'expliquer comme suit : lorsqu'une pression hydrostatique est appliquée au système, la valeur de $V_0(P, 4\text{ K})$ diminue considérablement, ce qui permet à la fonction d'onde de se propager dans l'ensemble de l'hétérostructure. En conséquence, la DDP augmente. Ce résultat est cohérent avec les recherches récentes sur les DFQs latéralement connectés à base de GaAs/AlGaAs [16] et les DBQs couplés verticalement [17].

La Fig. (3.3) présente l'énergie de liaison en fonction du champ électrique appliqué dans le sens de croissance $\vec{F} = F\hat{z}$ pour une impureté donneur et pour différentes positions de l'impureté. Considérons le cas suivant dans lequel il n'y a pas de pression externe $P = 0$ et les dimensions du système sont fixées de telle sorte que $L_d = 0,5a^*$ pour la largeur de chaque boîte, $L_b = 0,5a^*$ la largeur de la barrière centrale et $L_x = L_y = 1a^*$ la largeur des deux boîtes le long des axes \hat{x} et \hat{y} . Les chiffres 1, 2, 3 et 4 représentent les positions de l'impureté au centre de la barrière, au bord de la barrière, au centre de la boîte et au bord de la boîte, respectivement. L'énergie de liaison de l'impureté au centre de la barrière centrale (courbe 1) croît légèrement et linéairement en fonction du champ électrique appliqué, comme le montre la figure. L'effet de la barrière centrale fait en sorte que le nuage d'électrons reste emprisonné à l'intérieur de celle-ci et, à mesure que le champ électrique augmente, le nuage

d'électrons devient plus localisé et plus proche du site de l'impureté, ce qui se traduit par une augmentation régulière de l'énergie de liaison. Lorsque l'impureté est située à la position 3 qui correspond au centre de la boîte et pour un champ électrique appliqué nul, on trouve que E_b a la valeur la plus élevée.

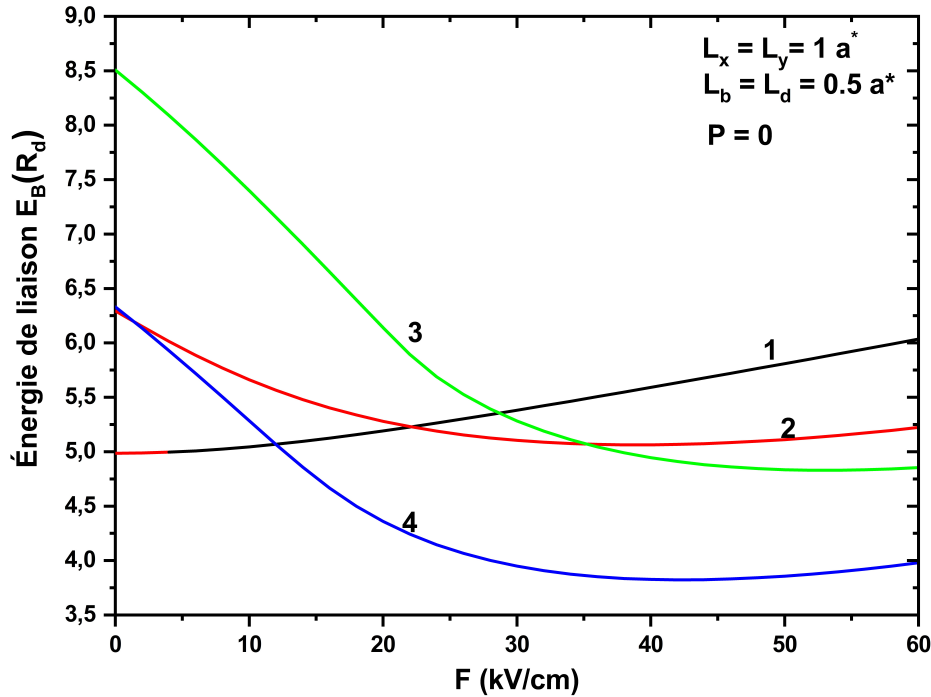


FIGURE 3.3 – Énergie de liaison d'une impureté en fonction du champ électrique appliqué dans une DBQ symétrique GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As. Les étiquettes 1, 2, 3 et 4 représentent les différentes positions occupées par l'impureté.

En fait, la valeur d'espérance électron-impureté est la plus faible, ce qui implique un affaiblissement de l'interaction de Coulomb. Au fur et à mesure que le champ augmente, la distance électron-impureté devient plus grande. Cela peut être interprété comme un effet tunnel des électrons vers la boîte à gauche, ce qui implique que leur densité diminue de façon monotone dans la boîte à droite, produisant une diminution de l'énergie de liaison. Pour l'impureté située au bord de la boîte (courbe 4), l'énergie de liaison continue à diminuer à mesure que le champ électrique augmente. Lorsque le champ électrique atteint environ 30 kV/cm, la densité d'états électroniques des électrons devient plus localisée dans la boîte à gauche, ce qui maintient la distance électron-impureté constante même lorsque le champ électrique augmente, mais l'énergie de liaison reste presque constante. Cette influence du champ électrique par rapport à la position de l'impureté sur l'énergie de liaison existe également pour un système de BQs multiples avec une liaison verticale entre les BQs, comme établi précédemment [17] et pour les DPQs [20].

La Fig. (3.4) montre la dépendance de l'énergie de liaison de l'état fondamental en fonction de la position z_i de l'impureté dans la DBQ. Trois valeurs de champ électrique sont considérées : $F = 0$, $F = 10$ kV/cm et $F = 20$ kV/cm. Nous utiliserons le cas de la pression nulle pour nous concentrer spécifiquement sur l'influence du champ électrique. Lorsque $F = 0$, l'énergie de liaison atteint sa valeur maximale symétriquement en poussant l'impureté le long de la direction de croissance vers le centre des deux boîtes. Ceci est dû au fait que la DDP des électrons est la plus élevée à ces endroits. Au fur et à mesure que l'on se rapproche des limites de chaque boîte, on constate que l'énergie de liaison commence à diminuer jusqu'à atteindre une valeur minimale aux limites des deux boîtes. Lorsque l'intensité du champ électrique est portée à 10 kV/cm, puis à 20 kV/cm, le nuage électronique est polarisé et la DDP est déformée et devient plus élevée dans la boîte de gauche. Par conséquent, lorsque le champ électrique augmente, l'énergie de liaison diminue dans la boîte droite et augmente dans la boîte gauche. Pour une impureté donneur peu profonde, ces résultats sont en bon accord avec ceux observés dans les FQs couplés basés sur des matériaux InAs/GaAs [29] et pour les BQs GaAs/AlGaAs triples couplés verticalement [21].

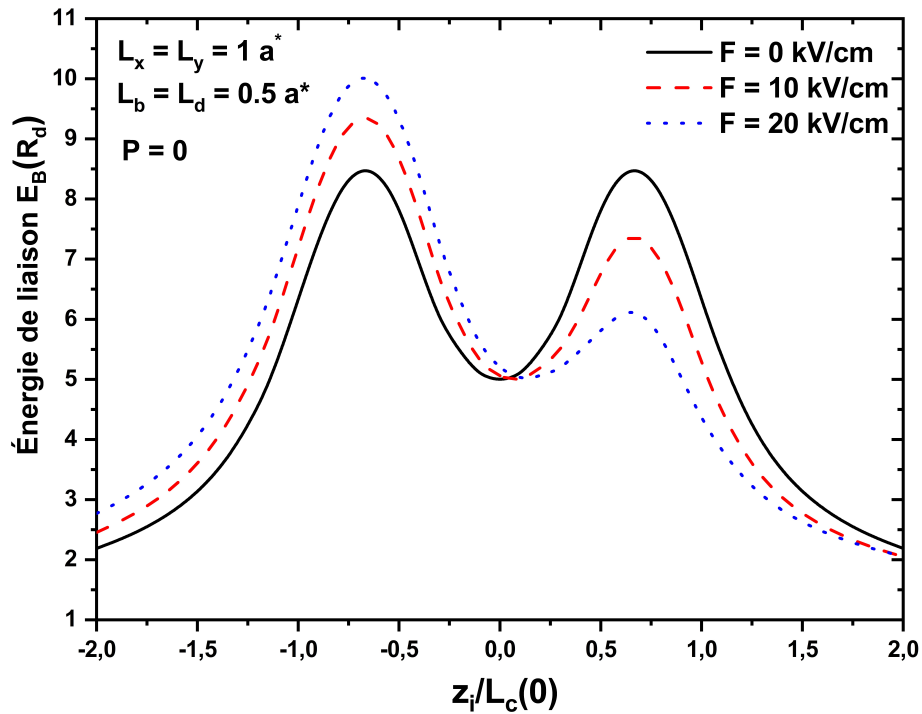


FIGURE 3.4 – Énergie de liaison à l'état fondamental de l'impureté dans une DBQ symétrique GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As en fonction de la position de l'impureté le long de la direction de croissance de l'hétérostructure. Trois valeurs de champs électriques appliqués sont considérées : $F = 0$, $F = 10$ kV/cm et $F = 20$ kV/cm avec $P = 0$.

Dans la Fig. (3.5) nous avons montré la polarisabilité d'une impureté donneur localisée

en trois endroits distincts et confinée dans une DBQ GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As en fonction de l'intensité du champ électrique. Notre objectif est d'examiner l'impact du champ électrique sur le comportement de la polarisabilité avec deux valeurs de pression hydrostatique zéro et 12 kbar.

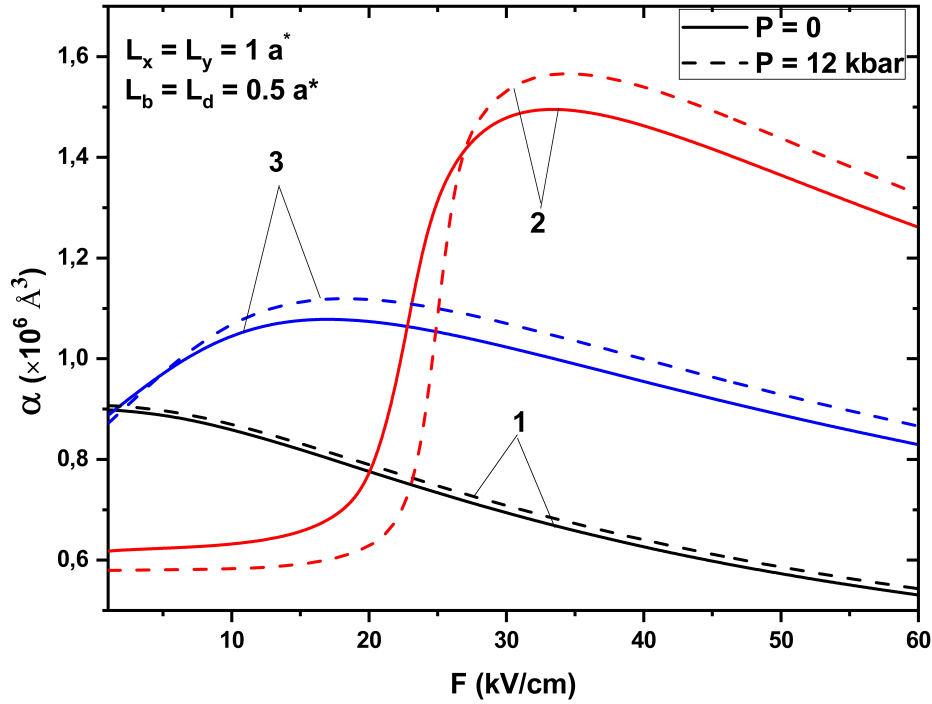


FIGURE 3.5 – Polarisation de l'impureté dans une DBQ symétrique GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As en fonction du champ électrique et à deux valeurs distinctes de la pression hydrostatique : $P=0$ et $P=12 \text{ kbar}$. Les positions de l'impureté sont représentées par les chiffres 1, 2 et 3, qui correspondent respectivement au centre de la barrière, au bord de la barrière et au centre de la boîte.

On peut voir sur la Fig. (3.5) que pour une impureté donneur située au centre de la barrière, lorsque le champ électrique est augmenté, le nuage électronique est polarisé, et le nuage d'électrons peut s'approcher de la zone centrale de la barrière, favorisant le confinement de la fonction d'onde à proximité de l'impureté, ce qui entraîne une baisse faible de la polarisabilité. En s'approchant du bord de la barrière, on remarque un comportement identique décrit par Morales et al. [20] pour un système à DPQs. En effet, les deux courbes pour cette position commencent avec de faibles valeurs de polarisabilité car le nuage électronique ne subit pas de distorsion importante pour les faibles valeurs du champ électrique appliqué pour cette position. L'électron entre dans la boîte de gauche lorsque le champ électrique atteint 20 kV/cm environ. La barrière centrale empêche alors les électrons de se déplacer, ce qui entraîne une distorsion des fonctions d'onde des électrons. Les nuages électroniques deviennent plus délocalisés et les amplitudes de polarisabilité atteignent leurs

niveaux maximums. Lorsque le champ électrique appliqué dépasse 20 kV/cm et que la pression hydrostatique augmente, le potentiel de confinement diminue, ce qui permet au champ électrique appliqué de polariser et de déplacer facilement la fonction d'onde électronique vers la boîte droite, où l'amplitude de polarisabilité augmente. L'amplitude de polarisabilité commence à augmenter à mesure que l'on se rapproche du centre de la boîte de droite, atteignant sa valeur maximale à 10-20 kV/cm. Ensuite, elle diminue progressivement à mesure que l'intensité du champ électrique augmente.

La Fig. (3.6) représente la variation de la polarisabilité en fonction de la position de l'impureté donneur notée z_i . Pour cela, on prend deux valeurs différentes du champ électrique et on fixe la taille de la structure.

