



UNIVERSITE SULTAN MOULAY SLIMANE
Faculté des Sciences et Techniques
Béni-Mellal



Centre d'Études Doctorales : Sciences et Techniques

Formation Doctorale : **Mathématiques et Physique Appliquée**

THÈSE

Présentée par

CHRAFIH YOUNES

Pour l'obtention du grade de

DOCTEUR

Spécialité : **PHYSIQUE**

Option : **Physique des Matériaux.**

ETUDE DE L'EFFET DES EXCITATIONS EXTERIEURES SUR LES PROPRIETES OPTIQUES ET ELECTRONIQUES DANS LES BOITES QUANTIQUES SEMI-CONDUCTRICES DE TYPE CŒUR /COQUILLE

Soutenu le Samedi 23/11/2019 à 10h devant la commission d'examen:

| | | |
|----------------------|--|--------------|
| ZORKANI | Professeur, Université Sidi Mohamed Ben Abdellah, FSDM. Fès, Maroc | Président |
| GRIMECH HASSAN | Professeur, Université Sultan Moulay Slimane, F.S.T. Béni-Mellal, Maroc | Rapporteur |
| ZAZOUI MIMOUN | Professeur, Université Hassan 2, F.S.T. Mohammedia, Maroc | Rapporteur |
| KEROUM LIMAME | Professeur, Centre Régional des Métiers de l'Éducation et de la Formation, CRMEF. Fès, Maroc | Rapporteur |
| ELGHAZI HADDOU | Professeur, Ecole National d'Arts et Métiers, ENSAM. Casablanca Maroc | Examineur |
| RAHMANI KHALID | Professeur, Université Sultan Moulay Slimane, F.P. Béni-Mellal, Maroc | Encadrant |
| BOULGHALLAT MOSTAPHA | Professeur, Université Sultan Moulay Slimane, F.S.T. Béni-Mellal, Maroc | Co-Encadrant |

RÉSUMÉ

Cette thèse est consacrée à l'étude des propriétés optoélectroniques des boîtes quantiques de type cœur/coquille sous l'effet des différentes perturbations extérieures à savoir : le champ magnétique, le champ électrique, la pression hydrostatique et la température. Les calculs ont été faits dans le cadre de l'approximation de la masse effective et à l'aide de l'approche variationnelle. Nous avons commencé par l'étude de l'effet du champ magnétique sur une impureté confinée dans une boîte quantique de forme cubique, où la barrière de potentiel est finie. Ensuite, nous avons étudié l'effet de la pression hydrostatique et du champ électrique, en présence de l'interaction électron-phonon (e-p), sur l'énergie de liaison, la polarisabilité, et la section efficace de photoionisation (PCS) d'une impureté localisée dans une boîte quantique cubique inhomogène de type cœur/coquille à base de GaAs/GaAlAs. Puis nous avons mené une étude comparative sur l'effet de la forme géométrique et du champ électrique sur la polarisabilité et la susceptibilité diamagnétique dans les boîtes quantiques inhomogènes.

Mots clés : Boîtes quantiques, impureté, énergie de liaison, polarisabilité, susceptibilité diamagnétique, section efficace de photoionisation, champ magnétique, pression hydrostatique et température.

N°d' ordre :229/2019

Etude de l' effet des excitations extérieures sur les propriétés optiques et electroniques dans les boîtes quantiques semi-conductrices de type cœur/coquille

CHRAFIH YOUNES



UNIVERSITE SULTAN MOULAY SLIMANE
Faculté des Sciences et Techniques
Béni-Mellal



Centre d'Études Doctorales « Sciences et Techniques »
Formation doctorale « Mathématiques et Physique Appliquée »

THÈSE

Présentée par

Younes CHRAFIH

En vue de l'obtention du Doctorat National

Mention : Physique

Option : Matériaux

Spécialité: Physique des Matériaux

ETUDE DE L'EFFET DES EXCITATIONS EXTERIEURES SUR LES PROPRIETES OPTIQUES ET ELECTRONIQUES DANS LES BOITES QUANTIQUES SEMI-CONDUCTRICES DE TYPE CŒUR /COQUILLE

Soutenue publiquement le 23 / 11 / 2019 devant le jury composé de :

| | | |
|--------------------|-----------------------------|--|
| Président | : Pr. Izeddine ZORKANI | Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès |
| Rapporteurs | : Pr. Mimoun ZAZOUI | Faculté des Sciences et Techniques, Mohammedia |
| | : Pr. Hassan GRIMECH | Faculté des Sciences et Techniques, Béni-Mellal |
| | : Pr. Karoum LIMAME | Centre Régional des Métiers de l'Éducation et de la Formation, Fès |
| Examineurs | : Pr. Haddou EL GHAZI | École Nationale d'Arts et Métiers, Casablanca |
| Directeur de thèse | : Pr. Khalid RAHMANI | Faculté Polydisciplinaire, Béni-Mellal |
| Co-encadrant | : Pr. Moustapha BOULGHALLAT | Faculté des Sciences et Techniques, Béni-Mellal |

Remerciements

*Ce travail de thèse a été effectué au sein de l'équipe de recherche en physique théorique et matériaux (ERPTM) de la Faculté Polydisciplinaire de Béni-Mellal en étroite collaboration avec le "Group of Nanomaterials and Renewable Energies" du laboratoire de physique à l'état solide à Faculté des Sciences DHAR EL MAHRAZ de Fès. Je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de thèse le Professeur **KHALID RAHMANI** de m'avoir accueilli au sein de son équipe et de mettre à ma disposition ses ressources matérielles et financières, puis pour son aide, ses conseils ainsi que la gentillesse et la patience qu'il a manifesté à mon égard durant cette thèse. Je le prie de trouver ici l'expression de ma très profonde gratitude. Mes remerciements vont également à mon co-directeur de thèse le Professeur **BOULGHALLAT Moustapha** de la Faculté des Sciences et Techniques de Béni Mellal de m'avoir confié des thèmes scientifiques d'actualité. Je tiens à le remercier de m'avoir guidé, encouragé, conseillé et surtout de me faire bénéficier à la fois de ses compétences scientifiques et de sa grande disponibilité. Je lui exprime toute ma reconnaissance pour le grand intérêt qu'il a toujours manifesté pour mes recherches. Je voudrais remercier chaleureusement le Professeur **Izeddine ZORKANI** de l'Université Sidi Mohamed Ben Abdellah de Fès pour sa disponibilité et les longues discussions qu'on a échangé le long de l'élaboration de ces résultats. Je tiens à le remercier de m'avoir guidé, encouragé, conseillé et surtout de m'avoir fait bénéficier à la fois de ses compétences scientifiques et de sa grande disponibilité. Je tiens à remercier également le Prof. **M. Khenfouch**, de l'Université UNISA (Afrique du Sud) pour son aide qu'il m'a apporté en me faisant profiter de ses compétences scientifiques et ses longues expériences. On était en action mutuelle, ses remarques et suggestions m'étaient d'un grand aide lors des interprétations des résultats et la mise en forme des publications.*

Je remercie ensuite l'ensemble des membres du jury, qui m'ont fait l'honneur de bien vouloir étudier avec attention mon travail.

Mes remerciements s'imposent également pour tous les membres de l'équipe ERPTM de Béni Mellal et les membres du « Group of Nanomaterials and Renewable Energies » Faculté des Sciences Dhar El Mehraz de Fès pour leurs soutiens et les contributions que chacun m'a apporté. L'esprit d'équipe entre doctorants a favorisé considérablement les échanges constructifs. Pour leurs encouragements et leur assistance aussi bien matérielle que morale qui m'ont permis de faire cette thèse dans de bonnes conditions, je remercie chaleureusement mes très chers parents, mes chères sœurs, mon frère ainsi que toute ma famille et tous mes amis.

Liste des publications

Y Chrafi, K Rahmani, M Khenfouch, S Janati Edrissi, I Zorkani, M Adar and M Boulghallat, “The hydrostatic pressure and magnetic field effect on the diamagnetic susceptibility of a shallow donor in GaAs/AlAs Quantum Box ”, *IOP Conf. Series: Journal of Physics*. **1292** 012001 (2019).

Younes Chrafi, Lhoucine Moudou, Khalid Rahmani, Izeddine Zorkani, Mohammed Khenfouch, Sanae Janati Edrissi, GaAs quantum well in the non-parabolic case : the effect of hydrostatic pressure on the intersubband absorption coefficient and the refractive index, *European. Physical Journal of Applied Physics*. **86**, 20101 (2019).

Y Chrafi, K Rahmani, S Janati Edrissi, S M’zerd, M Khenfouch, I Zorkani, and Y Najih “Temperature effect on the diamagnetic susceptibility of a shallow magneto-donor in GaAs/AlAs Quantum Box ”, *IOP Conf. Series: Journal of Physics*. **1292** 012002 (2019).

S M’zerd, S Janati Edrissi, **Y Chrafi**, K Rahmani, M Khenfouch, I Zorkani, and A Jorio “Shape effects on the diamagnetic susceptibility in inhomogeneous quantum dots ”, *IOP Conf. Series: Journal of Physics*. **1292** 012003 (2019).

S Janati Edrissi, S M’zerd, I Zorkani, K Rahmani, **Y Chrafi**, A Jorio, and M Khenfouch “ CdS/HgS Cylindrical Core/Shell: The simultaneous effect of the hydrostatic pressure and temperature on the diamagnetic susceptibility of hydrogenic donor impurity ”, *IOP Conf. Series: Journal of Physics*. **1292** 012004 (2019).

S Janati Edrissi, I Zorkani, K Rahmani, **Y Chrafi**, A Jorio, and M Khenfouch “ Temperature effect on the binding energy and the diamagnetic susceptibility of a magneto-donor in Cylindrical Quantum Dot (GaAs/GaAlAs) ”, *IOP Conf. Series: Journal of Physics*. **1292** 012005 (2019).

Sanae Janati Edrissi, Safae M’Zerd, Izeddine Zorkani, Khalid Rahmani, **Younes Chrafi**, Anouar Jorio, “Pressure effect on the diamagnetic susceptibility of donor in HgS and GaAs cylindrical quantum dot.” *Journal of Nanophotonic*. **13**(2), 026015 (2019).

Sanae Janati Edrissi, Izeddine Zorkani, Khalid Rahmani, **Younes Chrafi**, A.Mmadi, Anouar Jorio, L.Leonthe, « The effect of hydrostatic pressure on the diamagnetic susceptibility of a magneto-donor in a GaAs cylindrical quantum do » *Optoelectronics and advanced materials*– Rap ID Communications **13**, Iss. 1-2, January-February, p. 111 -115 (2019).

K Rahmani, **Y.Chrafi**, S M'Zred, S Janati, I Zorkani, A Jorio and A Mmadi, « Polarizability and binding energy of a shallow donor in spherical quantum dot-quantum well (QD-QW) » *IOP Conf. Series: Journal of Physics*: **984** 012001 (2018).

L.Moudou, **Y.Chrafi**, K Rahmani, and I Zorkani « Effect of conduction band non-parabolicity on the intersubband transitions in ZnO/Mg_xZn_{1-x}O quantum well heterostructures» *IOP Conf. Series: Journal of Physics*: **984** 012001 (2018).

S M'zred, K Rahmani, S Janati, **Y Chrafi**,I Zorkani and A Jorio . «Stark effect of shallow donor impurities in HgS Inhomogeneous Quantum Dots » *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering* **186** 012015 (2017).

S Janati.Edrissi, S M'Zred, **Y Chrafi**, K Rahmani, I Zorkani, A Mmadi and A Jorio. « Form effect on the Diamagnetic Susceptibility of a magnetodonor in Quantum Dot » *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering* **186** 012017 (2017).

Liste des abréviations et des symboles

E_g : Énergie de la bande interdite

E_b : Énergie de liaison

QB : Boite quantique

QD : Points quantique

IB : Bande intermédiaire

$\psi(\vec{r})$: Fonction d'onde

m_e^* : Masse effective de l'électron

m_h^* : Masse effective du trou

m_p^* : Masse effective du polaron

a^* : Rayon de Bohr effectif

R^* : Rydberg effectif

α : Paramètre variationnel

H : Hamiltonien

χ_{dia} : Susceptibilité diamagnétique

$b-a$: Épaisseur de la coquille

PCS : Section efficace de photoionisation

IQD : Boite quantique inhomogène

HQD : Boite quantique homogène

$V(r)$: Potentiel de confinement

$V_w^e(r_e)$: Potentiel du puit infini

ρ_{eD} : Distance électron-impureté

ε : Constante diélectrique

Liste des figures

Figure 1-1 : Schéma de bandes indiquant la bande de valence, la bande de conduction et la bande interdite.

Figure 1-2 : Dédoublé et peuplement électronique des niveaux d'énergie entre 2 atomes couplés (au centre). Les orbitales sont saturées : cas isolant.

Figure 1-3 : Structure de bande du CdSe massif dans la structure cristalline zinc blende (a) et dans la structure cristalline wurtzite (b). Les valeurs des masses effectives sont tirées de la référence [3], m_0 étant la masse de l'électron libre.

Figure 1-4 : Structure cristalline Zinc-blende (Exemple de l'Arséniure de Gallium (GaAs)).

Figure 1-5 : Evolution de la densité d'états $\rho(E)$ et de la structure des bandes $E(k)$ en fonction de la dimensionnalité du matériau. (a) un semi-conducteur massif (3D), (b) un puits quantique (2D), (c) un fil quantique (1D) et (d) une boîte quantique (0D) (E. Dupuy, 2009).

Figure 1-6 : Les différentes configurations de puits quantiques, (a) : puits quantique de type I, (b) : puits quantique de type II et (c) : puits quantique de type III.

Figure 1-7 : Image en microscopie électronique à balayage d'une assemblée régulière et homogène de nanofils de GaAs.

Figure 1-8 : Diagramme schématique de la particule de type cœur/coquille.

Figure 1-9 : Représentation schématique de différent type des nanostructures Cœur/Coquille de Type I (a), Type I inversé (b) et Type II (c).

Figure 1-10 : Mode de croissance épitaxial : (a) de Frank-van der Merwe, (b) de Volmer-Weber et (c) de Stranski-Krastanov.

Figure 1-11 : Bâti d'épitaxie par jet moléculaire, EJM, ou Molecular Beam Epitaxy, MBE (d'après D.V Morgan et K. Board [21]).

Figure. 1-12 : Schéma du système RHEED et principe de la diffraction de surface.

Figure 1-13 : Cavités destinées aux applications photoniques : (a) : Cavités à cristal photonique contenant une boîte quantique unique, (b) : Micro disque GaAs, image au microscope électronique, et (c) Cavité à cristaux photoniques formée d'un trou manquant dans un cristal photonique Parfait. Le cristal photonique est gravé dans une membrane GaAs de 180 nm d'épaisseur.

Figure 1-14 : Schéma de cellule solaire IBSC de type $p-i-n$ avec des boites quantiques cubique (QDs-IBSC) [24].

Figure 1-15 : Première zone de Brillouin d'un réseau à cubique face centrée. Les directions ΓX et ΓL sont des directions de haute symétrie [100] et [111].

Figure 2-1 : Divers formes schématiques de BQ (a) nanocristal sphérique (b), (c), (d), (e), (f) et (g) BQ épitaxiées respectivement parallélépipédique, demi-sphère, cylindrique, cubique, pyramidale tronquée et conique tronquée. Avec un système de coordonnées cartésiennes ou cylindriques ou sphérique.

Figure 2-2 : Schéma d'un point quantique cubique avec une impureté de donneur située au centre.

Figure 2-3 : Evolution de la polarisabilité en fonction de la fréquence.

Figure 2-4 : L'évolution de la constante diélectrique en fonction de la concentration des donneurs de Si [29].

Figure 2-5 : Variation de l'énergie de liaison d'une impureté donneur confinée dans une boîte quantique cubique sous la pression hydrostatique pour différentes valeurs de la concentration d'aluminium $x=0,15$ et $x=0,3$.

Figure 2-6 : Variation de l'énergie de liaison d'une impureté donneur confinée dans une boîte quantique cubique en fonction de la pression hydrostatique, pour différentes valeurs de la largeurs L ($\frac{a^*}{2}$, a^* et $\frac{3}{2}a^*$).

Figure 2-7 : Variation de la susceptibilité diamagnétique χ_{dia} en fonction de la largeur de la boîte, sous l'effet de la pression hydrostatique.

Figure 2-8 : Variation de la susceptibilité diamagnétique χ_{dia} en fonction du champ magnétique, pour différentes valeurs de la largeur de la boîte.

Figure 2-9 : Susceptibilité diamagnétique en fonction de la longueur de la boîte cubique pour différentes valeurs de la pression hydrostatique $P = 0, 1, 2, 3$ et 4GPa sous l'influence du champ magnétique ($\gamma=2$).

Figure 2-10 : Polarisabilité d'une impureté de type donneur dans une boite quantique cubique en fonction de la largeur L de la boîte quantique, pour différentes valeurs de la pression hydrostatique ($P=0, 1, 2, 3$ et 4GPa).

Figure 2-11 : Polarisabilité d'une impureté de type donneur confinée dans une boite quantique cubique en fonction de l'intensité du champ magnétique γ , pour différentes valeurs de la largeur ($L=3, 4$ et $5a^*$).

Figure 2-12 : Variation de la polarisabilité d'une impureté donneur en fonction de la pression hydrostatique en présence et en l'absence du champ magnétique pour des BQ de différents tailles.

Figure 2-13 : Energie de liaison E_b en fonction de la largeur de la boite L , sous l'effet de la température ($T=0, 150, 300$ et 500K).

Figure 2-14 : Evolution de l'énergie de liaison en fonction de la température pour différentes valeurs de la largeur de la boîte.

Figure 2-15 : Variation de la susceptibilité diamagnétique χ_{dia} en fonction de la largeur L , pour différentes valeurs de température ($T=150,300$ et 500K) avec $x=30\%$.

Figure 2-16 : Variation de la susceptibilité diamagnétique χ_{dia} en fonction de la température, pour différentes valeurs de la boîte quantique ($L=1,2$ et $3a^*$) avec $x=30\%$.

Figure 2-17 : Variation de la polarisabilité en fonction du champ magnétique, pour différentes valeurs de la température ($T=4, 300$ et $500K$).

Figure 2-18 : Variation de la polarisabilité en fonction de la largeur L , à $T=300K$ et en absence du champ magnétique.

Figure 3-1 : Diagramme schématique de la structure d'une boîte quantique inhomogène de forme cubique. Les signes (+) et (-) représentent respectivement le symbole du donneur ionisé et l'électron.

Figure 3-2 : Variation de l'énergie de Liaison d'une impureté donneur localisée au centre $Z_0 = (L_1+L_2)/2$ d'une boîte cubique inhomogène en fonction du rapport L_1/L_2 pour différentes valeurs de $L_2=2,3$ et $5a^*$.

Figure 3-3 : Energie de liaison d'une impureté donneur localisée au centre $Z_0 = (L_1+L_2)/2$ d'une boîte cubique inhomogène en fonction du rapport L_1/L_2 pour différentes valeurs du champ électrique $F=0.6$ et $1.2kV/cm$.

Figure 3-4 : Variation de la Polarisabilité d'une impureté donneur localisée au centre $Z_0 = (L_1+L_2)/2$ d'une boîte cubique inhomogène en fonction du rapport L_1/L_2 pour différentes valeurs de la pression $P=0,3$ et $5Kbar$.

Figure 3-5 : Polarisabilité en fonction du rapport L_1/L_2 pour différentes valeurs de la largeur de la boîte $L_2=2, 3,4$ et $5a^*$.

Figure 3-6 : PCS d'une impureté donneur localisée au centre en fonction de l'énergie du photon incident $\hbar\omega$ pour les deux valeurs de $L_2=1$ et $3a^*$.

Figure 3-7 : Variation de la section de photoionisation en fonction de l'énergie photonique normalisée de l'impureté du donneur placée au centre de la boîte quantique sous l'effet du champ électrique, pour différents valeurs de pression ($P=0, 3, 6GPa$).

Figure 3-8 : Variation de la section efficace (PCS) d'une impureté donneur peu profonde en fonction de l'énergie du photon incident pour différentes valeurs de la position de l'impureté.

Figure 3-9 : PCS d'une impureté donneur localisée au centre en fonction de l'énergie du photon incident $\hbar\omega$ pour les deux valeurs de $L_2=a^*$ et $3a^*$.

Figure 4-1 : Schéma d'une boîte quantique cœur/coquille avec l'ensemble des coordonnées et les dimensions ainsi que la position supposée de l'impureté.

Figure 4-2 : Variations de l'énergie de liaison du donneur E_b en fonction de la position du donneur (r_i/b) pour différentes valeurs du rayon du point $b= 1 a^*, 2 a^*, 3a^*, 4 a^*$ et $6 a^*$.

Figure 4-3 : Polarisabilité d'une d'impureté de type donneur en fonction du rayon b pour différentes valeurs du champ électrique $f = 0,1, f = 0,16, f = 0,18$ et $f = 0,2$.

Figure 4-4 : Polarisabilité une fonction de la position d'impureté r_i/b pour deux valeurs du champ électrique.

Figure 4-5 : Variation de l'énergie de liaison E_b en fonction du rapport (a/b) pour différentes valeurs du rayon extérieur du QDQW et pour différentes valeurs du champ électrique.

Figure 4-6 : Variation de l'énergie de liaison E_b en fonction du rapport a/b pour différentes valeurs du rayon extérieur du QDQW : $b \leq 0.8a^*$ (confinement géométrique fort).

Figure 4-7 : Polarisabilité d'une impureté en fonction du rapport (a/b) pour différentes valeurs des rayons extérieurs b.

Figure 4-8 : Schéma d'un point quantique sphérique avec une impureté donneur excentrée.

Figure 4-9 : Schéma d'un point quantique de type cœur/coquille à géométrie cylindrique.

Figure 4-10 : Structure inhomogène des points quantiques de forme cubique. Les signes (+) et (-) représentent respectivement le symbole du donneur ionisé et de l'électron.

Figure 4-11 : Evolution de l'énergie de liaison E_b d'une impureté donneur située au centre pour différentes formes des points quantiques non homogènes : (a) sphérique, (b) cubique et (c) cylindriques.

Figure 4-12 : Susceptibilité diamagnétique χ_{dia} d'une impureté donneur située au centre pour différentes formes des points quantiques non homogènes : (a) sphérique, (b) cubique et (c) cylindriques.

Figure 4-13 : Susceptibilité diamagnétique pour trois valeurs représentatives du champ magnétique ($\gamma=0, 0.4$ et 0.8) dans les différentes formes des points quantiques non homogènes : (a) sphérique, (b) cubique et (c) cylindriques.

Figure 4-14 : Susceptibilité diamagnétique en fonction de la position de l'impureté pour trois valeurs représentatives du champ magnétique ($\gamma=0, 0.4$ et 0.8) dans les différentes formes géométriques : (a) sphérique et (b) cubique.

Liste des Tableaux

Table 1-1 : Masses effectives d'électrons et de trous et de la bande interdite pour certains matériaux semi-conducteurs courants.

Table 2-1 : Tableau des valeurs du rayon de Bohr effectif et du Rydberg effectif pour quelques semi-conducteurs.

Table 2-2 : Valeurs expérimentales de la polarisabilité des donneurs dans le Si [26] et le Ge [28].

Tableau 2-3 : Variation de la masse effective, de la constante diélectrique, du rayon de Bohr effectif, du Rydberg effectif et de la hauteur de barrière potentielle sous l'effet de la pression hydrostatique.

Tableau 2-4 : Variation de la masse effective, de la constante diélectrique, du rayon de Bohr effectif, du Rydberg effectif et de la hauteur de barrière potentielle sous l'effet de la température.

Tableau 3-1 : Valeurs des paramètres physiques des semi-conducteurs de la famille II-VI et III-V.

Table 3-2 : Paramètres physiques utilisés pour GaAs.

Table 4-1 : Paramètres physiques caractérisant le système de GaAs.

Résumé

Cette thèse est consacrée à l'étude des propriétés optoélectroniques des boîtes quantiques de type cœur/coquille sous l'effet des différentes perturbations extérieures à savoir : le champ magnétique, le champ électrique, la pression hydrostatique et la température. Les calculs ont été faits dans le cadre de l'approximation de la masse effective et à l'aide de l'approche variationnelle. Nous avons commencé par l'étude de l'effet du champ magnétique sur une impureté confinée dans une boîte quantique de forme cubique, où la barrière de potentiel est finie. Ensuite, nous avons étudié l'effet de la pression hydrostatique et du champ électrique, en présence de l'interaction électron-phonon (e-p), sur l'énergie de liaison, la polarisabilité, et la section efficace de photoionisation (PCS) d'une impureté localisée dans une boîte quantique cubique inhomogène de type cœur/coquille à base de GaAs/GaAlAs. Puis nous avons mené une étude comparative sur l'effet de la forme géométrique et du champ électrique sur la polarisabilité et la susceptibilité diamagnétique dans les boîtes quantiques inhomogènes.

Mots clés : Points quantiques, impureté, énergie de liaison, polarisabilité, susceptibilité diamagnétique, champ magnétique, pression hydrostatique et température.

Abstract

This thesis is devoted to the study of the optoelectronic properties of quantum dots of the core/shell type under the effect of different external perturbations, namely: magnetic field, electric field, hydrostatic pressure and temperature. The calculations were made as part of the approximation of the effective mass and using the variational approach. We began by studying the effect of the magnetic field on an impurity confined in a cubic quantum box, where the potential barrier is finite. Then, we studied the effect of hydrostatic pressure and electric field in the presence of electron-phonon interaction (e-p), on the binding energy, polarisability, and effective photoionization section (PCS) of an impurity located in an inhomogeneous cubic quantum box of the core/shell type based on GaAs/GaAlAs. Then we showed a comparative study on the effect of geometric shape and electric field on polarisability and diamagnetic susceptibility in inhomogeneous quantum dots.

Keywords : Quantum dots, impurity, binding energy, polarisability, diamagnetic susceptibility, magnetic field, hydrostatic pressure, temperature.

Table des matières

| | |
|--|-----------|
| Remerciements | i |
| Liste des publications | ii |
| Liste des abréviations et des symboles..... | iv |
| Liste des figures | v |
| Liste des Tableaux | ix |
| Résumé | x |
| Abstract | xi |
| Introduction générale..... | 1 |
| Chapitre I : Généralités sur les nanomatériaux : Du semi-conducteur massif au point quantique | |
| 1.1. Introduction | 4 |
| 1.2. Propriétés électronique et théorie des bandes des semi-conducteurs | 5 |
| 1.3. Semi-conducteurs massifs III-V..... | 8 |
| 1.4. Matériaux semi-conducteurs de faible dimension..... | 9 |
| 1.4.1. Structures bidimensionnelles (2D) | 12 |
| 1.4.2. Structures unidimensionnelles (1D) | 14 |
| 1.4.3. Boîtes quantiques (0D) | 14 |
| 1.4.4. Boîtes quantiques de type cœur/coquille | 14 |
| 1.5. Elaboration des boîtes quantiques | 16 |
| 1.5.1. Lithographie..... | 17 |
| 1.5.2. Croissance auto-organisée de Stranski-Krastanov (SK) | 18 |
| 1.5.3. Epitaxie par jet moléculaire (EJM)..... | 19 |
| 1.6. Applications des boîtes quantiques dans l'optoélectronique et la photonique..... | 20 |
| 1.7. Modèle théorique et résolution numérique de l'équation de Schrödinger | 22 |
| 1.7.1. Hamiltonien d'un solide | 22 |
| 1.7.2. Approximation de la masse effective | 24 |
| 1.7.3. Formalisme de la fonction enveloppe | 26 |
| 1.7.4. Approche variationnelle | 28 |
| 1.8. Les excitons dans les semi-conducteurs nanocristallins..... | 29 |
| 1.8.1. Confinement fort $R < a_B$ | 30 |
| 1.8.2. Confinement faible $R > a_B$ | 31 |

| | | |
|--|---|-----------|
| 1.8.3. | Confinement intermédiaire $a_{Be} > R > a_{Bh}$ | 31 |
| 1.9. | Etat d'un électron lié à une impureté ionisée..... | 31 |
| 1.10. | Effet des perturbations extérieures..... | 33 |
| 1.10.1. | Effet d'un champ magnétique :..... | 33 |
| 1.10.2. | Effet d'un champ électrique..... | 35 |
| 1.11. | Conclusion..... | 36 |
| Références bibliographiques du 1^{er} chapitre..... | | 38 |

Chapitre II : Effets des perturbations extérieures sur les états des impuretés donneurs confinées dans un point quantique (QD) de forme cubique

| | | |
|---|---|-----------|
| 2.1. | Introduction..... | 40 |
| 2.2. | Etat d'un électron confiné dans une boîte quantique..... | 42 |
| 2.2.1. | Hamiltonien de l'électron..... | 43 |
| 2.2.2. | Fonction d'onde..... | 44 |
| 2.2.3. | Etat de l'électron confiné en présence du champ magnétique..... | 45 |
| 2.3. | Approche théorique..... | 46 |
| 2.4. | Résultats numériques et discussions..... | 54 |
| 2.4.1. | Effet de la pression hydrostatique :..... | 54 |
| 2.4.2. | Effet de la température..... | 63 |
| 2.5. | Conclusion..... | 68 |
| Références bibliographiques du 2^{ème} chapitre..... | | 69 |

Chapitre III : Section efficace de photoionisation d'une impureté donneur dans une boîte quantique de type cœur/coquille avec correction polaronique

| | | |
|-------------|---|-----------|
| 3.1. | Introduction..... | 71 |
| 3.2. | Théorie de Fröhlich..... | 74 |
| 3.2.1. | Couplage faible de l'électron-phonon :..... | 75 |
| 3.2.2. | Couplage fort de l'électron-phonon :..... | 76 |
| 3.3. | Approche théorique..... | 77 |
| 3.3.1. | Hamiltonien effectif..... | 77 |
| 3.3.2. | Choix de la fonction d'onde..... | 80 |
| 3.4. | Section efficace de photoionisation..... | 81 |
| 3.5. | Résultats et discussion..... | 82 |
| 3.5.1. | Energie de liaison E_b | 83 |
| 3.5.2. | Polarisabilité α d'une impureté de type donneur..... | 85 |
| 3.5.3. | Section efficace de photoionisation (PCS) d'une impureté de type donneur..... | 87 |
| 3.6. | Conclusion..... | 92 |

| | |
|---|------------|
| Références bibliographiques du 3^{ème} chapitre | 93 |
| Chapitre IV : Effet de la forme géométrique et du champ électrique sur la polarisabilité et la susceptibilité diamagnétique dans les points quantiques inhomogènes | |
| 4.1. Introduction | 95 |
| .4.2 Effets du champ électrique et de la taille du cœur d'une boîte quantique sphérique de type cœur/coquille sur la polarisabilité | 98 |
| .4.2.1 Formalisme théorique | 98 |
| .4.2.2 Résultats numériques et discussions..... | 103 |
| 4.2.3. Conclusion | 109 |
| 4.3. Effets de la géométrie des points quantiques inhomogènes sur la susceptibilité diamagnétique | 110 |
| 4.3.1. Formalisme théorique | 110 |
| 4.3.2. Résultats et discussions..... | 115 |
| 4.3.3. Conclusion | 122 |
| Références bibliographiques du 4^{ème} chapitre | 123 |
| Conclusion générale | 124 |

Introduction générale

Introduction générale

Ces dernières années les physiciens peuvent réaliser des systèmes complexes à des dimensions de l'ordre du nanomètre. Ces systèmes à deux, une et zéro dimension appelés respectivement, puits quantique (Quantum Well (QW)), fil quantique (Quantum Well Wire (QWW)) et points quantiques (Quantum Dot (QD)). Ces nanostructures sont de grand intérêt puisqu'elles sont parmi les composants électroniques les plus prometteuses vis-à-vis des applications dans les dispositifs optoélectroniques tels que : les émetteurs, les détecteurs, les lasers, les cellules solaires...etc.

La réalisation des matériaux nanostructures entraîne l'apparition des propriétés physiques qui pourraient être expliquées que par la mécanique quantique. Le principe d'Heisenberg stipule que la position et la quantité de mouvement d'une particule ne peuvent pas être simultanément déterminées avec une précision absolue. Plus que l'électron est confiné, plus sa quantité de mouvement est incertaine, et de ce fait son énergie est variable. Aujourd'hui des puits quantiques figurent dans les diodes laser et dans les cellules solaires. L'existence des impuretés dans ces nouvelles structures modifie considérablement les propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs puisqu'elles induisent des états d'énergie situés dans la bande interdite. Ce sont des états qui induisent de nouvelles transitions vers les sous-bandes de conduction responsable en majeure partie du comportement du matériau.

L'application d'un champ électrique est parmi les effets les plus importants dans les systèmes de faibles dimensions, car il peut conduire à un changement dans l'absorption optique près du bord de la bande, connu par « effet de Franz-Keldysh ». En particulier, l'application d'un champ électrique dans la direction de croissance de l'hétérostructure donne lieu à une polarisation de la distribution de charge et un déplacement des niveaux d'énergie des états quantiques appelé « déplacement Stark ». La force de ce déplacement est définie par la polarisabilité. Cette dernière est déterminée par la mesure à basse température de la constante diélectrique en fonction de la concentration des donneurs, en ajustant ces paramètres à l'aide de la formule de Clausius Mossotti. La polarisabilité d'un atome d'hydrogène est de l'ordre de a^{*3} , ou a^* est le rayon de Bohr effectif du donneur dans l'état fondamental.

Ce travail est consacré à l'étude de l'effet du confinement quantique à l'aide d'un potentiel à barrière finie et infini sur les propriétés optoélectroniques dans les boîtes quantiques de type cœur/coquille de différentes formes géométriques, construits à base des matériaux semi-conducteurs d'éléments III-V du tableau périodique. Nous allons en particulier examiner, en présence des perturbations extérieures, l'énergie de liaison d'une impureté donneur, la susceptibilité diamagnétique, la polarisabilité et la section efficace de photoionisation en fonction de l'énergie d'excitation pour caractériser les états d'impuretés. L'étude de la section efficace nous permet de recueillir des informations sur la nature des transitions. Ce processus de photoionisation excité par une onde électromagnétique ne peut se produire que si l'énergie de l'onde est supérieure à l'énergie du seuil de la photoionisation de l'impureté.

PLAN DU MEMOIRE

Dans ce travail, nous nous proposons d'étudier l'effet des perturbations extérieures sur les propriétés optoélectroniques dans les boîtes quantiques semi-conductrices de type cœur/coquille pour différentes formes géométriques. Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, nous utiliserons un formalisme général se basant sur le principe variationnel, avec un choix d'une fonction d'essai de l'état fondamental du donneur bien adaptée au problème étudié. Ensuite, nous décrivons l'effet du confinement quantique à l'aide d'un potentiel à barrière infinie puis finie.

Ce mémoire est présenté en quatre chapitres :

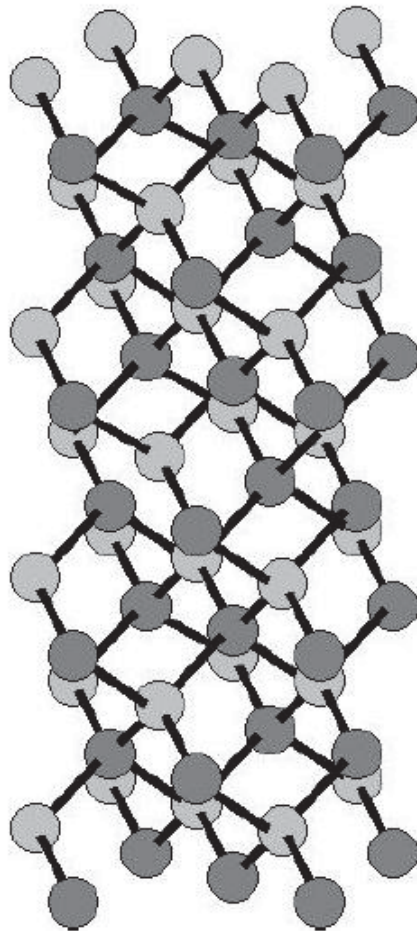
Dans le premier chapitre, nous exposons une description détaillée des différentes classifications des matériaux nanostructurés. Nous décrivons ensuite les bases théoriques nécessaires à l'étude d'une impureté donatrice dans une boîte quantique semi-conductrice, à savoir, l'Hamiltonien du système, l'approximation de la masse effective, l'effet des perturbations extérieures ainsi que les différentes techniques de résolution numérique.

Dans le second chapitre, nous allons étudier l'effet du champ magnétique sur l'énergie de liaison et sur la polarisabilité d'une impureté donneur confinée dans une boîte quantique homogène de forme cubique, en présence des perturbations extérieures tels que : la pression hydrostatique et la température. Nous réalisons les calculs en considérant une barrière de potentiel finie.

Le troisième chapitre concerne l'étude de l'effet de la pression hydrostatique et du champ électrique en présence de l'interaction électron-phonon, sur l'énergie de liaison, la polarisabilité et la section efficace de photoionisation (PCS) d'une impureté donatrice confinée dans une boîte quantique cubique inhomogène de type cœur/coquille à base de GaAs/GaAlAs. La photoionisation est considérée comme étant une transition optique de l'état fondamental de l'impureté à la première sous-bande de conduction.

Le quatrième chapitre est divisé en deux parties, la première concerne l'étude de l'effet du champ électrique, de la position de l'impureté et la taille du cœur et de la coquille, sur l'énergie de liaison et la polarisabilité d'une impureté donneur confinée dans une boîte quantique sphérique. Dans la deuxième partie, nous avons entamé une étude comparative sur l'énergie de liaison et la susceptibilité diamagnétique pour les différentes formes géométriques des boîtes quantiques (sphériques, cubiques et cylindriques).

*Chapitre I : Généralités sur les
nanomatériaux : Du semi-conducteur
massif au point quantique*



Maille cristalline blende ('cubique')

1.1.Introduction

Depuis les années cinquante, les matériaux massifs puis les couches minces voire les multicouches, et plus récemment les fils quantiques et les nanoparticules ont fait l'objet d'un intérêt croissant de la part des chercheurs, en raison de l'observation de nouveaux phénomènes physiques liés à la réduction de leurs dimensionnalités. Dans le cas de nanoparticules et de systèmes nanostructurés, la réduction de la taille des matériaux entraîne l'apparition de nouvelles propriétés physiques liées à l'apparition de nouveaux états de surface et d'interface (grains et joints de grains). Ces nouvelles propriétés structurales et électroniques ainsi que les propriétés optiques, dépendent fortement des méthodes et des conditions de synthèse de ces matériaux.

Parmi les matériaux nanostructurés les plus étudiés ces dernières années, nous citons les matériaux semi-conducteurs qui font un sujet d'actualité, vu leurs multiples applications technologiques. Les nanocristaux de ces semi-conducteurs ont des propriétés qui peuvent être mises à profit pour des applications en micro- nanoélectronique, optoélectronique, ou même photovoltaïque. L'énergie de gap du semi-conducteur change fortement avec sa taille. Pour cela la détermination de la corrélation entre le rayon de Bohr de l'exciton (a_B) et l'énergie de gap (E_g) est une propriété principale pour la compréhension du comportement des nanostructures.

Nous allons, dans ce chapitre, présenter les matériaux semi-conducteurs massifs et leurs propriétés, tant structurales qu'électroniques, ainsi que l'intérêt de les réaliser avec les matériaux III-V. Nous montrerons ensuite les spécificités des nanostructures semi-conductrices, puits, fils et points quantiques. Après, nous présentons le formalisme de la théorie de perturbation forte ainsi que la théorie de l'approximation de la masse effective et celle de la fonction enveloppe qui permettent de décrire de manière simple et efficace les états d'impuretés et les propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs massifs et de faibles dimensions. Nous proposons d'étudier les états d'impureté dans les boîtes quantiques sous différentes excitations extérieures : champ magnétique, champ électrique, pression hydrostatique et milieu extérieur. Les boîtes quantiques étudiées sont de forme cubique et de type cœur/coquille.

Dans la dernière partie nous présenterons les méthodes de croissance des boîtes quantiques et leurs applications dans le domaine photonique.

1.2. Propriétés électronique et théorie des bandes des semi-conducteurs

Le problème de l'électron dans un solide cristallin revient à considérer l'interaction des électrons avec un potentiel périodique. Dans un cristal parfait, les électrons ne peuvent pas occuper un état d'énergie arbitraire, mais ils sont confinés dans des bandes d'énergies qui présentent entre elles des niveaux d'énergie interdits. Une bande pleine (dont tous les états sont occupés) est inerte pour la conduction électrique et thermique : la conduction devient possible seulement lorsque la bande est incomplète. L'occupation des bandes est décrite par une statistique de Fermi-Dirac. A température nulle, les états dont l'énergie est inférieure à une énergie E_F , appelée énergie de Fermi, sont occupés, et les états dont l'énergie est supérieure à E_F sont vides. Dans les semi-conducteurs, l'énergie de Fermi est située dans la bande interdite, dont la largeur varie, selon le matériau, de 0eV à quelques eV. Pour avoir la conduction, il faut qu'un électron de la bande inférieure passe dans la bande supérieure, ce qui peut être réalisé soit par activation thermique (en augmentant la température), optique (avec des photons d'énergie supérieure à l'énergie de la bande interdite) ou électronique. On se restreint ainsi pour l'étude des propriétés électriques et optiques du matériau aux deux bandes de part et d'autre du niveau de Fermi, nommées bandes de valence et bande de conduction. La figure 1-1 schématise les bandes de valence et de conduction pour un isolant, un semi-conducteur et un conducteur.