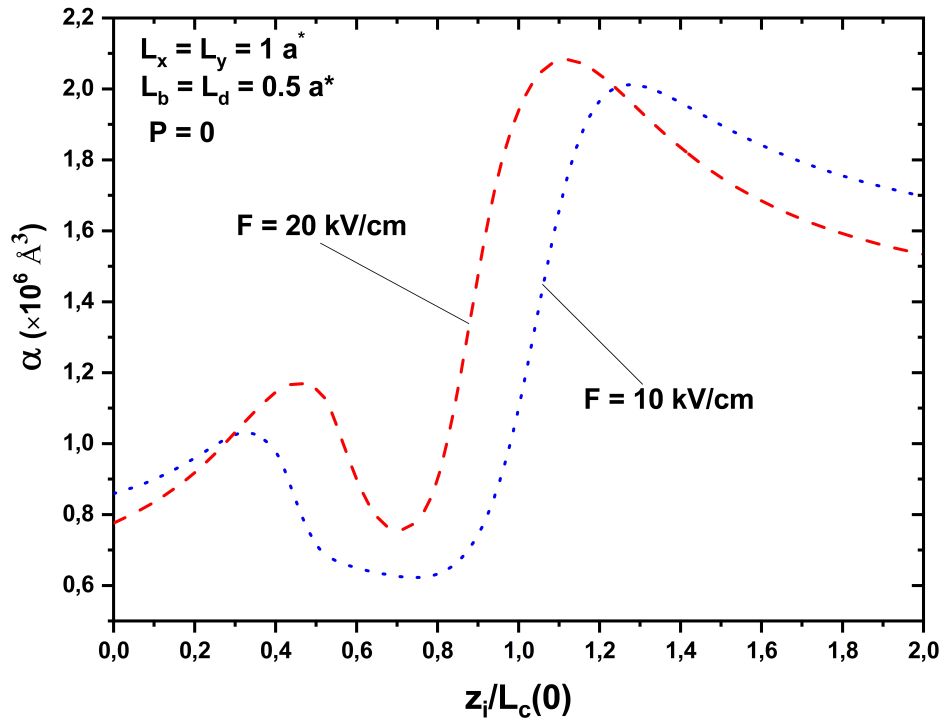


FIGURE 3.6 – Polarisation des impuretés α dans la DBQ symétrique GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As en fonction de l'emplacement des impuretés le long de la direction de croissance pour deux valeurs différentes de l'intensité du champ électrique : $F = 10$ kV/cm et $F = 20$ kV/cm. Les résultats sont pour $P = 0$, et les dimensions de la structure sont $(L_b, L_d) = (0.5a^*, 0.5a^*)$ et $(L_x, L_y) = (1a^*, 1a^*)$.

On peut clairement détecter que la polarisabilité prend des valeurs plus importantes en fonction de l'intensité du champ électrique à l'intérieur de la boîte droite. Un raisonnement similaire à celui donné dans la Fig. (3.4) pour l'énergie de liaison avec la réaction opposée peut être utilisé pour expliquer ce phénomène. Le nuage d'électrons se déforme et se déplace vers le côté opposé de la structure lorsque le champ électrique augmente, ce qui fait croître la valeur de la polarisabilité en même temps que la baisse de l'énergie. Lorsque

l'impureté se trouve à la barrière, la distorsion de la fonction d'onde électronique implique une diminution de la distance électron-impureté avec une augmentation de l'intensité du champ électrique, ce qui fait que l'énergie de liaison atteint sa valeur maximale et que la polarisabilité diminue.

La Fig. (3.7) montre la variation de la SEP en fonction de l'énergie du photon incident, pour deux valeurs distinctes de l'intensité du champ électrique : $F=0$ et $F=10$ kV/cm, pour trois emplacements de l'impureté donneur sur l'axe z : au bord de la barrière $z_i=L_b/2$ (étiquette 2), au centre de la boîte droite $z_i=(L_b+L_d)/2$ (étiquette 3), et au bord de la boîte droite $z_i=L_c$ (étiquette 4). Les paramètres de taille ont été fixés à $(L_d, L_b)=(0.5a^*, 0.5a^*)$ et $(L_x, L_y)=(1a^*, 1a^*)$. Nous pouvons remarquer que la SEP pour l'impureté donneur au centre de la barrière $z_i=0$ n'est pas montrée en fonction des deux valeurs du champ électrique. Ce dernier comportement est dû à l'annulation de l'élément de la matrice (M_{if}).

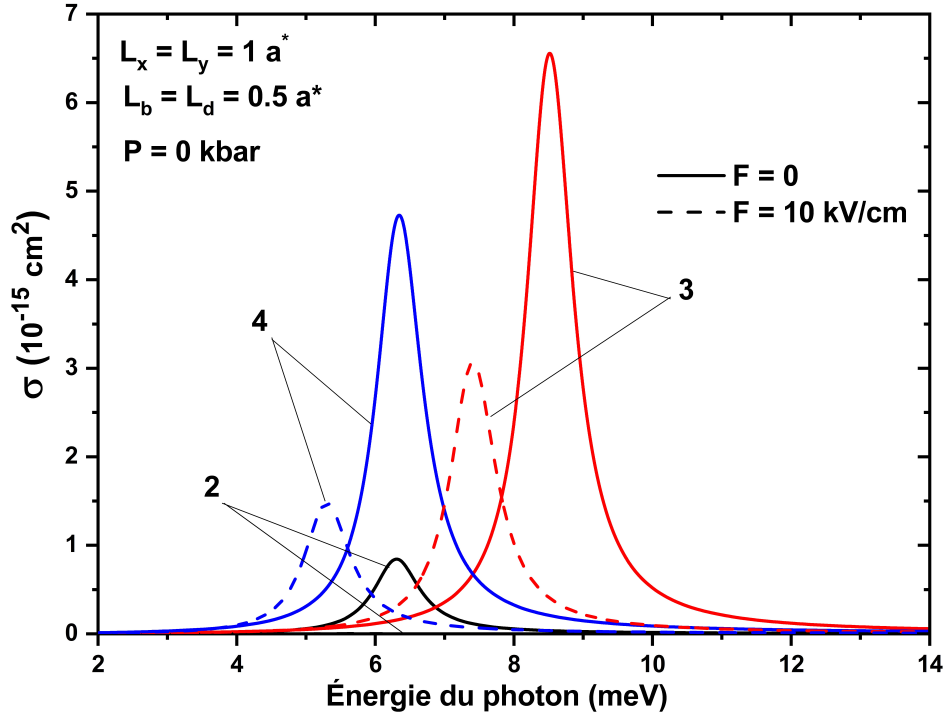


FIGURE 3.7 – SEP $\sigma(\hbar\omega)$ d'une impureté donneur dans une DBQ symétrique GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ en fonction de l'énergie des photons, pour deux valeurs distinctes du champ électrique. Les emplacements des impuretés sur le bord de la barrière, le centre de la boîte, et le bord de la boîte sont désignés par les nombres 2, 3, et 4, respectivement. La taille de l'hétérostructure représentée dans l'illustration.

En fait, lorsque l'onde électromagnétique est polarisée dans la direction z , la transition de l'état fondamental de l'impureté hydrogénoïde à l'état de sous-bande de conduction $n_x=n_y=n_z=1$ n'est pas permise lorsque l'impureté est située au centre de la barrière. La figure

indique clairement que lorsque l'intensité du champ électrique augmente, l'amplitude du pic de résonance diminue et passe à de faibles énergies de photons (*red-shift*) pour les trois endroits. Il convient de noter que la SEP pour une impureté au centre de la boîte droite s'est déplacée vers le domaine de haute énergie (*blue-shift*) et présente un pic d'intensité plus important. De plus, le déplacement de l'impureté près du bord de la boîte ou du bord de la barrière provoque un déplacement vers le rouge (*red-shift*) dans l'énergie de seuil et une diminution de l'amplitude du pic de résonance. Nos résultats sont justifiés parce que, comme le montre la Fig. (3.3), l'énergie de liaison est maximale près du centre de la boîte $z_i=(L_b+L_d)/2$ à $F=0$ et diminue lorsque l'impureté s'en éloigne. L'énergie de liaison des impuretés au bord de la barrière, au centre de la boîte et au bord de la boîte diminue lorsque l'intensité du champ électrique augmente, ce qui entraîne une diminution des valeurs de la SEP.

Pour démontrer l'impact de la pression hydrostatique sur la variation de la SEP, nous avons tracé la variation de $\sigma(\hbar\omega)$ en fonction de l'énergie des photons incidents dans la Fig. (3.8).

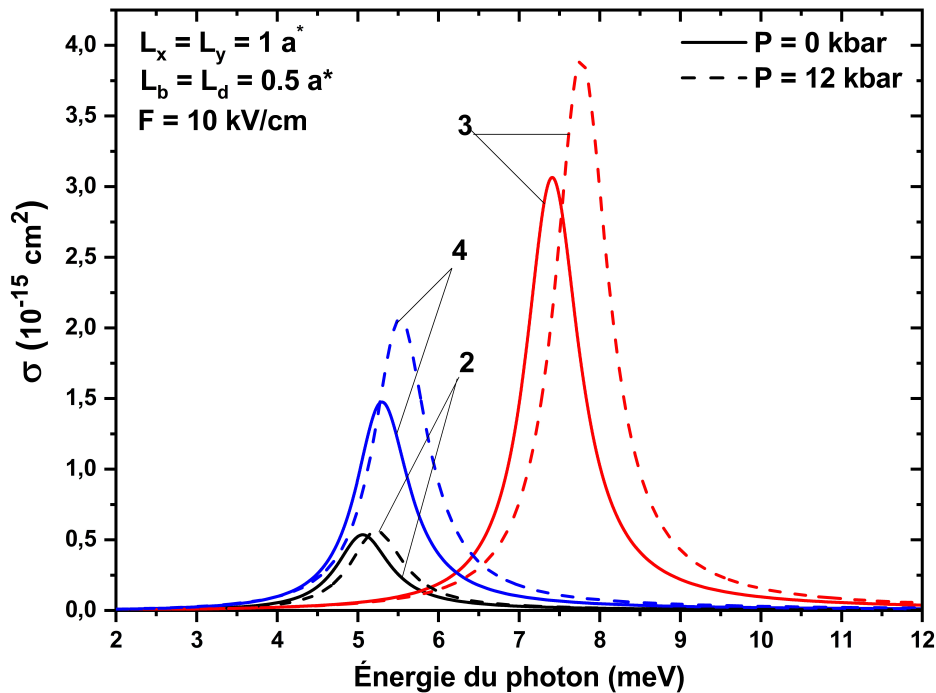


FIGURE 3.8 – SEP $\sigma(\hbar\omega)$ d'une impureté donneur dans une DBQ symétrique GaAs/ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ en fonction de l'énergie photonique pour deux valeurs hydrostatiques distinctes. Les emplacements des impuretés sur le bord de la barrière, le centre de la boîte, et le bord de la boîte sont désignés par les nombres 2, 3, et 4, respectivement. La taille de l'hétérostructure est représentée dans l'illustration.

Nous avons choisi deux valeurs différentes de la pression hydrostatique : $P=0$ et $P=12 \text{ kbar}$, et trois positions de l'impureté donneur le long de l'axe z : le bord de la barrière

$z_i=L_b/2$, le centre de la boîte $z_i=(L_b+L_d)/2$, et le bord de la boîte $z_i=L_c$ avec une taille de structure fixe à $(L_d,L_b)=(0.5a^*,0.5a^*)$ et $(L_x,L_y)=(1a^*,1a^*)$, avec un champ électrique constant $F=10$ kV/cm.

Dans toutes les situations de placement d'impuretés, l'amplitude du pic de résonance de la SEP augmente lorsque la pression hydrostatique augmente sous l'effet d'un champ électrique d'intensité constante, comme le montre la Fig. (3.4). Lorsque P augmente, l'énergie de liaison du donneur augmente également, en raison d'une diminution de la constante diélectrique statique et d'une augmentation proportionnelle de l'interaction de Coulomb. En conséquence, le spectre de SEP présente un déplacement vers le bleu (*blue-shift*).

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons utilisé une technique variationnelle pour évaluer l'énergie de liaison à l'état fondamental d'une impureté donneur peu profonde, la section efficace de photoionisation (SEP) et la polarisabilité sous les effets combinés d'un champ électrique et d'une pression hydrostatique. L'impureté est confinée dans un système composé de deux BQs à base de GaAs séparés par une barrière centrale de AlGaAs, le champ électrique appliqué étant orienté dans le sens de la croissance. D'une manière générale, nous avons observé que l'ampleur de la SEP pour une impureté augmente lorsque la pression augmente autour du centre de la BQ, et ce résultat est compatible avec le changement de l'énergie de liaison lorsque la pression augmente dans ce système. Par rapport à la pression hydrostatique, le champ électrique a l'effet inverse sur la SEP, avec un déplacement substantiel vers les *red-shifts* au fur et à mesure que le champ électrique augmente. La polarisabilité à l'intérieur de la boîte augmente lentement à mesure que la pression hydrostatique augmente. De plus, la polarisabilité d'une impureté proche du bord de la barrière change brusquement en fonction du champ électrique.

Bibliographie

- [1] S. Nizamoglu and H. V. Demir, “Hybrid white light sources based on layer-by-layer assembly of nanocrystals on near-UV emitting diodes,” *Nanotechnology*, vol. 18, 10 (2007).
- [2] T. Suzuki, T. Mitsuyu, K. Nishi, H. Ohyama, T. Tomimasu, S. Noda, T. Asano, and A. Sasaki, “Observation of ultrafast all-optical modulation based on intersubband transition in n-doped quantum wells by using free electron laser,” *Applied Physics Letters*, vol. 69, pp. 4136–4138, 12 (1996).
- [3] Y. S. Park, J. Roh, B. T. Diroll, R. D. Schaller, and V. I. Klimov, “Colloidal quantum dot lasers,” *Nature Reviews Materials*, vol. 6, pp. 382–401, 5 (2021).
- [4] G. Bastard, “Hydrogenic impurity states in a quantum well : A simple model,” *Physical Review B*, vol. 24, pp. 4714–4722, (1981).
- [5] J. W. Brown and H. N. Spector, “Hydrogen impurities in quantum well wires,” *Journal of Applied Physics*, vol. 59, pp. 1179–1186, (1986).
- [6] A. M. Elabsy, “Effect of Temperature on the Binding Energy of a Confined Impurity to a Spherical Semiconductor Quantum Dot,” *Physica Scripta*, vol. 59, (1999).
- [7] M. Takikawa, K. Kelting, G. Brunthaler, M. Takechi, and J. Komeno, “Photoionization of deep traps in AlGaAs/GaAs quantum wells,” *Journal of Applied Physics*, vol. 65, pp. 3937–3942, (1989).
- [8] A. Sali, M. Fliyou, H. Satori, and H. Loumrhari, “Photoionization of impurities in quantum-well wires,” *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, vol. 211, pp. 661–670, (1999).
- [9] A. L. Morales, A. Montes, S. Y. López, N. Raigoza, and C. A. Duque, “Donor-related density of states and polarizability in a GaAs-(Ga, Al)As quantum-well under hydrostatic pressure and applied electric field,” *Physica Status Solidi Conferences*, vol. 656, pp. 652–656, (2003).

- [10] A. Zounoubi, K. E. Messaoudi, I. Zorkani, and A. Jorio, "Magnetic field and finite barrier-height effects on the polarizability of a shallow donor in a GaAs quantum wire," *Superlattices and Microstructures*, vol. 30, pp. 189–200, (2001).
- [11] I. Karabulut, M. E. Mora-Ramos, and C. A. Duque, "Nonlinear optical rectification and optical absorption in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs asymmetric double quantum wells : Combined effects of applied electric and magnetic fields and hydrostatic pressure," *Journal of Luminescence*, vol. 131, pp. 1502–1509, (2011). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.jlumin.2011.03.044>
- [12] W. Belaid, H. E. Ghazi, I. Zorkani, and A. Jorio, "Pressure-related binding energy in (In,Ga)N/GaN double quantum wells under internal composition effects," *Solid State Communications*, vol. 327, p. 114193, 3 (2021).
- [13] A. L. Morales, A. Montes, S. Y. López, N. Raigoza, and C. A. Duque, "Donor-related density of states and polarizability in a GaAs-(Ga,Al)As quantum-well under hydrostatic pressure and applied electric field," *Physica Status Solidi Conferences*, vol. 656, pp. 652–656, (2003).
- [14] N. Raigoza, A. L. Morales, A. Montes, N. Porras-Montenegro, and C. A. Duque, "Stress effects on shallow-donor impurity states in symmetrical GaAs/Al_xGa_{1-x}As double quantum wells," *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 69, 1 (2004).
- [15] Z. G. Bai and J. J. Liu, "Stress effects on the binding energy of shallow-donor impurities in symmetrical GaAs/AlGaAs double quantum-well wires," *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 19, pp. 0–13, (2007).
- [16] E. Tangarife and C. A. Duque, "Shallow-donor impurity in coupled GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum well wires : Hydrostatic pressure and applied electric field effects," *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, vol. 247, pp. 1778–1785, 7 (2010).
- [17] C. M. Duque, M. G. Barseghyan, and C. A. Duque, "Donor impurity in vertically-coupled quantum-dots under hydrostatic pressure and applied electric field," *European Physical Journal B*, vol. 73, pp. 309–319, 2 (2010).

- [18] J. J. Liu, M. Shen, and S. W. Wang, “The influence of compressive stress on shallow-donor impurity states in symmetric GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs double quantum dots,” *Journal of Applied Physics*, vol. 101, no. 7, p. 073703, (2007). [Online]. Available : <https://doi.org/10.1063/1.2717584>
- [19] R. Arraoui, A. Sali, A. Ed-Dahmouny, M. Jaouane, and A. Fakkahi, “Polaronic mass and non-parabolicity effects on the photoionization cross section of an impurity in a double quantum dot,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 159, p. 107049, 11 (2021).
- [20] A. L. Morales, N. Raigoza, E. Reyes-Gómez, J. M. Osorio-Guillén, and C. A. Duque, “Impurity-related polarizability and photoionization-cross section in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs double quantum wells under electric fields and hydrostatic pressure,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 45, pp. 590–597, (2009). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.spmi.2009.03.001>
- [21] C. M. Duque, M. G. Barseghyan, and C. A. Duque, “Hydrogenic impurity binding energy in vertically coupled Ga_{1-x}Al_xAs quantum-dots under hydrostatic pressure and applied electric field,” *Physica B : Condensed Matter*, vol. 404, pp. 5177–5180, 12 (2009).
- [22] M. Kirak and Y. Altinok, “The electric field effects on the third-harmonic generation in spherical quantum dots with parabolic confinement,” *European Physical Journal B*, vol. 85, (2012).
- [23] A. Sali and H. Satori, “The combined effect of pressure and temperature on the impurity binding energy in a cubic quantum dot using the FEM simulation,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 69, pp. 38–52, (2014). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.spmi.2014.01.011>
- [24] H. O. Oyoko, C. A. Duque, and N. Porras-Montenegro, “Uniaxial stress dependence of the binding energy of shallow donor impurities in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots,” *Journal of Applied Physics*, vol. 90, pp. 819–823, (2001).
- [25] O. Akankan, “A study of the effect of spatial electric field on the binding energy and

- polarization of a donor impurity in a GaAs/AlAs tetragonal quantum dot (TQD),” *Superlattices and Microstructures*, vol. 55, pp. 45–52, (2013).
- [26] Y. Yakar, B. Çakır, and A. Özmen, “Polarizability and electric field gradient of two-electron quantum dots,” *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, vol. 137, 2 (2020).
- [27] A. Sali, H. Satori, M. Fliyou, and H. Loumrhari, “The photoionization cross-section of impurities in quantum dots,” *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, vol. 232, pp. 209–219, (2002).
- [28] G. Lamouche and Y. Lepine, “Photoionization of semiconductor impurities in the presence of a static electric field,” *Physical Review B Condens Matter*, vol. 49, pp. 15–1994, (1994).
- [29] E. Tangarife and C. A. Duque, “Simultaneous effects of hydrostatic pressure and electric field on impurity binding energy and polarizability in coupled InAs/GaAs quantum wires,” *Physica B : Condensed Matter*, vol. 406, pp. 952–956, (2011). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2010.12.035>

DÉCALAGE STARK ET SECTION EFFICACE DE PHOTOIONISATION D'UN DONNEUR CONFINÉ DANS UNE BOÎTE QUANTIQUE ELLIPSOÏDALE CŒUR/ COQUILLE

4.1 Introduction

Les hétérostructures de boîtes quantiques (BQs) ont fait l'objet d'une attention particulière dans la recherche théorique et expérimentale en raison de leur effet de confinement quantique significatif par rapport aux puits quantiques (PQs) et aux fils quantiques (FQs). [1]. Les BQs de différentes formes présentent des propriétés optiques uniques et ont été largement utilisées dans les lasers à base de nanostructures semi-conductrices [2], les cellules solaires [3], la communication et l'informatique quantiques [4] et la technique de biosurveillance comme COVID-19 [5]. Les BQs à gradation continue, récemment étudiées par Cheng et al. [6], offrent une perspective prometteuse pour le développement de nouvelles propriétés optiques et d'applications. Ces structures présentent des variations progressives dans leur composition nanométrique ainsi que dans leurs structures de bandes électroniques. Ces caractéristiques uniques sont susceptibles de favoriser l'émergence de propriétés optiques remarquables, telles que l'augmentation de la SEP. Par conséquent, ces BQs à gradation continue constituent une voie intéressante pour exploiter de nouvelles

avancées dans le domaine de la photonique et des applications optoélectroniques.

De nos jours, le nombre et la position des impuretés ont été contrôlés par les technologies modernes au cours du processus de croissance. Par conséquent, l'influence des impuretés sur le spectre d'énergie des électrons dans les structures de nanocristaux cœur/coquille aux formes géométriques variées est maintenant explorée théoriquement. Les spectres d'énergie d'une impureté donneur au centre des BQs sphériques [7, 8], dans les BQs cylindriques [9], dans les BQs ellipsoïdaux [10] et les impuretés situées sur l'axe du FQ [11] ont été étudiées dans le cadre de l'approximation de la masse effective (AME), dans la majorité des travaux publiés. La SEP est une caractéristique cruciale pour comprendre les propriétés optiques des états d'impureté dans les BQs. L'influence du champ électrique sur les états électroniques et la SEP a été étudiée pour différentes formes de boîtes quantiques (sphériques, cylindriques, coniques et pyramidales...) dans des structures GaAs/AlGaAs. La forme géométrique de la BQ et les propriétés des matériaux utilisés ont un impact sur les propriétés optiques. L'exploration de ces aspects permet d'améliorer la compréhension des mécanismes fondamentaux et des performances optiques des nanosystèmes, essentiels pour le développement de dispositifs optoélectroniques avancés et leurs applications technologiques. L'effet du champ électrique appliqué sur la SEP a été étudié dans des BQs coniques [12], dans des BQs de forme cylindrique [13, 14] et dans des BQs couplées [15]. En outre, Sali et al. ont publié plusieurs articles sur la SEP en fonction de divers paramètres et de l'énergie des photons $\hbar\omega$ dans des systèmes massifs et de faible dimension. Dans ces études, ils ont abordé l'existence d'impuretés sous l'effet de diverses perturbations physiques externes. Ils ont exploré la variation de la SEP pour les BQs [16] et les FQs avec [17] et sans [18] l'impact d'une barrière finie à cet égard. Le même auteur a de nouveau calculé l'énergie de liaison des BQs, cette fois en utilisant l'approche de l'AME et en présence d'une impureté [19, 20]. Dans la référence [21] les auteurs ont étudié l'influence du champ électrique et de l'emplacement de l'impureté donneur sur l'état fondamental et les états excités les plus bas d'une impureté dans la structure CdSe/ZnS BQCC en tenant compte des charges de polarisation à la frontière des nanostructures. Ils ont prouvé que l'énergie de liaison et la SEP sont fortement affectées par le confinement diélectrique et le champ électrique appliqué. Dans ce contexte, Zeiri et al. se sont concentrés sur les systèmes cœur/coquille à base des nanostructures de type II [22]. Ils ont étudié en profondeur les propriétés optiques ainsi que les

états électroniques de ces systèmes. L'approche de la matrice de densité est utilisée dans les calculs. Hértilli et al. ont utilisé la même hypothèse pour calculer les fonctions diélectriques linéaires et non linéaires en fonction de la taille de la nano-structure et de l'environnement diélectrique [23].

D'autre part, les auteurs de [24] ont étudié dans le cadre de la technique de perturbation et de la méthode variationnelle, les propriétés électroniques et optiques des nanostructures cœur/double-coquille, ils ont prouvé que la variation de la SEP est fortement affectée par la position de l'impureté et les paramètres géométriques comme les deux rayons du cœur et des deux coquilles. Le décalage Stark est une caractéristique majeure signalée dans les systèmes-nanostructures de faible dimension en présence d'un champ électrique, reflétant l'impact de ce dernier sur la distribution des porteurs de charge et les états électroniques des BQs et provoquant des changements dans la distribution de la DDP [25, 26]. En conséquence, la valeur élevée du décalage Stark des nanostructures semble fournir une base pour de nouveaux types de dispositifs optoélectroniques [2]. Des études théoriques récentes basées sur la recherche de SEP en utilisant l'AME dans le cadre de la méthode variationnelle dans une boîte quantique elliptique cœur/coquille (BQECC) de forme prolata et oblate, ont montré que, le décalage stark est largement influencé par l'emplacement de l'impureté, les formes des nanostructures et la taille [10]. Par conséquent, les propriétés optiques et électroniques obtenues accordées par les facteurs géométriques, l'intensité du champ électrique et la position de l'impureté dans les BQECCs peuvent être utiles pour la création et la fabrication de dispositifs optoélectroniques et photoniques. En outre, pour améliorer les performances de ces dispositifs optoélectroniques, nous ne pouvons pas seulement jouer sur la position de l'impureté et l'effet du champ électrique, mais il y a d'autres facteurs et paramètres qui sont importants pour gérer les propriétés optiques et électroniques telles que l'effet de la température, de la pression et de la variation de la composition. Dans ce cas, les auteurs dans [27, 28] ont calculé la SEP des impuretés confinées dans (In,Ga)N/GaN cœur/coquille sous pression hydrostatique et effet d'un champ électrique externe, ils ont démontré que la SEP est régulée par le contrôle des facteurs internes tels que la concentration d'indium, ainsi que des facteurs externes tels que le champ électrique et la pression hydrostatique.

4.2 Formalisme général

4.2.1 Hamiltonien du système sous l'effet de la pression hydrostatique et d'un champ électrique axial

Dans les présents calculs, la BQ semi-conductrice ellipsoïdale cœur/coquille est constitué d'un matériau GaAs immergé dans un matériau AlGaAs avec une impureté hydrogénéoïde peu profonde confinée au centre du système. La nanostructure étudiée est représentée schématiquement à la Fig. (4.1), les zones du cœur et de la coquille étant spécifiées par l'équation suivante [29] :

$$\frac{x^2}{a_i^2} + \frac{y^2}{b_i^2} + \frac{z^2}{c_i^2} = 1, \quad (i = 1, 2) \quad (4.1)$$

où a_i , b_i et c_i sont les demi-axes intérieur ($i = 1$) et extérieur ($i = 2$) de notre système BQECC, qui s'étendent respectivement le long des axes x -, y - et z .

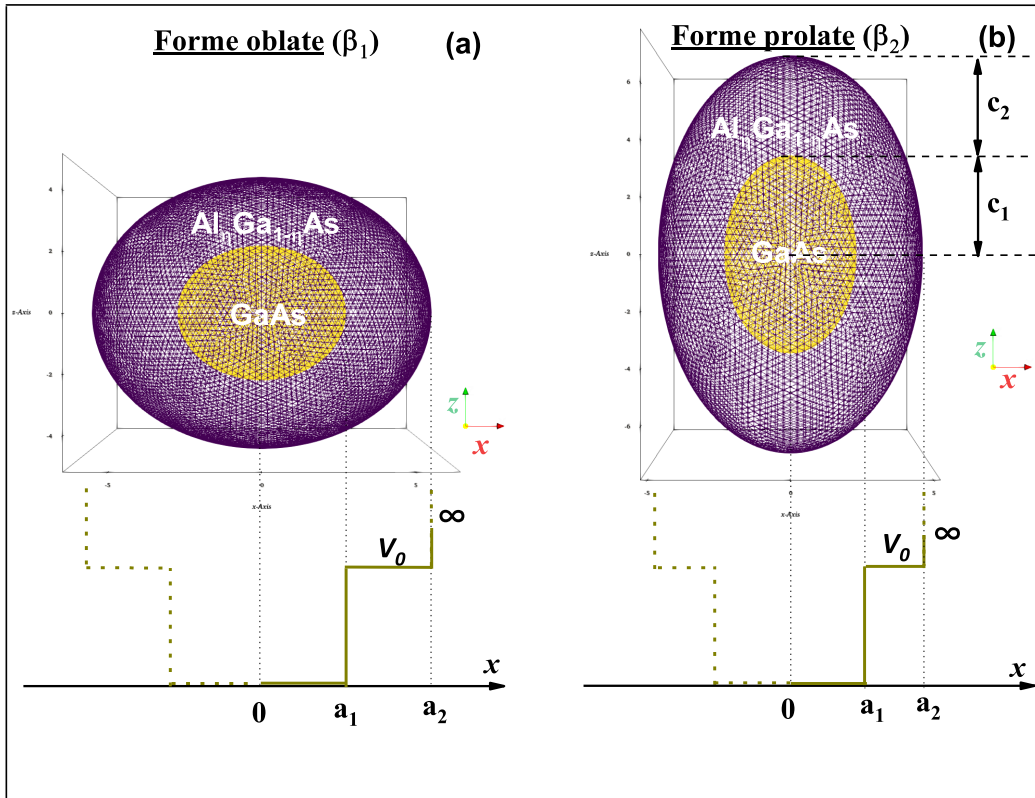


FIGURE 4.1 – Vue 2D de la structure BQECC oblate (a) et prolate (b) étudiée, ainsi que du profil du potentiel de confinement le long de la direction (1 0 0).