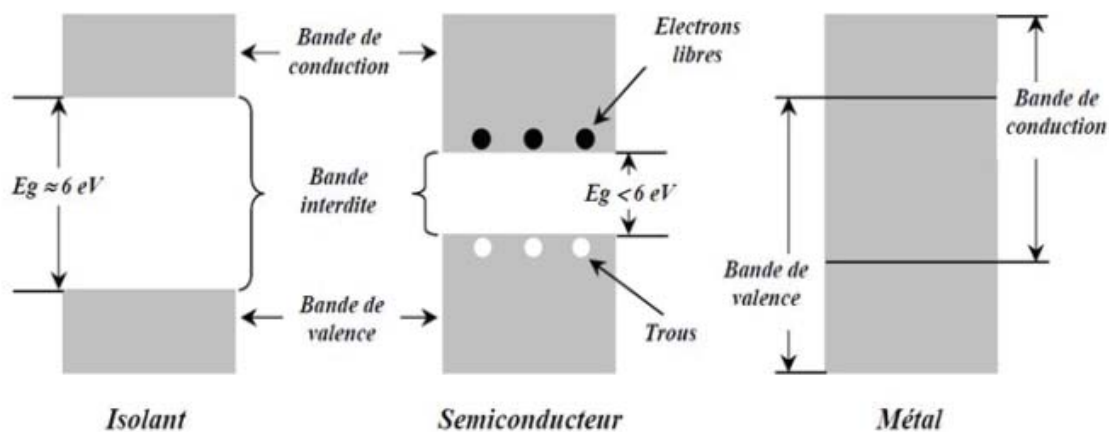


Figure 1-1 : Schéma de bandes indiquant la bande de valence, la bande de conduction et la bande interdite.

Pour simplifier, on prend le cas du silicium qui se cristallise dans la structure diamant avec deux atomes identiques par maille primitive (Si), possédant chacun 4 électrons de valence. Le couplage entre ces atomes, lève la dégénérescence en énergie des orbitales s et p en orbitales liants et antiliants. Dans le cas isolant, les niveaux d'énergie pertinents sont ceux du dernier

niveau saturé : orbitales (p) X,Y,Z liantes (de symétrie Γ_5), et du premier niveau vide : orbitale (s) antiliante (de symétrie Γ_1 plus élevée avec toutes celles du groupe T_d) (Figure 1.2).

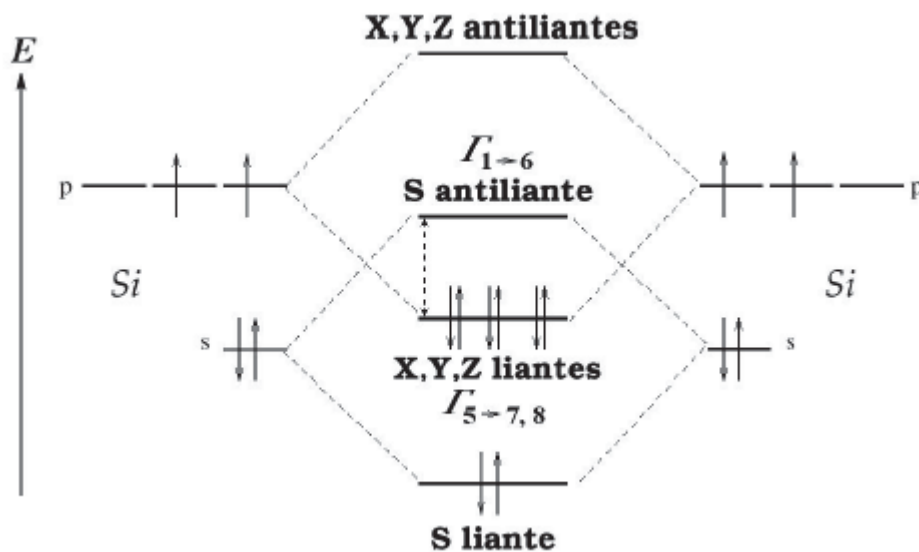


Figure 1-2 : Dédoubllement et peuplement électronique des niveaux d'énergie entre 2 atomes couplés (au centre). Les orbitales sont saturées : cas isolant.

Les orbitales liantes forment la bande de valence et les antiliantes celle de conduction, séparées par une bande d'énergie interdite ('bandgap'). Pour mieux comprendre la structure électronique des semi-conducteurs massifs, on prend le cas du séléniure de cadmium CdSe, qui est un semi-conducteur à bande interdite directe, dont l'énergie de la bande interdite E_g à température ambiante vaut 1.66 eV dans la structure zinc blende et 1.74 eV dans la structure wurtzite. Le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouvent au centre de la zone de Brillouin ($k=0$).

La bande de conduction est essentiellement formée à partir de l'orbitale (s) du cadmium, dont la configuration électronique est $[\text{Kr}]4d^{10}5s^2$, tandis que la bande de valence est constituée de l'orbitale (p) du sélénium, de configuration électronique $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^4$ [1]. De ce fait, la bande de conduction est deux fois dégénérée, et la bande de valence est six fois dégénérée en $k=0$. Le moment cinétique (J_e) de la bande de conduction est donné par $J_e = L_e + S_e$ et vaut $J_e = 1/2$ car l'électron se trouve sur l'orbitale s du cadmium ($L_e = 0$, $S_e = 1/2$). Le traitement de la bande de valence est plus complexe à cause de sa dégénérescence. La dégénérescence de la bande de valence est partiellement levée par le couplage spin-orbite, qui fait interagir le moment de spin du trou S_h et son moment cinétique orbital L_h . Le bon nombre quantique est donc le moment cinétique $J_h = L_h + s_h$ de la bande de valence. Le spin du trou S_h vaut 1/2 et le moment cinétique orbital L_h vaut 1 car le trou se trouve sur l'orbitale p du sélénium. Les valeurs

possibles pour le moment cinétique sont alors $J_h = 1/2$ et $J_h = 3/2$ qui correspondent à deux bandes de valence séparées en $k=0$ par la constante Δ_{so} de couplage spin-orbite, qui vaut $\Delta_{so} = 420$ meV dans le CdSe. La bande $J_h = 3/2$ est dégénérée quatre fois par sa projection m_{J_h} suivant l'axe de quantification : $m_{J_h} = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$, et la bande $J_h = 1/2$, dite bande de split-off, est dégénérée deux fois : $m_{J_h} = -1/2$ et $1/2$. La dégénérescence de la bande $J_h = 3/2$ est levée pour k différent de 0, produisant deux bandes de courbures différentes. En particulier, la bande correspondante à la projection $m_{J_h} = \pm 3/2$ a une plus faible courbure et est appelée bande de trou lourd (heavy hole, hh), celle correspondant à la projection $m_{J_h} = \pm 1/2$ a une courbure plus forte et elle est dite bande de trou léger (light hole, lh). La structure de bandes présentée est une bonne approximation pour la description d'un semi-conducteur massif de structure zinc blende.

Par contre, dans la structure cristalline wurtzite, la dégénérescence de la bande $J_h = 3/2$ est également levée pour $k=0$ par le champ cristallin qui est dû à l'asymétrie de cette structure. Cet éclatement vaut $\Delta_{cr} = 25$ meV dans le CdSe. Par conséquent, on peut définir une relation de dispersion pour chaque bande de valence au voisinage de $k=0$ à l'aide d'une équation du type de l'équation 1.2, où m_v^* est la masse effective du trou dans chaque bande de valence (splitoff, trou lourd et trou léger). La structure des bandes du CdSe massif dans les deux structures cristallines zinc blende et wurtzite, ainsi que les valeurs des masses effectives dans chaque bande, sont représentées sur la figure 1-3.

$$E_k^C = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_C^*} + E_g \quad (1.1)$$

$$E_k^V = -\frac{\hbar^2 K^2}{2m_v^*} \quad (1.2)$$

Où E_g est l'énergie de la bande interdite du semi-conducteur et l'origine des énergies coïncide avec le maximum de la bande de valence. L'approximation des masses effectives permet d'ignorer les atomes dans le réseau périodique du semi-conducteur et de traiter l'électron dans la bande de conduction et le trou dans la bande de valence comme des particules libres de masse effective respectivement $m_{C,V}^*$ [2].

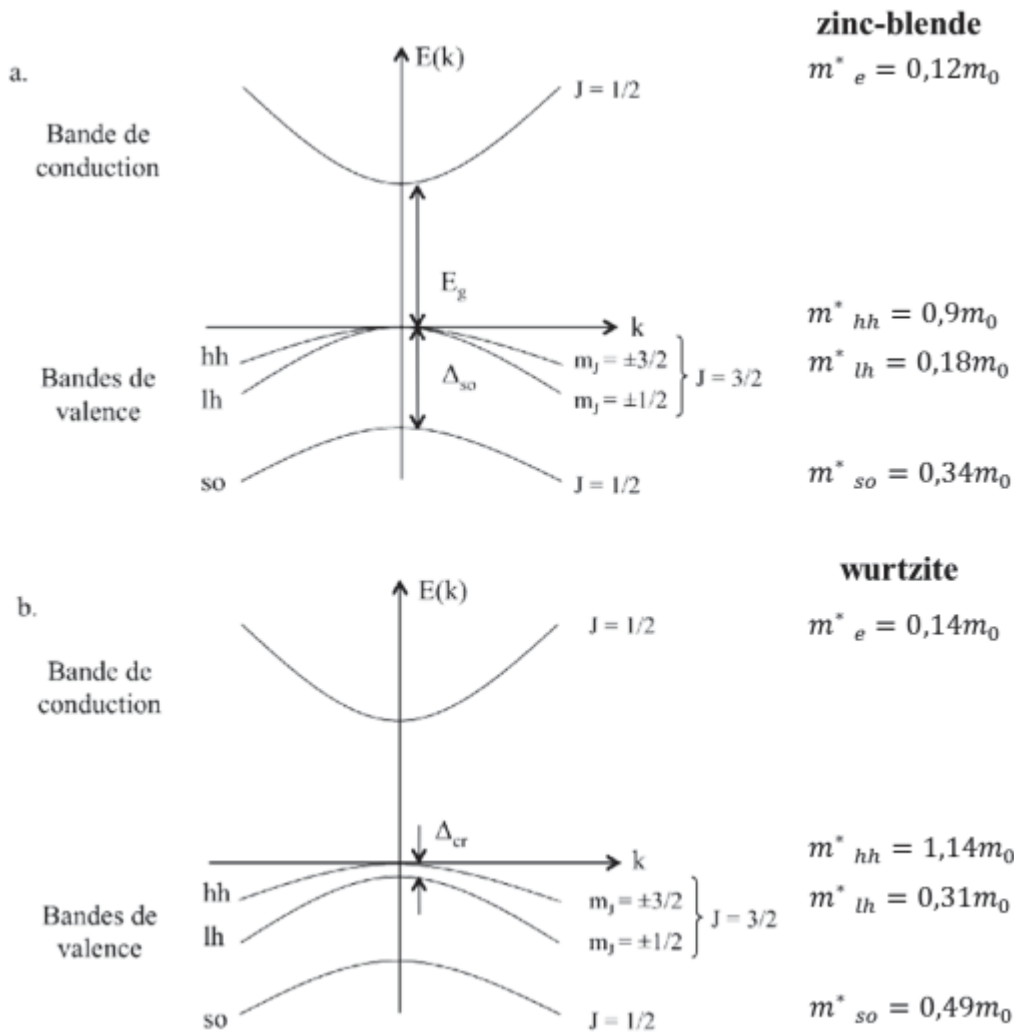


Figure 1-3 : Structure de bandes du CdSe massif dans la structure cristalline zinc blende (a) et dans la structure cristalline wurtzite (b). Les valeurs des masses effectives sont tirées de la référence [3], m_0 étant la masse de l'électron libre.

1.3. Semi-conducteurs massifs III-V

Les matériaux semi-conducteurs présentent une conductivité électrique intermédiaire entre celle des conducteurs ($\sim 10^6 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$) et des isolants ($\sim 10^{-22}$ à $\sim 10^{-14} \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$). Cette conductivité varie sous l'effet de la température, l'éclairement et la présence d'impuretés (dopage, défauts du réseau).

La famille des semi-conducteurs est très vaste et contient des éléments IV (Si, Ge), les composés III-V (AlAs, GaAs, InAs, AlN...), les composés II-VI (ZnS, CdTe, ZnO...) et les composés I-VII (CuCl).

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont au cœur des dispositifs électroniques et optoélectroniques utilisés aujourd'hui, car ils offrent une très grande mobilité des porteurs de charges (particulièrement pour les électrons) en plus d'une large gamme spectrale d'émission

et de détection optique, étant donné leur recombinaison directe dans l'espace réciproque. Ils sont des composés formés à partir d'un élément de la III^{ème} colonne et d'un élément de la V^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeleïev.

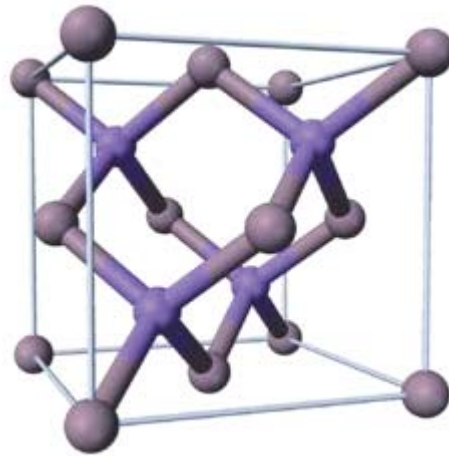


Figure 1-4 : Structure cristalline Zinc-blende (Exemple de l'Arséniure de Gallium (GaAs)).

Les semiconducteurs III-V tels que *GaAs* (arséniure de gallium), *AlAs*, *AlSb*, etc... sont des solides cristallins. La plupart s'ordonnent selon un réseau cubique à faces centrées (c.f.c). Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (*Si*, *Ge*, etc...), est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un d'éléments III, l'autre d'éléments V, décalé l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale. La maille élémentaire comporte deux atomes, le premier (*Ga*) à l'origine et l'autre (*As*) à $(a/4, a/4, a/4)$, où a a représenté le paramètre de maille du matériau. Du fait que les deux sous-réseaux cubiques à faces centrées sont décalés, le cristal n'est pas centrosymétrique. Il en découle des propriétés physiques différentes suivant les directions cristallographiques considérées. Les liaisons atomiques dans les matériaux III-V ne sont pas simplement covalentes comme dans le cas du silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V (*As*) sur ceux du groupe III (*Ga*).

1.4. Matériaux semi-conducteurs de faible dimension

A l'échelle nanométrique, les propriétés d'un matériau peuvent différer de celles du même matériau ayant des dimensions plus grandes. Les recherches ont démontré que la réduction des dimensions des semi-conducteurs dans une, deux ou trois directions, réduisait le nombre de degrés de liberté offerts aux électrons dans la matière et permettait de modifier de nombreux paramètres essentiels comme la bande interdite et la densité d'états électroniques. Ces effets s'observent lorsque l'une des dimensions est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de Louis De Broglie (équation 1.3) définie comme la longueur d'onde d'un électron dans le cristal

(de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres au maximum). Cette gamme de dimensions correspond au régime de confinement quantique pour lequel les électrons sont sensibles à la présence des limites des nanostructures et répondent aux évolutions de leurs dimensions en modifiant leur spectre énergétique.

La longueur d'onde de Louis De Broglie est donnée par [4] :

$$\lambda = \frac{2\pi \hbar}{p} = \frac{2\pi \hbar}{\sqrt{2m_e^* E}} \quad (1.3)$$

Avec \hbar est la constante de Planck et E est l'énergie de l'électron de masse effective m_e^* (resp. trou de masse effective m_h^*) par rapport au bas de la bande de conduction (resp. haut de celle de valence). Pour que les effets de confinement quantique apparaissent, il faut que l'énergie E soit supérieure à l'énergie thermique $k_B T$ (où k_B est la constante de Boltzmann) dont la longueur d'onde associée est appelée longueur d'onde de de Broglie thermique (λ_{th}), définie par la relation [4] :

$$\lambda_{th} = \frac{2\pi \hbar}{\sqrt{2m_e^* K T}} \quad (1.4)$$

En poursuivant ce raisonnement des objets quantiques, les différentes nanostructures peuvent être distinguées selon leur géométrie et selon le degré de liberté des porteurs de charges dans la structure.

La figure. 1-5 présente un aperçu général sur l'effet du degré de confinement sur la structure électronique et sur la densité d'état 0D : boîtes quantiques (quantum dots), 1D : fils quantiques (quantum wires), 2D : puits quantiques (quantum wells) et 3D : semi-conducteurs massifs.

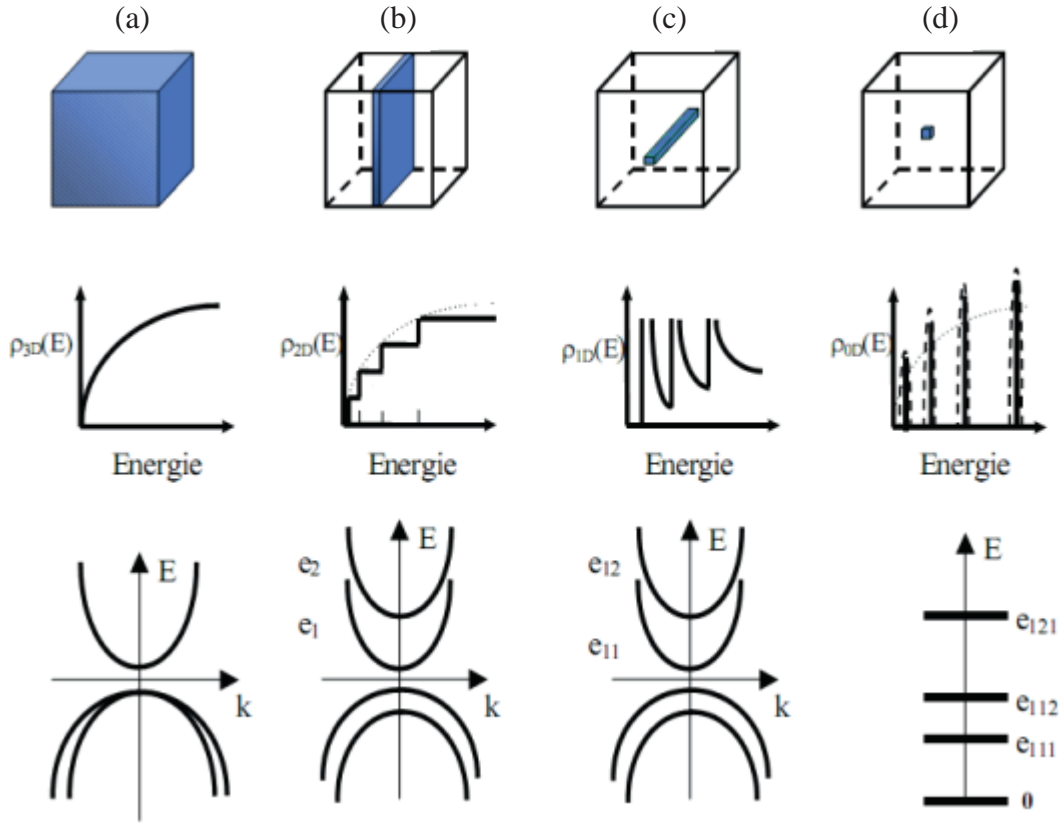


Figure 1-5 : Evolution de la densité d'états électroniques $\rho(E)$ et de la structure des bandes $E(k)$ en fonction de la dimensionnalité du matériau. (a) un semi-conducteur massif (3D), (b) un puits quantique (2D), (c) un fil quantique (1D) et (d) une boîte quantique (0D) (E. Dupuy, 2009).

La densité d'états correspond au nombre d'états disponibles pour un électron dans un intervalle d'énergie donné. Cette fonction de l'énergie dépend de la dimensionnalité du système. La Figure 1-5, montre l'évolution de la densité d'états $\rho(E)$ et de la structure de bande $E(k)$ en fonction du degré de confinement. Dans un semi-conducteur massif (3D), où les porteurs de charge ne sont pas confinés, la densité d'états est une fonction continue variant comme la racine de l'énergie :

$$\rho_{3D}(E) \propto \sqrt{E - E_g} \quad (1.5)$$

Si on restreint le mouvement des porteurs dans une direction donnée (disons z), ceux-ci seront confinés dans une couche 2D, qu'on appellera un puits quantique. L'énergie sera quantifiée selon la direction de confinement. La densité d'états devient alors une fonction en marche d'escalier :

$$\rho_{2D}(E) \propto \sum \theta[E - (E_g + E_{n_z})] \quad (1.6)$$

Où θ est la fonction de Heaviside et E_{n_z} est l'énergie des niveaux discrets n suivant z. Si le mouvement des porteurs est restreint dans deux directions orthogonales, ceux-ci seront libres

de se déplacer en une seule dimension ; on parlera alors de structure de type fil quantique. L'énergie est quantifiée alors selon les deux directions de confinement (y et z par exemple). La densité d'états est alors de la forme suivante :

$$\rho_{1D}(E) \propto \sum_{n_y n_z} \frac{1}{\sqrt{E - (E_g + E_{n_y} + E_{n_z})}} \quad (1.7)$$

Dans le cas où les porteurs sont confinés selon les trois directions de l'espace, on parlera de boîte quantique 0D (BQ). Ce confinement tridimensionnel conduit à une structure de niveaux d'énergie discrets à l'image des niveaux électroniques dans un atome. Les fonctions d'onde associées à ces états électroniques discrets sont analogues aux orbitales atomiques [5-6]. La densité d'états pour une BQ carrée correspond à une série de fonctions de Dirac :

$$\rho_{0D}(E) \propto \sum_{n_x n_y n_z} \delta[E - (E_g + E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z})] \quad (1.8)$$

1.4.1. Structures bidimensionnelles (2D)

Les structures (2D) sont des structures qui laissent aux porteurs de charges la liberté de se déplacer dans deux directions. Les électrons de la bande de conduction et les trous de la bande de valence restent confinés dans le matériau de plus petit gap qui joue le rôle d'un puits de potentiel. Ce puits quantique a vu le jour au début des années soixante-dix [7-8]. La première structure de ce type a été proposée par Esaki et Tsu (1969, 1970). Le puits quantique est obtenu en faisant croître une couche d'un matériau semi-conducteur en sandwich entre deux couches d'un autre matériau semi-conducteur d'une énergie de gap plus élevée et de paramètre de maille semblable. La discontinuité entre les bandes d'énergie des deux matériaux crée une barrière de potentiel qui confine les porteurs de charges (électron et trou) dans le puits quantique.

Selon la nature de la discontinuité des bandes interdites à l'interface puits-barrière, on distingue trois types de puits quantiques comme l'illustre la figure 1-6 :

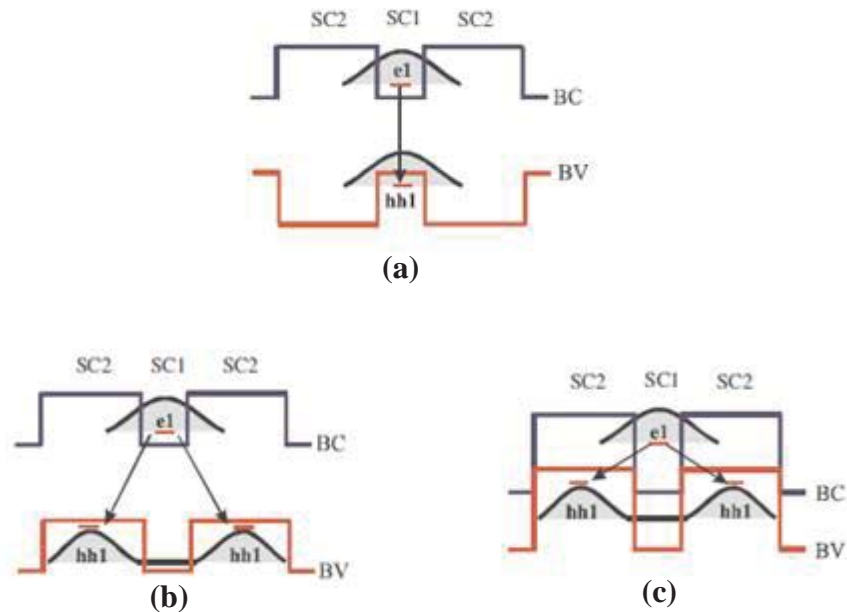


Figure 1-6 : Les différentes configurations de puits quantiques, (a) : puits quantique de type I, (b) : puits quantique de type II et (c) : puits quantique de type III.

a) Puits quantique de type-I où les électrons et les trous sont confinés dans le même matériau constituant le puits. L'énergie du photon émis ne dépend que des énergies de confinement des porteurs et du gap du matériau puits.

b) Puits quantiques de type-II où les électrons et les trous sont confinés séparément dans les deux matériaux puits et barrière respectivement. Dans ce cas, l'énergie du photon émis dépend des énergies de confinement des porteurs et aussi des gaps des deux matériaux formant l'hétérostructure.

c) Enfin, dans les puits quantiques dit de type- III (ex : système GaSb/InAs) qui est un cas particulier du type –II, le bas de la bande de conduction est situé en dessous du haut de la bande de valence. Dans cette configuration, dite aussi semi-métallique, l'énergie du photon émis n'est fonction que des énergies de confinement des électrons et des trous, c'est-à-dire, de l'épaisseur des couches du puits et de la barrière.

Plusieurs chercheurs s'intéressent à ce nouveau type de structure afin de comprendre et d'explorer ses qualités exceptionnelles. Ainsi, de nombreux travaux ont été menés. Ces travaux ont conduit à des découvertes scientifiques majeures. En particulier, la non-linéarité des propriétés optiques de ces matériaux et la mise en évidence de l'effet Hall quantique normal [9] et fractionné [10]. Ces structures bidimensionnelles ont été incorporées dans plusieurs dispositifs tels que les récepteurs micro-onde et les diodes laser. Ceci est dû au comportement quantique résultant de la basse dimensionnalité du système.

1.4.2. Structures unidimensionnelles (1D)

Au début des années quatre-vingt, les chercheurs ont proposé d'augmenter le degré de confinement, alors ils ont pu élaborer des structures unidimensionnelles [11]. Dans lesquelles les porteurs de charges ne puissent se déplacer librement que suivant une seule direction (1D). Nous obtenons ainsi des fils quantiques (Quantum Well Wires (QWW)). La densité d'états qui est en marches d'escaliers dans le cas des structures à puits quantiques, comporte maintenant des pics qui sont d'autant plus marqués que la section du fil quantique est faible (E. Assaid, 1995).

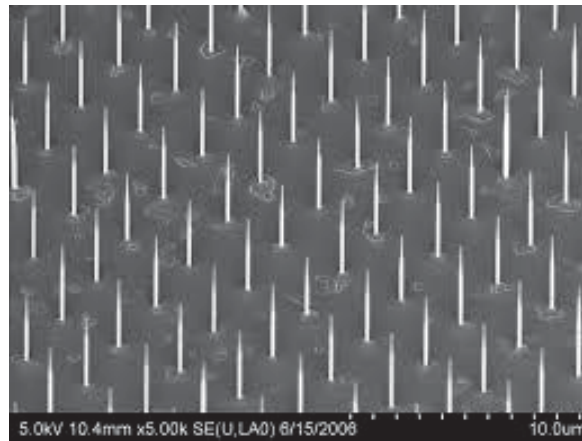


Figure 1-7 : Image en microscopie électronique à balayage d'une assemblée régulière et homogène de nanofils de GaAs.

1.4.3. Boîtes quantiques (0D)

Les nanocristaux semi-conducteurs colloïdaux (boîtes quantiques ou quantum dots) sont des nanoparticules semi-conductrices d'une taille inférieure à 10 nm [12]. Dans de telles structures, les porteurs de charges (électrons et trous) sont confinés dans les trois directions de l'espace et leurs niveaux d'énergie sont discrets, ce qui leur vaut parfois l'appellation d'« atomes artificiels » en phase solide [13]. Le confinement tridimensionnel des porteurs de charges a été fait pour la première fois par Kayanuma et Efros [14-15]. Il existe plusieurs formes de boîtes quantiques : cubique, sphérique, cylindrique, parallélépipédique, pyramidale et conique [16]. Cela est dû à la diversité des méthodes de réalisation.

1.4.4. Boîtes quantiques de type cœur/coquille

1.4.4.1. Généralités

Les nanocristaux de type cœur/coquille colloïdal contiennent au moins deux matériaux semi-conducteurs dans une structure en forme d'oignon. La possibilité d'accorder les propriétés optiques de base des nanocristaux du cœur, par exemple leur longueur d'onde de fluorescence,

leur rendement quantique et leur durée de vie, en faisant croître une couche de type épitaxial d'un autre semi-conducteur a permis des progrès significatifs dans la synthèse chimique de ces systèmes. Dans de tels nanocristaux cœur/coquille, la coquille constitue une barrière physique entre le noyau optiquement actif et le milieu environnant, rendant ainsi les nanocristaux moins sensibles aux changements environnementaux, à la chimie de surface et à la photo-oxydation. La coquille assure en outre une passivation efficace des états de piège de surface, ce qui donne lieu à un rendement quantique fortement amélioré. Cet effet est une condition préalable fondamentale à l'utilisation des nanocristaux dans des applications telles que les dispositifs émetteurs de lumière, qui dépendent de leurs propriétés d'émission [17].

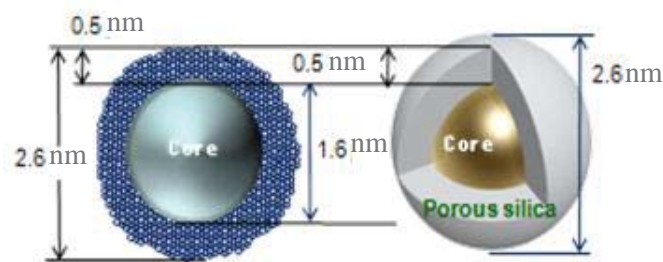


Figure 1-8 : Diagramme schématisé de la particule de type cœur/coquille.

En mettant l'accent sur les progrès récents, les structures enrobées les plus utilisées sont fabriquées à base de semi-conducteurs binaires appartenant aux groupes II et VI du tableau périodique (CdS, CdSe, CdTe, ZnO, ZnS, ZnSe). D'autres boîtes quantiques appartenant à d'autres familles ont également été synthétisées et étudiées. Nous pouvons citer les nanocristaux des groupes III-V (InP, InAs, GaN, GaP, GaAs), ainsi que des groupes IV-VI (PbS, PbSe, PbTe), I-VII (CuCl), V-VI (Bi₂Te₃) et II-V (Cd₃As, Zn₃P₂, Zn₃As₂). Pour les mieux comprendre, nous examinons les différents types de ces structures.

1.4.4.2. Nanostructure cœur/coquille de type I

Dans ce type, la bande interdite du matériau de la coquille est plus grande que celle du matériau du cœur, ce qui traduit un confinement des porteurs de charges (électron et trou) au noyau (cœur de la boîte quantique). Ce type de structure a pour but d'isoler le noyau de l'environnement extérieur et d'augmenter le rendement quantique en passivant la surface du noyau. Il est souvent utilisé dans les applications en biologie pour le marquage des cellules biologiques ou pour la fabrication des composantes nanophotoniques (Diodes électroluminescentes). L'un des premiers systèmes enrobés de type I était élaboré par (Dabbousi.1997) avec (CdSe) ZnS [18].

1.4.4.3. Nanostructure cœur/coquille de type II

Dans les nanostructures de type II, les bandes de conduction et de valence du cœur sont plus haut que ceux de la coquille ou l'inverse. Les porteurs de charges sont séparés spatialement. L'un est piégé dans le noyau alors que l'autre est bien localisé dans la coquille. La bande interdite dans ce type est plus petite que chacune des deux bandes interdites du matériau cœur et de la coquille. Ce décalage des bandes présente un avantage important par rapport aux autres types car il est possible d'avoir des longueurs d'onde bien définies en jouant sur l'épaisseur de la coquille. Les nanostructures de type II comme CdSe/ZnTe ou CdTe/CdSe ont été développées en particulier pour l'émission dans le proche infra-rouge (700 à 800nm).

1.4.4.4. Nanostructure cœur/coquille de type I inversé

Dans les nanostructures de type I inversé, la bande interdite du matériau de la coquille est plus petite que celle du matériau du cœur. Les porteurs de charges (électron et trou) sont piégés dans la coquille. Nous utilisons des points quantiques inversés lorsque nous souhaitons contrôler le décalage rouge du spectre de fluorescence en modifiant l'épaisseur de la coquille. Les systèmes type I inversés les plus courants sont à base de CdSe/CdS et ZnSe CdSe (C. Javaux, 2012) [19].

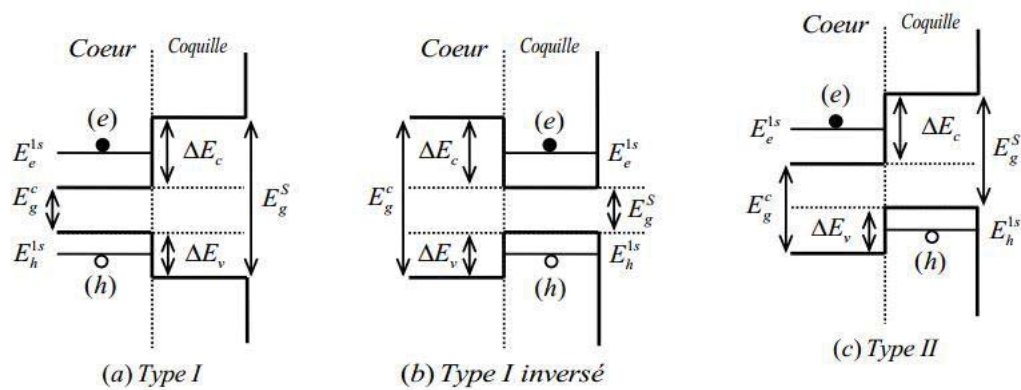


Figure 1-9 : Représentation schématique de différents types de nanostructures Cœur/Coquille de Type I (a), Type I inversé (b) et Type II (c) [19].

1.5. Elaboration des boîtes quantiques

Comme nous l'avons expliqué précédemment, la particularité de la boîte quantique est de confiner les porteurs dans toutes les directions. Si on crée un îlot de semiconducteur A à faible gap (tel que l'InAs) dans une matrice de semiconducteur B à fort gap (tel que le GaAs ou l'InP). Le semiconducteur A se comporte comme un piège pour les électrons de la bande de conduction

et pour les trous de la bande de valence. Si ce piège est de l'ordre de quelques dizaines de nm, on aura réalisé une boîte quantique avec des niveaux discrets pour les états des trous et des électrons.

Plusieurs types de boîtes quantiques existent mais deux catégories principales se distinguent :

- Les nanocristaux : Ce sont des boîtes colloïdales synthétisées par voie chimique où les charges libres sont confinées comme dans un système InAs/GaAs. On peut les utiliser dans des LEDs ou des lasers.
- les boîtes quantiques sont des nanoparticules/structures qui présentent un confinement quantique tridimensionnel, ce qui conduit à de nombreuses propriétés optiques et de transport uniques sont plus couramment utilisées en optoélectronique.

Ces deux types de boîtes quantiques ont présenté d'un intérêt industriel très important. Deux grandes familles de techniques existent : la synthèse chimique qui consiste à fabriquer les nanocristaux en solution sous la forme de colloïdes, et l'épitaxie où les nanocristaux sont fabriqués sur un substrat par dépôt de couches atomiques successives.

On peut citer quelques méthodes les plus utilisés récemment, telle que la gravure lithographique, la croissance auto-organisée et la croissance par jet moléculaire.

1.5.1. Lithographie

La gravure lithographique est une méthode dite descendante ou Top-down [20]. Cette méthode consiste à fabriquer d'abord des puits quantiques par MBE ou par CVD. Les puits sont ensuite structurés latéralement et en profondeur, par lithographie et gravure. Cette méthode onéreuse fournit des BQs avec des dimensions latérales plutôt grandes (> 50 nm) qui souffrent de surfaces défectueuses causées par la gravure, ce qui dégrade leurs propriétés optiques. Cette technique est basée sur trois étapes principales : (i) La première étape consiste à fabriquer le masque qui est l'image des nanostructures à graver. Il faut noter que la finesse du masque constitue à elle-même une limitation pour la taille des nanostructures à réaliser. (ii) La deuxième étape nécessite que l'image du masque soit transférée vers une résine déposée préalablement sur la surface à graver. Pour ce faire, la résine subit une attaque chimique sélective pour ensuite pouvoir attaquer le substrat au niveau des zones qui auraient été exposées ou non à un rayonnement UV, et (iii) La troisième étape consiste à transférer le motif, imprimé dans la résine, au semi-conducteur par gravure ionique. Pour atteindre des dimensions encore plus petites, plusieurs voies de recherches ont été développées comme la lithographie à rayons X, la lithographie électronique qui permet d'atteindre des résolutions de quelques nanomètres [21]

ou la lithographie à faisceaux d'ions. Toutes ces dernières techniques sont utilisées actuellement et des efforts considérables sont en cours pour les améliorer.

Bien que cette méthode a connu un succès, ses inconvénients principaux sont les contaminations du traitement, la formation des défauts, la non uniformité de la taille et la mauvaise qualité de la surface lithographiée. Ceci demande de nouvelles techniques plus sophistiquées pour la fabrication de boîtes quantiques plus performantes à de nombreuses applications. L'une de ces méthodes est la croissance épitaxiale par le mode de Stranski-Krastanov.

1.5.2. Croissance auto-organisée de Stranski-Krastanov (SK)

Les modes de croissance épitaxiale des couches non appariées en réseau sont généralement classés en trois groupes. La croissance couche par couche se produit souvent à de faibles valeurs de décalage de réseau (environ 2 % ou moins), et est appelée mode Frank van der Merwe. Ce mode est favorable quand l'énergie de liaison entre les atomes déposés est inférieure à celle entre la couche mince et le substrat. Le mode Vollmer-Weber (VW) fait référence à un différentiel d'énergie de déformation relativement élevé (en raison d'un fort décalage du paramètre de maille) entraînant la formation d'îlots importants et défectueux. C'est le mode de croissance le plus indésirable pour les dispositifs optoélectroniques, car sa minimisation d'énergie est le résultat de la formation de dislocations du réseau. Si un matériau présente un décalage de réseau d'environ 2 à 10% [22], il est énergétiquement favorable à la formation de petits îlots exempts de défauts, tendus de manière cohérente, au lieu d'une couche continue. C'est ce qu'on appelle le mode de croissance de la SK, et c'est une alternative à la relaxation génératrice de défauts qui se produit dans le mode VW. Ces trois modes sont illustrés dans la figure 1-10.

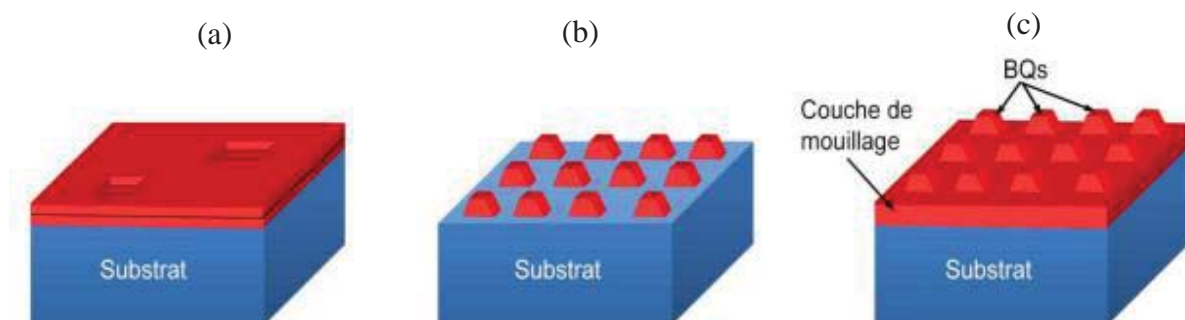


Figure 1-10 : Mode de croissance épitaxial : (a) de Frank-van der Merwe, (b) de Volmer-Weber et (c) de Stranski-Krastanov.

La méthode épitaxiale est largement utilisée en optoélectronique (lasers, photodétecteurs infrarouges) et nanotechnologies. Les méthodes épitaxiales peuvent être classées selon leur

origine : épitaxie en phase vapeur (EPV) ou épitaxie en phase liquide (EPL). Bien que EPL reste important, cette technique a été utilisée principalement au vingtième siècle pour préparer des structures micrométriques. Le EPV peut encore être classé selon le type de réaction. Ces méthodes permettent d'exploiter de nouvelles propriétés physiques dans de nouveaux types d'application (calcul quantique).

1.5.3. Epitaxie par jet moléculaire (EJM)

Plusieurs technologies permettent de produire des boîtes quantiques épitaxiées : l'épitaxie par jets moléculaires (Molecular Beam Epitaxy, MBE) ou l'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (Metalorganic Chemical Vapor Deposition, MOCVD). Si la MOCVD permet une plus grande reproductibilité et une plus grande vitesse de croissance, la MBE permet en général de mieux maîtriser les conditions de croissance.