Pour différencier les deux formes, nous supposons que $\beta_j = 1 - \frac{1}{\gamma_j}$ exprime le degré d'ellipticité en fonction du paramètre géométrique γ_j où $\gamma_j = \frac{c_j}{a_j}$ et $a_i = R_i \gamma_j^{\frac{-1}{3}}$. Nous avons

mentionné que $\beta_{j=1} < 0$ pour le sphéroïde oblate, $\beta_{j=2} > 0$ pour le sphéroïde prolata et $\beta_j = 0$ pour la forme sphérique (présentée par plusieurs travaux antérieurs [10, 29]).

La structure BQECC est sous l'effet d'un champ électrique spatial avec un angle α ajustant la direction. L'équation de Schrödinger a été résolue en utilisant la méthode des éléments finis (MEF) dans le cadre de l'AME pour trouver les niveaux électroniques du système et déterminer les propriétés opto-électroniques. L'Hamiltonien d'une impureté donneur placée au centre du cœur est exprimé comme suit :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m_{i=1,2}^*} \vec{\nabla}^2 - \frac{\kappa \cdot e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r} + e \cdot \vec{F} \cdot \vec{r} + V(x, y, z) \quad (4.2)$$

L'interaction entre un électron et une impureté est représentée par le second terme de l'Hamiltonien, où $\kappa = 0, 1$ représente l'absence ou l'existence de l'impureté, respectivement. Par ailleurs, m_1^* et m_2^* sont les masses effectives des électrons correspondant respectivement aux matériaux GaAs et $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$, elles dépendent de la concentration d'aluminium η et ϵ_r est la permittivité statique du GaAs.

Le potentiel de confinement des électrons est représenté par le terme $V(x, y, z)$. Sa valeur dépend de l'emplacement d'électron dans la nanostructure et est la suivante :

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & \text{à l'intérieur du cœur quantique} \\ V_0, & \text{à l'extérieur du cœur quantique et à l'intérieur de la coquille} \\ \infty, & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (4.3)$$

V_0 est la hauteur de la barrière entre le cœur de matériau GaAs et la barrière AlGaAs. Nous choisissons $V_0 = 0,262 \text{ eV}$ pour une transition directe de la bande interdite correspondant à une valeur de concentration en aluminium $\eta = 0.3$.

Nous examinerons deux directions du champ électrique : $\alpha = 0, \frac{\pi}{2}$ telles qu'elles existent dans le plan $y = 0$, où α est l'angle entre \vec{F} et l'axe x . Dans ces conditions, la nouvelle forme de l'Hamiltonien sera la suivante :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_{i=1,2}^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{\kappa \cdot e^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 r} + e(xF \cos \alpha + zF \sin \alpha) + V(x, y, z) \quad (4.4)$$

4.2.2 Décalage Stark et section efficace de photoionisation

4.2.2.1 Énergie de liaison et le décalage Stark

Pour déterminer l'énergie de liaison E_b^n de l'impureté pour l'état n d'un électron, nous avons calculé l'écart entre les niveaux d'énergie de l'électron $E_n^e(\kappa = 0)$ dans l'état fondamental ($n = 1s$), le premier ($n = 2s$) et le second ($n = 2p$) états excités et son énergie dans l'état fondamental avec impureté $E_0^{imp}(\kappa = 1)$, en utilisant l'équation (4.4) :

$$E_b^n = E_n^e(\kappa = 0) - E_0^{imp}(\kappa = 1) \quad (4.5)$$

Le spectre d'énergie de liaison est affecté par les niveaux d'électrons et plusieurs autres facteurs internes et externes, notamment l'ampleur du champ électrique et la taille des deux BQs : cœur et coquille.

Étant donné que l'Hamiltonien (4.4) ne peut pas être résolu analytiquement, la méthode des éléments finis (MEF) est employée pour calculer les niveaux d'énergie des électrons en présence et en l'absence d'impureté. Ces énergies sont générées numériquement en résolvant l'équation (4.4) avec COMSOL-Multiphysics [30] et avec une grille de maillage appropriée conformément aux conditions aux limites de Dirichlet et de Von Neumann :

$$\begin{cases} \Psi_i^{GaAs}(r = R_1) = \Psi_i^{AlGaAs}(r = R_1) \\ \left. \frac{\partial \Psi_i^{GaAs}}{\partial r} \right|_{r=R_1} = \left. \frac{\partial \Psi_i^{AlGaAs}}{\partial r} \right|_{r=R_1} \\ \Psi_i^{AlGaAs}(r = R_2) = 0 \end{cases} \quad (4.6)$$

Le décalage Stark dans les nanostructures fait référence au changement d'énergie qui se produit dans les états électroniques d'une structure lorsqu'elle est soumise à un champ électrique externe. Ce décalage est dû à l'interaction entre le champ électrique et les particules confinées dans la structure quantique, qui modifie les niveaux d'énergie des électrons et des trous à l'intérieur de cette structure.

Le décalage Stark, noté (ΔE_b^n) , est un effet important dans l'étude des nanostructures, car il peut être utilisé pour ajuster leurs propriétés électroniques et optiques. En appliquant un champ électrique externe, les chercheurs peuvent agir sur les niveaux d'énergie de la BQ et modifier son spectre d'émission. Cela peut être utile dans des applications telles que les lasers à BQs, où un contrôle précis de la longueur d'onde d'émission est essentiel. Pour l'impureté confinée au centre d'une structure BQECC au niveau d'énergie n , ΔE_b^n est dé-

finie comme la différence entre l'énergie de liaison de l'impureté en présence du champ électrique $E_b^n\{F \neq 0\}$ et son énergie en absence du champ électrique $E_b^n\{F = 0\}$ et peut être évaluée par [25] :

$$\Delta E_b^n = E_b^n\{F \neq 0\} - E_b^n\{F = 0\} \quad (4.7)$$

4.2.2.2 Force de l'oscillateur et la section efficace de photoionisation

Dans l'approximation dipolaire, la section efficace de photoionisation (SEP) d'une impureté confinée est exprimée comme [31, 32] :

$$\sigma(\hbar\omega) = \left[\left(\frac{\xi_{eff}}{\xi_0} \right)^2 \frac{n_r}{\epsilon_r} \right] \frac{4\pi^2}{3} \alpha_{FS} \hbar\omega \sum_f |\chi_{0,n}|^2 \delta(E_n^{\kappa=0} - E_0^{\kappa=1} - \hbar\omega) \quad (4.8)$$

où n_r est l'indice de réfraction, $\hbar\omega$ est l'énergie du photon incident, $\alpha_{FS} = \frac{1}{137}$ est la constante de structure fine [32]. $\left(\frac{\xi_{eff}}{\xi_0} \right)$ est le rapport entre le champ électrique effective au niveau de l'impureté ξ_{eff} et le champ électrique moyen du milieu ξ_0 , nous supposons que $\frac{\xi_{eff}}{\xi_0} = 1$ [16] car elle n'a pas d'influence sur la morphologie globale de la SEP. $\hbar\Gamma = 0.4 \text{ meV}$ est la largeur de raie de l'impureté [33].

Une fonction Lorentzienne étroite est généralement utilisée pour calculer la SEP à la place de la fonction δ [34] :

$$\delta(E_n^{\kappa=0} - E_0^{\kappa=1} - \hbar\omega) = \frac{\hbar\Gamma}{\pi \left[(E_b^n - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma)^2 \right]} \quad (4.9)$$

La force de l'oscillateur d'une nanostructure représente la probabilité qu'un électron subisse une transition entre des états d'énergie et émette ou absorbe un photon de lumière. Elle est liée au moment dipolaire de transition, qui décrit l'interaction entre le champ électrique de la lumière et la distribution des charges à l'intérieur de la nanostructure. Plus le moment dipolaire de transition est élevé, plus la force de l'oscillateur est importante.

La force de l'oscillateur $P_{0 \rightarrow n}^n$, a une utilité dans l'étude des propriétés optiques, donnée pour l'état n par la règle d'or de Fermi [35] :

$$P_{0 \rightarrow n}^n = \frac{2m_1^*}{\hbar^2} (E_n^{\kappa=0} - E_0^{\kappa=1}) |\chi_{0,n}|^2 \quad (4.10)$$

Nous examinons le rayonnement électromagnétique incident polarisé suivant la direction (Ox); donc : $\chi_{0,n} = \langle \Psi_n^{(\kappa=0)} | x | \Psi_0^{(\kappa=1)} \rangle$ représente l'élément de la matrice dipolaire entre les

états de transition, qui dépend de la direction de polarisation de l'onde électromagnétique x .

4.3 Résultats numériques et discussion

Dans cette section, les résultats des propriétés électroniques et optiques discutées dans ce travail ont été obtenus numériquement en utilisant l'approche 3D-MEF simulée par le logiciel COMSOL-Multiphysics [30]. Les calculs ont été effectués pour une structure BQECC GaAs/Al $_{\eta}$ Ga $_{1-\eta}$ As. Les paramètres utilisés pour les calculs numériques sont : la composition de l'aluminium $\eta = 0,3$, $m_1^* = 0,067m_0$ et $m_2^* = 0,093m_0$ [10] et nous avons choisi une taille beaucoup plus grande que la valeur de la taille critique des BQs. Le tableau (4.1) fournit les paramètres géométriques précis utilisés dans le calcul.

TABLE 4.1 – Demi-axes ellipsoïdaux du cœur et de la coquille utilisés dans la modélisation, ainsi que les valeurs γ_j et β_j pour les deux formes. Les dimensions sont données en (nm).

| Forme | Rayon intérieur R_1 | Rayon extérieur R_2 | $a_1=b_1$ | c_1 | $a_2=b_2$ | c_2 | degré d'ellipticité β_j | γ_j -paramètre |
|-------------------|-----------------------|-----------------------|-----------|-------|-----------|-------|-------------------------------|-----------------------|
| Oblate β_1 | 3 | 6 | 3.23 | 2.58 | 6.463 | 5.17 | -0.25 | 0.8 |
| Prolate β_2 | | | 2.62 | 3.93 | 5.24 | 7.86 | 0.33 | 1.5 |

Les résultats numériques concernant les effets du champ électrique spatial sur la DDP, l'énergie de liaison et le décalage Stark pour l'état fondamental et les deux états excités d'un électron lié à une impureté donneur localisée au centre du cœur de GaAs illustré dans la Fig. (4.1) sont présentés dans cette sous-section. Nous avons représenté les trois densités de probabilité d'énergie les plus basses d'un électron confiné dans une BQECC oblate (Fig. (4.2)) et prolate (Fig. (4.3)) sans impureté sous la condition $\alpha = 0, \pi/2$ pour le rayon interne $R_1=3$ nm et le rayon de la coquille externe $R_2=6$ nm. Commençons par la première colonne, nous avons étudié le comportement du nuage électronique de l'état $1s$ avec et sans le champ électrique appliqué. Cette figure montre que, dans tous les cas, la DDP de l'état fondamental est localisée dans le cœur de GaAs qui agit comme un puits. En outre, la symétrie radiale autour du centre de la boîte est lentement modifiée sous l'effet du champ électrique appliqué dans le cas du régime de confinement fort. Pour les premier et deuxième états excités (colonnes 2 et 3 dans les Figs. (4.2) et (4.3)), on voit clairement que les électrons sont es-

sentiellement intégrés dans la coquille d'AlGaAs et que la fonction d'onde est affectée par le champ électrique appliqué, ce phénomène peut s'expliquer comme suit : En présence d'un champ électrique statique, les densités d'électrons de tous les états sont poussées dans la coquille et se déplacent légèrement vers les côtés gauche et droit du système à mesure que l'intensité du champ augmente. Dans ce cas, le champ électrique brise la symétrie et divise les états quasi-dégénérés. Un comportement similaire a été rapporté par M. Cristea et al. dans [36], lorsqu'il a étudié les états propres fondamentaux et excités d'un nanodot ZnS/CdSe a ZnS/CdSe plongée dans un milieu diélectrique.