MBE (Figure 1-11) est une technologie ultravide ($P < 10^{-6}$ mbar) basée sur l'évaporation séquentielle de constituants élémentaires placés dans des cellules à expansion de Knudsen. Un des avantages de cette méthode repose sur le contrôle in situ par la diffraction d'électrons de haute énergie en incidence rasante (RHEED). Elle permet de faire croître des échantillons nano structurés de plusieurs cm^2 à des vitesses de l'ordre d'une monocouche atomique par seconde, ainsi que de contrôler un dopage homogène du matériau.

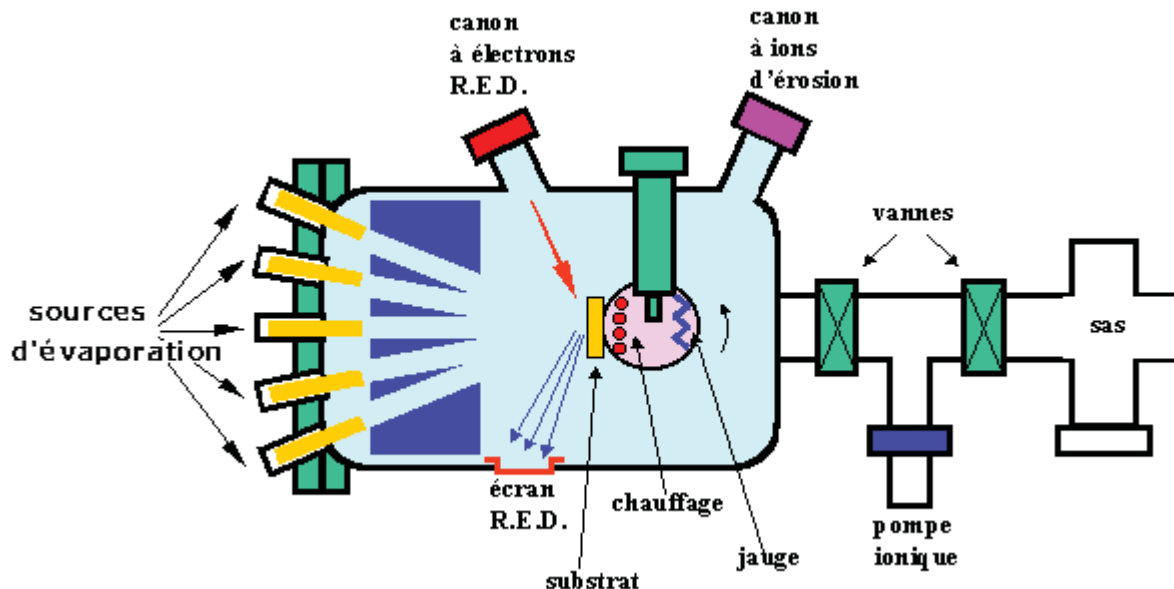


Figure 1-11 : Bâti d'épitaxie par jet moléculaire, EJM, ou Molecular Beam Epitaxy, MBE (d'après D.V Morgan et K. Board [21]).

L'observation et le contrôle de l'épitaxie in situ se fait par le système RHEED (Figure 1-12), qui est composé d'un canon à électrons, d'un écran phosphorescent et d'une caméra CCD. Les électrons sont accélérés avec une tension proche de 30kV. Le faisceau interagit avec la surface de l'échantillon avec un angle d'incidence rasant (1° à 3°) pour être en partie diffusé,

le reste étant transmis, réfléchi ou diffracté. La figure de diffraction est la projection sur l'écran fluorescent de l'intersection du réseau réciproque de la structure cristalline étudiée avec la sphère d'Ewald associée aux électrons incidents. Les parties réfléchies et diffractées forment respectivement la tache spéculaire et la figure de diffraction sur l'écran fluorescent. La caméra CCD capture l'image et envoie le signal à l'ordinateur où il sera traité à l'aide d'un logiciel développé par C. Botella à l'INL [23].

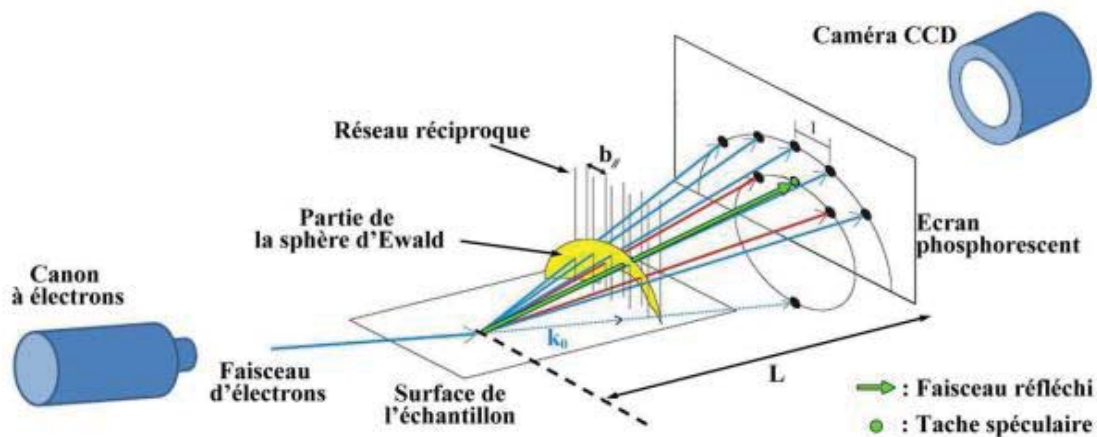


Figure. 1-12 : Schéma du système RHEED et principe de la diffraction de surface.

Les principaux avantages de l'épitaxie par jets moléculaires sont :

- ♣ Une faible vitesse de croissance (de l'ordre d'une monocouche par seconde pour l'InP) ce qui permet le control de la structure.
- ♣ Une interruption rapide des flux permettant la réalisation d'interfaces abruptes.
- ♣ Une croissance hors de l'équilibre thermodynamique, permettant la croissance de nombreux alliages métastables.

1.6. Applications des boîtes quantiques dans l'optoélectronique et la photonique

Les nanostructures semi-conductrices présentent de très nombreux intérêts. Grâce à leurs propriétés électroniques et optiques exceptionnelles, et suite au progrès technologiques réalisés dans les méthodes de fabrication et de synthèse. La possibilité de réaliser des boîtes quantiques de matériaux appartenant à la famille des nitrures semiconducteurs à grand gap (GaN, AlN) permet d'étendre potentiellement la gamme des longueurs d'onde accessibles au bleu et à l'ultraviolet qui suscitent actuellement un énorme intérêt pour les applications optoélectroniques (LEDs, etc). Ces structures peuvent être facilement intégrées dans de nombreux dispositifs optoélectroniques principalement dans le domaine des

télécommunications optiques. Elles peuvent aussi être utilisées pour la réalisation de cellules photovoltaïques et de diodes électroluminescentes. Les propriétés spécifiques des boîtes quantiques (niveaux discrets, raies fines d'émission et une haute efficacité radiative proche de 100%) permettent également d'envisager la conception de composants optoélectroniques novateurs basés sur une seule boîte quantique en guise de sources de photons uniques. Les boîtes quantiques ont été préférées aux autres hétérostructures telles que les puits ou les fils quantiques dans les lasers car elles présentent plusieurs avantages :

- ♣ La densité de porteurs ne changeant pas avec la température, le gain du laser reste stable.
- ♣ Étant donné le caractère discret des niveaux d'énergie, on peut envisager un gain supérieur à celui obtenu dans une structure à puits et d'abaisser le seuil du fonctionnement du laser. De plus, les recombinaisons non radiatives sont limitées.
- ♣ Le gain optique est plus élevé car les porteurs sont concentrés sur des gammes d'énergie plus étroites.

En introduisant des boîtes quantiques à l'intérieur des cavités optiques (cristaux photoniques ou microdisques), on peut obtenir un régime de couplage faible ou fort entre une boîte quantique et un mode de la cavité. Ce qui ouvre la voie vers des applications en photonique.

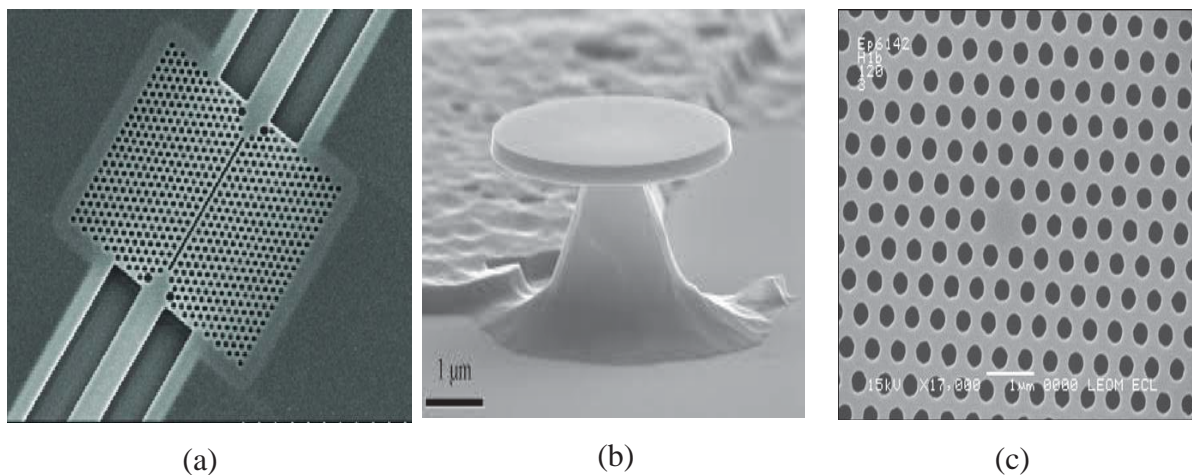


Figure 1-13 : Cavités destinées aux applications photoniques : (a) : Cavités à cristal photonique contenant une boîte quantique unique, (b) : Micro disque GaAs, image au microscope électronique, et (c) Cavité à cristaux photoniques formée d'un trou manquant dans un cristal photonique parfait. Le cristal photonique est gravé dans une membrane GaAs de 180 nm d'épaisseur.

L'insertion des matériaux nanostructures à base des boites quantiques dans la conception photovoltaïque (Figure 1-14), a connu un grand intérêt pour les chercheurs dans le domaine des énergies renouvelables. Elle offre la possibilité d'utiliser les effets du confinement quantiques

des porteurs de charges pour améliorer l'efficacité des dispositifs photovoltaïques. Un meilleur rendement à moindre coût, c'est ce que promettent les « quantum dots » dans le domaine des panneaux solaires photovoltaïques. Les QDs pourraient bénéficier aux cellules solaires en accordant une sensibilité optique souhaitable pour couvrir des parties spécifiques du spectre solaire, afin d'optimiser le rendement. Une nouvelle génération des panneaux solaires, appelée cellule solaire à bandes intermédiaire, utilise des points quantiques de différentes formes entre les jonctions p-n.

Lorsque plusieurs couches de QDs de taille uniforme sont empilées, les niveaux d'énergie discrets peuvent former une bande dite intermédiaire. Deux niveaux d'absorption de photons peuvent être réalisés sous ce mécanisme. Lorsqu'en plaçant les boîtes quantiques identiques dans un motif étroitement espacé, les fonctions d'onde des porteurs de charge se chevaucheront. Ce chevauchement créera une bande intermédiaire (IB) (figure 1-14) qui a un niveau de quasi-Fermi distinct des bandes de conduction et de valence du hôte semi-conducteur et les électrons seront dans un état délocalisé. Cela augmentera la probabilité d'absorption [24].

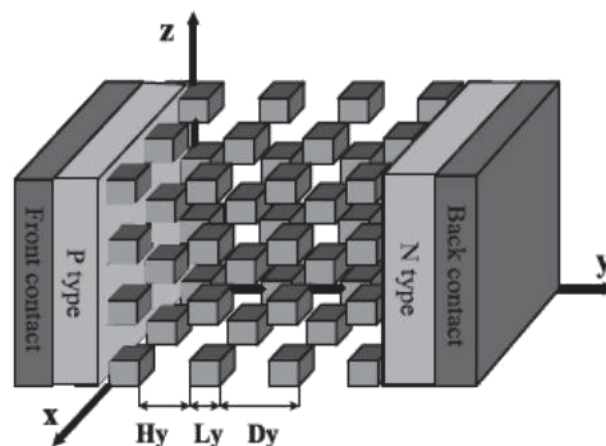


Figure 1-14 : Schéma de cellule solaire IBSC de type *p-i-n* avec des boîtes quantiques cubique (QDs-IBSC) [24].

1.7. Modèle théorique et résolution numérique de l'équation de Schrödinger

1.7.1. Hamiltonien d'un solide

Dans un cristal, l'Hamiltonien s'écrit sous la forme :

$$H = H_e + H_{ion} + H_{e-ion} \quad (1.9)$$

L'Hamiltonien électronique (électrons de valence) peut se détailler comme suit :

H_e = énergie cinétique + énergie de coulomb

$$H_e = \sum_j \frac{P_j^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{jj'} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r}_j - \vec{r}_{j'}|} \quad (\vec{r}_j \text{ et } \vec{r}_{j'} \text{ sont des vecteurs}) \quad (1.10)$$

e : charge élémentaire ($e=1,6.10^{-19}\text{C}$).

La partie ionique (noyau + électrons de cœur) s'écrit :

$$\begin{aligned} H_{\text{ion}} &= H_{\text{ion (cinétique)}} + H_{\text{ion-ion}} \\ H_{\text{ion}} &= \sum_i \frac{P_i^2}{2M_i} + \frac{1}{2} \sum_{ii'} V_{\text{ion}}(\vec{R}_i - \vec{R}_{i'}) \end{aligned} \quad (1.11)$$

L'interaction ion-électron est donnée par :

$$H_{e\text{-ion}} = \sum_{j,i} V_{e\text{-ion}}(\vec{r}_j - \vec{R}_i) \quad (1.12)$$

1.7.1.1. Approximation de Born-Oppenheimer

L'hypothèse de l'approximation adiabatique de Born-Oppenheimer :

Les ions seront considérés comme immobiles situés à leurs positions d'équilibres lorsqu'on traite un mouvement où on ne s'intéresse qu'aux électrons. Dans ce cas, on peut négliger le mouvement collectif des ions et écrire pour les électrons l'équation de Schrödinger suivante des états stationnaires en y incluant le terme d'interaction coulombien $H_{e\text{-ion}}$:

$$(H_e + H_{e\text{-ion}})\psi = E_e\psi \quad (1.13)$$

Les coordonnées des ions avec leurs électrons de cœur sont fixes. La fonction d'onde du système dépend uniquement des coordonnées des électrons et des coordonnées des ions.

La fonction d'onde totale s'écrit comme le produit de deux fonctions d'ondes celles des électrons et celles des ions :

$$\psi_{\text{tot}} = \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \varphi(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N'}) \quad (1.14)$$

N = nombre d'électrons de valence

N' = nombre d'ions.

L'équation de Schrödinger totale donne :

$$\begin{aligned} H\psi_{\text{tot}} &= E_{\text{tot}}\psi_{\text{tot}} \\ H\psi_{\text{tot}} &= (H_e + H_{e\text{-ion}} + H_{\text{ion}})\psi_{\text{tot}} \end{aligned} \quad (1.15)$$

Comme on a dit que la fonction ψ est indépendante de la position des ions i , on peut écrire :

$$\begin{cases} (H_e + H_{e\text{-ion}})\psi = E_e\psi \\ (H_e + H_{\text{ion}})\varphi = E_{\text{tot}}\varphi \end{cases}$$

Ce qui permet de découpler l'équation sur les électrons de valence et les ions.

Dans l'équation sur les électrons, on remplace la position des ions par leur position à l'équilibre. C'est l'approximation de **Born-Oppenheimer**.

1.7.1.2. Approximation de Hartree

Nous allons maintenant nous intéresser uniquement aux électrons de valence qui sont plongés dans le potentiel produit par les ions rigides. Notre problème va résider dans l'interaction électron-électron qui est toujours un problème à N corps difficile à résoudre. Sans cette interaction nous serions devant un problème à un seul électron.

L'approximation de Hartree va permettre de réduire l'Hamiltonien à N électrons en un Hamiltonien à un électron plongé dans un potentiel produit par le gaz d'électrons et les ions du cristal. On aura :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right\} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad \text{avec} \quad U(\vec{r}) = V(\vec{r}) + \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{j \neq j'} \langle \psi_{j'} | \frac{1}{r_{jj'}} | \psi_{j'} \rangle \quad (1.16)$$

$U(r)$ sera le potentiel cristallin qui représente le potentiel créé par les ions immobiles du cristal et l'interaction du gaz d'électrons de valence avec l'électron traité dans l'équation. Ce dernier sera représentatif des propriétés électroniques du cristal.

Ce potentiel cristallin va évidemment posséder la symétrie et la périodicité du cristal.

Munis de cette équation, qui nous semble plus simple, nous pouvons maintenant aborder le problème des états électroniques dans un cristal.

1.7.2. Approximation de la masse effective

Les structures de basse dimensionnalité peuvent être étudiées par différentes méthodes telles que : la méthode pseudo-potential empirique [25], la méthode k.p des bandes [26], la méthode de la masse effective... Mais il est révélé que la dernière reste la plus adaptable à la compréhension des résultats expérimentaux [26].

L'approximation de la masse effective est une approche qui permet de prendre en considération la perturbation $U(r)$, s'ajoutant au potentiel effectif de Hartree-Fock, peu importe l'origine de cette perturbation (potentiel coulombienne, champ électrique ou magnétique extérieur, ou tout autre perturbation). Plus particulièrement, cette approximation permet d'étudier un électron de la bande de conduction perturbé par un potentiel ou un champ extérieur comme un électron libre de masse m^* . Cette masse effective tient compte de l'interaction de l'électron avec le potentiel périodique dû au réseau cristallin (les ions du système sont supposés fixes). Un des principaux avantages de cette approche est de pouvoir s'adapter aux différentes

situations physiques, tout en offrant la possibilité de faire des calculs analytiques aptes à des interprétations physiques. En revanche, cette méthode n'est adaptée qu'à l'étude des états électroniques situés à $k=0$. Autrement dit, cette masse effective correspond à la bande d'énergie en son minimum [25-26]. L'Hamiltonien d'un électron s'écrit :

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \quad (1.17)$$

On sait que l'impulsion \vec{p} d'un électron dans le vide est liée à son vecteur d'onde \vec{k} par la relation :

$$\vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (1.18)$$

Et son énergie est :

$$E(\vec{k}) = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.19)$$

L'Hamiltonien présente la périodicité du réseau cristallin, et ses états propres sont présentés par les fonctions de Bloch [27] :

$$\phi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = U_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \quad (1.20)$$

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. La solution de l'équation de Schrödinger $H\phi_n(\vec{r}) = E_n\phi_n(\vec{r})$ se fait en général dans la première zone de Brillouin et les autres valeurs de $E_n(\vec{k})$ dans l'espace des \vec{k} s'obtiennent par périodicité et rabattement dans cette zone (figure 1-10).

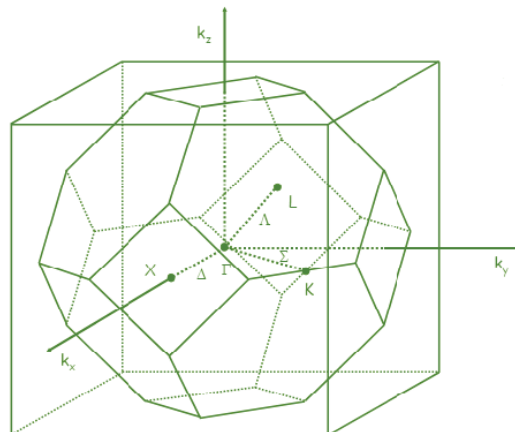


Figure 1-15 : Première zone de Brillouin d'un réseau à cubique à face centrée. Les directions ΓX et ΓL sont les directions de haute symétrie [100] et [111].

D'après le raisonnement de la description de l'électron par l'approximation de la masse effective, on peut décrire l'effet d'un potentiel supplémentaire $U(r)$, qui est considérée comme une perturbation, par une fonction d'onde sous la forme $\phi(r) = u_0(r)\varphi(r)$. Après on cherche à résoudre une équation différentielle qui porte sur la fonction enveloppe $\varphi(r)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\varphi(r)+U(r)\varphi(r)=(E-E_g)\varphi(r) \quad (1.21)$$

La partie locale $u_0(r)$ de la fonction de Bloch est déterminée par la seule structure atomique du semi-conducteur. Elle est donc indépendante du potentiel de confinement. L'effet du confinement est totalement contenu dans la fonction enveloppe $\phi(r)$ du porteur, donnée par les états d'un électron (ou trou) dans le potentiel de confinement.

La condition importante pour que l'approximation de la masse effective soit valide est que la fonction enveloppe soit suffisamment régulière en termes de périodicité du réseau cristallin. En d'autres termes, chaque période de la fonction enveloppe doit contenir un nombre suffisant d'atomes, afin que l'approximation puisse être appliquée. Dans le tableau 1-1 sont indiquées les masses effectives et les bandes interdites pour certains matériaux semi-conducteurs courants.

Table 1-1 : Masses effectives d'électrons et de trous et largeur des bandes interdites pour certains matériaux semi-conducteurs courants.

| Matériau | $m_e^*[m_e]$ | $m_h^*[m_e]$ | E_g (eV) |
|----------|--------------|--------------|------------|
| Si | 0.19 | 0.50 | 1.12 |
| Ge | 0.08 | 0.28 | 0.661 |
| GaAs | 0.067 | 0.65 | 1.424 |
| GaP | 0.35 | 0.5 | 2.26 |
| InP | 0.08 | 0.2 | 1.344 |
| InSb | 0.013 | 0.18 | 0.17 |
| InAs | 0.02 | 0.41 | 0.354 |
| GaSb | 0.05 | 0.4 | 0.726 |
| CdSe | 0.14 | 0.37 | 1.74 |
| CdS | 0.27 | 0.07 | 2.42 |

1.7.3. Formalisme de la fonction enveloppe

Dans les semi-conducteurs, le vecteur d'onde \vec{K} est considéré comme une variable plutôt qu'un opérateur. Mais en raison du confinement spatial, la périodicité du potentiel cristallin disparaît dans certaines directions, et donc le vecteur d'onde correspondant dans ces directions

devient opérateur. La théorie des masses effectives évolue vers la théorie de la fonction enveloppe dans les systèmes semi-conducteurs de faible dimension et constitue la base théorique des calculs des structures de sous-bandes.

Lorsqu'on applique le formalisme de la fonction enveloppe à des systèmes semiconducteurs de faible dimension, le théorème de la masse effective est central. Le but de ce théorème est de remplacer le vecteur d'onde, disons k_z , dans l'Hamiltonien en utilisant la masse effective d'un semi-conducteur et en utilisant l'opérateur différentiel $-i\frac{\partial}{\partial z}$, dans l'Hamiltonien perturbé, pour chercher une solution pour les fonctions enveloppe. La perturbation peut être un puits quantique, une barrière, une impureté, une excitation extérieure ou un super-réseau. En écrivant la perturbation comme $V(r)$, et la fonction enveloppe comme $F_i(r)$ pour la $i^{\text{ème}}$ bande, nous devons résoudre une équation différentielle du second ordre pour obtenir les niveaux d'énergie :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + V(r)\right)F_i(r) = EF_i(r) \quad (1.22)$$

Le semi-conducteur en volume non perturbé peut servir au cas limite du théorème de la masse effective. Par exemple, pour une seule bande parabolique d'énergie sous la forme de

$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$, l'équation de Schrödinger pour la fonction enveloppe devient :

$$\left(-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m^*}\right)F(r) = EF(r) \quad (1.23)$$

La relation de dispersion d'un électron dans le cristal n'est pas la même pour un électron en espace libre. Donc m^* est généralement différente de la masse de l'électron en espace libre.

$$m^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial K^2}\right)^{-1} \quad (1.24)$$

Dans une condition aux limites périodiques, cette équation donne directement la solution

$F(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{ik \cdot r}$ et l'énergie $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$, où le coefficient $\frac{1}{\sqrt{\Omega}}$ est introduit pour normaliser la

fonction d'onde. La fonction d'onde totale est :

$$\psi(r) = F(r)U_{nk_0}(r) \quad (1.25)$$

Où $U_{nk_0}(r)$ la fonction de base du bord de la bande. On peut voir dans ce théorème la masse effective est explicitement utilisée dans l'équation de Schrödinger. Les vecteurs d'ondes dans les directions de confinement sont remplacés par l'opérateur différentiel $\left(-i \frac{\partial}{\partial r}\right)$, où r est la coordonnée dans la direction de confinement, puis les énergies et les fonctions enveloppes sont résolues. Par exemple, dans une boîte quantique cubique, de côté $L_x = L_y = L_z = L$, l'équation de la fonction enveloppe est la suivante :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + V(x, y, z)\right) F_{m,n,k}(x, y, z) = E_{m,n,k} F_{m,n,k}(x, y, z) \quad (1.26)$$

Où m, n, k marquent les sous-bandes en raison du confinement dans les directions x, y et z . Si la fonction enveloppe $F_{m,n,k}(x, y, z)$ est résolue, la fonction d'onde totale est donnée par :

$$\psi(r) = F_{m,n,k}(x, y, z) \exp(ikr) \quad (1.27)$$

Et l'énergie est donnée par :

$$E = E_{m,n,k} = (m^2 + n^2 + k^2) \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* L^2} \quad (1.28)$$

Avec m, n et k sont des entiers.

1.7.4. Approche variationnelle

Dans de nombreux cas, si l'expression analytique des fonctions des ondes est disponible, la détermination des propriétés d'un système quantique devient très pratique. La méthode variationnelle est une approche qui peut être utilisée pour estimer l'énergie de l'état fondamental. Maintenant, nous reprenons brièvement le principe de la méthode variationnelle.

La fonction d'onde de l'état de base, ψ doit satisfaire à l'équation de Schrödinger :

$$H\psi = E\psi \quad (1.29)$$

Pour déterminer les niveaux énergétiques d'une particule dans un potentiel donné, il faut donner une résolution analytique de l'équation de Schrödinger, ce qui est très difficile. Pour cela, nous examinons une approximation des valeurs propres par la méthode variationnelle dite de Ritz [28,29]. Il y a un très grand nombre de travaux qui ont été faits avec la méthode variationnelle. Leurs résultats étaient très satisfaisants et en bon accord avec les résultats

expérimentaux. Cette méthode est basée sur la détermination de l'énergie fondamentale

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \text{ où } |\psi\rangle \text{ est un état arbitraire de la particule.}$$

Le choix de la fonction d'essai est un paramètre très important pour que la méthode variationnelle soit convenable pour décrire les propriétés d'un système quantique.

Dans cette méthode, on pourrait essayer toutes les fonctions d'onde pour identifier celle de l'état fondamental, mais malheureusement ce procédé n'est pas réaliste. Cependant, on peut se contenter d'explorer une région limitée de l'espace des fonctions d'onde au moyen d'une fonction test qui doit respecter les conditions aux limites (et toute autre contrainte physique) et représenter au mieux le système physique considéré. C'est pour cela la fonction choisie doit être normalisée et dépend d'un ou plusieurs paramètres libres. Alors le but principal de l'approche variationnelle est de déterminer ces paramètres libres, en prenant α comme paramètre variationnelle, qui minimise la valeur du fonctionnel afin de trouver la configuration d'énergie minimale.

$$E = \min_{\alpha} \left(\frac{\int \psi^*(\alpha, r) H \psi(\alpha, r)}{\int \psi^*(\alpha, r) \psi(\alpha, r)} \right) \quad (1.30)$$

1.8. Les excitons dans les semi-conducteurs nanocristallins

Aux basses températures, un semiconducteur possède une bande de conduction vide d'électrons, et une bande de valence saturée. L'excitation avec un photon dont l'énergie est au moins égale à l'énergie de gap, permet d'amener un électron, de vecteur d'onde \vec{k} donné, dans la bande de conduction, entraînant la création d'un état inoccupé dans la bande de valence. Cette vacance est effectivement traitée comme l'apparition d'une particule de charge positive et de vecteur d'onde $-\vec{k}$ appelée trou. L'électron et le trou formant un couple de deux particules de charges opposées, peuvent, par interaction coulombienne, former un état lié d'énergie inférieure à l'énergie E_g de la bande interdite (l'énergie du haut de la bande de valence est prise comme zéro des énergies) appelé **exciton**. L'énergie et la fonction d'onde enveloppe de l'exciton sont solutions de l'équation suivante :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r}_e - \vec{r}_h|} \right) \psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = E\psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \quad (1.31)$$

Les termes de l'Hamiltonien correspondent respectivement aux opérateurs énergie cinétique de l'électron et du trou, de position \vec{r}_e et \vec{r}_h , et à l'opérateur interaction coulombienne ; ϵ_0 est la permittivité électrique du vide.

L'énergie de liaison du 1^{er} niveau est obtenue en remplaçant la masse effective de l'électron par la masse réduite du système (e-h) et la constante diélectrique statique ϵ_0 par la constante diélectrique dynamique $\epsilon_0\epsilon_r$. Cette énergie permet de définir le rayon de Bohr a_B de

l'exciton (L'énergie de liaison est donnée dans le modèle de Bohr par $-\left(\frac{e^2}{2r\epsilon}\right)$, a_B vaut donc :

$$a_B = \frac{\left(\frac{h}{2\pi}\right)\epsilon^2}{\mu e^2} \quad (1.32)$$

Où μ représente la masse réduite de l'exciton :

$$\frac{1}{\mu^*} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \quad (1.33)$$

m_e^* et m_h^* sont respectivement les masses effectives de l'électron et du trou.

La réduction de la taille du semiconducteur conduit l'exciton à un état de confinement. Les effets seront plus ou moins importants suivant la taille du nanocrystal considéré. Le rayon de Bohr étant la longueur de référence.

L'exciton confiné subit deux potentiels [30] :

- L'interaction coulombienne, qui lie les deux particules qui le forment. Elle est caractérisée par l'énergie de liaison.
- Le puits de potentiel.

Différents régimes de confinement existent selon l'importance de ces potentiels qui dépendent de la taille du nanocrystal, de la constante diélectrique et des masses effectives que l'on trouve dans l'expression du rayon de Bohr de l'exciton.

1.8.1. Confinement fort $R < a_B$

C'est le cas où le confinement du puits est prépondérant. Le puits dissocie la paire électron-trou et quantifie les mouvements des deux particules séparément. Les énergies des premières transitions sont données par la relation [31] :

$$E_n = E_g + n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2R^2 \mu} \quad (1.34)$$

1.8.2. Confinement faible $R > a_B$

C'est un cas proche de celui du cristal massif, où les effets dus au puits sont faibles. L'énergie de l'exciton s'écrit :

$$E_n = E_g - \frac{1}{n^2} \frac{\hbar^2 \pi^2}{2R^2 \mu} + \frac{\hbar^2 K^2}{2M}$$

(1.35)

Où $M = m_e^* + m_h^*$ est la masse totale de l'exciton.

1.8.3. Confinement intermédiaire $a_{Be} > R > a_{Bh}$

a_{Be} et a_{Bh} sont respectivement les rayons de Bohr de l'électron et du trou, ils représentent leur extension spatiale. Les deux porteurs ne sont pas confinés de la même façon. L'énergie cinétique de l'électron est plus grande que celle du trou ; il se déplace donc plus rapidement. Le trou se localise plutôt au centre du nanocristal. L'énergie de la première transition s'écrit [31] :

$$E = E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2R^2 \mu} - \frac{1.8 e^2}{\epsilon R} \quad (1.36)$$

Dans cette équation, E_g est le gap du matériau massif. Le deuxième terme correspond au confinement quantique d'un puits de potentiel sphérique. Le troisième terme, dit d'attraction coulombienne, comporte la permittivité diélectrique relative du matériau ϵ ainsi que celle du vide ($\epsilon_0 = 8.854 \cdot 10^{-12} \text{F/m}$).

1.9. Etat d'un électron lié à une impureté ionisée

L'existence inévitable des défauts dans les matériaux semi-conducteurs à un effet négatif sur les performances des composants optoélectroniques. L'origine des défauts natifs intrinsèques est soit due à un manque stœchiométrique, soit à un traitement thermique ou à des irradiations. Alors que pour les défauts extrinsèques, comme les impuretés, peuvent être intentionnellement introduites ou non-intentionnelles due à un processus de traitement chimique ou physique.

Les propriétés optiques et électriques sont particulièrement sensibles à la présence de l'impureté (donneur ou accepteur) dans les semiconducteurs. L'introduction des impuretés a pour effet l'apparition d'états localisés dans la bande interdite, modifiant ainsi les propriétés optiques et de transport des électrons. C'est de cette manière qu'on a pu fabriquer les premiers

diodes et transistors qui ont été la pierre angulaire de la révolution du monde des télécommunications tel que nous le connaissons actuellement.

Sachant que la nature quantique de l'électron est prédominante dans les boîtes quantiques, la présence d'une impureté modifie considérablement leurs propriétés à cause de l'interaction coulombienne entre l'électron et l'ion impureté. D'autre part, à cause du confinement géométrique, l'électron reste localisé près de l'ion impureté et l'énergie de liaison se trouve ainsi renforcée. Ce raisonnement a pour but d'évaluer l'effet de la position, de la dimension géométrique et de la barrière de potentiel, qu'elle soit finie ou infinie, sur l'énergie de liaison. Bastard [32] a été le premier qui a étudié l'effet des impuretés dans les nanostructures. Il a montré que l'énergie de liaison d'une impureté dans un puits quantique infiniment profond augmente lorsque la taille du puits diminue. Il a étudié aussi l'effet de la position de l'impureté dans le puits et il a trouvé que l'énergie de liaison atteint sa valeur maximale lorsque l'impureté est située au centre du puits. Brown et Spector [33] ont calculé l'énergie de liaison d'une impureté confinée pour une barrière finie et infinie et pour une position arbitraire de l'impureté. Porras-Montenegro [34] a déterminé l'énergie de liaison d'une impureté en fonction du rayon de la structure et de la position de l'impureté. Il a trouvé que dans le cas d'un puits infini, l'énergie de liaison augmente d'une façon monotone avec la diminution de la taille de la boîte quantique sphérique. Dans le cas d'un puits fini, l'énergie de liaison augmente avec la diminution de la taille de la boîte et présente un maximum pour un rayon critique. Ses résultats montrent que dans le cas d'une barrière de potentiel infinie, l'énergie augmente au fur et à mesure que le rayon diminue et que dans le cas d'une barrière finie, l'énergie atteint un maximum puis diminue. Dans les deux cas (barrière finie ou infinie), l'énergie tend vers une limite correspondant à un atome d'hydrogène 1D.

L'application d'une perturbation extérieure (champ magnétique, champ électrique, pression hydrostatique...) perturbe les niveaux d'énergie à l'intérieur des bandes, mais c'est une manière de localiser et de contrôler les états quantiques de l'impureté. L'application d'un champ magnétique, par exemple, augmente l'énergie de liaison de l'électron avec l'impureté au centre. On trouve que l'application d'un champ magnétique introduit des états supplémentaires. Ces états sont appelés niveaux de Landau. Récemment, Zounoubi et Zorkani [35] ont étudié l'influence du champ magnétique sur l'énergie de liaison et la polarisabilité d'une impureté donneur peu profonde placée au centre d'un point quantique cylindrique (CQD). Ils ont constaté que le champ magnétique augmente l'énergie de liaison et réduit fortement la polarisabilité. Pour des points quantiques larges, les effets d'un champ magnétique fort sont prédominants. Erdogan [36] a étudié les effets des champs électriques et magnétiques sur la

polarisation dans des fils à puits quantiques cylindriques GaAs / AlAs. Il a constaté que la polarisation diminue avec l'augmentation de l'intensité des champs magnétiques. Villamil et Cabraa [37] ont rapporté un calcul des énergies de liaison et de transition pour une impureté donneuse peu profonde dans un QWW cylindrique GaAs – GaAlAs en fonction du rayon du fil, de la position de l'impureté et du champ magnétique appliqué. Ils ont montré comment les confinements géométrique et magnétique entrent en concurrence pour la localisation de la fonction d'onde porteuse et leurs effets sur la détermination de l'énergie de liaison. Safwan et Hekmat. [38] ont étudié l'énergie de liaison et la stabilité des excitons chargés dans les points quantiques cylindriques semi-conducteurs. Les résultats des calculs montrent que l'énergie de liaison de l'impureté dépend de la position de l'impureté, des paramètres structuraux des boîtes quantiques couplées tels que le rayon et la taille de la boîte.

1.10. Effet des perturbations extérieures

1.10.1. Effet d'un champ magnétique :

L'application d'un champ magnétique intense à une structure quantique modifie les niveaux d'énergie en introduisant des états supplémentaires. L'application d'un champ magnétique à un semi-conducteur modifie considérablement ses propriétés électroniques et optiques. De nombreux phénomènes apparaissent, le plus connu est la quantification des niveaux énergétiques dans les bandes de conduction et de valence nommés niveaux de Landau. Cette perturbation du champ magnétique donne l'apparition à d'autres phénomènes : on trouve, (i) la résonance cyclotronique qui caractérise les transitions entre les niveaux magnétiques de la même bande, (ii) la magnétoabsorption qui caractérise les transitions entre les niveaux de Landau des bandes de conduction et de valence et (iii) l'effet Zeeman, qui désigne la séparation d'un niveau atomique d'énergie d'une impureté ou d'une molécule en plusieurs sous-niveaux distincts.

Dans le cas d'un champ faible, le potentiel Coulombien l'emporte sur les termes dus aux effets magnétiques. Pour des champs magnétiques intermédiaires, l'effet du potentiel Coulombien est comparable à celui du champ magnétique et la fonction d'onde enveloppe de l'impureté, dans son état fondamental, prend la forme d'un œuf.

L'intensité du champ appliqué est considérée faible dans le cas où $\hbar\omega_c \leq 2R^*$ (R^* étant l'énergie de Rydberg et ω_c est la fréquence cyclotronique), et forte dans le cas contraire. Pour mieux comprendre l'effet du champ magnétique sur les nanostructures, nous étudions l'influence du champ magnétique B sur l'énergie fondamentale d'une impureté donneuse de

masse effective m^* et de charge e confinée dans un puit quantique. Nous supposons que l'impureté est placée au centre, et le champ magnétique est parallèle à l'axe de croissance (Oz). Nous considérons que les bandes de conduction des deux matériaux formant le puits et la barrière sont paraboliques. L'Hamiltonien du système s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m^*} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e^2}{\epsilon r} + V(r) \quad (1.37)$$

Le premier terme est l'opérateur d'énergie cinétique en présence du champ magnétique du potentiel vecteur \vec{A} , en général \vec{p} ne commute avec \vec{A} que si $div\vec{A} = 0$ ce qui est réalisé en choisissant une jauge de coulomb symétrique :

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \wedge \vec{r} \quad (1.38)$$

En tenant compte de la symétrie du système, nous pouvons introduire les coordonnées du système en utilisant les unités atomiques, où l'unité de longueur est le rayon de Bohr effectif

$$(a^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m^* e^2}), \text{ et comme unité d'énergie le Rydberg effectif } (R^* = \frac{m^* e^4}{\hbar^2 \epsilon^2}).$$

Dans le cadre des unités réduites, l'Hamiltonien s'écrit :

$$H = -\Delta - \frac{2}{r} + \frac{\gamma^2}{4} (x^2 + y^2) + \gamma L_z + V(r) \quad (1.39)$$

γ est un paramètre sans dimension. Il caractérise le rapport entre l'énergie magnétique et l'énergie Coulombienne de l'électron donneur. Il est donné par $\gamma = \frac{\hbar \omega_c}{2R^*}$, avec $\omega_c = \frac{eB}{m^* c}$ est appelée fréquence cyclotronique. L_z est la composante suivant Oz du moment cinétique orbital de l'électron et $V(r)$ est le potentiel de confinement.

Pour déterminer les niveaux d'énergie et les fonctions d'ondes associées à l'Hamiltonien (1.50), il faut trouver une résolution de l'équation de Schrödinger. Ceci est possible avec la méthode variationnelle de Rietz qui nécessite le choix d'une fonction d'essai contenant des paramètres variationnelles (comme indiqué dans 1-7 [28,29]).

Le comportement d'une impureté donneur dans les systèmes nanocristallins en présence d'un champ magnétique, a fait l'objet de nombreux travaux [29]. L'ensemble de ces travaux ont montré que la présence du champ magnétique renforce l'énergie de liaison et provoque une compétition entre la taille des boîtes, l'interaction Coulombienne (en fonction de la position de l'impureté) et le champ magnétique.

1.10.2. Effet d'un champ électrique

L'Hamiltonien d'un électron (trou) confiné dans un système de boites quantiques en présence d'un champ électrique F parallèle à l'axe de croissance z est donné par l'expression suivante :

$$H = \frac{p^2}{2m^*} \pm eFz \quad (1.40)$$

Où le premier terme est l'énergie cinétique en absence du champ électrique, e est la charge élémentaire, le signe $+$ correspond aux électrons, le signe $-$ aux trous. Pour obtenir les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde en présence de champs électrique il faut résoudre l'équation de Schrödinger selon la géométrie de la nanostructure à considérer (cylindrique, parallélépipédique, ou sphérique).

Alors l'équation de Schrödinger décrivant l'état stationnaire d'un électron dans un semi-conducteur plongé dans un champ électrique est de la forme :

$$\left[\frac{p^2}{2m^*} + eFz \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1.41)$$

Où $\psi(\vec{r})$ est la fonction enveloppe.

L'intensité du champ électrique influence le mouvement de l'électron le long de la direction de croissance z , alors l'électron n'est pas affecté par le champ F suivant les deux directions Ox et Oy . Ceci nous a permis de trouver des solutions de la fonction enveloppes sous la forme :

$$\psi(r) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) \varphi(z) \quad (1.42)$$

L'équation de Schrödinger se simplifie :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d\varphi(z)}{dz} + eFz\varphi(z) = E_z\varphi(z) \quad (1.43)$$

Avec :

$$E_z = E - \frac{\hbar^2}{2m^*} (K_x^2 + K_y^2) \quad (1.44)$$

On peut transformer l'équation (1-34) sous une forme standard :

$$\frac{d^2\varphi(\xi)}{d\xi^2} - \xi\varphi(\xi) = 0 \quad (1.45)$$

Avec ξ est un paramètre sans dimensions écrit sous la forme : $\xi = \left(z - \frac{E_z}{eF} \right) \left(\frac{2m^* eF}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}}$

Donc la fonction enveloppe qui satisfait l'équation de Schrödinger est donnée par :

$$\psi(r) = N \exp(i(k_x x + k_y y)) Ai(\xi) \quad (1.46)$$

N est la constante de normalisation qui correspond à $(2m^*)^{1/3} / (\pi)^{1/2} (eF)^{1/6} (\hbar)^{2/3}$

$Ai(\xi)$, est la fonction d'Airy [39]. Son expression générale est sous la forme :

$$Ai(\xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[i\left(\frac{u^3}{3} + u\xi\right)\right] du \quad (1.47)$$

Parmi les effets du champ électrique, on peut citer :

- ♣ Diminution des séparations en énergies entre les niveaux de l'électron dans la bande de conduction et ceux des trous dans la bande de valence, ce qui entraîne un déplacement vers le rouge du spectre d'absorption (Red Shift).
- ♣ Réduction du recouvrement des fonctions d'ondes de l'électron et du trou. Par conséquent, la force de l'oscillateur qui caractérise l'intensité de la transition optique diminue.
- ♣ Les règles de sélections relatives aux transitions optiques ($\Delta n_z=0$), dans les puits quantiques, ne sont pas respectées puisque le champ électrique mélange les états pairs et impairs et par conséquent apparition des transitions optiques interdites en absence du champ.

Ces conséquences sont désignées par effet Stark confiné (Quantum Confined Stark Effect : QCSE). Cet effet Stark peut être exploité dans un dispositif électromodulateur, qui par l'application d'une tension électrique module l'intensité d'un faisceau lumineux.

1.11. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les propriétés des nanostructures semi-conductrices ainsi que leurs classifications. Ces matériaux nanostructurés sont obtenus par différentes méthodes de croissance ouvrant le champ au développement industriel. L'étude des propriétés optoélectroniques nécessite des méthodes de résolution telles que la méthode de pseudo potentiel, la méthode K-p des bandes et la méthode variationnelle dans le cadre de l'approximation de la masse effective. Pour étudier les propriétés des structures de faible dimension, nous avons choisis la méthode variationnelle dans le cadre de la masse effective qui est une approximation puissante et adaptable. Après une section qui a été consacrée aux excitons et aussi aux impuretés dans les matériaux massifs et nanocristallins suivie par un survol

rapide sur les méthodes de croissance les plus utilisées, nous avons cité quelques avantages et applications scientifiques et technologiques des boîtes quantiques.

Références bibliographiques du 1^{er} chapitre

- [1] J Hu, Li Ls, W Yang, L Manna, Wang Lw, and A. P. Alivisatos. Linearly polarized emission from colloidal semiconductor quantum rods. *Science (New York, N.Y.)*, **292**, (2001).
- [2] Victor I. Klimov. *Semiconductor and Metal Nanocrystals: Synthesis and Electronic and Optical Properties*. Marcel Dekker, Inc., New York, (2004).
- [3] Y. C. Kim, Y. D. Klein, M. V. Ren, S. F. and Chang and J. K. Lou, H. Samarth, N. Furdyna. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, **49**, 11, (1994).
- [4] D. Bimberg, M. Grundmann, N. N. Ledentsov, *Quantum Dot Heterostructures*. John Wiley and Sons, (1999).
- [5] R.C. Ashoori. *Nature* **379**(6564), 413, (1996).
- [6] Z.I. Alferov. *Semiconductors* **32**(1), 1 (1998).
- [7] L. L. Chang, L. Esaki et R. Tsu, *App. Phys. Lett.* **24**, 593 (1974).
- [8] R. Dingle, W. Weigmann et C. H. Henry, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 827 (1974).
- [9] K. Von. Klitzing, G. Dorda et M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 494 (1980).
- [10] D. C. Tsu, H. L. Stormer, A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1559 (1982).
- [11] P. M. Petroff, A. C. Gossard, R. A. Logan et W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett*, **41**, 635 (1982).
- [12] R. Rossetti, S. Nakahara, L. E. Brus, *J. of Chemical Physics*, vol. **79**, 1086 (1983).
- [13] M. Grundman: Graduate texts in physics, The physique of semiconductor. An Introduction Including Nanophysics, second edition, *Springer*, (2010).
- [14] Y. Kayanuma, *Solid. State Commun.* **59**, 405 (1986).
- [15] A. I. Efros, *Superlattices and Microstructures*, **11**, 167 (1992).
- [16] L. Jacak, P. Hawrylak et A. Wojs, *Quantum Dots*, Springer, (1997).
- [17] Reiss, Peter, Myriam Protière, and Liang Li. "Core/Shell Semiconductor Nanocrystals." *Small* **5**, 154-168 (2009).
- [18] Dabbousi, B. O., J. Rodriguez-Viejo, F. V. Mikulec, J. R. Heine, H. Mattoussi, R. Ober, K. F. Jensen, and M. G. Bawendi. *J. of Physical Chemistry B* **101**, 9463-9475 (1997).
- [19] C. Javaux, "Thèse de Doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie Paris VI", (2012).
- [20] P. Ils A. Forchel, K.H. Wang, O. Schilling, R. Steffen, J. Oshinowo, Quantum wires and dots for optical studies. *Nanotechnology*, **32**(1-4): 317-330 (1996).
- [21] A. Sherer and H.G. Craighead. Fabrication of small laterally patterned multiple quantum wells. *Appl. Phys. Lett.* **49**:1284-1286 (1986).
- [22] T.R. Ramachandran, A. Madhukar, I. Mukhametzhanov, R. Heitz, A. Kalburge, Q. Xie, and P. Chen, Nature of Stranski-Krastanow growth of InAs on GaAs (001). *J. Vac. Sci. Technol. B*, **16**(3): 1330-1333 (1998).
- [23] El Akra, A. Croissance de boîtes quantiques In(Ga)As sur substrats de silicium et de SOI pour la réalisation d'émetteurs de lumière (PhD Thesis). Ecole Centrale de Lyon (2012).
- [24] Ben Afkir, Nourdine. "Étude et modélisation des structures à base des boites quantiques pour des application photovoltaïques. (2018).
- [25] A. Franceschetti and A. Zunger.. *Physical Review Letters*, **78**:915-918 (1997).
- [26] Lok C. Lew Yan Voon and Morten Willatzen. The k p Method, Electronic Properties of Semiconductors. *Springer*, (2010).
- [27] Landolt-Bornstein, « Semiconductors, physics of II-VI and I-VII compounds », *Springer verlag*, vol. **III/17b** : CdTe p.225, ZnTe p.157 (1982).

- [28] Walter Ritz "Über eine neue Methode zur Lösung gewisser Variationsprobleme der mathematischen Physik" *Journal für die Reine und Angewandte Mathematik*, vol. **135**, pages 1–61 (1909).
- [29] J.K. MacDonald, "Successive Approximations by the Rayleigh–Ritz Variation Method", *Phys. Rev.* **43**, 830 (1933).
- [30] U.Woggon bo, *Phys,stat, sol(b)*, **189** (1995).
- [31] A. Chellouche, caractérisation structurale et optique des nanocristaux, thèse de Magister, Université Mentouri, Algérie, (2001).
- [32] G. Bastard, *Phys. Rev. B* **24**, 4714 (1981).
- [33] J. W. Brown and H. N. Spector. Hydrogen impurities in quantum well wires. *Journal of applied physics*, **59** :1179–1186, (1986).
- [34] N. Porrás-Montenegro, *J. Phys. Condens. Matter*, **5**, A 367 (1993).
- [35] A.Zounoubi,I.Zorkani,K.ElMessaoudi and A. Jorio, *Phys. Lett. A* **312**, 220 (2003).
- [36] I. Erdogana,O. Akankana and H. Akbas,*Physica E* **33**, 83 (2006).
- [37] P. Villamila, C. Cabraa and N. P. Montenegro, *Microelectronics J.* **36**, 383 (2005).
- [38] S. A. Safwan, M. H. Hekmat, A. S. Asma and N. Elmeshed, *Physica E* **41**, 150 (2008).
- [39] Handbook of mathematical function, eds M.Abramowitz, I.A.Steun, Dover publications, Inc., New York (1972).

Chapitre II : Effets des perturbations extérieures sur les états des impuretés donneurs confinées dans un point quantique (QD) de forme cubique

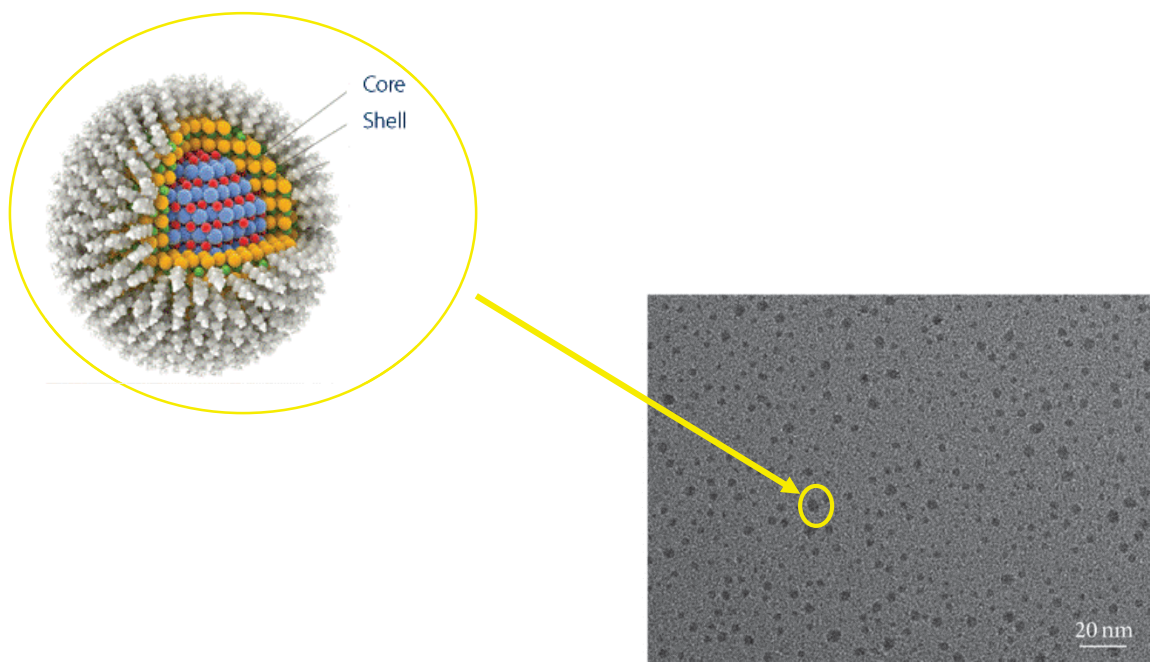


Image par microscope électronique à transmission (MET) à hautes résolutions des îlots de boîtes quantiques (QDs) [6].

2.1. Introduction

Récemment, un grand effort a été déployé dans le développement de la technologie des nanofabrications. Cette miniaturisation contribue à l'amélioration des différentes propriétés physiques des matériaux. Parmi ces nanomatériaux, on trouve les structures semi-conductrices dont les dimensions sont comparables aux distances interatomiques telles que les points quantiques (QDs). Les porteurs de charges sont confinés dans ces structures, et leur déplacement est limité dans les trois directions de l'espace. Ce confinement quantique tridimensionnel conduit à la formation de niveaux d'énergie de type atomique (sous-bandes). Les propriétés optoélectroniques différentes de celles d'un matériau massif, ouvrent le champ à de nombreuses applications tel que : les cellules solaires, les LEDs, les lasers, etc.

L'existence des impuretés hydrogénées dans les points quantiques est primordiale dans la révolution des composants électroniques. En effet, les impuretés donnent naissance à des états électroniques (sous bandes), ce qui facilite le transport électronique et contribue à l'amélioration des propriétés optiques [1-4]. Dans les points quantiques, l'électron se déplace dans un petit espace et reste attaché à l'ion d'impureté. En conséquence, la force effective de l'interaction de Coulomb entre les ions d'impureté électronique augmente, ce qui conduit à une amélioration de l'énergie de liaison. Ces avantages permettent de modifier radicalement les propriétés électroniques et optiques des structures de points quantiques tels que l'énergie de liaison, la section de photo-ionisation [5], les spectres d'absorption et d'autres propriétés optiques [6].

Le confinement quantique sur les états d'impureté dans les structures de points quantiques est un facteur très important en physique. De plus, l'existence de ces impuretés à l'intérieur des perturbations externes tels que le champ magnétique, la pression hydrostatique et la température conduit à des modifications majeures sur les propriétés électroniques et optiques. Ces perturbations ont attiré beaucoup d'attention de la part des chercheurs du points de vue expérimentaux et théoriques. En effet, la présence d'un champ magnétique introduit un autre degré de confinement électronique qui s'ajoute au confinement géométrique. Il rétrécit les fonctions d'ondes des impuretés et augmente leurs énergies de liaison et par suite modifie considérablement le spectre d'énergie des porteurs de charges (électrons et trous). Différents modèles impliquant l'effet du champ magnétique sur les états d'impuretés ont été décrits dans les régimes du champ fort et du champ faible. La fonction d'onde électronique décrivant l'état de l'impureté dépend de chaque régime. Pour le régime du champ faible, le potentiel

Coulombien l'emporte sur le terme magnétique et le modèle parabolique et suffisant pour décrire les états donneurs. Pour les champs magnétiques intermédiaires, l'effet du potentiel Coulombien est comparable à l'effet magnétique. Au fur et à mesure que le champ magnétique augmente, l'effet dû au terme diamagnétique devient prépondérant au terme Coulombien et le modèle parabolique des bandes doit céder la place au modèle de la non parabolicité des bandes surtout pour les semiconducteurs à gap étroit [7].

L'effet de la pression hydrostatique sur les états d'impureté de l'hydrogène dans le GaAs QD a été étudié [8-11]. Récemment, John Peter et al [12] ont étudié l'effet de la pression hydrostatique et du champ magnétique sur une impureté confinée dans un point quantique. Ils ont montré que l'énergie de liaison de l'impureté augmente avec la réduction de la taille et en présence du champ magnétique simultanément. Lefebvre et al [13,14] ont présenté des calculs théoriques et expérimentaux sur les spectres de photoluminescences (PL) sous l'effet de la pression et les transitions excitoniques dépendantes de la largeur du puits et de la hauteur de la barrière dans les systèmes à puits quantiques. Leurs résultats ont indiqué que l'augmentation des masses effectives et la diminution des hauteurs de barrière étaient la principale raison de la diminution du pic de PL avec des largeurs de puits réduites. Rezaei et al [15] ont étudié l'effet de la pression hydrostatique et du champ électrique sur l'énergie de liaison et la susceptibilité diamagnétique des impuretés contenues dans QD. Ils ont constaté que le potentiel de confinement est réduit et que la zone d'expansion de la fonction de test augmente avec l'augmentation du champ électrique appliqué, ce qui entraîne une diminution de l'énergie de liaison et une augmentation de la susceptibilité diamagnétique. Messoudi et al [16] ont calculé la polarisabilité pour un magnéto-donneur peu profond confiné dans un Quantum Box (QB).

L'application de la pression hydrostatique a une influence sur les paramètres physiques des semi-conducteurs, comme l'énergie de gap, la masse effective, la constante diélectrique, la vibration du réseau, etc. En effet, une augmentation de la pression entraîne une augmentation presque linéaire de l'énergie de la liaison du donneur sans altérer la symétrie du système hétérostructurel [17]. En revanche, les effets de la température sur l'état d'impureté des porteurs de charges confinés dans un point quantique de nanostructure ont été réalisés par certains auteurs [17-19]. L'énergie de liaison d'une impureté confinée dans un point quantique à base de GaAs a été rapportée en fonction de la température, par la théorie des perturbations de Rayleigh Schrödinger du second ordre [17]. Elabsy a étudié l'effet de la température sur l'énergie de liaison de l'impureté du donneur dans un atome semi-conducteur artificiel [18] et dans un système de points quantiques sphériques [19].

Dans le présent chapitre, nous présentons une étude théorique sur la polarisabilité d'un magnéto-donneur peu profond situé au centre d'un point quantique GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs cubique, sous l'action conjointe de la pression hydrostatique, de la température et du champ magnétique. Les calculs sont effectués à l'aide de la méthode variationnelle dans le cadre de l'approximation de la masse effective, en tenant compte de la corrélation électron-impureté dans la fonction d'onde de l'état fondamental et de l'état excité. Ces résultats sont utilisés pour expliquer le comportement de la polarisabilité dans les dispositifs de nanostructure en prouvant que l'énergie de liaison et la polarisabilité sont modifiées sous les contraintes externes.

2.2. Etat d'un électron confiné dans une boîte quantique

Vue les fluctuations de taille et de forme, l'étude expérimentale d'un ensemble de boîtes quantiques est un problème de nature statistique. En effet, les boîtes quantiques auto-organisées présentent en plus d'un potentiel de confinement longitudinal plus important, une très bonne qualité optique comparable à celle des boîtes quantiques naturelles. Plusieurs formes sont utilisées dans la littérature pour modéliser ces boîtes quantiques (cône, cône tronqué, lentille, disque...). La difficulté du calcul dépend fortement de la forme choisie. Dans notre cas, nous avons choisi la forme cubique qui est une forme très proche des boîtes réalisées expérimentalement [20]. Les boîtes quantiques de cette forme présentent un fort confinement suivant les trois directions de l'espace. Nous adopterons dans notre calcul, le système de coordonnées cartésiennes pour calculer les états électroniques des boîtes quantiques.

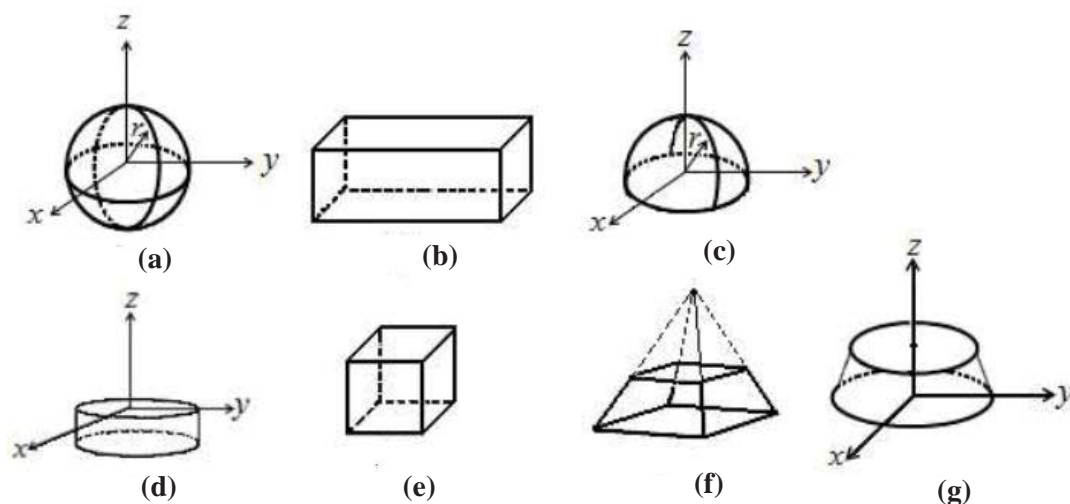


Figure 2-1 : Divers formes schématiques de BQ (a) nanocrystal sphérique (b), (c), (d), (e), (f) et (g) BQ épitaxiées respectivement parallélépipédique, demi-sphère, cylindrique, cubique, pyramidale tronquée et conique tronquée. Avec un système de coordonnées cartésiennes ou cylindriques ou sphérique.

2.2.1. Hamiltonien de l'électron

Considérons le système constitué d'un électron lié à une impureté hydrogénoïde de type donneur, confiné à l'intérieur d'une boîte cubique. Le mouvement de l'électron en interaction Coulombienne avec l'impureté placée à la position $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ est décrit par l'Hamiltonien :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta - \frac{e^2}{\epsilon_0 |\vec{r} - \vec{r}_i|} + V_{conf}(r) \quad (2.1)$$

Le premier terme correspond à l'opérateur de l'énergie cinétique de l'électron, le deuxième terme décrit l'interaction Coulombienne entre l'électron et l'impureté et le troisième terme présente le potentiel de confinement. m^* est la masse effective de l'électron, \vec{r} et \vec{r}_i sont respectivement les vecteurs positions de l'électron et de l'impureté.

Nous supposons que les porteurs de charges sont confinés dans le matériau GaAs par un potentiel de confinement fini.

Afin de faciliter le calcul numérique, nous avons effectué un dimensionnement en définissant une unité de longueur et une autre d'énergie (on les appelle unités donneurs). On note a^* (Rayon de Bohr) l'unité de longueur et R^* (le Rydberg effectif) l'unité de l'énergie tel que : $a^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m_e^* e^2}$ et $R^* = \frac{m_e^* e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2}$ avec \hbar la constante de Planck ($\hbar = 6.582118$ eV.s), e la

charge élémentaire et ϵ la constante diélectrique du matériau. Le tableau 2-1 donne quelques valeurs de ces unités pour quelques matériaux [21].

L'adimensionnement nous a permis de réécrire l'équation (2.1) sous la forme :

$$H = -\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + V_{conf}(r) - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} \quad (2.2)$$

Table 2-1 : Tableau des valeurs du rayon de Bohr effectif et du Rydberg effectif pour quelques semi-conducteurs.

| | $\frac{m_e^*}{m_0}$ | ϵ_0 | E_g (eV) | a^* (nm) | R^* (meV) |
|------|---------------------|--------------|------------|------------|-------------|
| GaAs | 0.067 | 13.18 | 1.424 | 9.95 | 5.758 |
| AlAs | 0.146 | 10.06 | 2.16 | 35.5 | 20.03 |

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, les états électroniques stationnaires liés à l'électron et leurs énergies associées, sont obtenus en résolvant l'équation de Schrödinger $H\psi = E\psi$.

2.2.2. Fonction d'onde

Comme l'équation de Schrödinger associée à l'Hamiltonien (2.1) ne peut être résolue analytiquement, nous avons adopté l'approche variationnelle qui dépend fortement du choix de la fonction d'onde représentant au mieux les propriétés physiques du système étudié. Par conséquent, dans la suite de notre travail, nous allons choisir la fonction d'onde électronique décrivant l'état fondamental de l'électron lié au donneur comme le produit de la fonction d'onde

en absence de l'impureté et du terme $\exp\left(-\left(\frac{x^2 + y^2}{8b^2} + \frac{z^2}{8a^2}\right)\right)$ décrivant l'interaction

Coulombienne, où a et b sont des paramètres variationnelles que l'on déterminera par la minimisation de l'énergie du système.

La fonction d'onde d'essai choisie est écrite sous la forme :

$$\psi_0 = N\varphi(x)\varphi(y)\varphi(z)\exp\left[-\left(\frac{x^2 + y^2}{8b^2} + \frac{z^2}{8a^2}\right)\right] \quad (2.3)$$

N est un facteur de normalisation et a, b sont les paramètres variationnelle. Le terme exponentiel est introduit afin de prendre en compte les interactions de Coulomb entre l'électron et le donneur ionisé.

L'énergie de l'état fondamental peut être obtenue en minimisant la valeur moyenne de H par rapport aux paramètres variationnelles a et b :

$$E = \min_{a,b} \frac{\langle \psi_0(r) | H | \psi_0(r) \rangle}{\langle \psi_0(r) | \psi_0(r) \rangle} \quad (2.4)$$

L'énergie de liaison du donneur est définie comme étant la différence entre l'énergie de l'électron en absence et en présence de l'impureté.

$$E_b = E_{sub} - E \quad (2.5)$$

Où E_{sub} est l'énergie du premier niveau de la bande de conduction qui est calculée sans tenir compte de l'interaction Coulombienne :

$$E_{sub} = \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle$$

$$\text{On aura : } E_{sub} = \frac{\pi^2}{L_x^2} + \frac{\pi^2}{L_y^2} + \frac{\pi^2}{L_z^2} \quad (2.6)$$

L'utilisation d'une fonction d'onde d'essai à paramètre unique n'est certainement pas adéquate, car elle préserve la symétrie sphérique de la fonction d'onde de type hydrogène et ne tient pas compte des effets d'anisotropie introduits par le champ magnétique externe, c'est-à-dire une distorsion dans la direction z et un confinement électronique dans les couches.

2.2.3. Etat de l'électron confiné en présence du champ magnétique

Considérons maintenant que l'électron, de charge $-e$ liée à l'impureté donneur de charge $+e$ et placé à la position $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ à l'intérieur de la boîte quantique, est soumis à l'action d'un champ magnétique uniforme (figure 2-2) suivant (Oz). Le mouvement de cet électron est décrit par l'Hamiltonien suivant :

$$H = \frac{1}{2m^*} \left(\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e^2}{\epsilon_0 |r - r_i|} + V_{conf}(\vec{r}) \quad (2.7)$$

Où m^* est la masse effective, ϵ_0 est la constante diélectrique statique et \vec{A} est le potentiel vecteur associé au champ magnétique \vec{B} et qui s'exprime dans la jauge symétrique par :

$$\vec{A} = \left(-\frac{By}{2}, \frac{Bx}{2}, 0 \right)$$

L'expression de l'Hamiltonien (2.7) en coordonnées cartésiennes se simplifie en utilisant les unités réduites à :

$$H = -\left(\nabla_x^2 + \nabla_y^2 + \nabla_z^2 \right) - \frac{2}{\sqrt{(x-x_i)^2 + (y-y_i)^2 + (z-z_i)^2}} + \gamma L_z + \frac{\gamma^2}{4} (x^2 + y^2) + V_{conf}(\vec{r}) \quad (2.8)$$

Où le premier terme désigne l'énergie cinétique de l'électron, le second terme décrit l'interaction Coulombienne entre l'électron de charge $-e$ et l'impureté de charge $+e$ placé à la distance r_i , le troisième terme décrit le couplage entre le champ magnétique et le moment magnétique orbital, où L_z est la composante suivant Oz du moment cinétique orbital de l'électron, et γ est la fréquence cyclotronique effective définie par : $\gamma = \frac{e B \hbar}{2m^* c R_B^*}$, qui est un paramètre sans

dimension, et qui mesure l'intensité du champ magnétique. Le dernier terme représente le potentiel de confinement géométrique qu'on suppose de profondeur finie :

$$V(r) = \begin{cases} 0 & |x| \leq \frac{L_x}{2}, |y| \leq \frac{L_y}{2}, |z| \leq \frac{L_z}{2} \\ V_0 & \text{Ailleurs} \end{cases} \quad (2.9)$$

L_x , L_y et L_z sont les dimensions de la boîte quantique respectivement dans les directions x , y et z .

V_0 : potentiel résulte de la discontinuité des bandes entre le matériau formant la nanostructure et le matériau barrière.

Ce cas de puits de profondeur finie a été traité théoriquement et montre qu'il en résulte un abaissement de l'énergie de confinement des niveaux d'énergie de l'électron par rapport au cas du potentiel infini sans conséquence physique notable [22-23].

2.3. Approche théorique

Le problème auquel nous nous sommes intéressées dans ce chapitre, est un système composé d'un électron lié à une impureté donneur confinée à l'intérieur d'une boîte quantique de GaAs à barrière de potentiel de confinement de hauteur finie. Le mouvement de l'électron en interaction coulombienne avec l'impureté hydrogénoïde placée à la position $\vec{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$ et confinée dans les trois directions de l'espace est décrit dans le cadre de l'approximation de la masse effective par l'Hamiltonien décrit dans l'équation (2.8).

Notre système est soumis à un champ magnétique $B(0,0,B)$ dirigé suivant l'axe z .

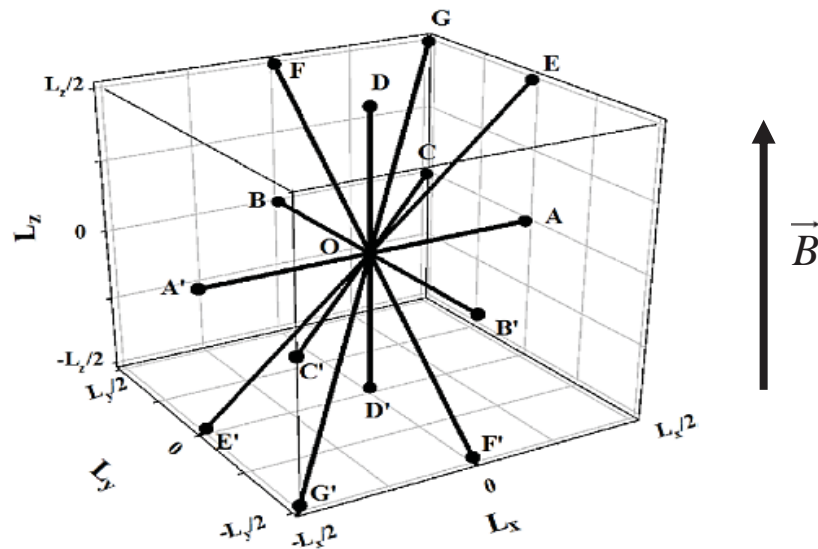


Figure 2-2 : Schéma d'un point quantique cubique avec une impureté de donneur située au centre.

Vu l'existence du potentiel coulombien dans l'équation précédente, l'Hamiltonien H ne peut être séparable. Nous avons ainsi utilisé la méthode variationnelle pour résoudre le problème. En tenant compte du confinement électronique dans les trois directions de la boîte quantique, nous avons choisi une fonction d'onde d'essai sous la forme décrit par l'équation (2.3).

$$\text{Avec : } \varphi(x) = \begin{cases} A_x \exp(K_{2x}x) & x \leq -\frac{L_x}{2} \\ \cos(K_{1x}x) & -\frac{L_x}{2} \leq x \leq \frac{L_x}{2} \\ A_x \exp(-K_{2x}x) & x \geq \frac{L_x}{2} \end{cases} \quad (2.10)$$

Où a et b sont les paramètres variationnelles obtenus par la minimisation de l'énergie $\langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle$ et N est une constante de normalisation donnée par :

$$N = \left[\iiint \cos^2\left(\frac{\pi x}{L_x}\right) \cos^2\left(\frac{\pi y}{L_y}\right) \cos^2\left(\frac{\pi z}{L_z}\right) \exp\left[-2\left(\frac{(x-x_i)^2}{8b^2} + \frac{(z-z_i)^2}{8a^2}\right)\right] \right]^{-\frac{1}{2}} dx dy dz \quad (2.11)$$

$$K_{1x} = \sqrt{\frac{2m_d^* E_x}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad K_{2x} = \sqrt{\frac{2m_b^*(V_0 - E_x)}{\hbar^2}} \quad (2.12)$$

Les paramètres K_{1x} , K_{2x} et A_x sont déterminés à l'aide des conditions aux limites appropriées de conservation de courant pour les fonctions d'onde aux interfaces et doivent satisfaire aux relations suivantes :

$$\tan \sqrt{2m_d^* E_x} \frac{L_x}{2\hbar} = \sqrt{\frac{m_d^*}{m_b^*} \left(\frac{V_0}{E_x} - 1 \right)} + \frac{L_x \hbar}{8b^2 \sqrt{2m_d^* E_x}} \left(\frac{m_d^*}{m_b^*} - 1 \right)$$

$$\text{Et } A_x = \cos\left(k_{1x} \frac{L_x}{2}\right) \exp\left(k_{2x} \frac{L_x}{2}\right)$$

Les fonctions $\varphi(y)$ et $\varphi(z)$ sont exprimées de la même manière en remplaçant x par y et z respectivement.

$m_{d,b}^*$ sont respectivement la masse effective de l'électron dans la boîte quantique et dans la barrière.

$$m_{d,b}^*(0) = \begin{cases} m_d^*(0) = 0.067 m_0 & \text{dans } GaAs \\ m_b^*(0) = (0.067 + 0.083x) m_0 & \text{dans } Ga_{1-x}Al_xAs \end{cases} \quad (2.13)$$

Comme indiqué précédemment, l'énergie de liaison E_b de l'impureté à l'état fondamental est définie comme suit :

$$E_b = \frac{\pi^2}{L_x^2} + \frac{\pi^2}{L_y^2} + \frac{\pi^2}{L_z^2} - \min_{a,b} \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle \quad (2.14)$$

Après intégration sur x, y et z l'énergie correspondante est donnée par :

$$E(a,b) = \langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle = E_1 + E_2 + E_3 \quad (2.15)$$

Avec : $E_1 = E_{1x} + E_{1y} + E_{1z}$

$$E_{1x} = \left(\frac{\pi}{L_x} \right)^2 + \frac{1}{4b^2} - \frac{\pi}{2b^2} \frac{F_1(b, L_x)}{L_x F_0(b, L_x)} - \frac{1}{16b^4} \frac{F_2(b, L_x)}{F_0(b, L_x)} \quad (2.16)$$

E_{1y} est exprimée de la même manière.

$$E_{1z} = \left(\frac{\pi}{L_z} \right)^2 + \frac{1}{4a^2} - \left(\frac{\pi}{2a^2} \frac{F_1(a, L_z)}{L_z} - \frac{1}{16a^4} F_2(a, L_z) \right) \times \frac{1}{F_0(a, L_z)} \quad (2.17)$$

$$E_2 = -\frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{\int_0^{\infty} F_3(t, b, L_x) F_3(t, b, L_y) F_3(t, a, L_z) dt}{F_0(b, L_x) F_0(b, L_y) F_0(a, L_z)} \quad (2.18)$$

$$E_3 = \frac{\gamma^2}{4} \left(\frac{F_2(b, L_x)}{F_0(b, L_x)} + \frac{F_2(b, L_y)}{F_0(b, L_y)} \right) \quad (2.19)$$

Où les intégrales F_0 , F_1 , F_2 et F_3 sont données par :

$$F_0(a, L) = \int_0^{\frac{L}{2}} \cos^2 \left(\frac{\pi z}{L} \right) \exp \left[- \left(\frac{z}{2a} \right)^2 \right] dz$$

$$F_1(a, L) = \int_0^{\frac{L}{2}} z \cos \left(\frac{\pi z}{L} \right) \sin \left(\frac{\pi z}{L} \right) \exp \left[- \left(\frac{z}{2a} \right)^2 \right] dz$$

$$F_2(a, L) = \int_0^{\frac{L}{2}} z^2 \cos^2 \left(\frac{\pi z}{L} \right) \exp \left[- \left(\frac{z}{2a} \right)^2 \right] dz$$

$$F_3(a, L, t) = \int_0^{\frac{L}{2}} \cos^2\left(\frac{\pi z}{L}\right) \exp\left[-\left(\frac{z}{2a}\right)^2 (1 + 4a^2 t)\right] dz$$

♣ Susceptibilité diamagnétique

Le diamagnétisme est associé à la tendance des charges électriques à former écran entre l'intérieur d'un corps et le champ magnétique appliqué, et donc à générer un champ magnétique opposé au champ extérieur. L'origine du diamagnétisme est un phénomène quantique (Quantification de Landau), pouvant être expliqué par la modification du mouvement orbital des électrons autour du noyau atomique.

Le traitement habituel du diamagnétisme des atomes et des ions utilise le **théorème de Larmor** : sous l'action lente d'un champ magnétique, le mouvement des électrons autour d'un noyau repéré par rapport au système de référence de rotation, sera le même que le mouvement initial dans le système au repos avant l'application du champ. L'application d'un champ magnétique provoque un courant fini autour du noyau, ce courant est équivalent à un moment magnétique. La direction du moment est opposée à celle du champ appliqué.

La susceptibilité diamagnétique χ_{dia} d'une impureté donneur localisée dans un point quantique, dans l'unité atomique (a.u) est donnée par [24] :

$$\chi_{dia} = -\frac{e^2}{6m^* \varepsilon_0 c^2} \left\langle \left(\vec{r} - \vec{r}_i \right)^2 \right\rangle \quad (2.20)$$

Avec c est la vitesse de la lumière dans le vide et $\left\langle \left(\vec{r} - \vec{r}_i \right)^2 \right\rangle$ est la valeur moyenne du carré de la distance entre l'électron et le noyau, qui est calculée par :

$$\left\langle \left(\vec{r} - \vec{r}_i \right)^2 \right\rangle = \frac{\left\langle \psi_0 \left| \left(\vec{r} - \vec{r}_i \right)^2 \right| \psi_0 \right\rangle}{\left\langle \psi_0 \left| \psi_0 \right\rangle} = 8N^2 \left(2I_{3x} I_{1x} I_{1z} + I_{1x}^2 I_{3z} \right) \quad (2.21)$$

Où les intégrales I_{1x} , I_{1z} , I_{3x} et I_{3z} sont données par :

$$I_{1x} = \int_0^{\frac{L_x}{2}} \cos^2(K_{1x} x) \exp\left[\left(-\frac{(x-x_i)^2}{4b^2}\right)\right] dx$$

$$I_{3x} = \int_0^{\frac{L_x}{2}} x^2 \cos^2(K_{1x} x) \exp\left[\left(-\frac{(x-x_i)^2}{4b^2}\right)\right] dx$$

$$I_{1z} = \int_0^{\frac{L_z}{2}} \cos^2(K_{1z}z) \exp\left[-\frac{(z-z_i)^2}{4a^2}\right] dz$$

$$I_{3z} = \int_0^{\frac{L_z}{2}} z^2 \cos^2(K_{1z}z) \exp\left[-\frac{(z-z_i)^2}{4a^2}\right] dz$$

♣ Polarizabilité d'une impureté donneur confinée dans une boîte quantique

a) Rappel de quelques résultats expérimentaux

Les propriétés électriques des diélectriques peuvent s'interpréter à l'échelle macroscopique par l'apparition dans tout volume (initialement neutre) soumis à un champ électrique d'un moment dipolaire électrique. C'est le phénomène de polarisation. Il correspond à des modifications dans la répartition des charges liées qui constituent les groupements stables de la matière (atomes, molécules, ions), modifications dues aux déformations ou réorientations de ces groupements : de fait, sous l'effet d'un champ électrique le barycentre des charges positives et celui des charges négatives, initialement confondus, se séparent, formant ainsi des dipôles électriques. En revanche, au niveau microscopique, la polarisation est liée au champ électrique local dans le matériau semi-conducteur par la relation :

$$\vec{P} = N\alpha\vec{E}_{loc} \quad (2.22)$$

Où N étant la concentration de dipôles par unité de volume, α la polarisabilité globale du matériau et \vec{E}_{loc} le champ électrique local.

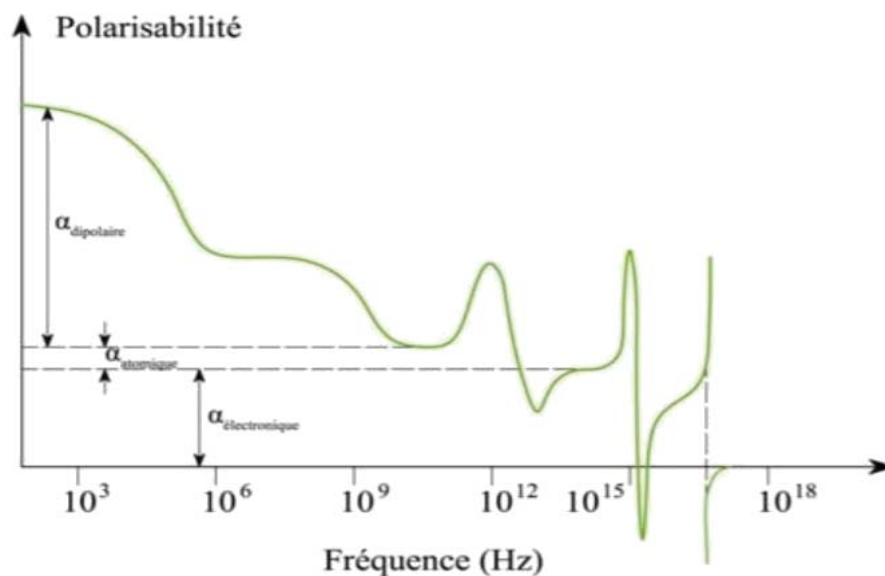


Figure 2-3 : Evolution de la polarisabilité en fonction de la fréquence.