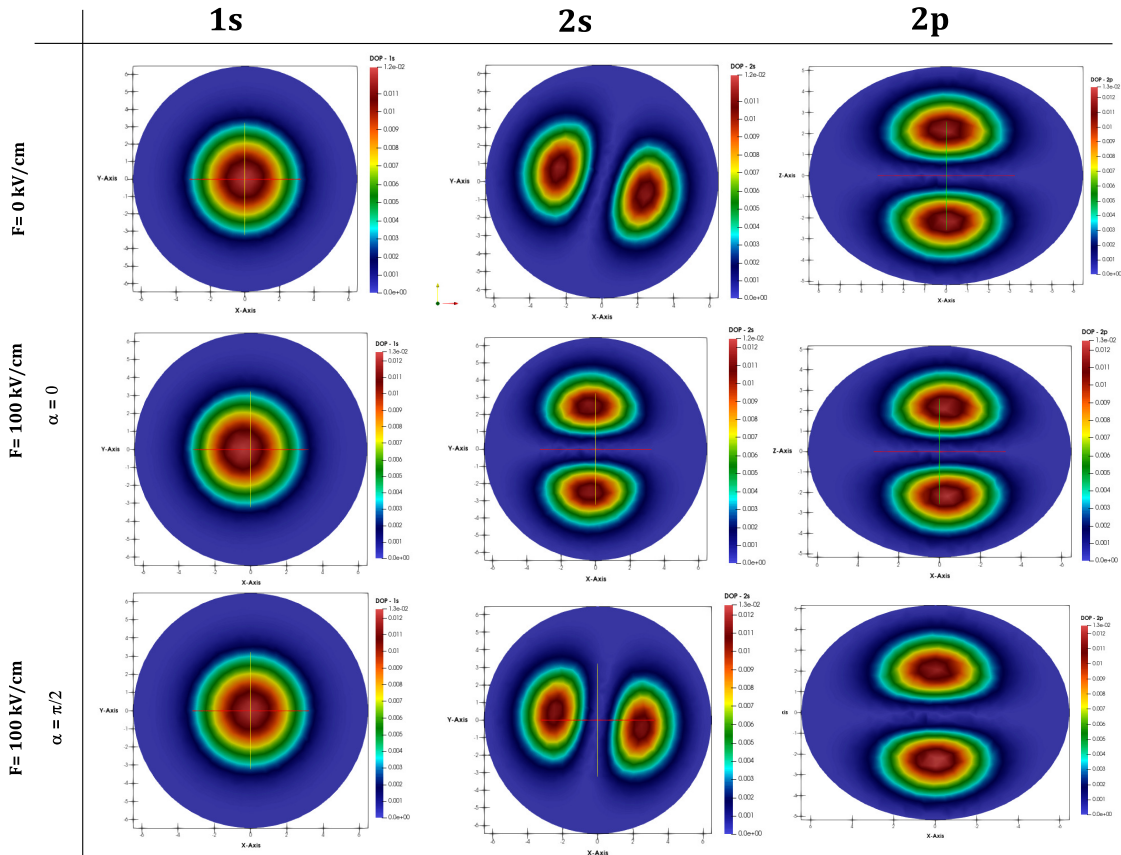


FIGURE 4.2 – Tracés 2D des trois DDP des trois premiers états électroniques d'un électron confiné dans une BQEC oblate sans impureté, pour deux valeurs de l'intensité du champ électrique F et $\alpha = 0, \pi/2$.

Afin d'étudier les trois DDP les plus basses d'un électron confiné dans une BQEC prolate et oblate et de mieux comprendre l'effet de l'intensité du champ électrique sur l'énergie de liaison, nous avons représenté sur la Fig. (4.4) la variation des énergies de liaison de l'état fondamental (a), du premier (b) et du deuxième (c) état excité d'une impureté au centre en fonction du champ électrique avec deux directions α et deux degrés d'ellipticité β . Sur cette figure, on peut facilement observer que toutes les courbes associées à l'énergie de liaison

présentent une symétrie à $F= 0$ kV/cm. Comme le montre la Fig. (4.4)-a, le maximum de l'énergie de liaison situé à $F=0$ kV/cm de l'état fondamental $1s$ pour la BQECC prolata (54,86 meV) est légèrement supérieur à celui de la BQECC oblate (54,80 meV). La même figure révèle que l'effet de l'angle α sur l'énergie de liaison de l'état fondamental E_b^{1s} dépend de manière significative du degré d'ellipticité β .

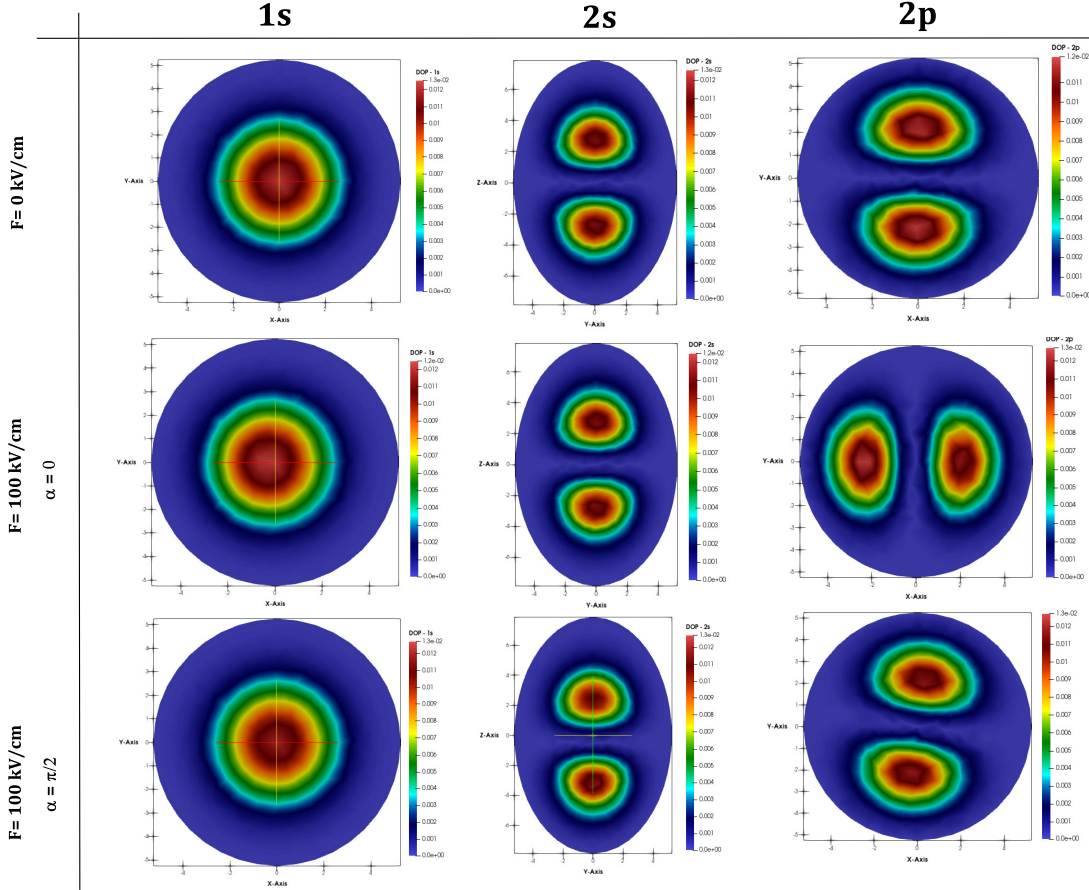


FIGURE 4.3 – Tracés 2D des trois DDP des trois premiers états électroniques d'un électron confiné au centre de la BQECC prolata sans impureté, pour deux valeurs de l'intensité du champ électrique F et $\alpha = 0, \pi/2$.

Contrairement à la Fig. (4.4)-a, l'influence de β sur l'énergie de liaison du premier état excité E_b^{2s} est plus prononcée. Plus précisément, la forme oblate a des valeurs d'énergie de liaison plus élevées sur toute la gamme de champ électrique et prend 241.8 meV comme valeur maximale à $F=0$ kV/cm, alors qu'elle a 205.4 meV pour la forme prolata. De plus, la modification de l'angle α a un effet négligeable sur E_b^{2s} pour β_2 . D'autre part, nous avons testé de la même manière l'effet du champ électrique appliqué sur l'énergie de liaison du second état excité dans la Fig. (4.4)-c. On peut voir que E_b^{2p} a un comportement opposé à E_b^{1s} et E_b^{2s} qui change avec la variation de l'angle et de la forme. Cependant, elle atteint son

maximum à $F = 0$ kV/cm pour $\alpha = 0$ dans le cas de la géométrie oblate et pour $\alpha = \frac{\pi}{2}$ dans le cas de la géométrie prolata, tandis qu'il atteint toujours son minimum à $F = 0$ kV/cm pour $\alpha = \frac{\pi}{2}$ dans le cas de la géométrie oblate et pour $\alpha = 0$ dans le cas de la géométrie prolata. L'impact du champ électrique sur le déplacement de l'effet Stark est illustré sur la Fig. (4.5) pour des BQECCs oblate et prolata.

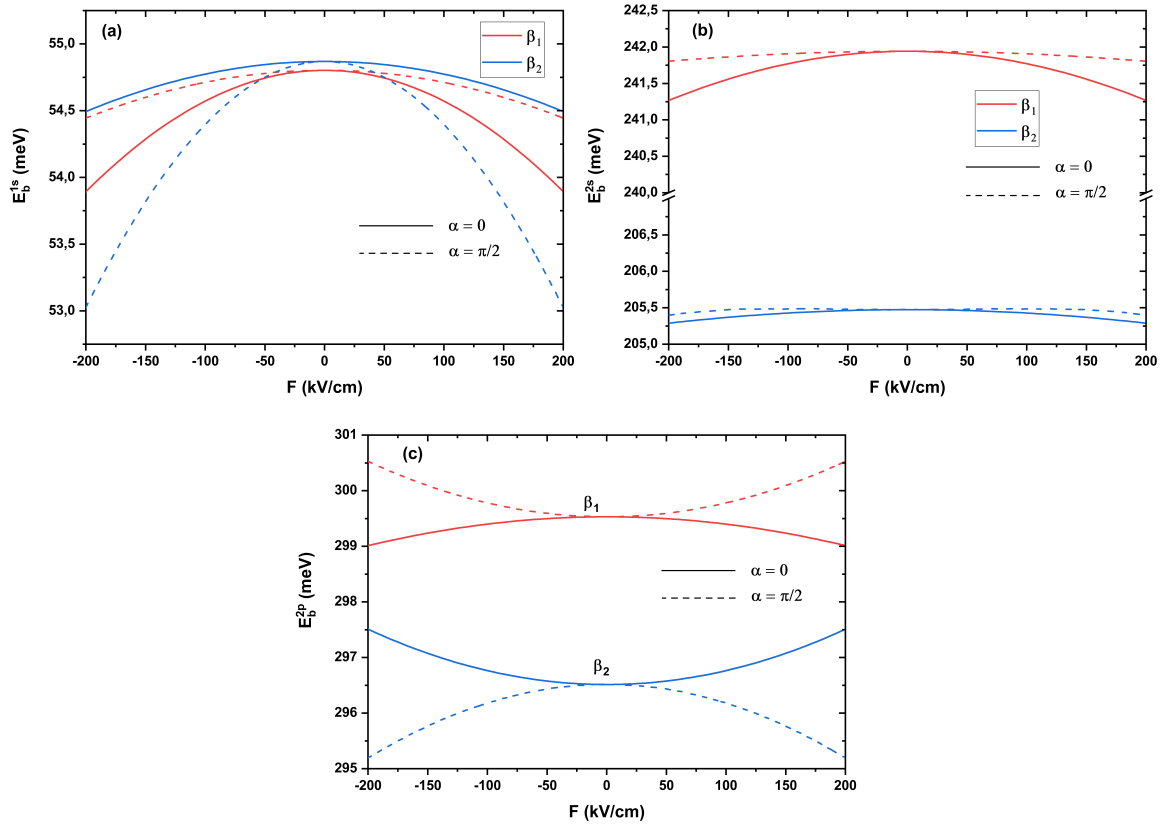


FIGURE 4.4 – Dépendance des énergies de liaison de l'état fondamental (a), du premier (b) et du second (c) états excités de l'impureté confinée au centre de la BQECC en fonction de l'intensité du champ électrique pour deux angles α et pour deux degrés d'ellipticité β .

Ces figures montrent que la dépendance de l'effet Stark par rapport au champ électrique présente un comportement symétrique. Les mêmes comportements sont observés pour tous les états, à l'exception de l'état $2p$ pour la forme prolata lorsque $\alpha = 0$ et $2p$ pour la forme oblate lorsque $\alpha = \frac{\pi}{2}$. Par conséquent, les états $1s$ et $2s$ pour chaque degré d'ellipticité β dans le cas de $\alpha = 0$ et $2p$ pour la BQECC oblate atteignent leur maximum pour la valeur de $F = 0$ kV/cm, tandis que l'état $2p$ dans le cas de la forme prolata atteint son minimum pour la même valeur de F (Fig. (4.5)-a). Néanmoins, tous les états où $\alpha = \frac{\pi}{2}$ atteignent leur maximum lorsque $F = 0$ kV/cm. Cependant, l'état de $2p$ dans le cas de la forme oblate, il atteint son minimum pour la même valeur de F (Fig. (4.5)-b). Dans cette étude, nous pouvons confirmer

que les facteurs géométriques et les formes des BQ sont des paramètres nécessaires pour la fabrication et la conception de dispositifs optoélectroniques et photoniques [9, 37].

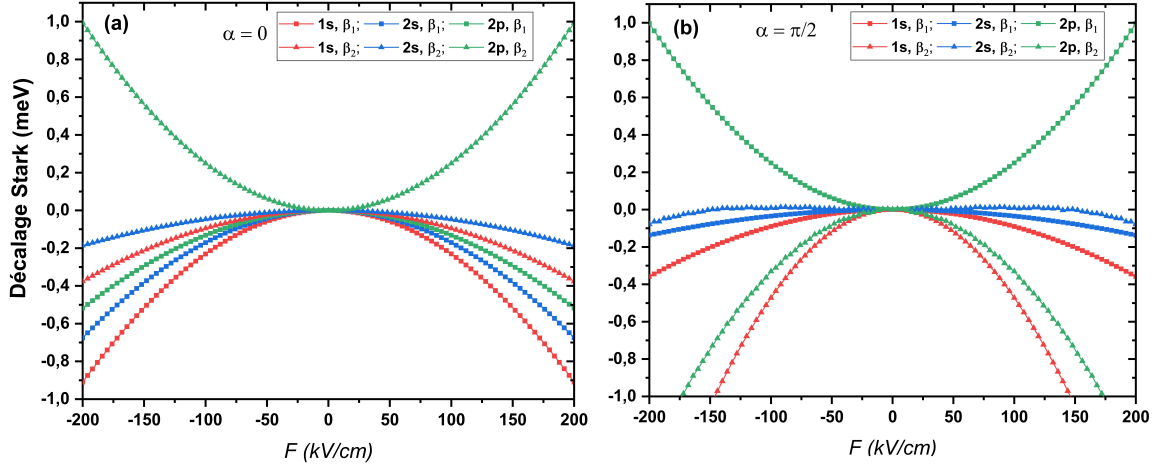


FIGURE 4.5 – Décalage Stark ΔE_b^n d'énergie de liaison pour l'impureté donneur confiné au centre de la BQECC au niveau d'énergie $n=1s, 2s$ et $2p$, dépend de deux valeurs d'angle du champ électrique : (a) $\alpha = 0$ et (b) $\alpha = \pi/2$ pour deux formes de BQECC : oblate β_1 et prolate β_2 .

Dans les discussions qui suivent et conformément à l'équation (4.10), nous nous concentrerons sur l'étude de la force de l'oscillateur P_{if} . Dans la Fig. (4.6), nous montrons la dépendance de la force de l'oscillateur P_{if} des différentes transitions entre l'état fondamental de l'impureté et les trois premiers états excités par rapport au champ électrique pour les deux formes de BQECC et pour deux angles α . La Fig. (4.6)-a montre que la force de l'oscillateur P_{if} correspondante à la forme oblate pour les transitions $1s^{imp}-1s^0$ pour $\alpha = 0$ et pour $\alpha = \frac{\pi}{2}$ diminue avec la baisse de $|F|$ et atteint une valeur minimale pour $F=0$ kV/cm ; en outre, les fluctuations correspondantes à P_{if} sont confondues pour de faibles valeurs de F . Ces résultats sont similaires aux travaux réalisés par Shi et al. [10] ainsi qu'à d'autres travaux produits par M. Cristea et al. [29], lorsqu'ils ont étudié l'effet combiné du champ électrique, de l'impureté et de la forme géométrique sur les états électroniques dans la BQECC, ils ont prouvé que pour la forme sphéroïde en champ électrique nul, la probabilité de localisation dans la coquille est à son plus bas niveau. Nous remarquons également que le changement de force d'oscillateur associé à cette transition apparaît au-delà de $F=\pm 100$ kV/cm. Le même comportement est observé pour le système correspondant à la transition $1s^{imp}-2p^0$ pour $\alpha = 0$ et pour $\alpha = \frac{\pi}{2}$. Concernant la transition $1s^{imp}-2s^0$ pour les cas de $\alpha = 0$ et $\alpha = \frac{\pi}{2}$, nous pouvons clairement voir que, la force de l'oscillateur associée à la transition $1s^{imp}-2s^0$ diminue avec la diminution de $|F|$ et atteint un maximum (environ 6%)

pour $F=0$ kV/cm, tandis que, pour la transition $1s^{imp}-2p^0$ dans le cas de $\alpha = \frac{\pi}{2}$, on peut voir que la variation de P_{if} en fonction champ électrique est une fonction impaire et monotone. Ce résultat est donc prévisible car la source de ces changements est liée à la relation de P_{if} avec l'intensité de F , puisque l'application du champ électrique conduit à une diminution de l'énergie de transition. Le même comportement de la force de l'oscillateur associée à la transition $1s^{imp}-2p^0$ est obtenu dans le cas de la forme prolate $\alpha = 0$ et $\alpha = \frac{\pi}{2}$ (Fig. (4.6)-b). Cependant, pour la transition $1s^{imp} - 2p^0$ sous la condition $\alpha = 0$, la courbe de la force de l'oscillateur présente une contribution symétrique et décroît avec la diminution de $|F|$ et atteint un minimum (autour de 4%) à $F=0$ kV/cm. Sinon, pour $\alpha = \frac{\pi}{2}$, la variation du P_{if} associé à la transition $1s^{imp}-2p^0$ en fonction de F est quasi constante. Dans ce cas, on peut dire que la transition $1s^{imp}-2p^0$ n'est pas affectée par le champ électrique.

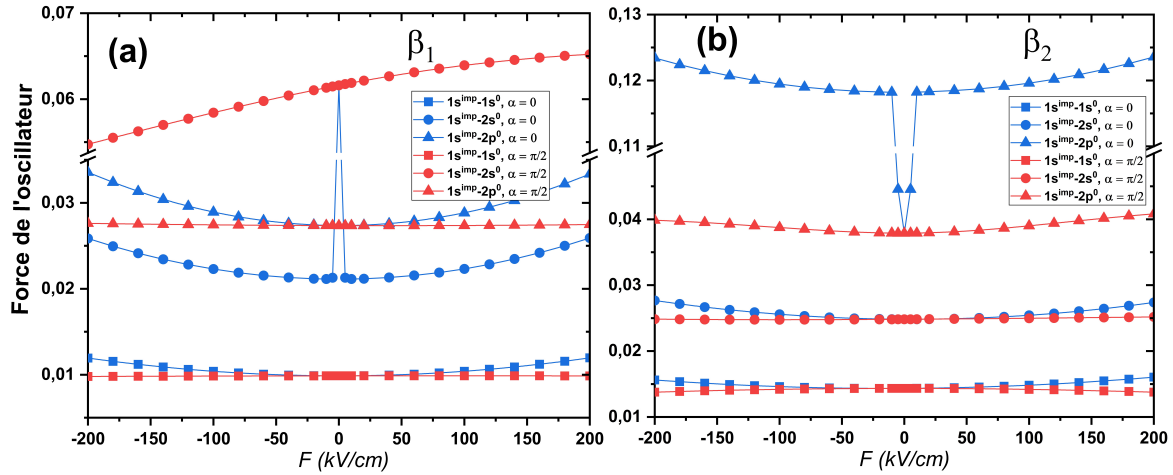


FIGURE 4.6 – Variation de la force de l'oscillateur P_{if} pour les transitions entre l'état fondamental de l'impureté donneur et les trois premiers états électroniques en fonction du champ électrique pour deux angles α et deux formes de BQECC : (a) oblate β_1 et (b) prolate β_2 .

Nous avons étendu notre étude pour comprendre l'effet de champ électrique et des formes des BQs, nous avons montré dans la Fig. (4.7)-a la fluctuation des SEP associés aux transitions $1s^{imp}-1s^0$, $1s^{imp}-2s^0$ et $1s^{imp}-2p^0$, respectivement, sous la condition de $\alpha = 0$ pour plusieurs valeurs de F , pour une forme oblate de BQECC. Sur cette figure, nous observons que les SEP pour la transition $1s^{imp}-2p^0$ présentent un décalage vers le bleu et un décalage vers le rouge pour la transition $1s^{imp}-1s^0$ par rapport à la transition $1s^{imp}-2s^0$. Par ailleurs, l'amplitude des pics de la SEP est significativement modifiée en fonction de F pour la transition $1s^{imp}-2s^0$, mais il y a un décalage des pics de la SEP des trois transitions vers les énergies les plus basses pour des valeurs de F supérieures à 100 kV/cm. En effet, en

l'absence du champ électrique ($F = 0$), l'amplitude de la SEP pour la transition $1s^{imp}-2s^0$ est plus grande, correspondant à environ $2.15 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$. Ce résultat est attendu, car l'effet du champ électrique sur la force de l'oscillateur apparaît pour les valeurs de F au-delà de 100 kV/cm (voir Fig. (4.6)-a) et présente un pic significatif pour $F = 0$ kV/cm. Plusieurs études basées sur l'investigation de la SEP dans les BQECCs ont montré que, pour la forme oblate, l'intensité des SEPs atteint un maximum pour $F=0$ kV/cm [10]. Le comportement de la SEP avec l'énergie des photons dans les conditions de $F = 100$ kV/cm est illustré sur la Fig. (4.7)-b pour la forme oblate de la BQECC. Cette figure montre que le même comportement que dans la Fig. (4.6)-a, il y a toujours un décalage vers le rouge du pic de la SEP associé à la transition $1s^{imp}-1s^0$ et un décalage vers bleu associé à la transition $1s^{imp}-2p^0$ par rapport à la transition $1s^{imp}-2s^0$ dans les deux cas $\alpha = 0$ et $\alpha = \frac{\pi}{2}$. De plus, une meilleure amplitude de la SEP est obtenue dans le cas de $\alpha = \frac{\pi}{2}$ pour la transition $1s^{imp}-2s^0$, ce phénomène est lié à la dépendance de la force de l'oscillateur avec le champ électrique discutée dans la Fig. (4.6)-a. D'autre part, les énergies de seuil restent inchangées avec l'angle de direction du champ électrique α . Nos résultats sont en excellent accord avec ceux de [38].

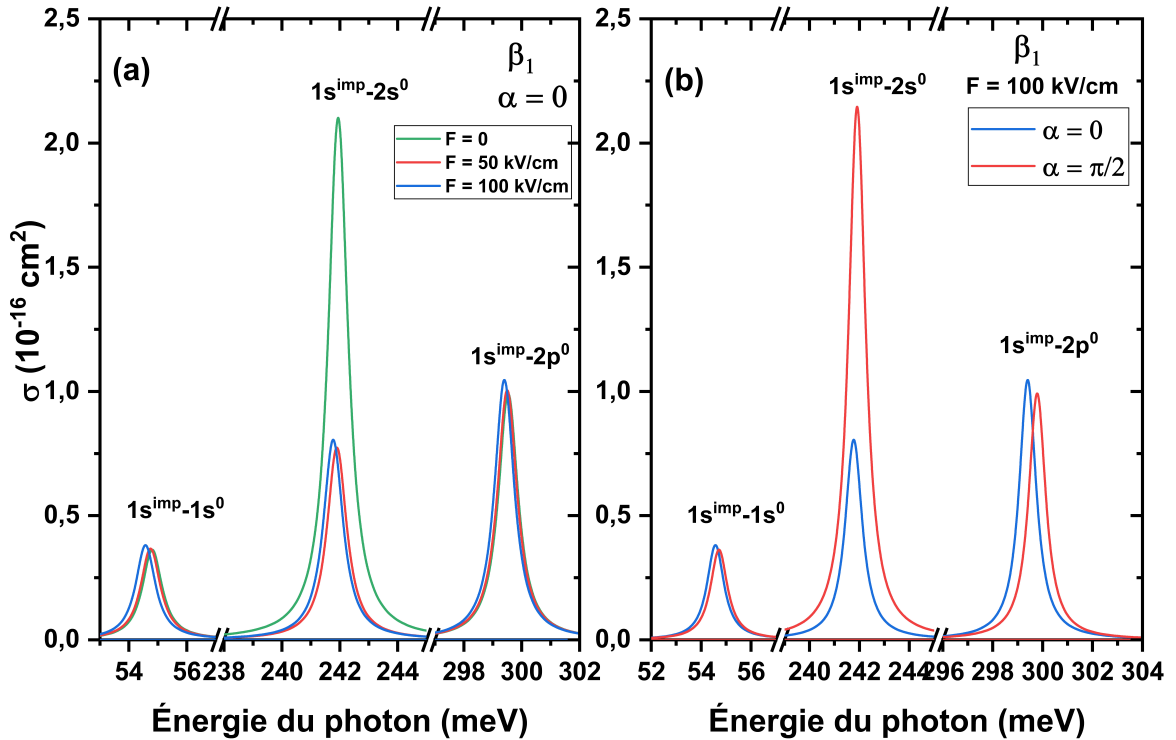


FIGURE 4.7 – SEP des transitions entre l'état fondamental de l'impureté au centre de la BQECC et les trois premiers états électroniques en fonction de l'énergie du photon $\hbar\omega$ pour une forme oblate (β_1) avec trois valeurs du champ électrique (a) et deux valeurs de l'angle α pour $F = 100$ kV/cm (b).

Enfin, nous présentons dans la Fig. (4.8), la variation de la SEP pour les transitions entre

l'état fondamental de l'impureté et trois premiers états électroniques en fonction de l'énergie du photon incident $\hbar\omega$ pour la forme prolata (β_2) avec trois valeurs de F (Fig. (4.8)-a) et deux valeurs de l'angle α pour de $F = 100 \text{ kV/cm}$ (Fig. (4.8)-b).

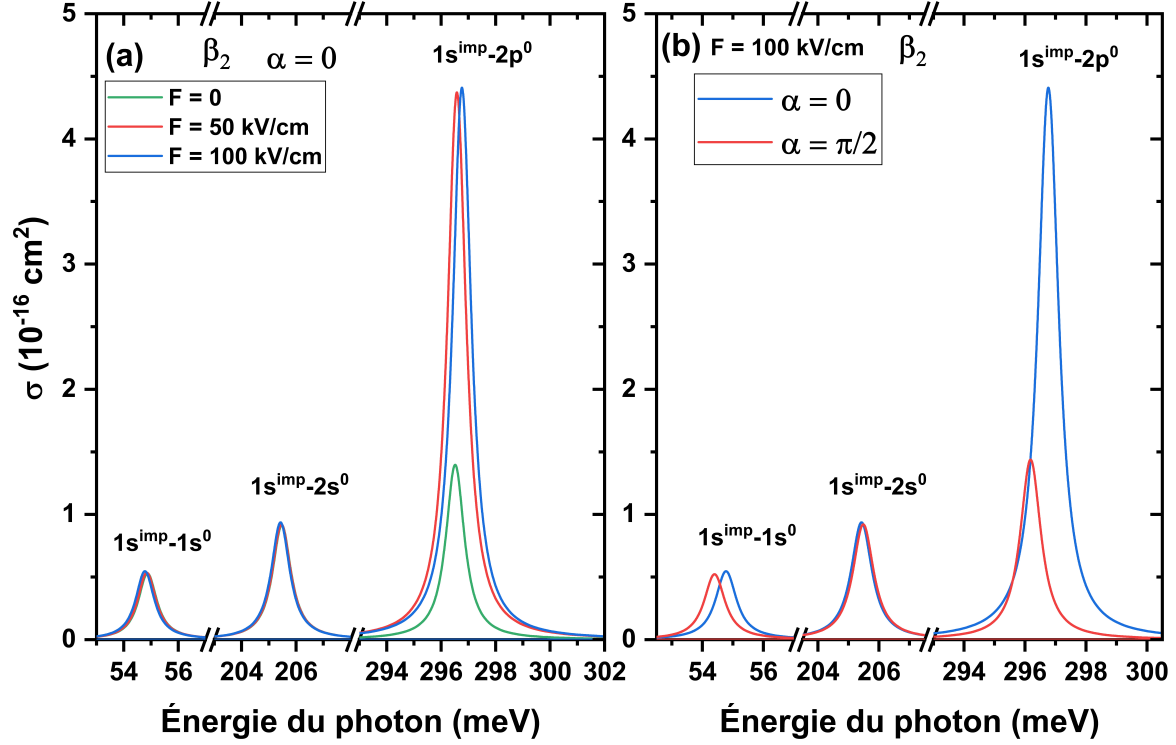


FIGURE 4.8 – SEP des transitions entre l'état fondamental de l'impureté au centre de la BQECC et les trois premiers états électroniques en fonction de l'énergie du photon incidente $\hbar\omega$ pour une forme prolata (β_2) avec trois valeurs du champ électrique (a) et deux valeurs de l'angle α avec $F = 100 \text{ kV/cm}$ (b).