La polarisabilité globale d'un matériau diélectrique en fonction de la fréquence est représentée schématiquement sur la figure 2-3. Cette figure montre que la polarisabilité résulte de plusieurs processus : des processus lents (résultant du déplacement thermiquement activé d'ions ou réorientation de dipôles) et des processus rapides (les plus rapides impliquant seulement les nuages électroniques). Plusieurs auteurs [25-29] ont déterminé la constante diélectrique des semi-conducteurs, par des mesures de magnetocapacitance à basse fréquence, en fonction de la concentration des donneurs N_D . Ils ont déduit la polarisabilité des donneurs en ajustant leurs données expérimentales avec l'expression de Clausius Mossoti [30]. Au-delà d'une certaine valeur limite de la concentration N_D , la constante diélectrique diverge exponentiellement. La figure 2-4 montre un exemple pour le Si. Dans ce cas le phénomène se passe pour une concentration des donneurs $N_D=4.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [29].

Le tableau 2-1 donne des résultats expérimentaux de la polarisabilité pour quelques impuretés dans le Si et le Ge. Nous pouvons dire que la polarisabilité dépend de la nature chimique de l'impureté et permet donc d'identifier le type d'impureté dans les semi-conducteurs.

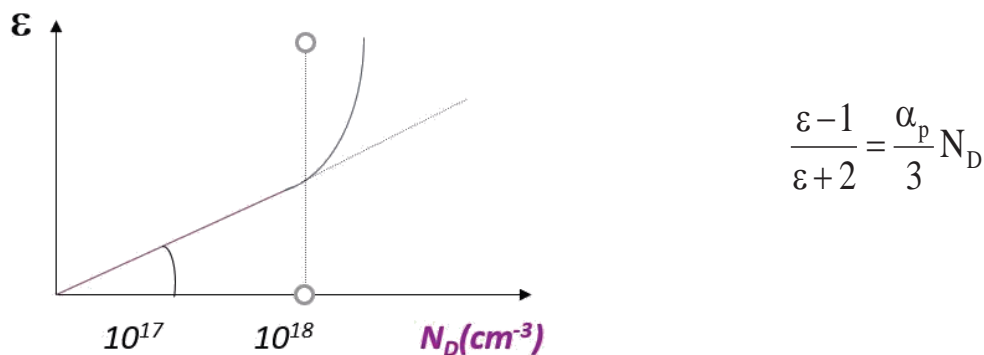


Figure 2-4 : L'évolution de la constante diélectrique en fonction de la concentration des donneurs de Si [29].

Table 2-2 : Valeurs expérimentales de la polarisabilité des donneurs dans le Si [26] et le Ge [28].

| Cristal | Si | | | Ge |
|-------------------------------------|---------------|---------------|---------------|-------------|
| Impureté | Sb | P | As | Sb |
| $\alpha_{exp} (10^5 \text{ \AA}^3)$ | 3.1 ± 0.3 | 2.4 ± 0.4 | 1.0 ± 0.1 | 68 ± 15 |

b) Etude théorique

La polarisabilité d'une impureté donneur est calculée à partir de l'expression du moment dipolaire qui est définie par [31] :

$$P = -e \left(\langle \vec{r} \rangle_{f \neq 0} - \langle \vec{r} \rangle_{f=0} \right) \quad (2.23)$$

Avec : $f = \frac{ea^*F}{R^*}$ est le paramètre sans dimension qui caractérise l'intensité du champ électrique.

La polarisabilité d'un donneur de magnéto peu profond est donnée par :

$$\alpha = \frac{P}{F} \quad (2.24)$$

Après le calcul nous obtenons pour la polarisabilité d'un donneur de magnéto peu profond l'expression suivante :

$$\alpha = -\frac{1}{f} \left(\frac{2F_2(a, L_z)}{F_0(a, L_z) + F_2(a, L_z)} \right) \quad (2.25)$$

♣ Effet de la pression hydrostatique

L'application de la pression hydrostatique (P) affecte les paramètres des semi-conducteurs comme l'énergie de gap, la masse effective et la constante diélectrique. En effet, une augmentation de la pression entraîne une augmentation presque linéaire de la liaison au donneur sans altérer la symétrie du système hétérostructurel.

La variation de la constante diélectrique du GaAs sous l'effet de la pression à T=300K est donnée par [32] :

$$\varepsilon(P) = 13.18 - 0.088P \quad (2.26)$$

La masse effective de l'électron dans la boîte quantique et dans la barrière en fonction de la pression appliquée sont exprimés par :

$$m_{d,b}^*(P) = m_{d,b}^*(0) \exp(0.078P) \quad (2.27)$$

La densité de probabilité est très importante dans la région de la boîte quantique, donc les porteurs de charge sont confinés dans la boîte (GaAs). Ainsi, une barrière de potentiel finie constitue une bonne approximation dans cette situation :

$$V(r, P) = \begin{cases} 0 & |x| \leq \frac{L_x(P)}{2}, |y| \leq \frac{L_y(P)}{2}, |z| \leq \frac{L_z(P)}{2} \\ V_0(P) & \text{Ailleurs} \end{cases} \quad (2.28)$$

Avec [32] : $V_0(P) = 0.685 \Delta E_g(x, P)$

La différence totale de la bande interdite entre GaAs et Ga_{1-x}Al_xAs en fonction de la concentration x d'aluminium est donnée par [32] :

$$\Delta E_g(x, P) = \Delta E_g(x) + PD(x) \quad (2.29)$$

Et

$$\Delta E_g(x) = 1.155x + 0.37x^2$$

D(x) est le coefficient de pression de la bande interdite, donné par [32] :

$$D(x) = [-(1.3 \times 10^{-3})x] \quad (ev / Kbar)$$

Nous notons que dans l'ensemble de ces paramètres, la pression P est exprimée en GPa .

♣ Effet de la température

Les effets de la température sur l'état d'impureté des porteurs de charges confinés dans un point quantique de nanostructure ont été réalisés par certains auteurs [17-19]. L'application de la température peut modifier les paramètres réduits des systèmes tels que la constante diélectrique, la masse effective de l'électron et l'énergie de gap. Leurs expressions peuvent bien être décrite par les relations suivantes [38-39] :

$$\varepsilon_d(T) = \begin{cases} 12,74 \exp[9,4 \times 10^{-5}(T - 75,6)] & T \leq 200K \\ 13,18 \exp[20,4 \times 10^{-5}(T - 300)] & T > 200K \end{cases} \quad (2.30)$$

La constante diélectrique de Ga_{1-x}Al_xAs est donnée par [39] :

$$\varepsilon_b(x, T) = \varepsilon_d(T) - 3,12x \quad (2.31)$$

Pour la boîte quantique de GaAs, la masse effective de conduction parabolique est déterminée à partir de l'expression [40-41] :

$$m_d^*(T) = \frac{m_0}{1 + E_g^\Gamma \left(\frac{2}{E_g^\Gamma(T)} + \frac{1}{E_g^\Gamma(T) + \Delta_0} \right)} \quad (2.32)$$

La masse effective de conduction de $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ est donnée par :

$$m_b^*(T) = m_d^*(T) + 0,083xm_0 \quad (2.33)$$

Avec $E_g^\Gamma = 7,51 \text{ eV}$ est l'énergie de la bande interdite au centre de la zone de Brillouin Γ .

$\Delta_0 = 0,341 \text{ eV}$ est le décalage dû aux interactions spin-orbite. En fonction de la température,

E_g^Γ peut être exprimée en eV par la relation [42] :

$$E_g^\Gamma(T) = 1.519 - \frac{(5.405 \times 10^{-4})T^2}{(T + 204)} \quad (\text{eV}) \quad (2.34)$$

2.4. Résultats numériques et discussions

Dans ce paragraphe, nous présentons une analyse des résultats obtenus par notre modèle théorique. Le cas d'illustration est la boîte quantique de forme cubique à base de GaAs entourée par $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. On fixe la concentration de l'aluminium à 30%. En présence d'un champ magnétique uniforme le long de la direction z et sous différentes excitations extérieures (pression, température). Les paramètres utilisés lors du calcul numérique sont mentionnés dans le tableau (2-1).

2.4.1. Effet de la pression hydrostatique :

a) Energie de liaison E_b :

Tout d'abord, nous commençons par étudier l'impureté en absence du champ magnétique ($\gamma = 0$). La figure 2-5 présente la variation de l'énergie de liaison E_b d'une impureté donneur dans une boîte quantique cubique de GaAs/ $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ (QD) en fonction de la largeur de la boîte (L), pour quatre valeurs représentatives de la pression hydrostatique $P=0, 1, 2$ et 4 GPa . On prend pour la teneur en aluminium les deux cas $x=15\%$ et 30% .

Nous remarquons que le maximum de l'énergie de liaison E_b est obtenu lorsque le confinement géométrique est très fort ($L \approx 0,5a^*$) puis, l'énergie de liaison subit une diminution rapide et atteint sa valeur la plus basse avec l'augmentation de la dimension de la boîte. Cette figure montre également que l'énergie de liaison du donneur augmente lorsque la pression hydrostatique P augmente pour toute largeur de la boîte et pour les deux cas de teneur en

aluminium. Ces évolutions sont dues au fait que l'électron est fortement localisé dans le QD avec l'augmentation de la pression hydrostatatique. Ainsi, la distance relative entre l'électron et l'impureté est réduite lorsque le confinement est fort suite à une augmentation de la pression hydrostatatique. De plus, nous pouvons observer que les effets de la pression hydrostatatique sont négligeables dans les boîtes quantiques de petites tailles.

Pour mieux comprendre l'effet de la pression hydrostatatique sur l'énergie de liaison, nous avons tracé E_b en fonction de la pression comme indiqué dans la figure 2-6. Nous remarquons que E_b augmente au fur et à mesure que la pression augmente, pour les trois cas de la taille de la boîte ($L=0.5a^*$, a^* et $1.5a^*$). Ceci peut être expliqué que la diminution de la largeur L évolue progressivement avec la pression hydrostatatique. Ainsi, l'interaction de Coulomb entre l'électron et l'impureté augmente ce qui entraîne une évolution de l'énergie de liaison du donneur.

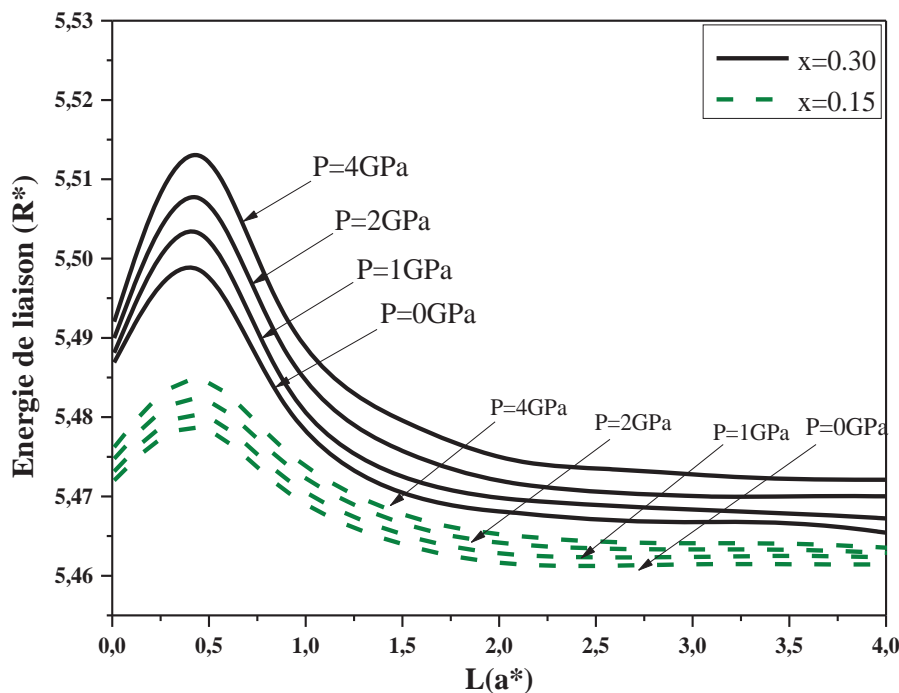


Figure 2-5 : Variation de l'énergie de liaison d'une impureté donneur confinée dans une boîte quantique cubique sous la pression hydrostatatique pour différentes valeurs de la concentration d'aluminium $x=0,15$ et $x=0,3$.

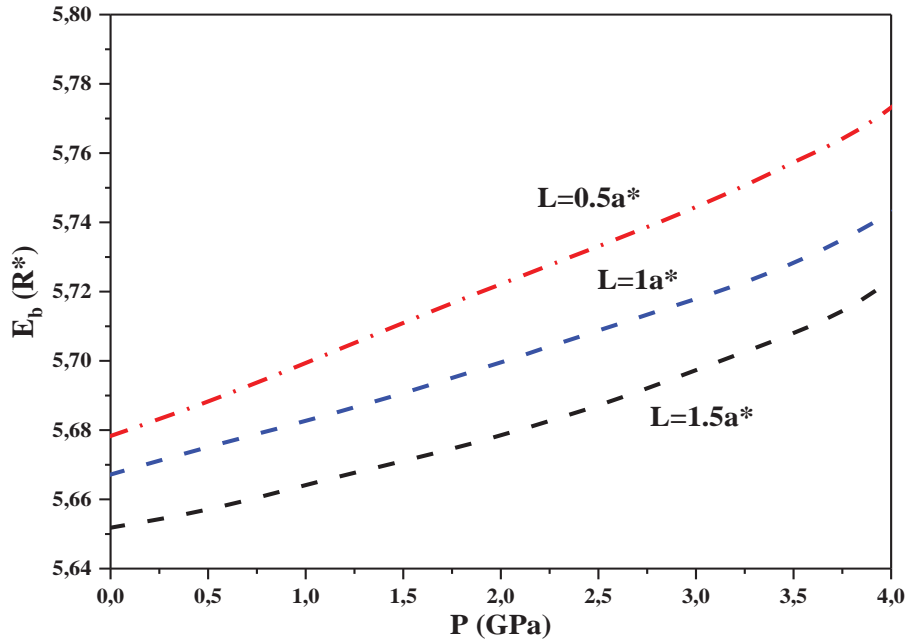


Figure 2-6 : Variation de l'énergie de liaison d'une impureté donneur confinée dans une boîte quantique cubique en fonction de la pression hydrostatique, pour différentes valeurs de la largeurs L ($\frac{a^*}{2}$, a^* et $\frac{3}{2}a^*$).

b) Susceptibilité diamagnétique χ_{dia}

Nous avons calculé la susceptibilité diamagnétique d'un magnéto-donneur placé au centre de la boîte quantique (QB) et nous avons évalué l'influence de la pression hydrostatique et du champ magnétique. Dans la figure 2-8, nous avons présenté la variation de la susceptibilité diamagnétique χ_{dia} en fonction de la largeur de la boîte quantique L pour différentes valeurs de la pression hydrostatique ($P=0, 1, 2,$ et 4 GPa). Nous observons que la valeur absolue de la susceptibilité diamagnétique $|\chi_{dia}|$ augmente avec l'augmentation de la largeur de la boîte. L'effet de la pression hydrostatique est très important pour les boîtes quantiques de grandes tailles et devient moins influençant pour les petits QD. Pour les grandes boîtes quantiques, lorsque la pression hydrostatique augmente, la valeur absolue de la susceptibilité diamagnétique diminue. Ceci peut être dû à la localisation de la fonction d'onde, et donc la valeur $\langle (\vec{r} - \vec{r}_i)^2 \rangle$ diminue avec l'augmentation de la pression, ce qui conduit à modifier la valeur de la susceptibilité diamagnétique $|\chi_{dia}|$ (Eq.2.21).

Nous remarquons dans le tableau 2-3 que les expressions $m^*(P)$ et $\varepsilon(P)$ augmentent et par conséquent $|\chi_{dia}|$ diminue avec l'augmentation de la pression. Nos résultats sont en accord avec ceux trouvés par [15,33].

Tableau 2-3 : Variation de la masse effective, la constante diélectrique, du rayon de Bohr effectif, du Rydberg effectif et de la hauteur de barrière potentielle sous l'effet de la pression hydrostatique.

| P (GPa) | GaAs | | | | Ga _{1-x} Al _x As | | | | | |
|------------|------------------------|--------------------|-----------------|-------------|--------------------------------------|------------------------|--------------------|-------------|------------------------|--------------------|
| | | | | | X=0.1 | | | X=0.3 | | |
| | $\frac{m_d^*(P)}{m_0}$ | $\varepsilon_d(P)$ | $a^*(\text{Å})$ | R* (meV) | V_0 (meV) | $\frac{m_b^*(P)}{m_0}$ | $\varepsilon_b(P)$ | V_0 (meV) | $\frac{m_b^*(P)}{m_0}$ | $\varepsilon_b(P)$ |
| 0 | 15.830 | 13.18 | 110.2 | 4.96 | 214.2556 | 15.8383 | 12.868 | 328.443 | 15.855 | 12.244 |
| 1 | 14.867 | 12.95 | 101.93 | 5.43 | 213.6235 | 14.8753 | 12.638 | 329.073 | 14.8925 | 12.014 |
| 2 | 14.090 | 12.73 | 93.02 | 5.95 | 213.6200 | 14.0983 | 12.418 | 327.8089 | 14.1154 | 11.794 |
| 3 | 13.448 | 12.51 | 85.46 | 6.53 | 213.2512 | 14.4563 | 12.198 | 327.8081 | 13.4732 | 11.574 |
| 4 | 12.914 | 12.29 | 78.51 | 7.15 | 213.1145 | 12.9223 | 11.978 | 327.8074 | 12.9391 | 11.362 |
| 5 | 12.468 | 12.08 | 72.12 | 7.84 | 212.9854 | 12.4763 | 11.768 | 326.6151 | 12.4932 | 11.151 |

Pour étudier l'effet du champ magnétique sur la susceptibilité diamagnétique, nous avons présenté dans la figure 2-9, la variation de la susceptibilité diamagnétique χ_{dia} en fonction de l'intensité du champ magnétique, pour différentes valeurs de la largeur $L(a^*)$ de la boîte quantique. Nous remarquons que la valeur absolue de la susceptibilité diamagnétique $|\chi_{dia}|$ augmente à mesure que la largeur de la boîte augmente. Pour les petits QB ($L=1a^*$ et $L=1,25a^*$), l'effet du champ magnétique est négligeable et devient plus prononcé pour les grands QB ($L=2a^*$ et $L=3a^*$). Lorsque le champ magnétique augmente, la valeur absolue de la susceptibilité diamagnétique $|\chi_{dia}|$ diminue. C'est peut être expliqué par l'effet du confinement plus fort de l'intensité du champ magnétique et au confinement spatial (géométrique).

Pratiquement, ceci est expliqué par le fait que le diamagnétisme est la tendance à former un écran pour s'opposer au champ appliqué. Alors, lorsque le confinement est très fort, l'impureté s'approche de la surface, ce qui traduit l'augmentation de la susceptibilité diamagnétique $|\chi_{dia}|$ en valeur absolue (l'impureté est très proche du champ magnétique).

La figure 2-10, présente la variation de la susceptibilité diamagnétique en fonction de la largeur de la boîte pour différentes valeurs de la pression hydrostatique et sous la présence du champ magnétique appliqué ($\gamma=2$). Il semble que la valeur absolue de la susceptibilité diamagnétique augmente au fur et à mesure que la largeur L augmente, ainsi nous remarquons que la variation de $|\chi_{dia}|$ en fonction de la pression hydrostatique est faible pour les petites boîtes quantiques en raison de la domination du confinement géométrique. En revanche, pour les grandes boîtes quantiques, il est clair que le confinement géométrique induit par un champ magnétique est dominant est la fonction d'onde est plus concentrée autour de l'impureté. Nos résultats montrent que pour les grandes boîtes quantiques, l'effet des deux perturbations externes semble prendre part également, ce qui est conduit à un confinement fort et une diminution plus impressionnante de la valeur absolue de la susceptibilité diamagnétique $|\chi_{dia}|$. Ces comportements peuvent être interprétés par le fait que la pression hydrostatique tire en bas les niveaux électroniques sous-bandes et réduit considérablement la distance donneur-électron $\langle (\vec{r} - \vec{r}_i)^2 \rangle$, ce qui provoque une forte localisation de la densité électronique près du donneur ionisé et réduit l'expansion de l'orbitale atomique. Par conséquent, l'interaction coulombienne devient plus importante. Des comportements similaires ont été observés dans le cas d'une boîte quantique sphérique [34-35].

D'après les résultats obtenus, on suggère que dans les nanostructures de faibles dimensions, le facteur de confinement géométrique peut se réaliser soit par la réduction de la taille de la boîte quantique, ou encore par l'effet de l'excitation extérieure telle que la pression hydrostatique et le champ magnétique. Cet effet permet de prévoir le comportement des impuretés, pendant la réalisation des dispositifs optoélectroniques. Nos résultats sont en accord avec les références [36-37].

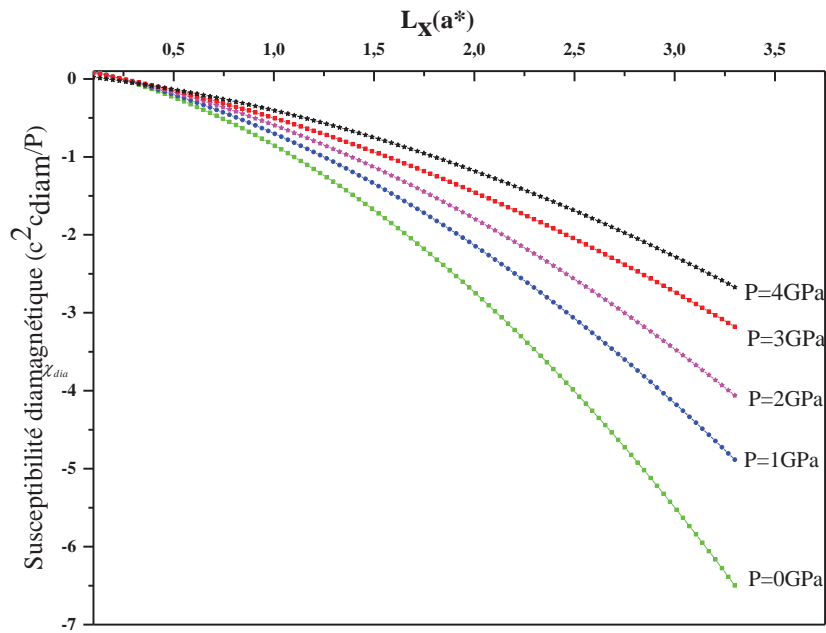


Figure 2-7 : Variation de la susceptibilité diamagnétique χ_{dia} en fonction de la largeur de la boîte, sous l'effet de la pression hydrostatique.

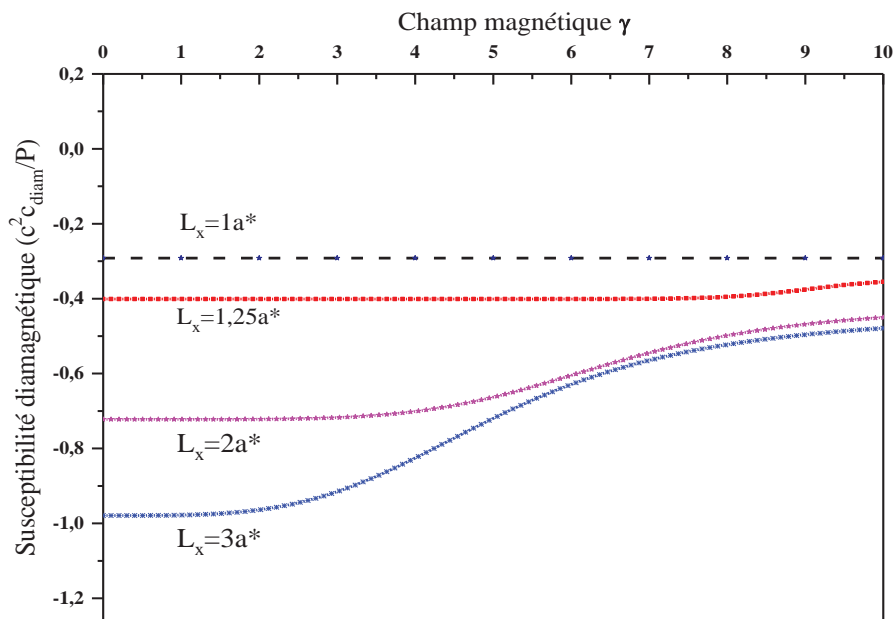


Figure 2-8 : Variation de la susceptibilité diamagnétique χ_{dia} en fonction du champ magnétique, pour différentes valeurs de la largeur de la boîte.

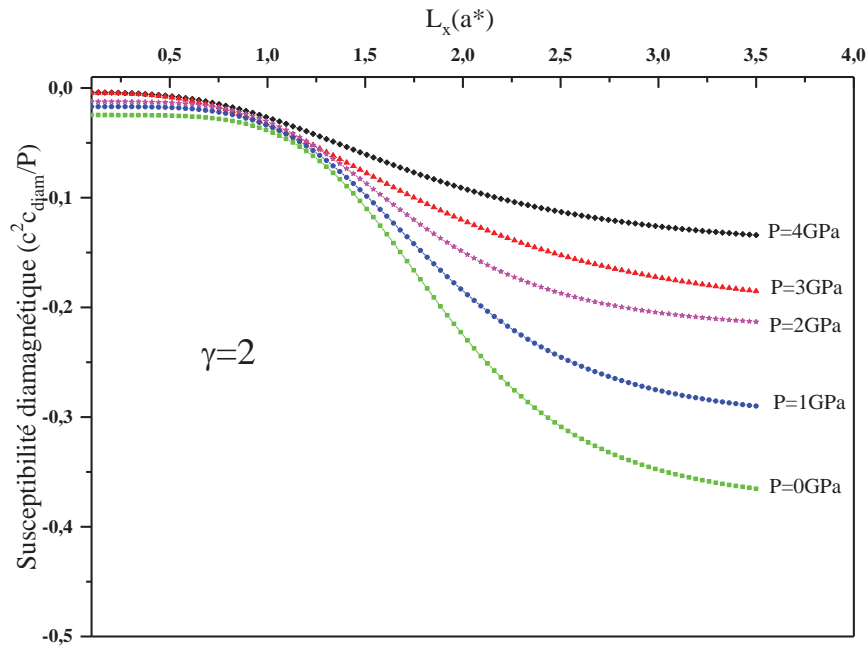


Figure 2-9 : Susceptibilité diamagnétique en fonction de la longueur de la boîte cubique pour différentes valeurs de la pression hydrostatique $P = 0, 1, 2, 3$ et 4GPa sous l'influence du champ magnétique ($\gamma=2$).

c) Polarisabilité d'un magnéto-donneur :

Les propriétés optiques et électroniques des matériaux semi-conducteurs subissent des changements importants sous la pression hydrostatique. Alors nous avons calculé la polarisabilité d'un magnéto-donneur placé au centre d'une boîte quantique cubique (QB) (équation 2.26) et nous avons évalué l'influence de la pression hydrostatique, du champ magnétique et de la taille de la boîte cubique. Dans la figure 2-11, nous présentons la polarisabilité d'une impureté donneur en fonction de la largeur de la boîte cubique pour différentes valeurs de la pression hydrostatique ($P=0, 1, 2, 3$, et 4GPa). La polarisabilité augmente avec l'augmentation de la taille de la boîte quantique, ceci peut être dû à la décompression de la fonction d'onde. De plus, la polarisabilité diminue lorsque nous augmentons la pression hydrostatique. L'effet de la pression hydrostatique est négligeable pour QD de petites tailles ($L \leq 1.5a^*$), car l'effet du confinement géométrique est prédominant et devient plus significatif pour les QD de grandes tailles ($L \geq 2a^*$).

Dans la figure 2-12, nous présentons la variation de la polarisabilité en fonction du champ magnétique fort γ^2 pour trois valeurs représentatives de la largeur de la boîte. Nous avons noté que la polarisabilité subit une diminution rapide au fur et à mesure que l'intensité du champ magnétique augmente, et cet effet est très remarquable pour les boîtes quantiques de grande taille ($L=5a^*$ et $L=4a^*$). Lorsqu'on applique un champ magnétique \vec{B} , la polarisabilité

diminue rapidement pour les différentes tailles de la BQ. Mais dès que le champ \bar{B} devient très intense ($\gamma \geq 8$), la polarisabilité diminue lentement.

Dans la figure 2-13, nous avons présenté la variation de la polarisabilité en fonction de la pression hydrostatatique en absence et en présence d'un champ magnétique fort ($\gamma = 3$) ($B \approx 20T$) pour des BQ de différentes tailles. Cette figure montre une certaine concurrence entre le confinement géométrique, le champ magnétique et l'effet de la pression hydrostatatique. Nous remarquons que la polarisabilité pour les petites QB est indépendante de l'effet simultané de la pression hydrostatatique et du champ magnétique et devient sensible pour ces deux paramètres pour les BQ de grandes tailles, ce qui reflète le confinement supplémentaire dû à l'application de la pression et du champ magnétique. Nous pouvons analyser ce comportement, par deux effets : la réduction de la fonction d'onde qui devient plus compressées dans la boîte, et l'augmentation de l'énergie de liaison qui réduit la polarisabilité. Nos résultats sont en bon accord avec Sali et al [44] et Safarpour et al [45].

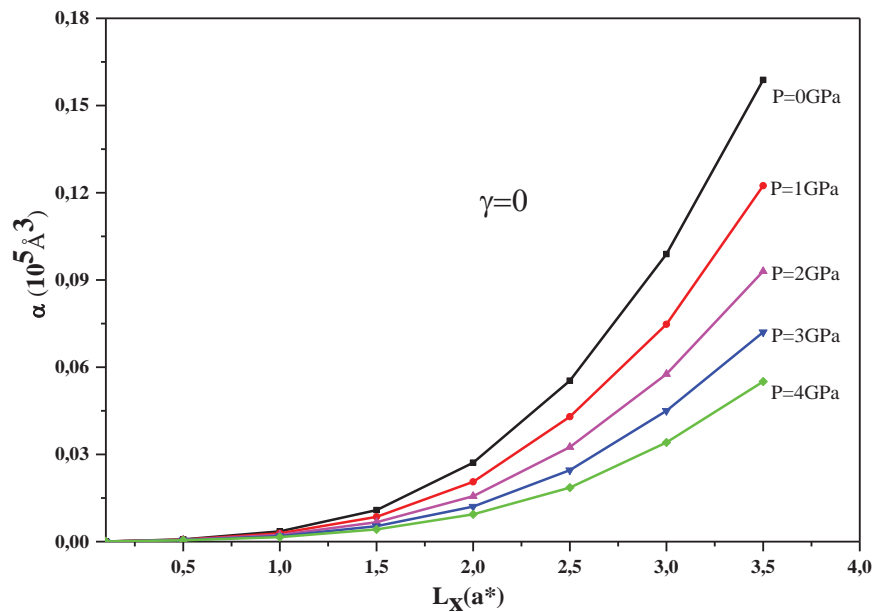


Figure 2-10 : Polarizabilité d'une impureté de type donneur dans une boîte quantique cubique en fonction de la largeur L de la boîte quantique, pour différentes valeurs de la pression hydrostatatique ($P=0, 1, 2, 3$ et 4 GPa).

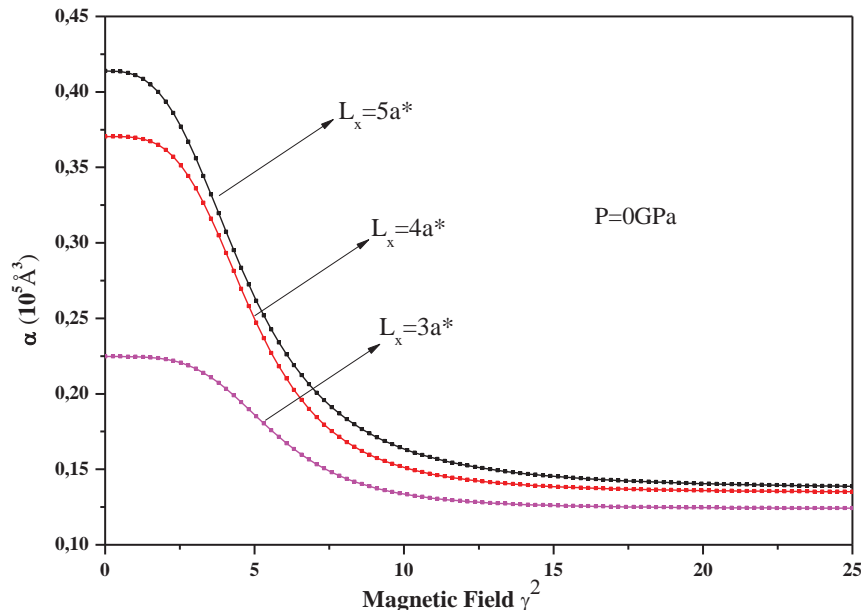


Figure 2-11 : Polarisabilité d’une impureté de type donneur confinée dans une boîte quantique cubique en fonction de l’intensité du champ magnétique γ , pour différentes valeurs de la largeur ($L=3, 4$ et $5a^*$).

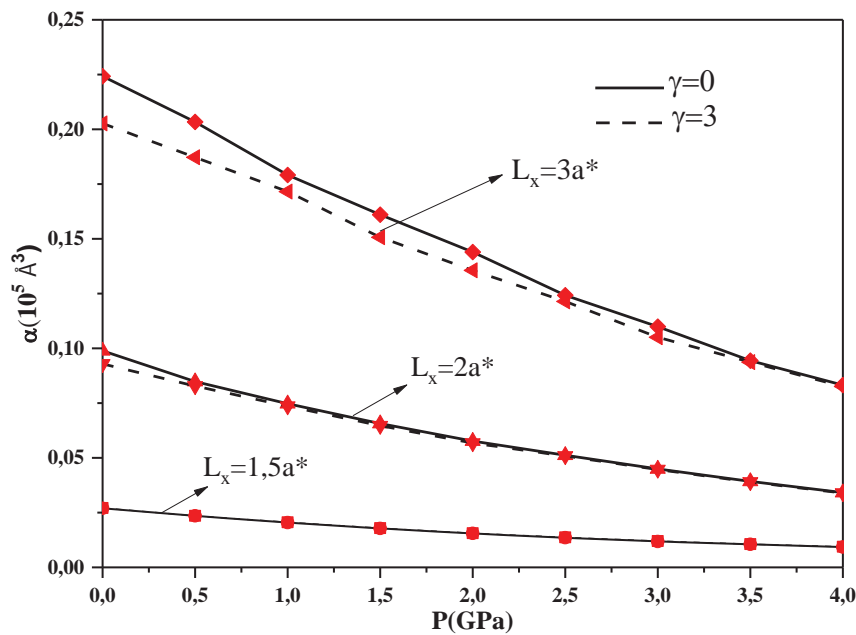


Figure 2-12 : Variation de la polarisabilité d’une impureté donneur en fonction de la pression hydrostatique en présence et en l’absence du champ magnétique pour des BQ de différents tailles.

2.4.2. Effet de la température

Les différents paramètres utilisés dans les calculs sont indiqués dans le tableau 2-4. Les résultats sont présentés en unités atomiques réduites.

Tableau 2-4 : Variation de la masse effective, de la constante diélectrique, du rayon de Bohr effectif, du Rydberg effectif et de la hauteur de la barrière du potentiel sous l'effet de la température.

| T(k) | GaAs | | | | Ga _{1-x} Al _x As | | | | | |
|------|------------------------|-----------------|--------|----------|--------------------------------------|------------------------|-----------------|----------------------|------------------------|-----------------|
| | | | | | X=0.1 | | | X=0.4 | | |
| | $\frac{m_d^*(T)}{m_0}$ | $\epsilon_d(T)$ | a* (Å) | R* (meV) | V ₀ (meV) | $\frac{m_b^*(T)}{m_0}$ | $\epsilon_b(T)$ | V ₀ (meV) | $\frac{m_b^*(T)}{m_0}$ | $\epsilon_b(T)$ |
| 77 | 0.0665 | 12.50 | 99.3 | 5.83 | 101.8437 | 0.0748 | 12.188 | 445.3117 | 0.0997 | 11.252 |
| 150 | 0.0657 | 12.85 | 103.4 | 5.42 | 99.8537 | 0.074 | 12.538 | 437.1549 | 0.0989 | 11.602 |
| 250 | 0.0641 | 13.05 | 107.6 | 5.13 | 98.8761 | 0.0724 | 12.738 | 433.2449 | 0.0973 | 11.802 |
| 300 | 0.0632 | 13.18 | 110.2 | 4.96 | 98.3875 | 0.0715 | 12.868 | 431.2898 | 0.0964 | 11.932 |
| 400 | 0.0613 | 13.45 | 115.9 | 4.62 | 97.4100 | 0.0696 | 13.138 | 427.3800 | 0.0945 | 12.201 |
| 500 | 0.0594 | 13.73 | 122.2 | 4.29 | 96.4325 | 0.0677 | 13.418 | 423.4700 | 0.0926 | 12.482 |

a) Energie de liaison E_b

La figure 2-14 présente la variation de l'énergie de liaison d'une impureté donneur peu profond au centre d'une boîte cubique de GaAs en fonction de la température et de la largeur de la BQ, avec une teneur en aluminium de 30%. Il ressort clairement de la figure que l'énergie de liaison (E_b) atteint une valeur maximale pour une largeur de la boîte comprise entre 0,5a* et 0,75a*, puis diminue à mesure que la largeur de la boîte quantique augmente, quelle que soit la valeur de la température. De plus, l'énergie de liaison diminue avec une augmentation de la température pour toutes les valeurs supérieures de 0,5a*. Avec une réconciliation de toutes les courbes pour les grandes valeurs de la boîte. Ces évolutions énergétiques sont les mêmes que celles obtenues par D.E.Aspnes et J.D.Correa [42-43]. La diminution de l'énergie de liaison par l'augmentation de la température, s'explique par une augmentation du rayon de Bohr effectif (diminution de la masse effective), donc la constante de Rydberg effective diminue, ce qui réduit la hauteur potentielle de la barrière.

La variation de l'énergie de liaison E_b en fonction de la température du donneur dans la boîte cubique, pour les différentes valeurs de L (0, 5, 1 et 1a*) est illustrée dans la figure 2-15. L'impureté est supposée au centre de la boîte quantique. Pour une taille fixe et au fur et à mesure

que la température augmente, l'énergie de liaison commence à diminuer d'une façon rapide. Cet effet conduit à l'affaiblissement de l'emplacement de l'électron près de l'impureté avec l'augmentation de la température. On note également que pour $T < 200\text{K}$, l'énergie de liaison diminue plus lentement que pour $T > 200\text{K}$. Ce comportement indique que l'effet de la température est assez significatif dans les petites boîtes quantiques.

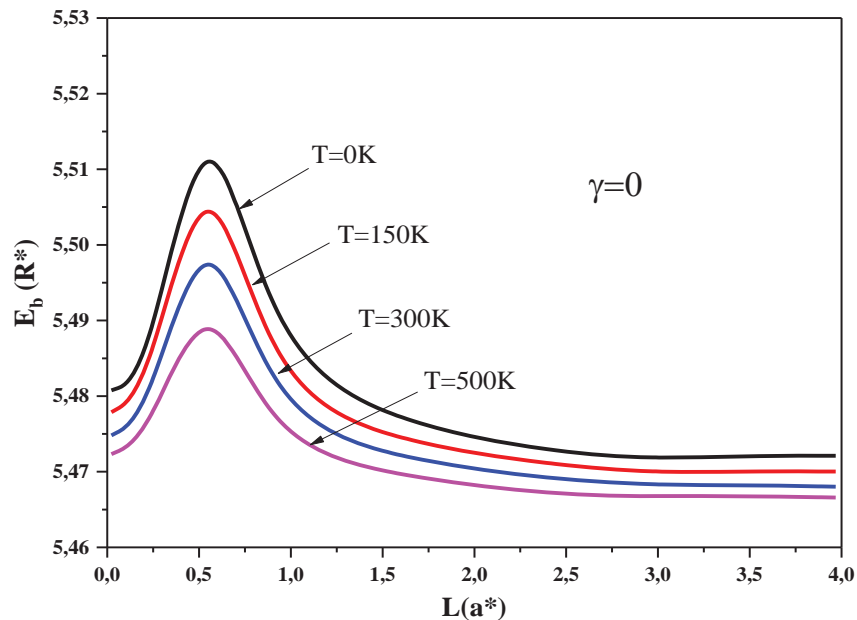


Figure 2-13 : Energie de liaison E_b en fonction de la largeur de la boîte L , sous l'effet de la température ($T=0, 150, 300$ et 500K).

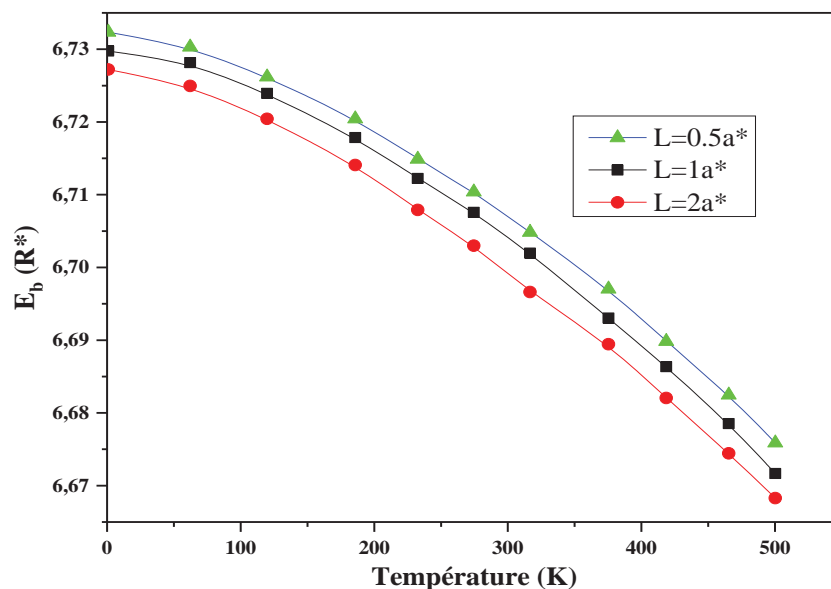


Figure 2-14 : Evolution de l'énergie de liaison en fonction de la température pour différentes valeurs de la largeur de la boîte.

b) Susceptibilité diamagnétique χ_{dia}

Afin d'étudier l'effet de la température sur la susceptibilité diamagnétique d'une impureté donneur hydrogénique, nous avons représenté sur les figures 2-16 et 2-17 la variation de la susceptibilité diamagnétique en fonction de la température et de la dimension de la boîte quantique.

A partir de la figure 2-16, nous pouvons observer que la valeur absolue de la susceptibilité diamagnétique $|\chi_{dia}|$ augmente avec la largeur (L) pour différentes valeurs de la température (T=150K, 300K et 500K). On note que, pour une température fixe, la valeur absolue de la susceptibilité diamagnétique $|\chi_{dia}|$ augmente au fur et à mesure que la largeur de QB augmente. Ceci est lié au fait qu'à une température donnée, la fonction d'onde est plus comprimée pour les petites QB. Nous remarquons sur la figure 2-17 que l'influence de la température n'est appréciable que pour les grands QD (pour $L \geq 2a^*$). Pour les petites QD ($L \leq 2a^*$), le confinement géométrique est plus prononcé et l'effet de la température est négligeable. Pour les grandes boîtes, on remarque que lorsque la température augmente, la valeur absolue de la susceptibilité diamagnétique $|\chi_{dia}|$ augmente. Cette augmentation peut être due à la diminution de l'interaction de Coulomb. Comme la masse effective des électrons diminue et que la constante diélectrique augmente, la hauteur de la barrière du potentiel diminue (comme le montre le tableau 2-4), ce qui entraîne une diminution de l'interaction de Coulomb entre l'électron et l'impureté pour les tailles des boîtes quantiques qui augmentent la valeur absolue de la sensibilité diamagnétique.

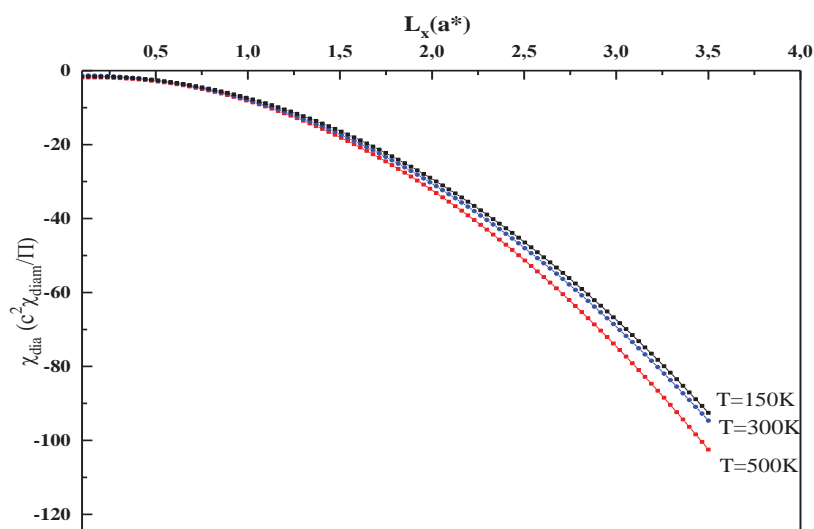


Figure 2-15 : Variation de la susceptibilité diamagnétique χ_{dia} en fonction de la largeur L, pour différentes valeurs de température (T=150,300 et 500K) avec $x=30\%$.

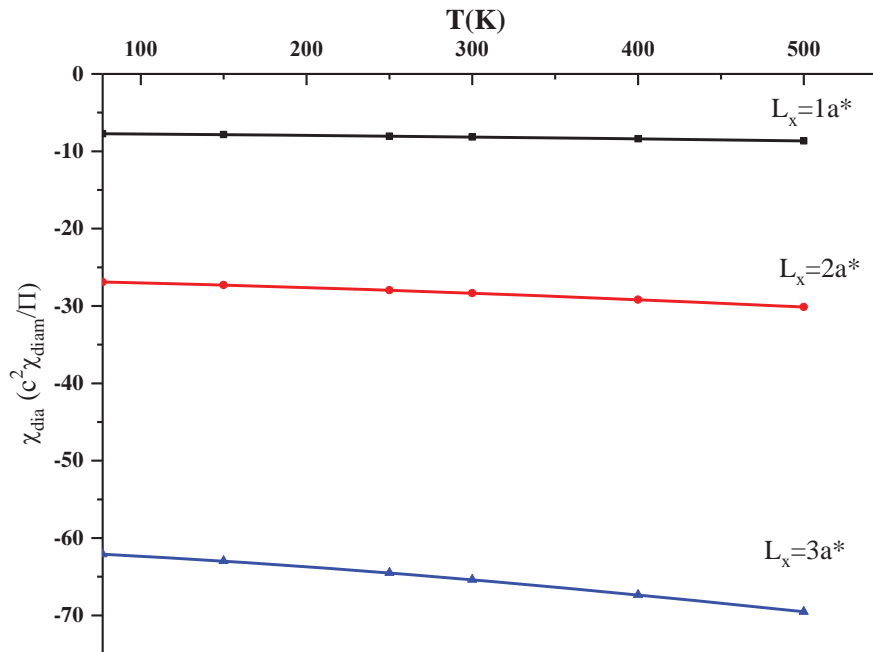


Figure 2-16 : Variation de la susceptibilité diamagnétique χ_{dia} en fonction de la température, pour différentes valeurs de la boîte quantique ($L=a^*, 2a^*$ et $3a^*$) avec $x=30\%$.

c) Polarisabilité α d'un magnéto-donneur

La figure 2-18 présente une variation de la polarisabilité en fonction de l'intensité du champ magnétique pour trois valeurs de la température. Nous constatons que l'augmentation du champ magnétique réduit la polarisabilité. Ceci peut être expliqué par l'augmentation du confinement géométrique.

L'augmentation de la température entraîne une augmentation de la polarisabilité, ceci est due à la diminution de l'interaction coulombienne comme indiqué précédemment. Dans la figure 2-19, nous avons montré la variation de la polarisabilité α en fonction des largeurs de la boîte en absence du champ magnétique. La polarisabilité augmente en augmentant la largeur de la boîte.

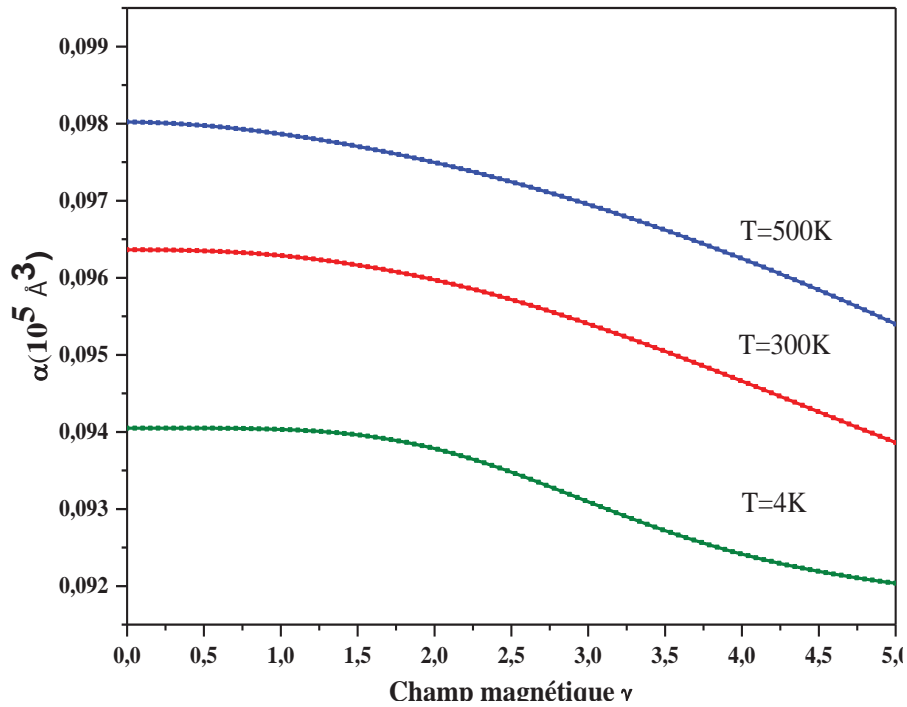


Figure 2-17 : Variation de la polarisabilité en fonction de l'intensité du champ magnétique, pour différentes valeurs de la température ($T=4, 300$ et 500K).

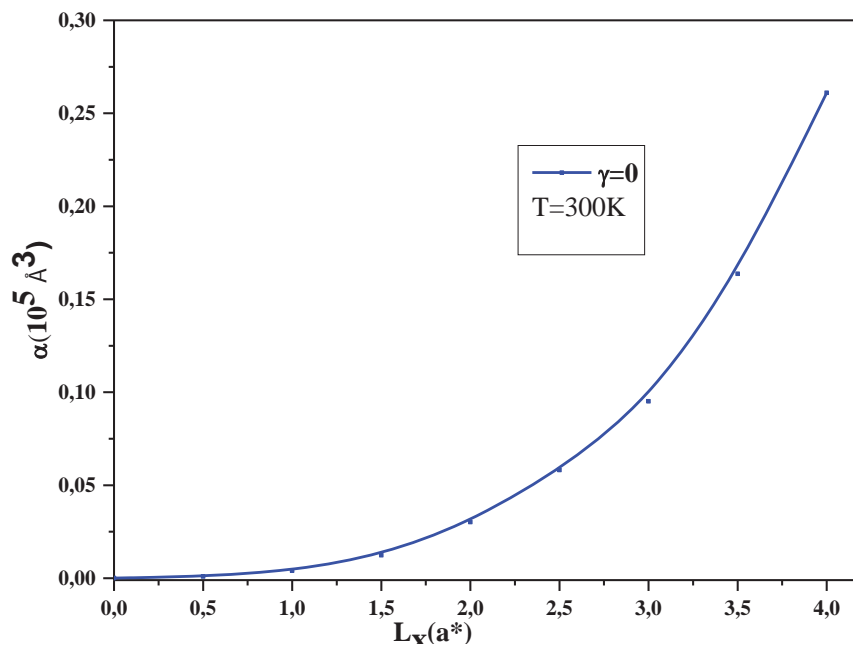


Figure 2-18 : Variation de la polarisabilité en fonction de la largeur L , à $T=300\text{K}$ en absence du champ magnétique.

2.5. Conclusion

En conclusion, ce chapitre montre clairement l'importance du champ magnétique externe sur le dopant unique dans une boîte quantique cubique de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As. Nous avons introduit d'autres perturbations extérieures qui sont : la pression hydrostatique et la température. Différents paramètres ont été pris en compte : la taille de la boîte quantique, l'intensité du champ magnétique et la position du donneur ionisé. Nos calculs ont été réalisés dans le cadre de l'approximation de la masse effective à l'aide d'une méthode variationnelle perturbatrice en considérant une barrière de potentiel finie. Nous avons constaté une sensibilité remarquable de l'énergie de liaison à la largeur de la boîte quantique. Nous avons également remarqué l'existence d'une largeur critique qui dépend de la taille de la structure et du décalage de la bande du matériau. Nos résultats montrent ainsi que l'effet de la température et de la pression hydrostatique sur l'énergie de liaison et la polarisabilité dans les semi-conducteurs de faibles dimensions est appréciable pour les points quantiques de grandes tailles. Nous avons constaté que la pression hydrostatique augmente l'énergie de liaison, ce qui reflète la forte localisation de l'impureté. D'autre part, l'effet de la pression est remarquable sur la polarisabilité et devient plus important pour les grandes boîtes. Par contre, la température diminue cette énergie plus précisément même pour les petits points quantiques ($<1,5a^*$). Il est également noté que pour $T < 200\text{K}$ l'énergie de liaison diminue lentement par rapport à $T > 200\text{K}$. Nos calculs montrent que la température et le champ magnétique jouent un rôle important dans la polarisation des boîtes quantiques. Ceci montre la possibilité de contrôler les transitions d'énergie de l'impureté en agissant sur l'intensité du champ magnétique ou sur la taille de la nanostructure ainsi que la présence de l'excitation extérieure. Autrement la susceptibilité diamagnétique diminue avec l'augmentation de la pression hydrostatique ou du champ magnétique. Pour les petites boîtes quantiques, la susceptibilité diamagnétique reste indépendante pour la pression hydrostatique et le champ magnétique. Nous remarquons aussi que l'effet de la température sur la susceptibilité diamagnétique est appréciable pour les boîtes quantiques de grandes tailles. La température augmente la valeur absolue $|\chi_{dia}|$ de la susceptibilité.

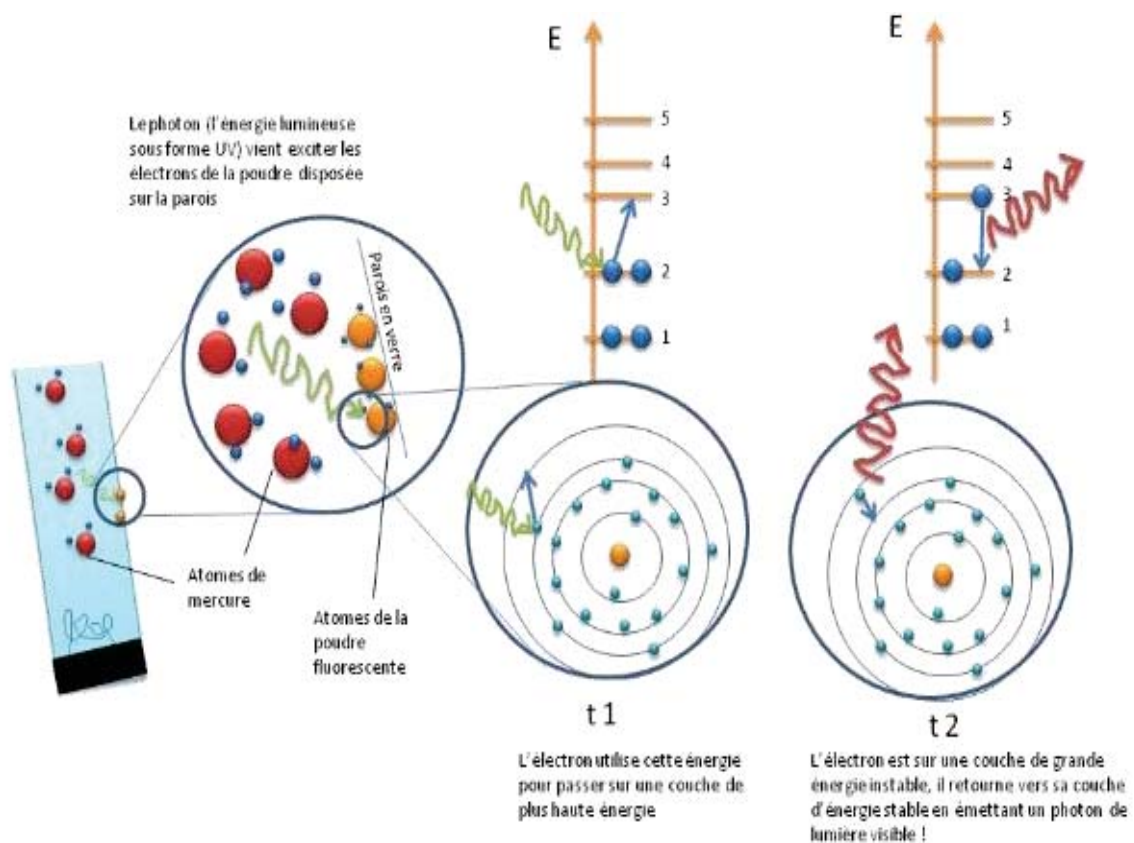
Dans le prochain chapitre, nous montrerons les résultats obtenus à partir de notre résolution numérique via la méthode variationnelle des structures à base de boîtes quantiques inhomogènes (Core/Shell) de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As sous l'effet de la correction polaronique.

Références bibliographiques du 2^{ème} chapitre

- [1] J. C. Phillips, *Rev. Mod. Phys.* **42**, 317 (1970).
- [2] P. Harrison, "Quantum Wells, Wires and Dots", Wiley, NY (2006).
- [3] D. Bimberg, M. Grundmann, N. N. Ledentsov, "Quantum Dot Heterostructures", Wiley, Chichester, New York (1999).
- [4] G. Schmid, "Nanoparticles from theory to applications", second edition, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA (2010).
- [5] A. Sali, H. Satori, M. Fliyou, H. Loumrhari, *Phys. Status Solidi B* **232**, 209 (2002).
- [6] M. Sahin, *Phys. Rev. B* **77** 045317 (2008).
- [7] W. Trserakowski, M. Baj, S. Huant and L. C. Brunel, *Phys Rev. B* **33**, 6846 (1986).
- [8] H.O. Oyoko, C.A. Duque, N.P. Montenegro, *J. Appl. Phys.* 90 -819 (2001).
- [9] A.M. Elabsy, *Phys. Scripta.* **48**, 376 (1993).
- [10] N. Raigoza, A.L. Morales, A. Montes, N.P. Montenegro, C.A. Duque, *Phys. Rev. B* **69**, 045323 (2004).
- [11] S.T.P. Merchancano¹, H. Paredes-Gutierrez, J.S. Valencia, *J. Phys : Condens. Matter.* **19**, 026225 (2007).
- [12] A. John Peter *Solid State Communications*, **147**, 296–300 (2008).
- [13] P. Lefebvre, B. Gil, H. Mathieu, *Phys. Rev. B* **35** 5630 (1987).
- [14] P. Lefebvre, B. Gil, J. Allegre, H. Mathieu, Y. Chen, C. Raisin, *Phys. Rev. B* **35** 1230 (1987).
- [15] G. Rezaei, N.A. Doostimotlagh, *Physica E*, **44**, 833–838 (2012).
- [16] K. El-Messaoudi, A.Zounoubi, I.Zorkani and A.Jorio, *Phys. Stat. Sol. (b)* **270**, 233 (2002).
- [17] S.-H. Chen, J.-L. Xiao, *Physica B* **393**, 213 (2007).
- [18] A.M. Elabsy, *Egypt. J. Sol.* **23**, 267 (2000).
- [19] A.M. Elabsy, *Phys. Scr.* **59**, 328 (1999).
- [20] J. Bocquel, A. D. Giddings, T. Mano, T. J. Prosa, D. J. Larson, and P. M. Koenraad, "Composition profiling of GaAs/AlGaAs quantum dots grown by droplet epitaxy," *Applied Physics Letters*, vol. **105**, no. 15, (2014).
- [21] G. Pellegrini, G. Mattei, and P. Mazzoldi. Finite depth square well model: Applicability and limitations. *J. Appl. Phys.*, **97**, 073706, (2005).
- [22] A. Zounoubi, K. El Messaoudi, I. Zorkani, and A. Jorio, *Superlatt. Microstruct.*, **30**, 189, (2001).
- [23] Heon Ham and Harold N. Spector, *J. Appl. Phys.*, **90**, 2781 (2001).
- [24] R.F. Kopf, M.H. Herman, M.L. Schnoes, A.P. perley, G. Livescu, M. Ohring, *J.Appl.Phys.*, **71**, 5004 (1992).
- [25] J.Berthin ,T.G. Castner and N.K.Lee, *Solid Stat. Comm*, **14**, 1321 (1974).
- [26] T.G. Castner, *Phys. Rev. B* **21**, 3523 (1980).
- [27] H.S.Tam and T.G. Castner, *Phys. Rev. B* **23**, 3983 (1981).
- [28] F.A. D'Altroy et al, *Phys.* **103**, 1671 (1956).
- [29] T.G. Castner, *Phys. Rev. Lett* **34**, 1627 (1975).
- [30] R.P.Feymann, le cours de Physique d'Electromagnétisme Tome2, Interdéditioin (1964).
- [31] I. Zorkani and L. Filali, *phys. stat. sol. (b)* **215**, 999 (1999).
- [32] A. John Peter *Solid State Communications*, **147**, 296–300 (2008).
- [33] M. El Haouari, E. Feddi, A. Oukerroum and E. Assaid, *IEEE*, **978**-1-4799-65/15(2015).
- [34] A. Sivakami and M. Mahendran, *Physica B* **405**, 1403-1407 (2010).

- [35] A. John Peter, *Physica E* **28**, 225-229 (2005).
- [36] M. H. E. F. A. Oukerroum, *IEEE*, **978**-1-4798 (2015).
- [37] E. Kilicarlan, S. Sakiroglu, M. Koksall, H. Sari and I. Sokmen, *Physica E*, **42**, 1531-1535 (2010).
- [38] G.A. Samara, *Phys. Rev. B* **27** 3494 (1983).
- [39] R.F. Kopf, M.H. Herman, M.L. Schnoes, A.P. perley, G. Livescu, M. Ohring, *J. Appl. Phys*, **71**, 5004 (1992).
- [40] S. Adachi, *J. Appl. Phys.* **58**, R1 (1985).
- [41] B. Welber, M. Cardona, C.K. Kim, S. Rodriquez, *Phys. Rev. B* **12**, 5729 (1975).
- [42] D. E. Aspnes, *Phys. Rev. B***14** 5331 (1976).
- [43] J.D. Correa, N. Porrás-Montenegro, C.A. Duque, *Phys. Status Solidi B* **241**, 2440 (2004).
- [44] Sali, A., Satori, H., 2014. *Superlattices and Microstructures* **69**, 38–52 (2014).
- [45] A. Hakimyfard, M.G. Barseghyan, C.A. Duque, A.A. Kirakosyan, *Physica B* **404**, 5159 (2009).

Chapitre III : Section efficace de photoionisation d'une impureté donneur dans une boîte quantique de type cœur/coquille avec correction polaronique



3.1.Introduction

Avec des progrès récents de la technologie de la nano-fabrication, les scientifiques sont arrivés à fabriquer une nouvelle classe des boîtes quantiques enrobées appelées boîtes quantiques cœur/coquille (IQD). Ces boîtes ont attiré l'attention en raison de leurs performances exceptionnelles signalées pour les dispositifs optoélectroniques, qui fonctionnent dans la région vert-ultraviolet dans le spectre visible. Ces nanostructures sont typiquement composées de deux semi-conducteurs de bandes différentes : le noyau, avec une bande interdite plus large, est recouvert d'une coque faite d'un semi-conducteur avec une bande interdite plus petite, ou l'inverse. Les techniques de fabrication des structures quantiques cœur/coquille ont maintenant mûri, les plus développées et utilisées récemment : méthode lithographique [1-2], épitaxie par jet moléculaire (MBE) [3-4] et épitaxie organométallique en phase vapeur [5]. Les dernières années ont été marquées par un grand développement des applications optoélectroniques de nouvelle génération, qui marque une amélioration considérable des applications telles que les cellules solaires [6], les diodes électroluminescentes [7], et l'information quantique [8-9].

L'existence d'impuretés hydrogénées dans les systèmes quantiques enrobées est essentielle dans la révolution des composants électroniques. En effet, les impuretés donnent lieu à des états électroniques (sous-bandes) qui facilitent le transport quantique et contribuent à l'amélioration des propriétés optiques [10-12]. Dans les points quantiques intégrés, l'électron se déplace dans un espace plus petit et reste attaché à l'ion d'impureté. Par conséquent, la force effective de l'interaction de Coulomb entre les électrons et les ions d'impuretés électroniques augmente, ce qui entraîne une amélioration de l'énergie de liaison. Ces avantages permettent de modifier radicalement les propriétés électroniques et optiques des structures de points quantiques cœur/coquille telles que l'énergie de liaison, la section de photoionisation [13], le spectre d'absorption et autres propriétés optiques [14]. De nombreux chercheurs [15-17] ont étudié les problèmes d'impureté dans diverses structures quantiques intégrées. Des études théoriques et expérimentales dans les systèmes micro-électroniques ont montré que l'énergie de liaison de l'impureté est une quantité physique qui est très sensible à la variation de la position de l'impureté. Cette dernière joue un rôle très important pour la compréhension des propriétés optiques des systèmes en faible dimensions [18-20]. La modification effectuée par l'impureté est essentiellement due à la propagation de la fonction d'onde, qui est très importante avec le confinement géométrique et devient moins sensible pour le confinement faible [21]. Bolcatto et al, ont montré que l'énergie de liaison diminue d'environ 35% lorsque l'impureté se

déplace du centre vers l'extimité de la boîte cubique [22]. Mendoza et al [23] ont étudié l'effet de la position de l'impureté sur l'énergie de liaison dans une boîte quantique cubique GaAs. Ils ont étudié l'effet du champ électrique et la position de l'impureté hydrogénique sur l'énergie de liaison dans une boîte quantique de forme cubique. En outre, il a été démontré que la position de l'impureté provoque un déplacement de la bande d'absorption dans la gamme des basses énergies. L'effet du confinement quantique, la forme différente du cœur ou de la coquille peuvent affecter directement les propriétés du système, et un tel système mérite donc d'être étudié plus.

Un autre facteur qui s'avère important pour l'analyse des propriétés optoélectroniques pour les semi-conducteurs polaires, c'est l'interaction entre l'électron et les phonons optiques. D'après les études sur les cristaux, les atomes ne sont pas rigoureusement fixes, ils vibrent autour de leur position d'équilibre et l'échauffement du solide stimule ces vibrations. Les phonons sont décrits par des ondes planes de fréquence et de vecteur d'onde bien connus. Ce raisonnement reste le même pour les systèmes à faibles dimensions. De nombreux auteurs ont continué à étudier le rôle de l'interaction (électron, trou) -phonon dans les modifications significatives montrées par les spectres de réponse optique de matériaux semi-conducteurs. La théorie Hamiltonien décrite par l'interaction électron-phonon LO a été exprimée par Fröhlich [24]. Plusieurs auteurs se sont penchés sur la concurrence entre l'effet de confinement dû aux perturbations extérieurs, et le couplage électron-phonon sur l'impureté [25-26]. Les études théoriques consacrées au couplage électron-phonon dans les points quantiques enrobés, ont montré que la dépendance de la taille de QD avec la correction polaronique par l'interaction LO ne sont pas uniformes et il y a un désaccord entre les différents modèles de QDs. En effet, certains auteurs ont montré que cette interaction disparaît dans les points quantiques de petites tailles [27], autres experts ont montré que la correction polaronique est indépendante du rayon du cœur du point quantique [28]. En revanche, des études expérimentales ont constatés que l'effet polaronique augmente avec la diminution de la taille des points [29-30]. Ainsi, par exemple une étude systématique de la transition hydrogénéoïde de donneurs peu profonds dans GaAs en volume, ainsi que dans des multi-puits quantiques GaAs/AlGaAs et des superréseaux, à la résonance avec les phonons optiques de GaAs, conclut au renforcement de l'interaction électron-phonons quand le confinement est accentué [31]. Des boîtes quantiques de InAs formés sur un substrat GaAs par épitaxie à jet moléculaire selon le mode de croissance Stranski-Krastanov ont été étudiées par magnéto-spectroscopie dans l'infrarouge lointain [32]. Ces boîtes forment des lentilles d'environ 2 nm de hauteur et 70 nm de diamètre et présentent une symétrie

quasi-cylindrique. Les mesures indiquent que le couplage électron-phonons dans une boîte quantique est toujours de type couplage fort.

La présence d'un champ électrique, autour des structures quantiques enrobées, modifie la distribution des porteurs de charges et de l'énergie qui s'appelle « Stark shift ». Cette modification fournit des informations précieuses sur les propriétés optoélectroniques des boîtes quantiques [33]. Les résultats théoriques ont révélé que la photoionisation (PCS) dépend fortement de l'énergie de liaison et de l'intensité du champ électrique. Elle dépend aussi de la symétrie du potentiel de l'échantillon qui confine les porteurs de charges. Sahin et al [34] ont étudié la section de photoionisation d'une impureté hydrogénique centrale dans un point quantique sphérique. Ils ont montré que l'énergie de liaison et la PCS dépendaient fortement de l'épaisseur de la couche interne et des énergies photoniques. La variation de la PCS en fonction de l'énergie photonique pour différentes positions du donneur hydrogénique dans un point quantique carré est déterminée à l'aide de technique variationnelle par magnéti [35]. On a constaté que le PCS est affecté par plusieurs facteurs comme : l'impureté décentrée, la forme asymétrique et le champ électrique..., en combinant les problèmes d'impuretés, les excitations extérieures et les géomètres des points quantiques, qui affectent l'énergie de liaison des impuretés et le PCS dans un système quantique non conventionnel cœur/coquille qui semble être un problème intéressant.

Le but de ce chapitre est la construction de l'Hamiltonien d'interaction électron-phonon dans une boîte quantique de type cœur/coquille de semi-conducteur, dont nous allons faire usage tout au long de ce travail. Nous nous basons sur le modèle développé par Fröhlich qui repose entièrement sur l'hypothèse suivante, justifiée dans le cas de semi-conducteurs de type III-V, II-VI et I-VII : le paquet d'onde d'un électron interagissant avec les phonons s'étend sur une distance bien plus importante que les dimensions de la cellule élémentaire. En conséquence, la particule interagit uniquement avec les vibrations optiques de grande longueur d'onde et nous pouvons considérer le matériau comme un milieu polarisable continu. En effet, les vibrations de petite longueur d'onde produisent un champ de polarisation alternativement positif/négatif sur des distances de l'ordre de la cellule élémentaire, et donc nul en moyenne sur l'étendue du paquet d'onde électronique. Alors que les vibrations acoustiques de grande longueur d'onde ne produisent pas de polarisation du réseau puisque les ions vibrent en phase.

Néanmoins, de nouvelles expériences concernant l'effet d'un champ électrique sur les états d'impureté dans une boîte quantique inhomogène montrent la possibilité de contrôler les propriétés photoniques d'un QD particulier pour l'émission et l'absorption de la lumière. En

relation avec ce sujet, et afin de contribuer à la compréhension des phénomènes liés à l'application d'un champ électrique latéral sur IQD, nous allons étudier l'effet d'un champ électrique sur un donneur confiné dans une boîte quantique inhomogène (cœur/coquille), en présence des excitations extérieurs et en tenant compte de l'interaction électron-phonon. Nous espérons que le présent travail attirera davantage l'attention des chercheurs sur ce sujet.

3.2. Théorie de Fröhlich

Fröhlich a proposé un modèle d'Hamiltonien pour le "grand" polaron dans lequel l'interaction entre un seul électron et des phonons optiques longitudinaux (LO) est décrite par la mécanique quantique. Afin de déterminer comment les propriétés électroniques sont modifiées du fait de l'interaction de l'électron avec le champ de polarisation induit. Il a introduit plusieurs hypothèses permettant un traitement simplifié [36]. La polarisation portée par les phonons LO est représentée par le modèle d'Einstein dans lequel la fréquence est considérée comme constante, $\omega_{LO}=\omega_0$. Puisqu'il ne suppose qu'un seul électron, l'Hamiltonien [37] peut s'écrire comme suit :

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \sum_q \hbar\omega_{LO} a_q^+ a_q + \sum_q (V_q a_q e^{iq.r} + V_q^* a_q^+ e^{-iq.r}) \quad (3.1)$$

Le premier terme présente l'énergie cinétique de l'électron libre de masse effective m^* dans le bas de la bande de conduction en absence de l'interaction avec les vibrations du réseau. Le deuxième terme est l'énergie des phonons optiques longitudinaux de vecteurs d'onde q et de fréquence ω_{LO} , où a_q^+ et a_q sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation. Le troisième terme représente l'énergie d'interaction entre une charge $-e$ à la position r et le réseau, via la polarisation produite par le déplacement des ions. Le potentiel qui localise l'électron est de type Coulombien à grande distance. Au voisinage de l'électron ce potentiel est tronqué de façon à permettre au réseau de suivre le mouvement de l'électron à une distance déterminant le degré de localisation de l'électron : on parle du rayon du polaron, noté r_p .

V_q , est la transformée de Fourier du potentiel d'interaction électron-phonon.

$$V_q = -\frac{i}{q} \left(\frac{4\pi\alpha r_p^3}{V} \right) \quad (3.2)$$

Où α est la constante de couplage électron-phonons. Dans un cristal polaire à constante diélectrique électronique ϵ_∞ et statique ϵ_0 , α est défini comme suit :

$$\alpha = \left(\frac{e^2}{2r_p \hbar \omega_{LO}} \right) \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \quad (3.3)$$

La constante diélectrique haute fréquence ϵ_∞ , est connue à partir de mesures de l'indice de réfraction. Elle est pratiquement indépendante de la température, contrairement à la constante diélectrique statique ϵ_0 .

r_p est le rayon du polaron qui s'exprime par:

$$r_p = \left(\frac{\hbar}{2m_p^* \omega_{LO}} \right)^{1/2} \quad (3.4)$$

L'approximation du continuum reste valide tant que le rayon de Bohr du défaut est grand devant le paramètre du réseau $a_{\text{réseau}}$: $r_p \gg a_{\text{réseau}} \sqrt{\mathfrak{R}}$.

Dans de nombreux cristaux, le rayon polaronique est de l'ordre de quatre fois le paramètre de la maille du réseau $a_{\text{réseau}}$ [38]. Ainsi l'approximation du continuum implique que $\mathfrak{R} \ll 16$

Tableau 3-1 : Valeurs de paramètres physiques des semi-conducteurs de la famille II-VI et III-V.

| Matériau | α | a_0^* (Å) | r_p (Å) | a_0^*/r_p | $\hbar\omega_{LO}$ (meV) | R_y (meV) | \mathfrak{R} |
|----------|----------|-------------|-----------|-------------|--------------------------|-------------|----------------|
| CdS | 0.527 | 25.9 | 25.3 | 1.025 | 38.26 | 36.42 | 0.952 |
| CdSe | 0.460 | 34.0 | 33.2 | 1.024 | 26.58 | 45.55 | 1.71 |
| CdTe | 0.315 | 53.3 | 44.8 | 1.189 | 20.84 | 14.73 | 0.707 |
| GaAs | 0.068 | 99.5 | 39.7 | 2.507 | 36.70 | 5.8 | 0.159 |
| InSb | 0.022 | 579.0 | 106.2 | 5.450 | 24.46 | 0.83 | 0.034 |

3.2.1. Couplage faible de l'électron-phonon :

Dans ce régime, le couplage électron-phonon peut être traité comme une petite perturbation du système. La fonction d'onde sera légèrement modifiée à cause de cette interaction et le problème peut être résolu en utilisant les théories de perturbation existantes [39]. Un résultat simple, et pourtant suffisant, est obtenu à partir de la théorie des perturbations

de Rayleigh-Schrödinger [37] donnant la masse effective du polaron notée m_p^* est exprimée par :

$$\frac{m_p^*}{m_b^*} = \frac{1}{1 - \frac{\alpha}{6}} \quad (3.5)$$

Cela signifie que les effets polaires donnent l'impression que le porteur de charge est plus lourd que la masse de la bande m . La constante α de couplage polaire, due aux déformations du réseau, et l'énergie propre E du polaron (en unité d'énergie $\hbar\omega_{LO}$) est liées par :

$$E = -\alpha + \frac{p^2}{m_p^*} \quad (3.6)$$

Elle est plus grande que la masse effective de l'électron m_e^* car $\left(1 - \frac{\alpha}{6}\right)^{-1} > 1$. En couplage faible ($\alpha \ll 1$) ces variations d'énergie et de masse effective sont faibles.

La masse supplémentaire provient de l'interaction électron-ion qui induit une déformation du réseau. Au fur et à mesure que l'électron se déplace, il doit traîner cette déformation. Il faut de l'énergie pour déplacer la déformation et la traîner, c'est la raison réelle de l'augmentation de la masse en augmentant la constante de couplage du polaron. Cette approche suppose l'absence d'interaction entre les divers phonons constituant le nuage autour de l'électron (théorie des phonons indépendants).

3.2.2. Couplage fort de l'électron-phonon :

Le régime de couplage électron-phonon fort a été le premier à être étudié par Landau et Pekar en 1946. C'est leur étude qui a précédé le mot "Polaron". On sait maintenant que leur théorie et les améliorations qui en découlent sont valables pour des valeurs élevées du constant de couplage α . Lorsque le couplage électron-phonons est suffisamment fort, le polaron peut développer une structure interne caractérisée par des niveaux d'énergie discrets.

Dans ce régime, la méthode de calcul de la constante polaire (ou énergie) est radicalement différente de celle du couplage faible. Fondamentalement, un calcul variationnelle sur une fonction d'onde gaussienne est utilisé et l'énergie minimale est la suivante [37] :

$$E = -\frac{\alpha^2}{3\pi} \approx -0.106\alpha^2 \quad (3.7)$$

Où α est la constante de couplage.

Le mouvement des ions crée un potentiel local qui piège l'électron à l'état lié. L'extension spatiale de cet état lié dépend du mouvement moyen des électrons. Les ions se déplacent également en fonction du mouvement moyen des électrons. Certaines mesures expérimentales telles que des mesures d'absorption optique sont reliées à l'énergie de ces états. Un nombre grandissant de phonons prend part à l'interaction (le nombre de phonons est de l'ordre de $\alpha/2$), et il n'est plus possible d'ignorer les corrélations entre phonons. De plus, la fréquence des phonons est faible devant celle de l'électron. Dans ce cas on dit que l'électron "suit" de façon adiabatique les fluctuations de la polarisation (approximation de Born-Oppenheimer).

La masse du polaron est proportionnel à α^4 comme suit [37] :

$$\frac{m_p^*}{m_e^*} = \frac{16}{81\pi^2} \alpha^4 \quad (3.8)$$

La théorie des polarons de Fröhlich est basée sur l'hypothèse de la théorie du continuum pour les ions. Bien que cette théorie semble raisonnable pour de petites valeurs de constante de couplage α , elle échoue lorsque la taille du polaron est de l'ordre des dimensions atomiques. Par conséquent, la théorie du couplage fort ne peut s'appliquer aux solides réels à moins que des modifications supplémentaires ne soient apportées pour tenir compte de la nature atomique des phonons.

3.3. Approche théorique

3.3.1. Hamiltonien effectif

Le Problème auquel nous nous sommes intéressés est un système composé d'un électron lié à une impureté donneur confinée au centre d'une boîte quantique de GaAs inhomogène entourée par deux matériaux de barrières de hauteurs infinies de $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$, en présence d'un champ électrique faible le long de la direction z (figure 3-1). Une impureté donneur est localisée dans la coquille le long de l'axe z . Dans cette situation, l'électron peut être supposé complètement confiné dans le matériau de la coquille.

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, l'équation de Schrödinger du mouvement de l'électron en interaction coulombienne avec l'impureté placée à la position $r_0 = (x_0, y_0, z_0)$, sous l'effet de la pression hydrostatique et en présence d'un champ électrique uniforme \vec{E} peut être écrite sous la forme :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*(P)}\nabla^2 - \frac{e^2}{\varepsilon\sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2}} + V(r, P) + \eta(z-z_0) + H_{LO} + H_{e-LO} \quad (3.9)$$

Avec :

$$\begin{cases} L_1 \leq x_0 \leq L_2 \\ L_1 \leq y_0 \leq L_2 \\ L_1 \leq z_0 \leq L_2 \end{cases} \quad (3.10)$$

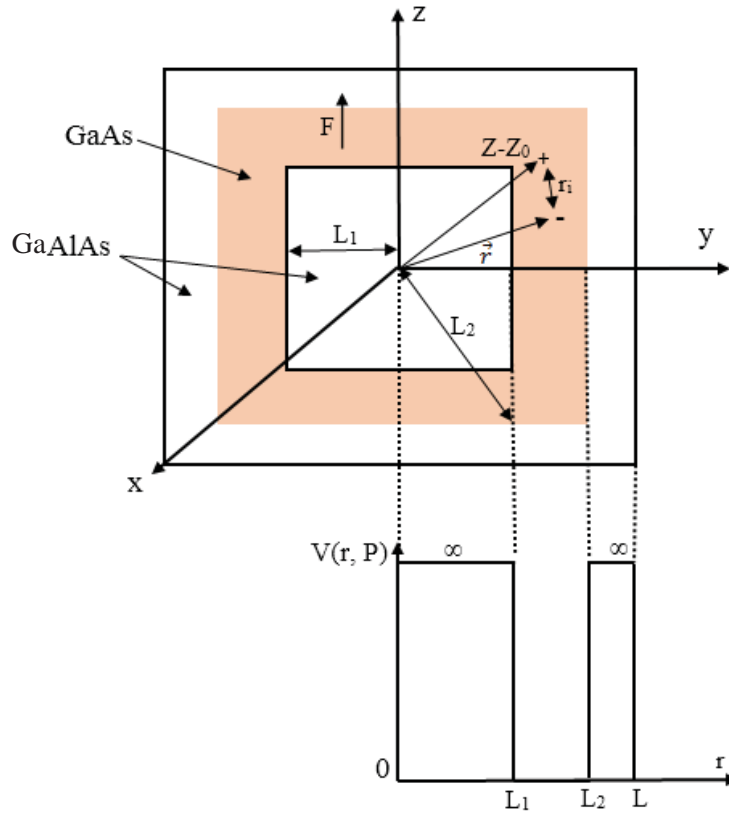


Figure 3-1 : Diagramme schématique de la structure d'une boîte quantique inhomogène de forme cubique. Les signes (+) et (-) représentent respectivement le symbole du donneur ionisé et l'électron.