A partir de ces courbes, on peut observer que, nous avons le même comportement de la SEP présentée dans la Fig. (4.7), il y a un décalage vers des énergies plus basses pour la transition $1s^{imp}-1s^0$ et un décalage vers des énergies plus élevées dans le cas de $1s^{imp}-2p^0$ par rapport à $1s^{imp}-2s^0$. Examinons l'effet du champ électrique sur la SEP présentée dans la Fig. (4.8)-a, on peut voir que la transition $1s^{imp}-2p^0$ est significativement affectée par le champ électrique, par rapport au comportement des autres transitions, qui ne sont presque pas affectées, et pendant ce temps, l'intensité de pic de la SEP dans le cas de $\alpha = 0$ est d'environ $4.5 \cdot 10^{-16} \text{ cm}^2$ pour cette transition. En revanche, avec une valeur fixe de F , les variations de la SEP associées à la transition $1s^{imp}-2p^0$ présentent une amplitude significative dans le cas où $\alpha = 0$ par rapport au cas $\alpha = \frac{\pi}{2}$. La raison de la modification du SEP sous l'effet du champ électrique est présentée et discutée précédemment dans la Fig. (4.7), cette modification est liée au changement de la force de l'oscillateur induit par le champ électrique.

En comparant les résultats de la Fig. (4.7) avec ceux de la Fig. (4.8), nous concluons que la SEP présente une meilleure magnitude dans le cas de la forme prolata de la BQECC. Nos conclusions sont en bonne concordance avec celles citées dans [39, 40], lorsque les auteurs ont examiné l'effet du champ électrique sur la SEP d'une l'impureté confinée dans des BQs multiples de forme cylindriques elliptiques avec un champ électrique non-axial, ils ont conclu que la forme prolata est favorisée par rapport à la forme oblate pour modifier les propriétés électroniques et optiques.

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié la SEP de l'impureté hydorgénique confinée dans une BQECC GaAs/AlGaAs en utilisant la MEF dans le cadre de l'AME. L'énergie de liaison E_b^n , la force de l'oscillateur P_{if} et la SEP liées aux transitions entre les trois états électroniques (l'état fondamental $1s^0$ + les deux états excités les plus bas $2s^0$ et $2p^0$) et l'état fondamental d'une impureté hydrogénoïde confinée au centre du milieu cœur de la structure, sont discutés et évalués avec le degré d'ellipticité β , variation du champ électrique et son angle d'ajusement α . Nos résultats ont révélé que la SEP, la force de l'oscillateur et la DDP sont affectés par l'intensité du champ électrique, l'angle α ainsi que la forme des BQs. Avec un choix approprié de la direction α et F, nos résultats numériques montrent que la forme prolata est préférable pour améliorer les propriétés optiques et électriques. Les résultats obtenus pourraient aider à la création et à la fabrication de dispositifs photoniques et optoélectroniques centrés sur des BQs prolates à multicouches.

Bibliographie

- [1] G. Liu, Y. Cao, R. Liu, G. Chen, F. Wu, Y. Zheng, Z. Chen, K. Guo, and L. Lu, “Terahertz laser field manipulation on the electronic and nonlinear optical properties of laterally-coupled quantum well wires,” *Optics Express*, vol. 30, p. 5200, 2 (2022).
- [2] Y. S. Park, J. Roh, B. T. Diroll, R. D. Schaller, and V. I. Klimov, “Colloidal quantum dot lasers,” *Nature Reviews Materials*, vol. 6, pp. 382–401, 5 (2021).
- [3] L. Hu, Q. Zhao, S. Huang, J. Zheng, X. Guan, R. Patterson, J. Kim, L. Shi, C. H. Lin, Q. Lei, D. Chu, W. Tao, S. Cheong, R. D. Tilley, A. W. Ho-Baillie, J. M. Luther, J. Yuan, and T. Wu, “Flexible and efficient perovskite quantum dot solar cells via hybrid interfacial architecture,” *Nature Communications*, vol. 12, 12 (2021).
- [4] R. Uppu, L. Midolo, X. Zhou, J. Carolan, and P. Lodahl, “Quantum-dot-based deterministic photon–emitter interfaces for scalable photonic quantum technology,” *Nature Nanotechnology*, vol. 16, pp. 1308–1317, 12 (2021).
- [5] Y. Zhang, A. Malekjahani, B. N. Udugama, P. Kadhiresan, H. Chen, M. Osborne, M. Franz, M. Kucera, S. Plenderleith, L. Yip, G. D. Bader, V. Tran, J. B. Gubbay, A. McGeer, S. Mubareka, and W. C. W. Chan, “Surveilling and Tracking COVID-19 Patients Using a Portable Quantum Dot Smartphone Device,” *Nano Letters*, vol. 21, pp. 5209–5216, 6 (2021).
- [6] Y. Cheng, H. Wan, T. Liang, C. Liu, M. Wu, H. Hong, K. Liu, and H. Shen, “Continuously Graded Quantum Dots : Synthesis, Applications in Quantum Dot Light-Emitting Diodes, and Perspectives,” *The Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 12, pp. 5967–5978, 6 (2021).
- [7] G. Bastard, “Hydrogenic impurity states in a quantum well : A simple model,” *Physical Review B*, vol. 24, pp. 4714–4722, (1981).
- [8] J.-L. Zhu and X. Chen, “Spectrum and binding of an off-center donor in a spherical quantum dot,” *Physical Review B*, vol. 50, pp. 4497–4502, 8 (1994). [Online]. Available : <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.50.4497>

- [9] V. A. Holovatsky, O. M. Makhanets, and O. M. Voitsekhivska, "Oscillator strengths of electron quantum transitions in spherical nano-systems with donor impurity in the center," *Physica E : Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 41, pp. 1522–1526, 8 (2009).
- [10] L. Shi and Z. W. Yan, "Stark shift and photoionization cross section of on-center and off-center donor impurity in a core/shell ellipsoidal quantum dot," *Physica E : Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 98, pp. 111–117, (2018). [Online]. Available : <https://doi.org/10.1016/j.physe.2017.12.034>
- [11] H. Ham, C. J. Lee, and H. N. Spector, "Photoionization cross section of hydrogenic impurities in cylindrical quantum wires : Infinite well model," *Journal of Applied Physics*, vol. 96, pp. 335–339, 7 (2004).
- [12] E. Iqraoun, A. Sali, A. Rezzouk, E. Feddi, F. Dujardin, M. E. Mora-Ramos, and C. A. Duque, "Donor impurity-related photoionization cross section in GaAs cone-like quantum dots under applied electric field," *Philosophical Magazine*, vol. 97, pp. 1445–1463, (2017). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1080/14786435.2017.1302613>
- [13] M. G. Barseghyan, A. A. Kirakosyan, and C. A. Duque, "Donor-impurity related binding energy and photoinization cross-section in quantum dots : Electric and magnetic fields and hydrostatic pressure effects," *European Physical Journal B*, vol. 72, pp. 521–529, (2009).
- [14] M. G. Barseghyan, M. E. Mora-Ramos, and C. A. Duque, "Hydrostatic pressure, impurity position and electric and magnetic field effects on the binding energy and photoionization cross section of a hydrogenic donor impurity in an InAs Pöschl-Teller quantum ring," *European Physical Journal B*, vol. 84, pp. 265–271, 11 (2011).
- [15] C. M. Duque, M. G. Barseghyan, and C. A. Duque, "Hydrogenic impurity binding energy in vertically coupled $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ quantum-dots under hydrostatic pressure and applied electric field," *Physica B : Condensed Matter*, vol. 404, pp. 5177–5180, 12 (2009).

- [16] A. Sali, H. Satori, M. Fliyou, and H. Loumrhari, "The photoionization cross-section of impurities in quantum dots," *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, vol. 232, pp. 209–219, (2002).
- [17] A. Sali, M. Fliyou, and H. Loumrhari, "Photoionization of shallow donor impurities in finite-barrier quantum-well wires," *Physica B*, vol. 233, pp. 196–200, (1997).
- [18] A. Sali, M. Fliyou, H. Satori, and H. Loumrhari, "Photoionization of impurities in quantum-well wires," *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, vol. 211, pp. 661–670, (1999).
- [19] A. Sali and H. Satori, "The combined effect of pressure and temperature on the impurity binding energy in a cubic quantum dot using the FEM simulation," *Superlattices and Microstructures*, vol. 69, pp. 38–52, (2014). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.spmi.2014.01.011>
- [20] H. Satori and A. Sali, "The finite element simulation for the shallow impurity in quantum dots," *Physica E : Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 48, pp. 171–175, (2013). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2012.12.010>
- [21] E. C. Niculescu and M. Cristea, "Impurity states and photoionization cross section in CdSe/ZnS core-shell nanodots with dielectric confinement," *Journal of Luminescence*, vol. 135, pp. 120–127, (2013).
- [22] N. Zeiri, A. Naifar, S. A.-B. Nasrallah, and M. Said, "Third nonlinear optical susceptibility of CdS/ZnS core-shell spherical quantum dots for optoelectronic devices," *Optik*, vol. 176, pp. 162–167, 1 (2019).
- [23] S. Hértilli, N. Yahyaoui, N. Zeiri, S. Saadaoui, and M. Said, "Energy levels and nonlinear optical properties of spheroid-shaped CdTe/ZnTe core/shell quantum dot," *Optics and Laser Technology*, vol. 155, p. 108425, 11 (2022). [Online]. Available : <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0030399222005825>
- [24] D. A. Baghdasaryan, E. M. Kazaryan, and H. A. Sarkisyan, "Photoionization and electrostatic multipoles properties of spherical core/shell/shell quantum nanolayer

- with off-center impurity,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 104, pp. 69–77, (2017). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.spmi.2017.02.017>
- [25] O. Mommadi, A. E. Moussaouy, M. E. Hadi, M. Chnafi, Y. M. Meziani, and C. A. Duque, “Stark shift and exciton binding energy in parabolic quantum dots : hydrostatic pressure, temperature, and electric field effects,” *Philosophical Magazine*, vol. 101, no. 6, pp. 753–775, (2021). [Online]. Available : <https://doi.org/10.1080/14786435.2020.1862430>
- [26] L. Aderras, A. Baha, E. Feddi, F. Dujardin, and C. Duque, “Stark-shift of impurity fundamental state in a lens shaped quantum dot,” *Physica E : Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 89, pp. 119–123, (2017). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2017.02.012>
- [27] H. E. Ghazi and A. J. Peter, “Photo-ionization cross-section of donor-related in (In,Ga)N/GaN core/shell under hydrostatic pressure and electric field effects,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 104, pp. 222–231, (2017). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.spmi.2017.02.013>
- [28] L. Shi and Z. W. Yan, “Exciton bound to an ionized donor impurity in GaAsGa_{1-x}Al_xAs ellipsoidal finite-potential quantum dots under hydrostatic pressure, volume = 151, year = (2011),” *Solid State Communications*, pp. 1907–1911, 12.
- [29] M. Cristea, “Simultaneous effects of electric field, shallow donor impurity and geometric shape on the electronic states in ellipsoidal ZnS/CdSe core-shell quantum dots,” *Physica E : Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 103, pp. 300–306, 9 (2018).
- [30] “COMSOL Multiphysics, v. 5.4. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.” (1998). [Online]. Available : www.comsol.com/blogs
- [31] R. Arraoui, A. Sali, A. Ed-Dahmouny, M. Jaouane, and A. Fakkahi, “Polaronic mass and non-parabolicity effects on the photoionization cross section of an impurity in a double quantum dot,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 159, p. 107049, 11 (2021).

- [32] M. Jaouane, A. Sali, A. Fakkahi, R. Arraoui, A. Ed-Dahmouny, and F. Ungan, “Photoionization cross section of donor single dopant in multilayer quantum dots under pressure and temperature effects,” *Physica E : Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 114, p. 115450, (2022). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2022.115450>
- [33] A. Fakkahi, A. Sali, M. Jaouane, R. Arraoui, and A. Ed-Dahmouny, “Study of photoionization cross section and binding energy of shallow donor impurity in multilayered spherical quantum dot,” *Physica E : Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 143, 9 (2022).
- [34] A. Ed-Dahmouny, A. Sali, N. Es-Sbai, R. Arraoui, M. Jaouane, A. Fakkahi, K. El-Bakkari, and C. A. Duque, “Combined effects of hydrostatic pressure and electric field on the donor binding energy, polarizability, and photoionization cross-section in double GaAs/GaAlAs quantum dots,” *The European Physical Journal B*, vol. 95, p. 136, 8 (2022). [Online]. Available : <https://link.springer.com/10.1140/epjb/s10051-022-00400-2>
- [35] M. Şahin, “Photoionization cross section and intersublevel transitions in a one- and two-electron spherical quantum dot with a hydrogenic impurity,” *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 77, pp. 1–12, (2008).
- [36] M. Cristea, A. Radu, and E. C. Niculescu, “Electric field effect on the third-order nonlinear optical susceptibility in inverted core-shell nanodots with dielectric confinement,” *Journal of Luminescence*, vol. 143, pp. 592–599, (2013).
- [37] S. M’zerd, M. E. Haouari, M. Aghoutane, M. El-Yadri, E. Feddi, F. Dujardin, I. Zorkani, A. Jorio, M. Sadoqi, and G. Long, “Electric field effect on the photoionization cross section of a single dopant in a strained AlAs/GaAs spherical core/shell quantum dot,” *Journal of Applied Physics*, vol. 124, (2018).
- [38] D. B. Hayrapetyan, G. L. Ohanyan, D. A. Baghdasaryan, H. A. Sarkisyan, S. Baskoutas, and E. M. Kazaryan, “Binding energy and photoionization cross-section of hydrogen-like donor impurity in strongly oblate ellipsoidal quantum dot,” *Physica E : Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 95, pp. 27–31, (2018). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2017.09.006>

- [39] L. Shi and Z. W. Yan, “Electric field and shape effect on the linear and nonlinear optical properties of multi-shell ellipsoidal quantum dots,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 94, pp. 204–214, (2016). [Online]. Available : <http://dx.doi.org/10.1016/j.spmi.2016.04.022>
- [40] L. Shi, Z. W. Yan, and M. W. Meng, “Binding energy and photoionization cross section of hydrogenic impurities in elliptic cylindrical core/shell quantum dots under a non-axial electric field,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 150, 2 (2021).