Où $m^*(P)$, ε et $V(r, P)$ sont respectivement la masse effective, la constante diélectrique de GaAs et le potentiel de confinement.

À $T = 300\text{k}$ la variation de la constante diélectrique de GaAs avec la pression (P) est donnée par [40]:

$$\varepsilon = \begin{cases} \varepsilon(P, \omega) & \text{Pour } L_1 \leq |x| \leq L_2, L_1 \leq |y| \leq L_2, L_1 \leq |z| \leq L_2 \\ \varepsilon_\infty & \text{Ailleurs} \end{cases} \quad (3.11)$$

$$\varepsilon(P, \omega) = \varepsilon_\infty + \frac{\varepsilon(P) - \varepsilon_\infty}{1 - \frac{\omega_{LO}^2}{\omega_{TO}^2}} \quad (3.12)$$

$$\varepsilon(P) = \varepsilon(P=0) - 0,088P = \varepsilon_0 - 0,088P$$

Où ε_0 et ε_∞ sont les constantes diélectriques statiques et à très haute fréquence respectivement, et ω_{TO} est la fréquence du phonon optique transverse [41].

P est en kbar.

$$\varepsilon(P) = \varepsilon_\infty \left(\frac{\omega_{LO}^2}{\omega_{TO}^2} \right) \quad (3.13)$$

L'équation, ci-dessus, correspond à la polarisation due aux modes globaux LO de la fréquence propre du point quantique.

$m^*(P)$ est la masse effective de conduction dépendante de la pression hydrostatique pour l'électron de la boîte quantique et de la couche barrière, respectivement [42].

$$m^*(P) = m_{core,shell}^*(0) \exp(0.078P) \quad (3.14)$$

$$m_{core,shell}^*(0) = \begin{cases} m_{core}^*(0) = 0.067 m_0 & \text{en GaAs} \\ m_{shell}^*(0) = (0.067 + 0.083x) m_0 & \text{en Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As} \end{cases} \quad (3.15)$$

m_0 est la masse de l'électron libre.

La hauteur de la barrière du potentiel dépendante de la pression hydrostatique est :

$$V(r, P) = \begin{cases} 0 & \text{Pour } L_1 \leq |x| \leq L_2, L_1 \leq |y| \leq L_2, L_1 \leq |z| \leq L_2 \\ \infty & \text{Ailleurs} \end{cases} \quad (3.16)$$

L'opérateur Hamiltonien pour le phonon LO confiné s'exprime par [42] :

$$H_{LO} = \sum_{mnq} \hbar \omega_{LO} \left(\hat{a}_{mn}^+(q_z) \hat{a}_{mn}(q_z) + \frac{1}{2} \right) \quad (3.17)$$

Où $\hat{a}^+(q_z)$ et $\hat{a}(q_z)$ sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation d'un phonon LO avec des nombres quantiques m, n, et q. On sait que ces opérateurs satisfont les règles commutatives comme suit [42] :

$$[a_{mnqz}, a_{m'n'qz'}^+] = \delta_{mm'} \delta_{nn'} \delta_{qzqz'} \quad \text{Et} \quad [a_{mnqz}, a_{m'n'qz'}] = [a_{mnqz}^+, a_{m'n'qz'}^+]$$

L'Hamiltonien d'interaction électron-phonon décrivant l'interaction de la charge ponctuelle (électron ou trou) en position r_0 avec la polarisation $P(r)$ est donnée par [43]:

$$H_{e-LO} = -e \int_{L_1}^{L_2} \int_{L_1}^{L_2} \int_{L_1}^{L_2} \left(\nabla_x^2 + \nabla_y^2 + \nabla_z^2 \right) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} P(r) dx dy dz \quad (3.18)$$

Les ions oscillants produisent le champ de polarisation $P(r)$ qui est exprimé par :

$$P(r) = neu + n\alpha E_{loc} \quad (3.19)$$

Où n est la densité en nombre de paires, u est le déplacement relatif des ions positifs et négatifs, α est la polarisabilité électronique par paire d'ions, et E_{loc} est le champ local à la position des ions.

3.3.2. Choix de la fonction d'onde

Afin de déterminer les valeurs propres de l'Hamiltonien, nous utilisons la méthode variationnelle pour résoudre numériquement l'équation Schrödinger $(H - E)\psi = 0$.

La fonction d'onde d'essai de l'état $1s$ est définie comme suit :

$$\psi_0 = N \sin\left(\pi \left(\frac{x-L_1}{L_2-L_1}\right)\right) \sin\left(\pi \left(\frac{y-L_1}{L_2-L_1}\right)\right) \sin\left(\pi \left(\frac{z-L_1}{L_2-L_1}\right)\right) \exp\left[-\left(\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2}{8b^2} + \frac{(z-z_0)^2}{8a^2}\right)\right] \quad (3.20)$$

N est un facteur de normalisation et a , b sont les paramètres variationnelle. Le terme exponentiel est introduit afin de prendre en compte les interactions de Coulomb entre l'électron et le donneur ionisé. L'énergie est alors obtenue par la minimisation par rapport aux paramètres variationnelles.

En faisant correspondre la fonction de test et ses dérivés aux limites de la boîte cubique et de la normalisation, nous définissons toutes les constantes en fonction des paramètres réduites. En présente le Rydberg $R^*(P) = \frac{m^*(P)e^4}{2\hbar^2 \varepsilon^2(P)}$ en tant qu'unité de l'énergie et le rayon

de Bohr, $a^*(P) = \frac{\hbar^2 \varepsilon^2(P)}{m^*(P)e^2}$ comme unité de longueur.

L'ajustement des paramètres (a, b) est fait par la minimisation numérique de l'expression de l'énergie :

$$E = \min_{a,b} \langle \psi(r, P) | H | \psi(r, P) \rangle \quad (3.21)$$

La polarisabilité d'une impureté de type donneur est calculée à partir de l'expression du moment dipolaire définie par [44-45]:

$$P = -e \langle \vec{r} \rangle \quad (3.22)$$

Avec Γ est le paramètre sans dimension qui caractérise l'intensité du champ électrique.

Nous établirons pour la polarisabilité d'un donneur peu profond par l'expression suivante :

$$\Gamma \quad (3.23)$$

3.4. Section efficace de photoionisation

Le processus de la photoionisation dans les points quantiques inhomogènes de forme cubique, est décrit comme étant la transition optique de l'état fondamental de l'impureté à un autre état des sous-bandes de conduction dans les trois directions de la boîte quantique. L'expression de la section efficace de photoionisation s'exprime par [46] :

$$\sigma(\hbar\omega) = \left[\left(\frac{\zeta_{eff}}{\zeta_0} \right)^2 \frac{n_r}{\varepsilon_0(P)} \right] \frac{4\pi^2 \alpha_{SF}}{3} \hbar\omega \sum_f |\langle \psi_i | r | \psi_f \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (3.24)$$

Où n_r est l'indice de réfraction optique du matériau, ε_0 est la constante diélectrique statique du milieu, $\alpha_{FS} = \frac{e^2}{\hbar c}$ est la constante de la structure fine, E_f est l'énergie de l'état final et E_i

l'énergie de l'état initial de l'impureté. δ est la distribution de Dirac qui exprime la conservation de l'énergie. $\langle \psi_i | r | \psi_f \rangle$ est l'élément de matrice de position entre l'état initial et l'état final.

$\left(\frac{\zeta_{eff}}{\zeta_0} \right)$ est le rapport du champ électrique effectif au niveau de l'impureté. δ est remplacée par Lorentz [47] :

$$\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) = \frac{\hbar^2 \omega \Gamma}{[(\hbar\omega - E_s)^2 + (\hbar\Gamma)^2]} \quad (3.25)$$

En suivant l'approche variationnelle et en tenant compte du confinement électronique dans les trois directions du point et du potentiel d'impureté hydrogénique, nous avons choisi pour l'état fondamental $|1s\rangle$ la fonction d'onde décrite dans l'équation 3.20

L'énergie de liaison E_b de l'impureté à l'état fondamental est définie comme étant la différence entre l'énergie de confinement obtenue en absence de l'impureté et l'énergie de l'état fondamental en présence de l'impureté qui s'est exprimée par :

$$E_b = \frac{3\pi^2}{(L_2 - L_1)^2} - \min_{a,b} \langle \psi_i | H | \psi_i \rangle \quad (3.26)$$

Pour les impuretés non localisées au centre de la boîte quantique, la première transition permise est celle qui prend place de l'état fondamental de l'impureté donneur vers les premières sous-bandes de conduction. La fonction d'onde associée à cette transition est :

$$\psi_f(r) = \left(\frac{2}{L_2 - L_1} \right)^{\frac{3}{2}} \sin\left(\pi \left(\frac{x - L_1}{L_2 - L_1} \right) \right) \sin\left(\pi \left(\frac{y - L_1}{L_2 - L_1} \right) \right) \sin\left(\pi \left(\frac{z - L_1}{L_2 - L_1} \right) \right) \quad (3.27)$$

L'énergie propre associée à cette transition est : $\frac{3\pi^2}{(L_2 - L_1)^2}$

L'expression de la section efficace de la photoionisation associée à une impureté donneur localisée au centre d'une boîte quantique devient [48] :

$$\sigma(\hbar\omega) = \left[\left(\frac{\zeta_{eff}}{\zeta_0} \right)^2 \frac{n_r}{\varepsilon(P, \omega)} \right] \frac{32\pi\alpha_{SF}}{(L_2 - L_1)} N^2 I^2(L_x, L_y, L_z) \frac{\hbar^2 \omega \Gamma}{[(\hbar\omega - E_s)^2 + (\hbar\Gamma)^2]} \quad (3.28)$$

Avec : $E_s = E_b + \frac{3\pi^2}{(L_2 - L_1)^2}$ et $\Gamma = 0.4$ meV est la largeur de raie d'impureté hydrogénique et

$I(L_x, L_y, L_z)$ représente l'intégrale optique donnée par :

$$I(L_x, L_y, L_z) = \int_{L_1}^{L_2} \int_{L_1}^{L_2} \int_{L_1}^{L_2} (x - x_0) \sin\left(\pi \left(\frac{x - L_1}{L_2 - L_1} \right) \right) \sin^2\left(\pi \left(\frac{y - L_1}{L_2 - L_1} \right) \right) \sin^2\left(\pi \left(\frac{z - L_1}{L_2 - L_1} \right) \right) \exp\left[-\left(\frac{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2}{8b^2} + \frac{(z - z_0)^2}{8a^2} \right) \right] dx dy dz \quad (3.29)$$

3.5. Résultats et discussion

Les calculs numériques ont été réalisés pour le système de boîte quantique inhomogène (cœur/coquille) à base de GaAs pris en sandwich par deux matériaux de $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ de hauteurs infinies. Sous l'effet de la pression hydrostatique et en présence d'un champ électrique faible uniforme le long de la direction (z), pour différentes valeurs de la largeur de la boîte quantique et pour différentes positions de l'impureté donneur.

Concernant la section efficace de photoionisation (PCS), il est nécessaire d'examiner le paramètre ζ_{eff} du champ effectif au niveau de l'impureté. Vu la complexité d'évaluer ce

paramètre, la PCS a été déterminée en évaluant le rapport $\left(\frac{\zeta_{eff}}{\zeta_0}\right)$ du champ effectif de l'impureté par la simulation des résultats expérimentaux, en le prenant approximativement égal à 1 [48-49].

La table 3-2 présente les paramètres physiques utilisés lors des calculs numériques. Ces valeurs sont tirés des références [50-52], m_e^* est la masse effective de l'électron (en unité d'un d'électron libre), ϵ est la constante diélectrique, E_g est l'énergie de gap, $\hbar\omega_{LO}$ est l'énergie du phonon en meV , a^* (P) est l'unité de longueur (rayon de Bohr), et R^* est le Rydberg effectif.

Table 3-2 : Paramètres physiques utilisés pour GaAs à température ambiante et à pression atmosphérique.

| | m_e^* | ϵ_0 | ϵ_∞ | E_g (eV) | $\hbar\omega_{LO}$ | a^* | R^* |
|------|---------|--------------|-------------------|------------|--------------------|-------|-------|
| GaAs | 0.067 | 13.18 | 10.6 | 1.6 | 35.33 | 10.37 | 5.29 |

3.5.1. Energie de liaison E_b

Sur la figure 3-2, nous avons présenté l'énergie de liaison de l'impureté confinée dans une boîte quantique inhomogène en fonction des largeurs interne (L_1) et externe (L_2) de la boîte en présence d'une excitation électrique de l'ordre de 1.2kV/cm (figure 3-1). Nous remarquons que l'énergie de liaison dépend fortement du rapport (L_1/L_2), et elle présente un point critique (minimum) quand le rapport (L_1/L_2) varie entre 0 et 1. On dit que l'énergie de liaison de l'impureté donneur change de l'état du point quantique homogène pour ($L_1/L_2 \rightarrow 0$) à l'état d'une couche mince 2D étroite pour ($L_1/L_2 \rightarrow 1$), ce qui est peut-être utile pour les nanofabrications. Aussi, nous remarquons que lorsque la largeur externe L_2 augmente, l'énergie de liaison diminue. Ceci peut être expliqué par la diminution du confinement géométrique.

L'effet de la correction polaronique est très remarquable. Les phonons entraînent une augmentation de l'énergie de liaison pour les différentes tailles ($L_2=2a^*, 3a^*$ et $5a^*$). Son effet devient négligeable quand le rapport (L_1/L_2) tend vers 1 et l'énergie de liaison converge dans les deux cas vers $E_b \approx 4.5R^*$ (cas d'un puit quantique 2D étroit).

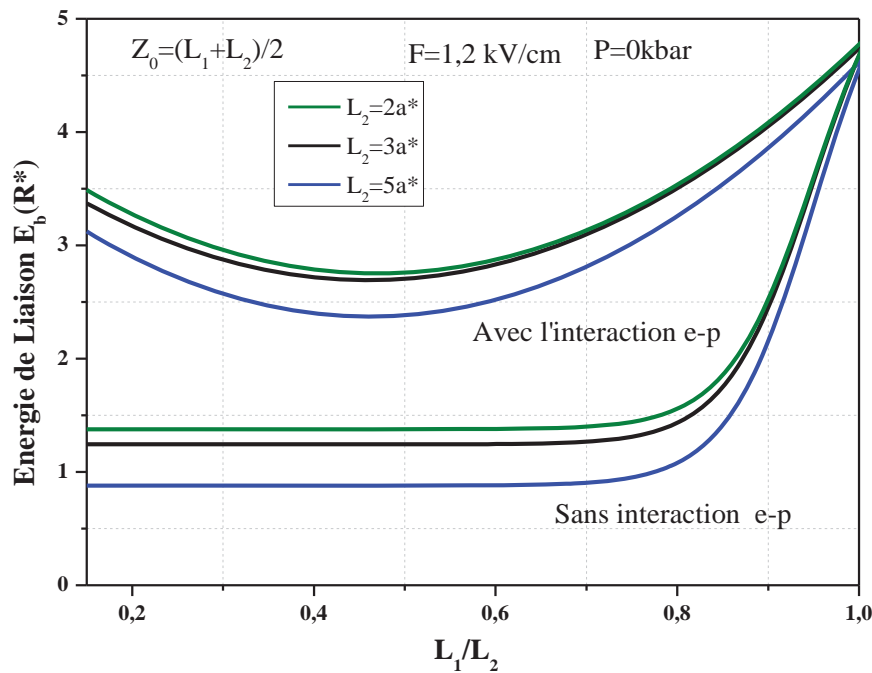


Figure 3-2 : Variation de l'énergie de liaison d'une impureté donneur localisée au centre $Z_0 = (L_1 + L_2)/2$ d'une boîte cubique inhomogène en fonction du rapport L_1/L_2 pour différentes valeurs de $L_2 = 2, 3$ et $5a^*$.

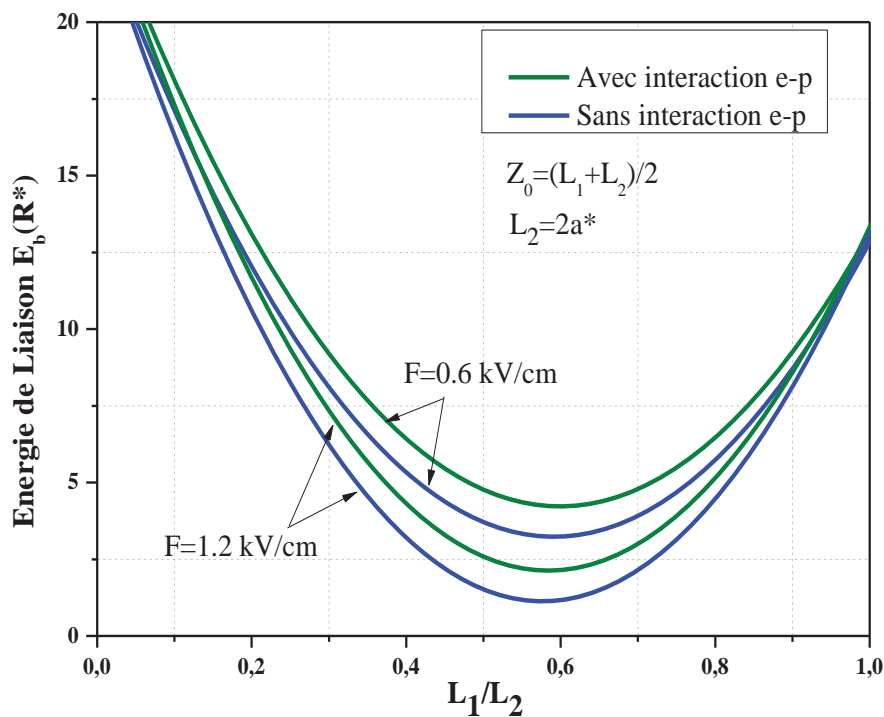


Figure 3-3 : Energie de liaison d'une impureté donneur localisée au centre $Z_0 = (L_1 + L_2)/2$ d'une boîte cubique inhomogène en fonction du rapport L_1/L_2 pour différentes valeurs du champ électrique $F = 0.6$ et 1.2 kV/cm .

La figure 3-3 présente la variation de l'énergie de liaison d'une impureté donneur placée au centre d'une boîte cubique inhomogène de GaAs, en fonction du rapport (L_1/L_2) pour deux

différentes valeurs du champ électrique F . Nous remarquons que l'énergie de liaison dépend de l'intensité du champ électrique. L'augmentation du champ électrique entraîne une réduction de l'énergie de liaison qui est due au fait que le champ électrique pousse la charge loin de l'impureté ce qui fait diminuer l'interaction coulombienne. Aussi nous notons que l'effet du champ électrique et de la correction polaronique sont très importants quand le rapport (L_1/L_2) est au voisinage de 0.5 (varie entre 0.4 et 0.5) et deviennent faibles quand le rapport tend vers les extrémités (0 ou 1).

3.5.2. Polarisabilité α d'une impureté de type donneur

La figure 3-4, illustre la variation de la polarisabilité en fonction du rapport (L_1/L_2) pour les trois valeurs de la pression hydrostatique $P=0, 3$ et 5Kbar d'une impureté localisée au centre de la boîte. Nous notons que pour les petites valeurs du rapport (L_1/L_2) (entre 0.2 et 0.5), la polarisabilité est maximale, car le confinement géométrique est faible. La polarisabilité électrique de l'impureté diminue lorsque le rapport $(L_1/L_2) \rightarrow 1$. Aussi nous enregistrons que l'application de la pression réduit la polarisabilité et son effet est prononcé pour $0.2 \leq \frac{L_1}{L_2} \leq 0.6$ et devient moins important pour $(L_1/L_2) \rightarrow 0$ ou $(L_1/L_2) \rightarrow 1$.

L'effet polaronique est très remarquable en absence de la pression hydrostatique, et devient plus faible avec l'augmentation de la pression. D'autre part, quand l'influence du couplage électron-phonon est prise en considération, le comportement de la polarisabilité électrique reste le même, mais les valeurs obtenues sont plus basses que celles obtenues sans tenir compte de l'interaction e-ph. Cette réduction est remarquable dans l'intervalle de la petite taille de la boîte. Ceci peut-être expliqué par deux principales raisons. La première est que la masse effective des porteurs est plus grande que celle de la bande de conduction ce qui entraîne une réduction de l'énergie de transition mais au même temps la réduction de la taille de la boîte et mène à l'augmentation de cette énergie. La deuxième est que la correction polaronique affecte la masse effective de l'électron ce qui implique cette diminution de l'énergie de liaison. Nos résultats sont en bon accord avec les résultats de M'zerd et all [52].

La figure 3-5 présente la variation de la polarisabilité électrique de l'impureté en fonction du rapport (L_1/L_2) pour les différentes valeurs de la largeur externe de la boîte $L_2=1, 2, 3$ et $4a^*$ et en présence d'un champ électrique faible de l'ordre de 0.6kV/cm . Cette figure montre que la polarisabilité augmente avec l'augmentation de la taille de la largeur externe L_2 . Cependant, au-dessus d'une certaine valeur de L_2 , la fonction d'onde de l'électron dans la région de barrière

devient importante et l'énergie de liaison commence ainsi à diminuer jusqu'à ce qu'elle atteigne une valeur qui est caractéristique du matériel de barrière car $(L_1/L_2) \rightarrow 0$. On constate également que l'effet polaronique devient plus grand pour les boîtes quantiques de grandes tailles ($L_2=3a^*$ et $4a^*$) et devient négligeable pour celle de petites tailles ($L_2=1a^*$). C'est parce que la localisation de l'électron devient plus prononcée et augmente ainsi l'importance de l'interaction électron-phonon. L'énergie de liaison avec l'accouplement électron-phonon rivalise plutôt bien avec celle calculés par Feddi et al et V.Lofovski et al [53-55]. Les effets polaronique sur l'énergie de liaison sont moins importants dans le volume que dans un petit QD quand la localisation de l'électron est prononcée ce qui entraine une correction et seulement d'environ de 1 à 3% selon la largeur externe L_2 de la boîte.

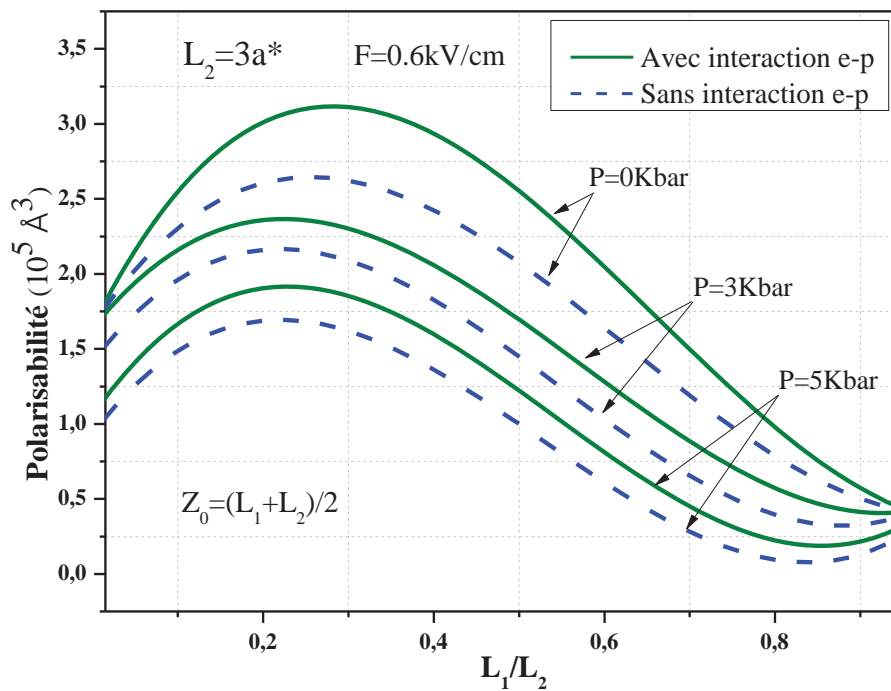


Figure 3-4 : Variation de la polarisabilité d'une impureté donneur localisée au centre d'une boîte cubique inhomogène en fonction du rapport L_1/L_2 pour les valeurs de la pression $P=0,3$ et 5 Kbar .

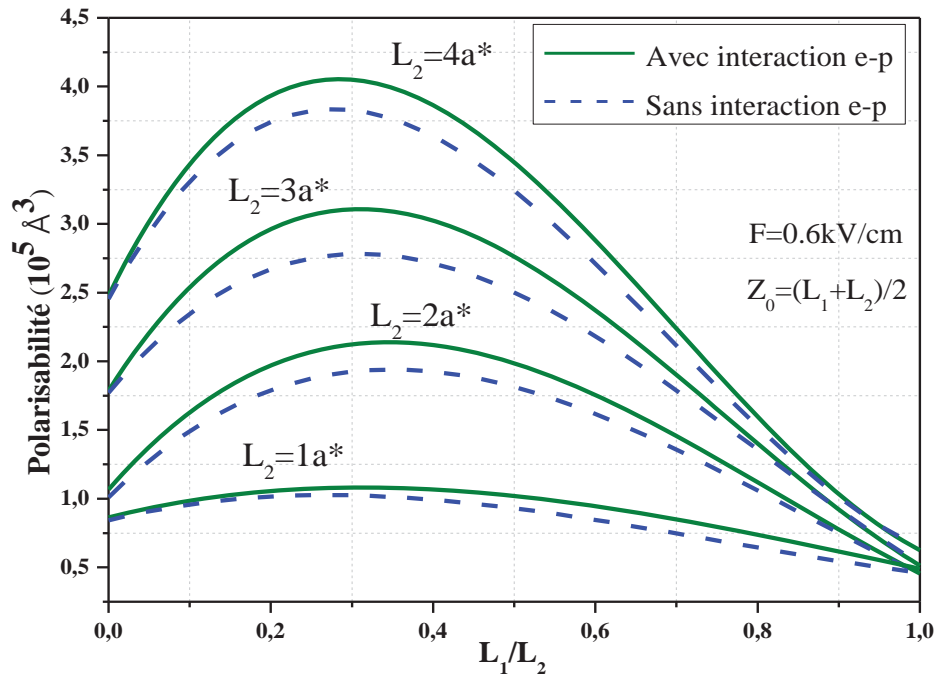


Figure 3-5 : Polarisabilité en fonction du rapport L_1/L_2 pour les valeurs de la largeur de la boîte externe $L_2=2, 3, 4$ et $5a^*$.

3.5.3. Section efficace de photoionisation (PCS) d'une impureté de type donneur

Sur la figure 3-6, la variation du PCS est tracée en fonction de l'énergie du photon incident pour deux valeurs de la largeur externe de la boîte ($L_2=a^*, 2a^*$), et pour une largeur interne fixée à $L_1=0.5a^*$. PCS présente un pic pour différentes tailles. On déduit que le maximum de PCS correspond à une énergie du photon incident proportionnelle à l'énergie de liaison E_b . De plus, lorsque l'épaisseur de la coquille (L_2-L_1) diminue, la hauteur du pic de résonance se réduit et l'énergie de seuil est déplacée vers le bleu en raison de l'augmentation de l'énergie de liaison causée par l'effet de confinement. On note que l'intensité de crête et la fréquence de seuil reposent toutes les deux sur l'épaisseur de la coquille (L_2-L_1) ainsi que sur la largeur de la boîte externe L_2 . Aussi, nous remarquons que la correction polaronique augmente la section efficace et déplace légèrement le pic de résonance vers les hautes énergies.

La figure 3-7, présente la variation de la section efficace de photoionisation (PCS) d'une impureté donneur localisée à l'intérieur d'une boîte quantique inhomogène, en fonction de l'énergie photonique normalisée en présence et en absence d'un champ électrique uniforme et d'une pression hydrostatique. Nous remarquons que pic de PCS présente un maximum (pic) pour une énergie du photon incident $\hbar\omega$ qui varie entre 7.5eV et 8.5eV.

On constate que la PCS augmente avec le champ électrique puisque ce dernier réduit l'énergie de liaison. En relation avec la pression hydrostatique, nous remarquons que l'effet du

champ électrique sur la PCS est plus appréciable en absence de la pression, et diminue avec l'augmentation de cette dernière. L'augmentation de la pression entraîne une réduction de la PCS car elle entraîne une augmentation de l'énergie de liaison et donc de l'énergie du seuil de photoionisation optique. Par conséquent, l'excitation d'un électron lié à une impureté donneur à la première sous-bande de conduction par absorption d'un photon nécessite des énergies photoniques plus élevées pour que la transition ait lieu.

Pour les hautes énergies ($\hbar\omega \geq 11\text{eV}$) la PCS devient indépendante du champ électrique et de la pression hydrostatique.

La figure 3-8, présente l'évolution de la PCS d'une impureté donneur peu profonde en fonction de l'énergie du photon incident pour différentes positions de l'impureté. Ces résultats montrent clairement que les transitions associées à une impureté localisée au centre de la boîte exigent une énergie du photon très élevée devant celles associées à une impureté aux extrémités. De plus l'extension de la fonction d'onde de l'état fondamental de l'impureté augmente et par conséquent l'élément de matrice de position entre la fonction d'onde de l'état initial et la fonction d'onde de l'état final décroît. La diminution de l'élément de matrice donne à une décroissance de la PCS. La correction polaronique est faible dans le cas où l'impureté est non localisée au centre, mais elle devient significative lorsque l'impureté est placée au centre de la boîte ce qui est peut-être expliqué par l'élévation de l'énergie de liaison E_b .

Nous rapportons dans la figure 3-9, la variation de la section efficace de photoionisation (PCS) d'une impureté donneur localisée au centre en fonction de l'énergie du photon incident en présence et en absence de la pression hydrostatique. Nous notons que cette dernière a un effet considérable sur la PCS. En conséquence, l'augmentation de la pression hydrostatique entraîne un décalage du pic de résonance vers les basses énergies avec une diminution de la valeur de PCS en raison de l'augmentation de l'énergie de liaison des impuretés. Ceci peut être expliqué du fait que la pression hydrostatique a une grande influence sur la constante diélectrique $\epsilon(P)$ par rapport au moment dipolaire I_{fi} et l'énergie de transition E_{fi} (lorsque P augmente l'électron se rapproche de l'impureté). Autrement dit, la croissance de l'énergie de liaison favorise la localisation de la fonction d'onde dans la couche interne de la boîte quantique (L_2-L_1) où le pic de PCS est influencé par l'énergie de liaison, la masse effective et l'intégrale optique (Eq. 2.29). Nous pouvons donc conclure que l'augmentation de la pression hydrostatique conduit à une grande localisation de la fonction d'onde autour de l'impureté et

donc une diminution de la convergence entre la fonction d'onde de l'état initial et de l'état final, ce qui peut être expliqué la diminution de la magnitude du pic de résonance.

Il est intéressant de mentionner que la contribution des modes des phonons LO sur les propriétés optiques des défauts de type hydrogénoïde peut être assez importante selon la force du couplage électron phonon, et selon la position du défaut par rapport au centre du point quantique. Les modes des phonons optiques de surface ne se couplent pas à la fonction d'onde électronique quand le défaut est situé au centre, mais leur effet augmente au fur et à mesure que le défaut s'en éloigne.

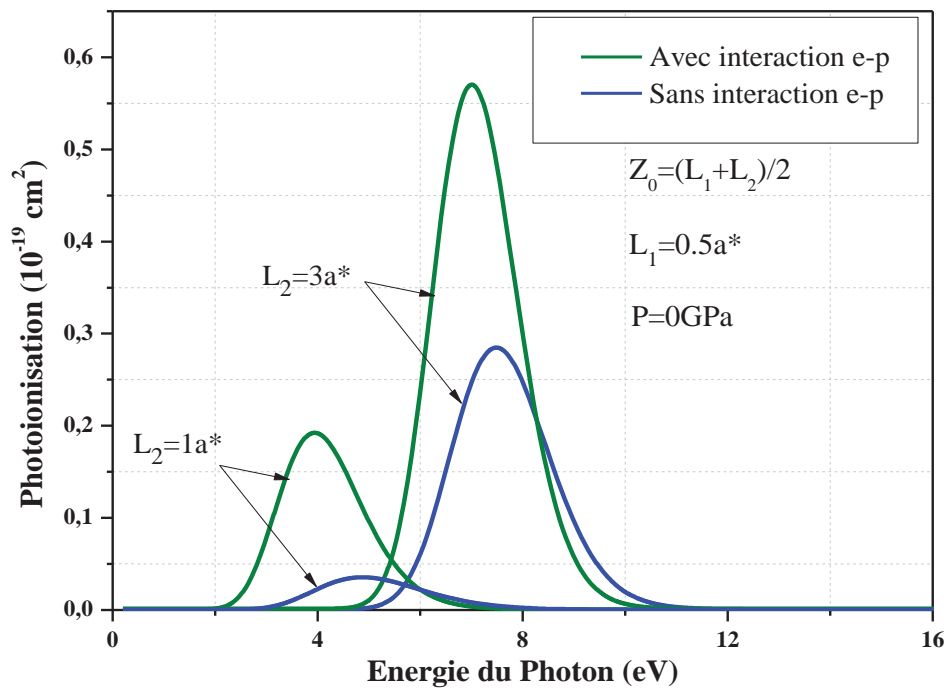


Figure 3-6 : PCS d'une impureté donneur localisée au centre d'une boîte cubique inhomogène en fonction de l'énergie $\hbar\omega$ du photon incident pour les deux valeurs $L_2 = a^*$ et $3a^*$.

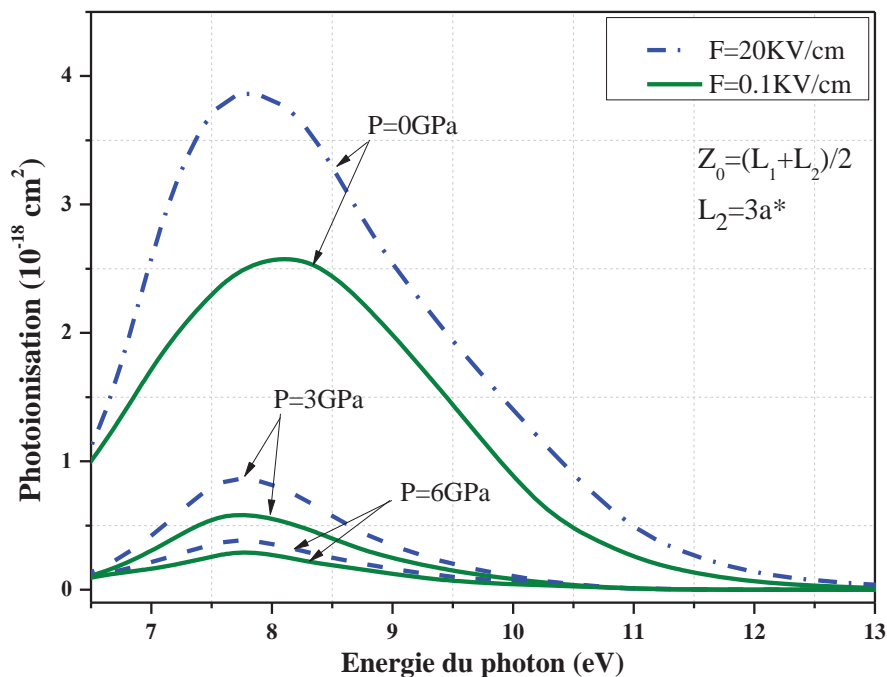


Figure 3-7 : Variation de la section de photoionisation en fonction de l'énergie photonique normalisée de l'impureté du donneur placée au centre de la boîte quantique sous l'effet du champ électrique, pour plusieurs valeurs de pression ($P=0$; 3 et 6GPa).

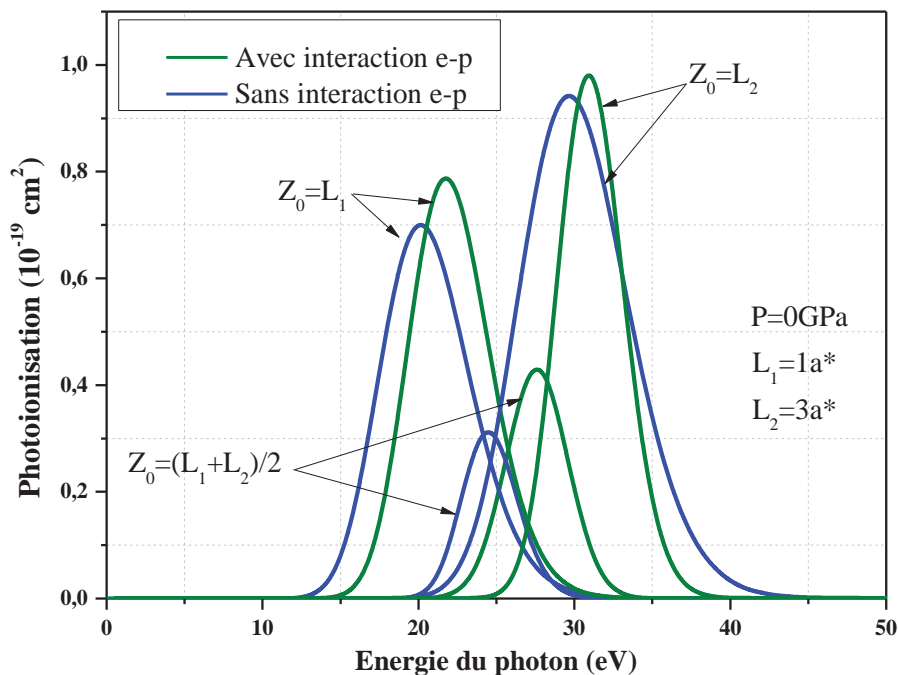


Figure 3-8 : Variation de la section efficace (PCS) d'une impureté donneur peu profonde en fonction de l'énergie du photon incident pour différentes positions de l'impureté.

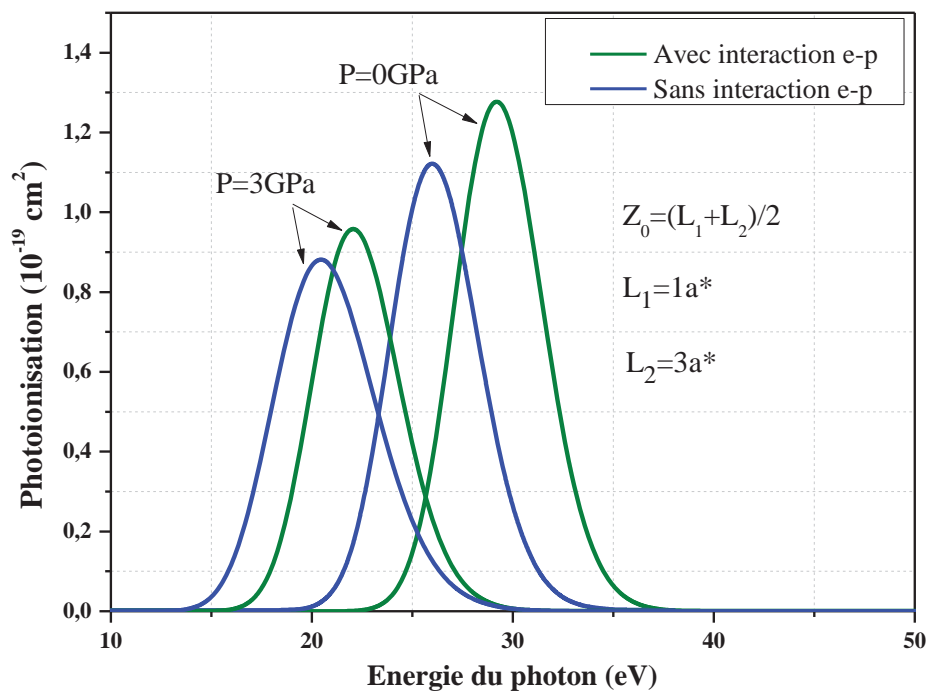


Figure 3-9 : PCS d'une impureté donneur localisée au centre en fonction de l'énergie du photon incident $\hbar\omega$ pour les deux valeurs $L_2 = a^*$ et $3a^*$.