CONCLUSION GÉNÉRALE

En conclusion, les propriétés optoélectroniques des boîtes quantiques couplées à base de GaAs (boîtes quantiques doubles ou boîtes de type cœur/coquille) ont été étudiées dans cette thèse, ce qui a permis de comprendre leur comportement et leurs applications potentielles en optoélectronique.

Après une brève introduction, nous avons présenté dans le premier chapitre un aperçu de base des nanostructures, y compris leurs types, leurs techniques d'élaboration, leurs domaines d'application et les méthodes numériques employées dans les procédures de calcul.

Grâce à la modélisation théorique, nous avons démontré dans le deuxième chapitre que la pression uniaxiale et la température ont des effets significatifs sur les propriétés optiques d'une impureté donneur confinée dans des boîtes quantiques doubles GaAs/ $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$. L'étude a révélé que l'énergie de liaison de l'impureté diminue avec l'augmentation de la température tandis qu'elle augmente avec l'augmentation de la pression uniaxiale. Alors que les trois termes des coefficients optiques, linéaire, non linéaire du troisième ordre et totale présentent un comportement non monotone en fonction de la pression et de la température. L'étude a également montré que les changements d'indice de réfraction augmentent avec la pression et la température. Les résultats suggèrent que les propriétés optiques des boîtes quantiques peuvent être ajustées en contrôlant les conditions externes telles que la pression et la température, ce qui pourrait être utile pour développer des dispositifs optoélectroniques de haute performance basés sur les boîtes quantiques formés en alliage GaAs.

Dans le troisième chapitre, nous avons étudié l'impact de la pression hydrostatique et du champ électrique sur l'énergie de liaison, la polarisabilité et la section efficace de photoionisation d'une impureté donneur dans un système double boîte quantique GaAs/ $\text{Al}_\eta\text{Ga}_{1-\eta}\text{As}$, en tenant compte de l'effet de la position d'impureté. Nous avons vu que lorsque la pression hydrostatique appliquée augmente, l'intensité de la section efficace de photoionisation pour une impureté localisée au centre de la boîte quantique augmente et décale vers les hautes énergies. Ce résultat est cohérent avec la façon dont l'énergie de liaison change lorsque la pression augmente dans ce système. Le champ électrique affecte les pics de la

section efficace de photoionisation à l'inverse de la pression hydrostatique, avec un décalage vers le rouge lorsque l'intensité du champ électrique augmente. Au fur et à mesure que la pression hydrostatique augmente, la polarisabilité à l'intérieur de la boîte augmente lentement. En outre, en fonction du champ électrique, une impureté proche de la limite de la barrière subit des changements abrupts de sa polarisabilité.

Le quatrième chapitre est consacré à l'étude de l'effet du champ électrique spatial et des paramètres géométriques sur l'énergie de liaison, le décalage Stark, la force de l'oscillateur et la section efficace de photoionisation d'une impureté confinée dans une boîte quantique GaAs/ Al_ηGa_{1-η}As ellipsoïdale de type cœur/coquille. Les structures ellipsoïdales oblates et prolates ont été prises en considération, le degré d'éllipticité servant de variable intrigante. En outre, nous nous sommes intéressés aux transitions entre l'un des états de la sous-bande de conduction ($1s^0$, $2s^0$ ou $2p^0$) et l'état fondamental de l'impureté donneur ($1s^{imp}$). Nous avons conclu que le maximum d'énergie de liaison situé à $F = 0$ kV/cm de l'état fondamental $1s$ pour la forme prolate est légèrement supérieur à celui de la forme oblate. Au fur et à mesure que $|F|$ augmente, l'énergie de liaison diminue depuis le maximum jusqu'à une valeur minimale correspondant à $F = \pm 200$ kV/cm. On constate aussi, que E_b^{2p} a un comportement opposé à celui de E_b^{1s} et E_b^{2s} est modifié avec la variation de l'angle et le changement de la forme des boîtes quantiques ellipsoïdales. Il a été observé que la dépendance du décalage Stark avec le champ électrique présente un comportement symétrique. Les mêmes comportements pour tous les états sauf l'état $2p$ pour la forme prolate quand $\alpha = 0$ et $2p$ pour la forme oblate quand $\alpha = \pi/2$. Nous avons montré que, pour chaque transition, la force d'oscillateur est fortement liée à la forme de la structure ainsi qu'à l'angle et à l'intensité du champ électrique. Nous avons également constaté aussi, que la section efficace de photoionisation présente une amplitude maximale pour une forme oblate dans le cas de la transition $1s^{imp} - 2s^0$, où le champ électrique est orthogonal à l'axe de révolution de la structure, tandis que le maximum change à la transition $1s^{imp} - 2p^0$ pour la forme prolate dans le cas où le champ électrique est parallèle à l'axe de révolution.

En bref, en termes de propriétés optiques, nos calculs montrent que les boîtes quantiques couplées présentent plusieurs avantages par rapport aux boîtes quantiques simples

mono-couches. À titre d'exemple, les doubles boîtes quantiques ont une section efficace de photoionisation plus importante que les boîtes quantiques simples, ce qui signifie qu'ils peuvent absorber plus de photons avec un domaine d'absorption d'énergie plus élevé. Cela peut être bénéfique pour les applications dans le domaine de la détection et de l'imagerie quantiques, car cela permet une sensibilité et une résolution plus élevées. Aussi, Le comportement des coefficients d'absorption optiques dans une double boîte quantique peut être contrôlé et modifié en accordant les niveaux d'énergie des deux boîtes quantiques avec des champs électriques externes ou bien en changeant les dimensions de la nanostructure. Cela fait des doubles boîtes quantiques une plateforme pour le développement de nouveaux dispositifs optoélectroniques. En effet, les doubles boîtes quantiques à base de GaAs sont apparus comme une technologie prometteuse pour diverses applications dans les domaines de l'informatique quantique, de la communication, de la cryptographie et de la détection. Ils offrent un niveau élevé de contrôle et d'accordabilité, ce qui les rend idéaux pour créer des qubits, des paires de photons intriqués et des capteurs fonctionnant à l'échelle nanométrique. Alors que la recherche dans le domaine de l'informatique quantique et du traitement de l'information quantique continue de progresser, les applications des doubles boîtes quantiques à base de GaAs devraient jouer un rôle de plus en plus important dans l'avancement de ces domaines. De plus, dans le domaine de spintronique, les doubles boîtes quantiques en GaAs peuvent être utilisées comme qubits de spin dans l'informatique quantique basée sur le spin et la spintronique, ainsi que comme capteurs pour détecter les champs magnétiques et électriques et mesurer leurs intensités dans la gamme des hautes fréquences.

LISTE DES PUBLICATIONS

- **A. Ed-Dahmouny**, N. Zeiri, R. Arraoui, N. Es-Sbai, M. Jaouane, A. Fakkahi, A. Sali, K. El-Bakkari and C.A. Duque, *The third-order nonlinear optical susceptibility in an ellipsoidal core-shell quantum dot embedded in various dielectric surrounding matrices*, Physica E : Low-dimensional Systems and Nanostructures **153**, 115784 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.physe.2023.115784>
- **A. Ed-Dahmouny**, N. Zeiri, A. Fakkahi, R. Arraoui, M. Jaouane, A. Sali, N. Es-Sbai, K. El-Bakkari and C.A. Duque, *Impurity photo-ionization cross section and stark shift of ground and two low-lying excited electron-states in a core/shell ellipsoidal quantum dot*, Chemical Physics Letters **812**, 140251 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2022.140251>
- **A. Ed-Dahmouny**, A. Sali, N. Es-Sbai, R. Arraoui and C.A. Duque, *The impact of hydrostatic pressure and temperature on the binding energy, linear, third-order nonlinear, and total optical absorption coefficients and refractive index changes of a hydrogenic donor impurity confined in GaAs–Ga_{1-x}Al_xAs double quantum dots*, The European Physical Journal Plus **137**, 784 (2022). <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-022-03002-0>
- **A. Ed-Dahmouny**, A. Sali, N. Es-Sbai, R. Arraoui, M. Jaouane, A. Fakkahi, K. El-Bakkari and C. A. Duque, *Combined effects of hydrostatic pressure and electric field on the donor binding energy, polarizability and photoionization cross-section in double GaAs–GaAlAs quantum dots*, The European Physical Journal B **95**, 136 (2022). <https://doi.org/10.1140/epjb/s10051-022-00400-2>
- R. Arraoui, **A. Ed-Dahmouny**, A. Sali, K. El-Bakkari, M. Jaouane and A. Fakkahi, *Tridimensional electric field effect on diamagnetic susceptibility and polarisability of a donor impurity in a double quantum dot*, Philosophical Magazine, 1-16 (2023). <https://doi.org/10.1080/14786435.2023.2180157>
- R. Arraoui, A. Sali, **A. Ed-Dahmouny**, K. El-Bakkari, M. Jaouane and A. Fakkahi, *The spatial electric field effect on the impurity binding energy and self-polarization in a double quantum dot*, The European Physical Journal Plus **137**, 979 (2022). <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-022-03193-6>
- R. Arraoui, A. Sali, **A. Ed-Dahmouny**, M. Jaouane and A. Fakkahi, *Polaronic mass*

- and non-parabolicity effects on the photoionization cross section of an impurity in a double quantum dot*, Superlattice Microst **159**, 107049 (2021). <https://doi.org/10.1016/J.SPML.2021.107049>
- M. Jaouane, A. Fakkahi, **A. Ed-Dahmouny**, K. El-Bakkari, A. Turker Tuzemen, R. Arraoui, A. Sali and F. Ungan, *Modeling and simulation of the influence of quantum dots density on solar cell properties*, The European Physical Journal Plus **138**, 148 (2023). <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-023-03736-5>
 - R. Arraoui, K. El-Bakkari, K. Limame, **A. Ed-Dahmouny**, M. Jaouane, A. Fakkahi, H. Azmi and A. Sali, *Pressure and temperature influences on the nonlinear optical rectification of an impurity in a symmetrical double quantum dot*, The European Physical Journal Plus **138**, 292 (2023). <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-023-03892-8>
 - K. El-Bakkari, M. Jaouane, A. Fakkahi, **A. Ed-Dahmouny**, R. Arraoui, H. Azmi, A. Sali and F. Ungan, *Hydrogenic donor-related binding energy and diamagnetic susceptibility in multilayer cylindrical quantum dots under hydrostatic pressure*, Applied Physics A **129**, 557 (2023). <https://doi.org/10.1007/s00339-023-06834-4>
 - A. Fakkahi, M. Kirak, M. Jaouane, A. Sali, **A. Ed-Dahmouny**, K. El-Bakkari and R. Arraoui, *The nonlinear optical rectification and second harmonic generation of a single electron confined in a multilayer spherical quantum dot*. Opt Quant Electron **55**, 476 (2023). <https://doi.org/10.1007/s11082-023-04730-y>
 - M. Jaouane, A. Sali, A. Fakkahi, R. Arraoui, **A. Ed-Dahmouny** and F. Ungan, *Photoionization cross section of donor single dopant in multilayer quantum dots under pressure and temperature effects*, Physica E : Low-dimensional Systems and Nanostructures **144**, 115450 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.physe.2022.115450>
 - A. Fakkahi, A. Sali, M. Jaouane, R. Arraoui and **A. Ed-Dahmouny**, *Investigation of the nonlinear optical rectification coefficient in a multilayered spherical quantum dot*, Optical Materials **132**, 112752 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2022.112752>
 - A. Fakkahi, A. Sali, M. Jaouane, R. Arraoui, **A. Ed-Dahmouny**, *Study of photoionization cross section and binding energy of shallow donor impurity in multilayered spherical quantum dot*, Physica E : Low-dimensional Systems and Nanostructures **143**, 115351 (pp7) (2022). <https://doi.org/10.1016/j.physe.2022.115351>

- A. Fakkahi, M. Jaouane, K. Limame, A. Sali, M. Kirak, R. Arraoui, **A. Ed-Dahmouny**, K. El-bakkari and H. Azmi, *The impact of the electric field on the photoionization cross section, polarizability, and donor impurity binding energy in multilayered spherical quantum dot*, Applied Physics A **129**, 188 (2023). <https://doi.org/10.1007/s00339-023-06472-w>
- A. Fakkahi, H. Dakhlaoui, A. Sali, M. Jaouane, R. Arraoui, K. El-Bekkari and **A. Ed-Dahmouny**, *Pressure, temperature and electric field effects on the photoionization cross section in a multilayered spherical quantum dot*, The European Physical Journal Plus **137**, 1244 (2022). <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-022-03462-4>
- K. El-bakkari, E. Igraoun, M. Jaouane, R. Arraoui, A. Sali, A. Fakkahi, **A. Ed-Dahmouny** and H. Azmi, *Magnetic field effect on the linear and nonlinear refractive index and optical absorption of a donor in a GaAs quantum ring*, Physica Scripta **98**, 085102 (2023). <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1402-4896/ace220>

LISTE DES COMMUNICATIONS

- **A. Ed-Dahmouny**, A. Sali, A. Ezzarfi, R. Arraoui, M. Jaouane, A. Fakkahi, N. Es-Sbai, M. Ouazzani Jamil, *Binding energy and optical absorption coefficient of shallow donor impurity in GaAs/GaAlAs rectangular Double Quantum Dot*, International Conference on Ceramic Glass and Soft Matter (ICCGS 2020), 11-12 November 2020, University Sidi Mohamed Ben Abdellah and Moroccan Association of Materials for Alternative Energies (AMMEA).
- **A. Ed-Dahmouny**, The international Conference on Digital Technologies and Applications (ICDTA'21), Webinar 3 : Renewables Energy & Industry 4.0, 29-30 January 2021, Fez, Morocco.
- **A. Ed-Dahmouny**, *Effets des perturbations extérieurs sur les propriétés optiques et électroniques pour les doubles boîtes quantiques DQDs*, 6ème édition de la journée des doctorants, 20 Février 2021, Laboratoire SIGER, FST USMBA.
- **A. Ed-Dahmouny**, N. Es-Sbai, A. Sali, R. Arraoui, M. Jaouane, A. Fakkahi and C.A. Duque, *Linear and nonlinear optical properties of donor inside a core/shell spherical nanodot : Role of dielectric mismatch and optoelectronic applications*, Première Édition des Jeunes chercheurs de l'USMBA, 21 Décembre 2022, Centre des Conférences de l'USMBA.