3.6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié l'effet de la pression hydrostatique et du champ électrique en présence de l'interaction électron-phonon (e-p), sur l'énergie de liaison (E_b), la polarisabilité (α), et la section efficace de photoionisation (PCS) d'une impureté donneur localisée dans une boîte cubique inhomogène (cœur/coquille) à base de GaAs/GaAlAs. L'effet de la position de l'impureté sur ces grandeurs physiques a été aussi étudié.

Nos résultats montrent que l'énergie de liaison, la polarisabilité et le PCS dépendent fortement du champ électrique, de la taille du QB, de la pression hydrostatique et de la correction polaronique. C'est ce que l'on a constaté : (i) l'énergie de liaison dépend fortement de la largeur intérieure et extérieure du point quantique cubique, ainsi que de l'intensité du champ électrique. Nous concluons que l'énergie de liaison est réduite par l'intensité du champ électrique même en présence d'un fort confinement géométrique. (ii) La polarisabilité augmente en augmentant la largeur extérieure L_2 pour une intensité fixe du champ électrique. L'influence de l'introduction de la pression hydrostatique est plus prononcée, elle a réduit rapidement l'intensité de la polarisabilité du donneur. De plus, le confinement géométrique augmente l'importance de l'interaction électron-phonon. (iii) L'influence de l'augmentation de la largeur extérieure L_2 conduit à un décalage vers le rouge de la PCS, tandis que le pic de la PCS augmente. L'effet combiné de la pression hydrostatique et du champ électrique provoque un décalage du PCS vers le bleu et une réduction de l'amplitude du pic. De plus, nous avons constaté que la PCS était fortement affectée par la position des impuretés.

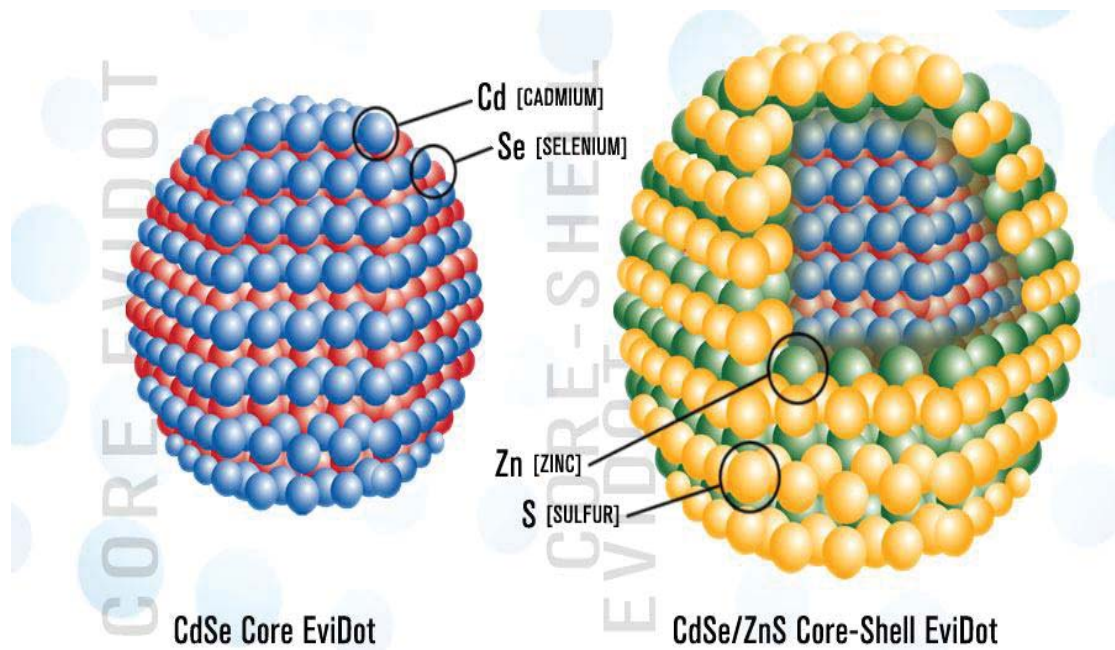
La mesure de la photoionisation dans les systèmes à faible dimension permettrait de comprendre les propriétés optiques des porteurs de charges dans les structures physiques à base de semi-conducteurs. Au meilleur de notre connaissance, il n'existe aucun résultat expérimental concernant la section de photoionisation sur les QW, QWW et QD.

Références bibliographiques du 3^{ème} chapitre

- [1] P. M. Petroff, A. C. Gossard and W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* **45**, 620 (1984).
- [2] J. M. Gaines et al., *J. Vac. Sc. Tech. B* **6**, 1378 (1988).
- [3] E. H. C. Parker, *The Technology and Physics of Molecular Beam Epitaxy* (Plenum Press, New York) (1985).
- [4] J. Gilbert et al., *Appl. Phys. Lett.* **49**, 1275 (1986).
- [5] T. Fujui and H. Saito, *Appl. Phys. Lett.* **50**, 824 (1987).
- [6] J. M. Azpiroz, I. Infante, and F. De Angelis, *J. Phys. Chem. C* **119**, 12739 (2015).
- [7] T.-R. Kuo, S.-T. Hung, Y.-T. Lin, T.-L. Chou, M.-C. Kuo, Y.-P. Kuo, and C.-C. Chen, *Nanoscale Res. Lett.* **12**, 537 (2017).
- [8] S. Kabi, A. G. Unil Perera, *J. Appl. Phys.* **117**, 12430 (2015).
- [9] K. Suseel Rahul, K. Salini, V. Mathew, *J. Phys. Condens. Matter* **28**, 475304 (2016).
- [10] A. Mmadi, K. Rahmani, I. Zorkani and A. Jorio, *Superlattices and Microstructures* **57**, 27–36 (2013).
- [11] K. Rahmani, I. Zorkani and A. Jorio, *Phys. Scr.* **83**, 035701 (2011).
- [12] K. X. Guo and S. W. Gu, *Phys. Rev. B* **47**, 16322 (1993).
- [13] A. Sali, H. Satori, M. Fliyou, H. Loumrhari, *Phys. Status Solidi B* **232**, 209 (2002).
- [14] M. Sahin, *Phys. Rev. B* **77**, 045317 (2008).
- [15] J.L. Movilla, J. Planelles, *Phys. Rev. B* **71**, 075319 (2005).
- [16] W.F. Xie, Q. Xie, *Physica B* **404**, 1625 (2009).
- [17] R. Charrour, M. Bouhassoune, M. Fliyou, D. Bria, A. Nougouai, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 4817 (2000).
- [18] Bondar N V, Brodyn M S, Yermolaeva Yu V, Dobrotvorskaya M V and Tolmachev A V *Ukr. J.Phys.* **55**, 1032 (2010).
- [19] Pan J H, Liu L Z and Liu M. *Chin. Phys. Lett.* **28** 086201 (2011).
- [20] Boichuk V I, Leshko R Ya, Bilynskyi I V and Turyanska L M. *Condens. Matter Phys.* **15** 1 (2012).
- [21] Xiao Z, Zhu J and He F. *J. Appl. Phys.* **79**, 9181 (1996).
- [22] Bolcatto P G and Proetto C R. *Phys. Rev. B* **59**, 12487 (1999).
- [23] Mendoza C I, Vazquez G J, del Castillo-Mussot M and Spector H. *Phys. Rev. B* **71**, 075330 (2005).
- [24] H. Fröhlich, *Advances in Physics* **3**, 325 (1954)
- [25] K. Oshiro, A. Akai, M. Matsuura, *Phys. Rev. B* **66**, 153308 (2002).
- [26] M. E. Mora-Ramos, *phys. stat. sol. (b)* **223**, 843 (2001).
- [27] A. M. de Paula, L. C. Barbosa, C. H. B. Cruz, O. L. Alvez, D. A. Sanjurjo, C. L. Cesar, *Superlattice Microstructures* **23**, 1103 (1998).
- [28] S. Schmitt-Rink, D. A. B. Miller, D. S. Chemla, *Phys. Rev. B* **35**, 8113 (1987)
- [29] M.C. Klein, F. Hache, D. Ricard, C. Flytzanis, *Phys. Rev. B* **50**, 14302 (1990).
- [30] J.C. Marini, B. Stébé, E. Kartheuser, *Phys. Rev. B* **50**, 14302 (1994).
- [31] J.-P. Cheng and B. D. McCombe J. M. Shi, F. M. Peeters, and J. T. Devreese, *Phys. Rev. B.*, **48**, 7910 (1993).
- [32] M. A. Odnoblyudov, I. N. Yassievich, and K. A. Chao, *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 4884. (1999).
- [33] M. Bouhassoune, R. Charrour, M. Fliyou, D. Bria, A. Nougouai, *J. Appl. Phys.* **88**, 3514 (2000).

- [34] L. Aderras, A. Bah, E. Feddi, F. Dujardin, C.A. Duque, *Physica E* **89**, 119 (2017).
- [35] Sahin, M., Tek, F., & Erdine, A. *Journal of Applied Physics*, **111**, 1-17 (2012).
- [36] C. G. Kuper, G. D. Whitfield, Polarons and excitons. Scottish Universities Summer School, Plenum Press, New York. (1962).
- [37] J. T. Devreese. Fröhlich Polaron concept. Lecture course including detailed theoretical derivations, (2010).
- [38] A. M. Stoneham Theory of defects in solids: Clarendon Press, Oxford., (1975).
- [39] G. D. Mahan. Many Particle Physics. Kluwer Academic Publishers, New York, 3rd edition, (2000).
- [40] G. Rezaei, N.A. Doostimotlagh, *Physica E* **44**, 833–838 (2012).
- [41] Khordad, R., Bahramiyan, H. *Journal of Applied Physics* **115**, 124314(2014).
- [42] S. T. Perez-Merchancano, H. Paredes-Gutierrez, and J. Silva-Valencia, *J. Phys. Condens. Matter.* **19**, 026225 (2007).
- [43] Melnikov, D.V., Fowler, W.B. *Physical Review B* **64** (2001).
- [44] K.El Messaoudi, A. Zounoubi, I. Zorkani and A. Jorio, *Phys.Stat.Sol.(b)* **270**,233 (2002).
- [45] I. Zorkani and L. Filali, *phys. stat. sol. (b)* **215**, 999 (1999).
- [46] Sali, A., Satori, H., Fliyou, M., Loumrhari, H. *Physica status solidi (b)* **232**, 209-219(2002).
- [47] Bastard G, *Phys Rev B*, **24**, 4714, (1981).
- [48] M. El-Said and M. Tomak, *J. Phys. Chem. Solids* **52**, 603–606 (1991)
- [49] K. Oshiro, K. Akai, and M. Matsuura, *Phys. Rev. B* **58**, 7986 (1998).
- [50] J. S. Pan and H. B. Pan, *Phys. Status Solidi B* **148**, 129 (1988).
- [51] S.N.Klimin, E. P. Pokatilov, and V. M. Fomin, *Phys. Status Solidi B* **184**,373 (1994).
- [52] M'zerd, S., El Haouari, M., Aghoutane, M., El-Yadri, M., Feddi, E., Dujardin, F., Zorkani, I., Jorio, A., Sadoqi, M., Long, G. *Journal of Applied Physics* **124**, 164303 (2018).
- [53] Feddi, E., El-Yadri, M., Dujardin, F., Restrepo, R.L., Duque, C.A. *Journal of Applied Physics* **121**, 64303(2017).
- [54] O.Keller, *Phys.Rep.* **268**, 85 (1996).
- [55] V.Lofovski and V.Piatnytsia, *J. Comput. Theor. Nanosci.* **8**, 1 (2001).

Chapitre IV : Effet de la forme géométrique et du champ électrique sur la polarisabilité et la susceptibilité diamagnétique dans les points quantiques inhomogènes.



4.1. Introduction

Au cours de la dernière décennie, les progrès de la nano-fabrication ont permis de fabriquer des matériaux semi-conducteurs de faible dimension tels que les puits quantiques (QW), les fils quantiques (QWW) et enfin des structures à points quantiques (QDs) où l'électron est confiné dans les trois directions de l'espace [1-2]. Leurs dimensionnalités réduites permettent d'observer et d'étudier de nouveaux effets. En effet, ces structures sont connues par leur rendement quantique élevé par rapport à celui des puits et fils quantiques. Par conséquent, au cours des dernières années, des études expérimentales et théoriques des propriétés électroniques et optiques des points quantiques homogènes (QDs) [3], ont attiré l'attention de nombreux scientifiques en physique de la matière condensée et en sciences appliquées [4-6]. Toutefois les états de surface peuvent diminuer leurs performances optoélectroniques car ces états de surface piègent les porteurs de charges ce qui diminue leur nombre et par conséquent réduit les performances électroniques et optiques à la fois. Pour pallier à ce problème, il a été pensé que le recouvrement total d'une boîte quantique par un puits quantique de semiconducteur différent de bande interdite plus petite (ou plus grande) et de paramètre de maille similaire peut supprimer efficacement et durablement les centres de recombinaison non-radiative à la surface du cœur. D'après ce raisonnement un nouveau type de structure de points quantiques (QD), appelé points quantiques non homogènes (IQD), a été fabriqué et étudié. Ces structures sont expérimentalement composées de deux matériaux semi-conducteurs dont l'un, avec la bande interdite la plus petite, est encastré entre un noyau et l'enveloppe extérieure du matériau avec la bande interdite la plus grande.

L'originalité de ces nanostructures de type cœur/coquille, réside dans leurs propriétés physiques qui peuvent être ajustées en contrôlant la taille du cœur et l'épaisseur de la coquille, ce qui permet de manipuler à l'avance les niveaux d'énergie ainsi que les transitions intra ou interbandes. En outre, le dopage des nanocristaux constitue l'une des façons d'obtenir de nombreuses propriétés optoélectroniques accordables. Les interactions des donneurs ou des accepteurs avec des excitons jouent un rôle clé dans l'interprétation des spectres de photoluminescence. Plus récemment, le contrôle de la largeur de la bande interdite et du niveau de fermi des nanocristaux semiconducteurs dopés révèle que les propriétés dues au "dopant solitaire" sont responsables des nouvelles transitions ce qui conduit à une nouvelle génération de dispositifs optoélectroniques tels que les cellules solaires et les transistors à couches minces. Les boîtes quantiques sphériques inhomogènes synthétisés avec un noyau central et un ou plusieurs des couches de coquilles (telles que CdSe/ZnS, InAs/ZnSe, CdS/PbS) attirent de

nombreux intérêts scientifiques [7,8]. Xi Zhang et al [9] ont étudié les susceptibilités non linéaires du troisième ordre associées à la transition inter-sous-bandes, calculées pour les points quantiques enrobés de forme cylindrique (ZnS/CdSe). X.N.Li et D.Z.Yao[10] se sont intéressés à l'étude des propriétés optiques non linéaires des points quantiques CdSe/ZnS (QDQW). Xing et al. [11] Se sont intéressés à l'étude théorique du problème de focalisation des polarons liés dans les structures à puits quantiques (QDQW). Autrement, Comprendre les états d'impureté dans ces structures est un problème important dans la technologie des semi-conducteurs. Récemment, J.Silva et al [12] ont calculé l'énergie de liaison du donneur en fonction de la position du donneur en QD avec un puits sphérique infini et pour différents rayons de la structure. Ils ont constaté que l'énergie de liaison du donneur diminue lorsque la position du donneur localisée au centre et puis elle augmente pour atteindre un minimum, car la position du donneur est égale au rayon du QD. Porteanu et al [13] ont mis en évidence que le déplacement vers le rouge (Red Sheft) des spectres de photoluminescence (PL), et le seuil d'absorption ainsi que l'énergie des phonons enregistrés sur CdS/HgS/CdS QDQW différent de ceux enregistrés sur le CdS (QD) et sur HgS (QW). Dans le cadre de la théorie de la masse effective et en adoptant la méthode de diagonalisation numérique, Ranjan et al [14] ont démontré que lorsque l'impureté donneur se déplace du centre de la structure QDQW son énergie de liaison augmente. Ce comportement est en opposition avec celui reporté sur une simple boîte quantique.

L'effet d'un champ électrique sur les propriétés physiques des nanostructures est d'un grand intérêt. En particulier, il entraîne une diminution de l'énergie de liaison de l'impureté neutre et provoque sa polarisation. Dans un puit quantique, l'application d'un champ électrique parallèlement à l'axe de croissance rétrécit la séparation en énergie entre les niveaux de l'électron dans la bande de conduction et ceux du trou dans la bande de valence, ce qui entraîne un déplacement vers le rouge du spectre d'absorption (Red Shift). L'effet du champ électrique sur l'énergie de liaison de l'exciton confiné dans la structure (QDQW) a été étudié par Khamkhami et al [15]. Ces auteurs ont montré que l'effet Stark est significatif même pour les petites tailles et que le déplacement d'énergie est plus important lorsque l'exciton est placé sur la surface de la boîte quantique. Dans cette partie nous nous intéressons à l'effet du champ électrique sur l'énergie de liaison d'une impureté donneur de type hydrogénoïde confinée dans une nanostructure type cœur/coquille (IQDQW).

L'objectif de ce chapitre est d'étudier théoriquement les propriétés optoélectroniques d'une impureté donneur placée dans le puits d'une boîte quantique cœur/coquille de

CdS/HgS/CdS, sous l'effet de différentes perturbations : le champ électrique, le champ magnétique pour différentes positions de l'impureté. Le calcul d'énergie est effectué dans le cadre de l'approximation de la masse effective en utilisant la méthode variationnelle tandis que le calcul des propriétés optiques est basé sur l'approche de la matrice de la densité compacte.

- ♣ Dans la première partie de ce chapitre, nous avons étudié l'effet du champ électrique, de la position d'impureté, de la taille du cœur et de la coquille sur l'énergie de liaison et sur la polarisabilité d'un dopant unique confiné dans une boîte quantique sphérique (cœur/coquille) de *CdS (core)/HgS (well)/CdS (shell)*. Dans le premier paragraphe, nous présentons notre approche théorique pour déterminer les états propres par la résolution de l'équation de Schrödinger par le formalisme de la fonction enveloppe. Nos résultats numériques, nos discussions et nos conclusions sont rapportés au deuxième paragraphe.
- ♣ Dans la deuxième partie, nous avons entamé une étude comparative sur les propriétés optoélectroniques, pour les trois différentes formes des points quantiques (cubique, sphérique et cylindrique). A cet effet, nous avons calculé l'énergie de liaison et la susceptibilité diamagnétique d'une impureté donneur confinée dans des boîtes quantiques de différentes formes. Puis nous avons présenté nos résultats numériques et nos conclusions à ce sujet.

4.2. Effets du champ électrique et de la taille du cœur d'une boîte quantique sphérique de type cœur/coquille sur la polarisabilité

4.2.1. Formalisme théorique

Considérons une nanostructure de type boîte-quantique puits-quantiques *CdS (core)/HgS (well) / CdS (shell)* composée de trois couches semiconductrices de forme sphérique, soumise à l'action d'un champ électrique \vec{F} uniforme et parallèle à l'axe Oz. Dans cette structure, la couche semiconductrice de faible gap dopée N est prise en sandwich par l'autre couche semiconductrice de gap plus élevé. À cause de la discontinuité entre le matériau formant la boîte quantique (CdS de gap 2.5 eV) et le matériau environnant qualifié de puits quantiques (HgS de gap 0.5 eV), nous supposons que les porteurs de charge sont confinés dans le matériau HgS par un potentiel de confinement infini. Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, et dans un modèle à deux bandes simples, isotropes et paraboliques, l'Hamiltonien effective du système s'écrit :

$$H = -\nabla^2 - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} + V_{conf}(r) + W \quad (4.1)$$

Le premier terme de l'Hamiltonien désigne l'énergie cinétique de l'électron, le second décrit l'interaction Coulombienne. Le potentiel de confinement est donné par :

$$V_{conf}(r) = \begin{cases} 0 & a < r < b \\ \infty & r < a \text{ and } r > b \end{cases} \quad (4.2)$$

Où a est le rayon de la couche interne (boîte quantique) et b le rayon total de la boîte quantique (core + shell), par conséquent $b-a$ est l'épaisseur de la couche externe puits quantique : (QW). Dans l'expression (4-1) nous avons utilisé le système d'unités atomiques effectives ayant comme unité de longueur le rayon de Bohr effectif de l'électron donneur dans le semiconducteur massif $a^* = \hbar^2 \varepsilon_0 / m^* e^2$, et comme unité d'énergie le Rydberg effectif $R^* = m^* e^4 / 2\hbar^2 \varepsilon_0^2$. m^* est la masse effective de l'électron et ε_0 la constante diélectrique statique du matériau. Le paramètre sans dimension $f = ea^*F/R^*$ caractérise l'intensité du champ électrique.

L'énergie due à l'effet du champ électrique \vec{F} est définie comme suit :

$$W = eF(r \cos(\theta) - r_i) \quad (4.3)$$

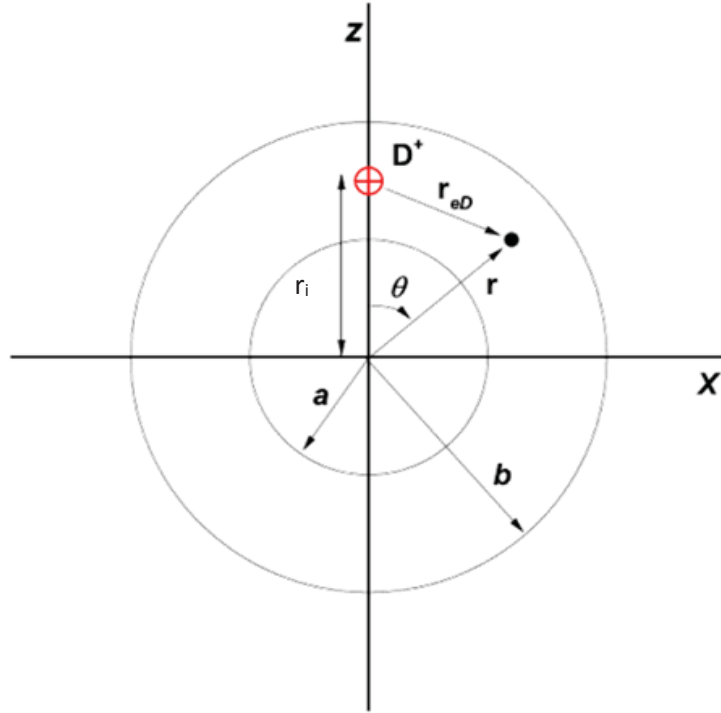


Figure 4-1 : Schéma d'une boîte quantique cœur/coquille avec l'ensemble des coordonnées et les dimensions ainsi que la position supposée de l'impureté.

r et r_i sont respectivement la position de l'électron et du donneur à partir du centre de la structure. r_{ed} est la distance entre l'électron et l'impureté. Nous supposons que l'impureté (D^*) est placée dans l'axe Oz. On trouve l'expression de r_{ed} sous la forme :

$$r_{ed} = \left| \vec{r} - \vec{r}_i \right| = \sqrt{r^2 + r_i^2 - 2rr_i \cos(\theta)}$$

4.2.1.1. Choix de la fonction d'onde

Puisque l'équation de Schrödinger associée à l'Hamiltonien (4-1) n'admet pas de solution exacte nous avons utilisé encore une fois la méthode variationnelle. La fonction d'onde que nous avons choisie s'écrit sous la forme :

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \psi_0(r) [1 + \beta f(r \cos(\theta) - r_i)] \quad (4.4)$$

Où β est un paramètre variationnel qui tient compte de l'effet du champ électrique. $\psi_0(r)$ est la fonction d'onde en absence de ce champ ($f = 0$), modélisée par la forme :

$$\psi_0(r) = \frac{\text{Sin}[K(r-a)]}{r} \exp -\alpha(r^2 - 2rr_i \cos(\theta) + r_i^2) \quad (4.5)$$

α est un paramètre variationnel et K est un paramètre proportionnel à l'inverse de la différence entre le rayon total b de la boîte quantique et le rayon a de la couche interne $K = \pi/b - a$.

4.2.1.2. Energie de liaison du donneur :

En présence des champs électrique, l'énergie totale de l'électron est obtenue par minimisation de la valeur moyenne de l'Hamiltonien H donnée par :

$$\begin{aligned} E(\alpha, \beta) &= \frac{\langle \Psi_i | H | \Psi_i \rangle}{\langle \Psi_i | \Psi_i \rangle} \\ &= E_k + E_{coul} + E_e \end{aligned} \quad (4.6)$$

La précision de la méthode variationnelle dépend fortement du choix de la fonction d'onde qui doit représenter au mieux les propriétés physiques du système.

L'énergie de liaison du donneur est définie comme étant la différence entre l'énergie de l'électron en absence et en présence de l'impureté.

$$E_b = E_{Sub} - \min_{\alpha, \beta} E \quad (4.7)$$

E_{Sub} est l'énergie du premier niveau de la bande de conduction en présence de la perturbation du champ électrique \vec{F} . Cette énergie (subband) est calculée sous la forme :

$$E_{Sub} = \langle \psi_0(\alpha=0) | H_{Sub} | \psi_0(\alpha=0) \rangle \quad (4.8)$$

On aura : $E_{Sub} = \frac{\pi}{b-a}$.

Après intégration sur E_k et l'énergie cinétique

$$E_k = \frac{(K^2 - \alpha^2)I_1 + \alpha(r_i^2 I_2 + 2K I_3 + r_i I_4) - 2I_5 + J_1 f}{I_1 + 2\beta J_1 f + \beta^2 M_1 f^2} \quad (4.9)$$

E_{coul} représente l'énergie d'interaction coulombienne

$$E_{coul} = \beta \frac{\{2[(K^2 - \alpha^2)J_1 + \alpha(r_i^2 J_2 + 2K J_3 + r_i J_4) - 2J_5] + 2U_1 - 2KU_2 + 2\alpha U_3 - 2\alpha r_i I_5\}f + 2M_1 f^2}{I_1 + 2\beta J_1 f + \beta^2 M_1 f^2} \quad (4.10)$$

E_e désigne l'énergie d'interaction de l'électron avec le champ électrique

$$E_e = \beta^2 \frac{\{(K^2 - \alpha^2)M_1 + \alpha(r_i^2 M_2 + 2K M_3 + r_i M_4) - 2M_5 + 2U_4 - 2KU_5 + 2\alpha U_6 - 2\alpha r_i J_5\}f^2}{I_1 + 2\beta J_1 f + \beta^2 M_1 f^2} \quad (4.11)$$

Les intégrales I_1, I_2, I_3, I_4 et I_5 . J_1, J_2, J_3, J_4 et J_5 . M_1, M_2, M_3 et M_4 . U_1, U_2, U_3, U_4, U_5 et U_6 , qui ne peuvent être calculé analytiquement, sont données par :

$$I_1 = \int_a^b \int_0^\pi \sin\theta \sin^2(K(r-a)) \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2r r_i \cos\theta}\right] dr d\theta$$

$$I_2 = \int_a^b \int_0^\pi \frac{\sin^3 \theta \sin^2(K(r-a))}{(r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$I_3 = \int_a^b \int_0^\pi \sin \theta \sin(K(r-a)) \cos(K(r-a)) \frac{r - r_i \cos \theta}{\sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}} \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$I_4 = \int_a^b \int_0^\pi \sin \theta \frac{\sin^2(K(r-a)) \cos \theta [2(r^2 + r_i^2)] - r r_i [1 + 3 \cos^2 \theta]}{r (r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$I_5 = \int_a^b \int_0^\pi \frac{\sin \theta \sin^2(K(r-a))}{\sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}} \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$J_1 = \int_a^b \int_0^\pi (r \cos \theta - r_i) \sin \theta \sin^2(K(r-a)) \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$J_2 = \int_a^b \int_0^\pi \frac{(r \cos \theta - r_i) \sin^3 \theta \sin^2(K(r-a))}{(r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$J_3 = \int_a^b \int_0^\pi (r \cos \theta - r_i) \sin \theta \sin(K(r-a)) \cos(K(r-a)) \frac{r - r_i \cos \theta}{\sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}} \times \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$J_4 = \int_a^b \int_0^\pi (r \cos \theta - r_i) \sin \theta \frac{\sin^2(K(r-a)) \cos \theta [2(r^2 + r_i^2)] - r r_i [1 + 3 \cos^2 \theta]}{r (r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta)^{\frac{3}{2}}} \times \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$J_5 = \int_a^b \int_0^\pi \frac{(r \cos \theta - r_i) \sin \theta \sin^2(K(r-a))}{\sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}} \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$M_1 = \int_a^b \int_0^\pi (r \cos \theta - r_i)^2 \sin \theta \sin^2(K(r-a)) \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$M_2 = \int_a^b \int_0^\pi \frac{(r \cos \theta - r_i)^2 \sin^3 \theta \sin^2(K(r-a))}{(r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$M_3 = \int_a^b \int_0^\pi (r \cos \theta - r_i)^2 \sin \theta \sin(K(r-a)) \cos(K(r-a)) \frac{r - r_i \cos \theta}{\sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}} \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$M_4 = \int_a^b \int_0^\pi (r \cos \theta - r_i)^2 \sin \theta \frac{\sin^2(K(r-a))}{r} \frac{\cos \theta [2(r^2 + r_i^2)] - r r_i [1 + 3 \cos^2 \theta]}{(r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta)^{\frac{3}{2}}} \times \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$M_5 = \int_a^b \int_0^\pi \frac{(r \cos \theta - r_0)^2 \sin \theta \sin^2(K(r-a))}{\sqrt{r_0^2 + r^2 - 2 r r_0 \cos \theta}} \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_0^2 + r^2 - 2 r r_0 \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$U_1 = \int_a^b \int_0^\pi \sin \theta \cos \theta \frac{\sin^2(K(r-a))}{r} \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$U_2 = \int_a^b \int_0^\pi \sin \theta \cos \theta \sin(K(r-a)) \cos(K(r-a)) \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_0^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$U_3 = \int_a^b \int_0^\pi \frac{r \sin \theta \cos \theta \sin^2(K(r-a))}{\sqrt{r_0^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}} \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$U_5 = \int_a^b \int_0^\pi (r \cos \theta - r_0) \sin \theta \cos \theta \frac{\sin^2(K(r-a))}{r} \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2 r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$U_6 = \int_a^b \int_0^\pi (r \cos \theta - r_i) \sin \theta \cos \theta \sin(K(r-a)) \cos(K(r-a)) \\ \times \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

$$U_7 = \int_a^b \int_0^\pi \frac{r(r \cos \theta - r_i) \sin \theta \cos \theta \sin^2(K(r-a))}{\sqrt{r_i^2 + r^2 - 2r r_i \cos \theta}} \exp\left[-2\alpha \sqrt{r_i^2 + r^2 - 2r r_i \cos \theta}\right] dr d\theta$$

La polarisabilité d'une impureté de donneur est calculée à partir de l'expression du moment dipolaire définie par :

$$P = -e \left(\left\langle \left| \vec{r} - \vec{r}_i \right| \right\rangle_{f \neq 0} - \left\langle \left| \vec{r} - \vec{r}_i \right| \right\rangle_{f=0} \right) \quad (4.12)$$

Nous établirons pour la polarisabilité d'un magnéto-donneur peu profond l'expression suivante :

$$P = \alpha_p F \quad (4.13)$$

4.2.2. Résultats numériques et discussions

Dans cette section, nous discuterons nos résultats obtenus en appliquant la méthode variationnelle directe pour calculer la polarisabilité α_p par la formule du moment dipolaire P et l'énergie de liaison E_b d'une impureté hydrogénique dans le puits quantique (QDQW) en l'absence et en présence d'un champ électrique. Nos calculs ont été effectués pour une boîte quantique sphérique de CdS (core)/ HgS (well) / CdS (shell), avec les paramètres physiques répertoriés dans le tableau 4-1.

Table 4-1 : Paramètres physiques caractérisant le système.

| Material | $\frac{m^*}{m_0}$ | ϵ_0 | ϵ_∞ | $a^* \left(\overset{0}{\text{Å}} \right)$ | $R^* (eV)$ | $E_g (eV)$ |
|----------|-------------------|--------------|-------------------|--|------------|------------|
| CdS | 0.2 | 9.1 | 5.5 | 5.818 | 3.65 | 2.5 |
| HgS | 0.036 | 18.2 | 11.36 | 5.851 | 5.0 | 0.5 |

Dans nos calculs, deux cas extrêmes se présentent : $a = 0$ (Point quantique homogène "HQD") et le deuxième cas où le rayon interne converge vers le rayon externe ($a \rightarrow b$) pour b fixe qui correspond à une couche sphérique infiniment mince (Point quantique inhomogène "IQD"). Nous présenterons les résultats pour les cas d'un HQD et d'un IQD.

4.2.2.1. Point quantique homogène (HQD)

Dans ce cas, on prend $a=0$ où le système étudié est devenu similaire à une boîte quantique homogène (HQD) de rayon b . Dans la figure 4-2. Nous présentons l'énergie de liaison E_b du donneur en fonction de la position du donneur dans un point quantique sphérique ($a = 0$) et pour différents rayons de la structure ($b=1, 2, 4, 6$ et $8a^*$). Nous remarquons que l'énergie de liaison diminue avec l'augmentation de la position de l'impureté pour atteindre un minimum lorsque l'impureté s'approche de la surface. Ceci peut être due à la distribution de la fonction d'onde électronique. Par conséquent, la diminution des dimensions géométriques de la boîte quantique crée une compression de la fonction d'onde de l'électron qui devient plus proche de l'impureté. Dans la figure 4-3, nous avons porté, à titre d'illustration, la variation de la polarisabilité α_p pour une impureté donneur sous l'effet du champ électrique. Nous notons que la polarisabilité diminue avec l'augmentation de l'intensité du champ électrique. Nos résultats montrent que la polarisabilité augmente au fur et à mesure que le rayon de la boîte augmente, ainsi, l'effet du champ électrique est plus prononcé pour les boîtes quantiques de grandes tailles. Ceci peut être expliqué pour les boîtes de grandes tailles, où le confinement géométrique est faible, ce qui rend les résultats applicables au cas des semi-conducteurs 3D. L'intensité du champ électrique favorise le confinement de l'électron et réduit la polarisabilité.

Afin d'étudier l'effet de la polarisabilité électrique de l'impureté, nous avons tracé dans la figure 4-4 les variations de la polarisabilité en fonction de la position $\frac{r_i}{b}$. Dans cette figure, nous montrons que la polarisabilité électrique augmente avec la position du donneur jusqu'à ce qu'elle atteigne le rapport $\frac{r_i}{b} \approx \frac{1}{2}$, après elle diminue avec l'augmentation de la taille $\frac{r_i}{b}$. Ceci implique que l'effet de confinement est plus important que l'effet du champ électrique dans le cas de positions inverses faibles non significatives dans les positions majeures. Son effet est plus prononcé lorsque l'impureté est placée entre le milieu de la boîte quantique $\frac{r_i}{b} \approx 0.4$ et $\frac{r_i}{b} \approx 0.8$ la polarisabilité commence à diminuer au fur et à mesure que le donneur se déplace vers les extrémités de la boîte quantique. Nous notons également que la polarisabilité électrique diminue à mesure que nous augmentons le champ électrique.

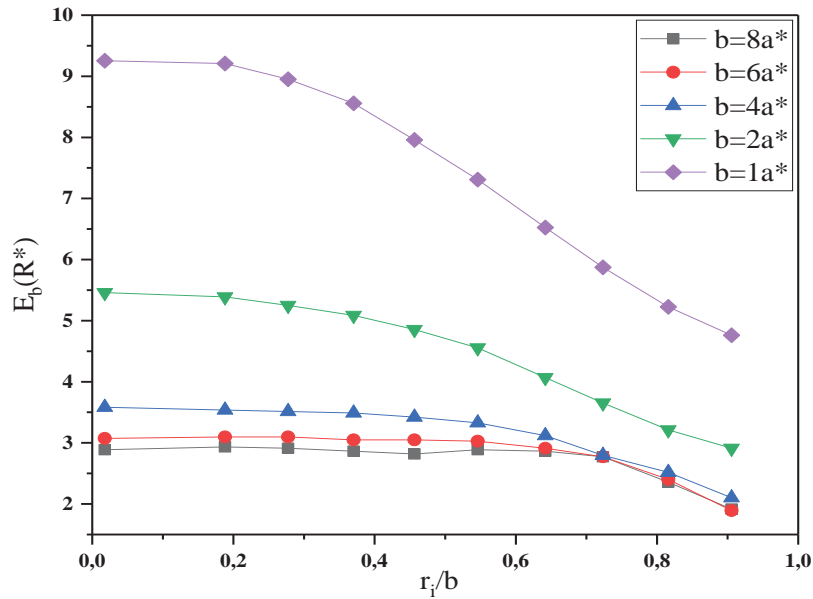


Figure 4-2 : Variations de l'énergie de liaison du donneur E_b en fonction de la position du donneur (r_i/b) pour différentes valeurs du rayon du point ($b= a^*, 2 a^*, 3a^*, 4 a^*$ et $6 a^*$).

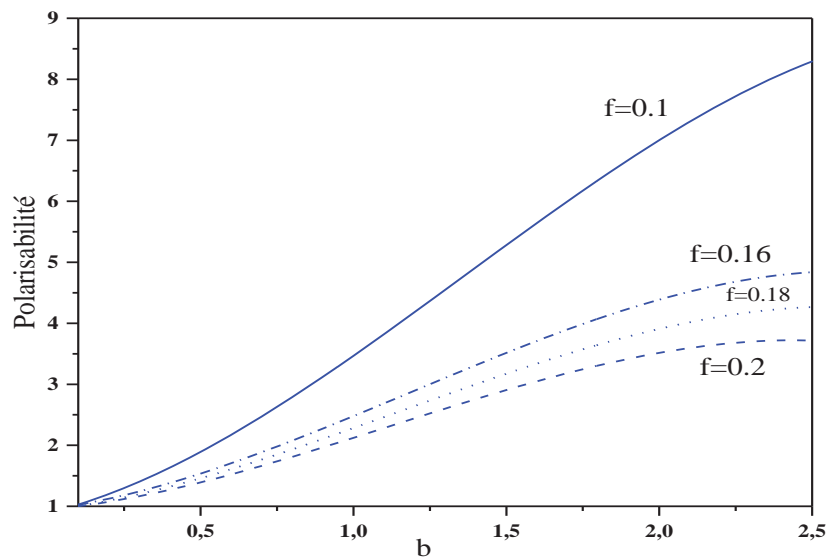


Figure 4-3 : Polarisation d'une impureté de type donneur en fonction du rayon b pour différentes valeurs du champ électrique ($f = 0.1, f = 0.16, f = 0.18$ et $f = 0.2$).

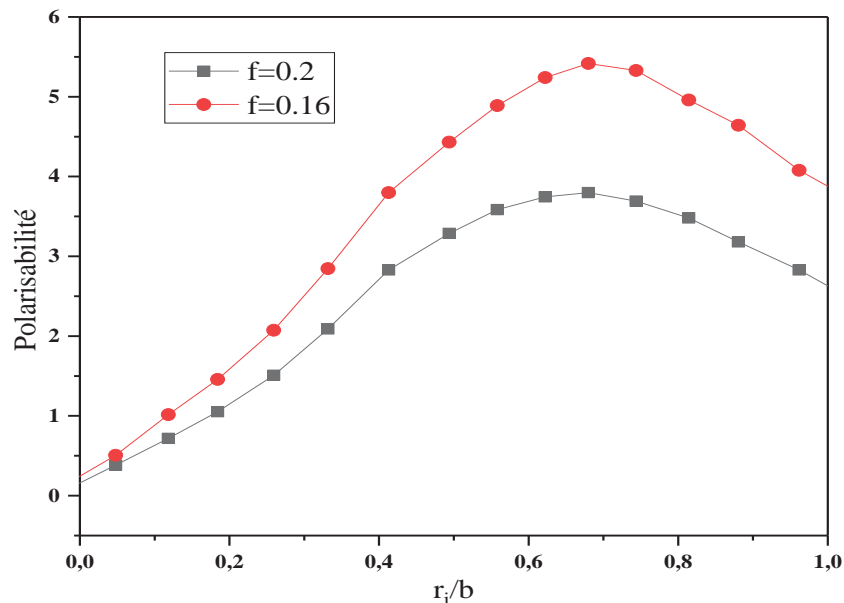


Figure 4-4 : Polarisabilité une fonction de la position d'impureté r_i/b pour deux valeurs du champ électrique.

4.2.2.2. Point quantique inhomogène (IQD)

Sur la figure 4-5 nous avons fixé le rayon b et nous avons tracé la valeur de l'énergie de liaison E_b pour différentes valeurs du rayon a de l'impureté, et en fonction de sa position. Nous observons que pour $\frac{a}{b} \ll 0.5$ l'énergie de liaison est presque indépendante du champ électrique appliqué. Quand ce confinement diminue (cas $b=2a^*$), l'effet du champ électrique se fait sentir. Ce dernier ayant tendance à séparer spatialement l'électron (charge négative) et l'impureté (charge positive) donc à rendre l'énergie d'interaction Coulombienne faible et par conséquent il diminue l'énergie de liaison. Nous constatons que l'effet du champ électrique est plus prononcé lorsque le rapport a/b tend vers 1, cas de puits quantique étroit. Ce comportement est en contradiction avec ce qui a été trouvé dans un puits quantique simple. Ce qui prouve la spécificité de la structure QDQW et confirme le fait que ses propriétés physiques diffèrent de chacun de ses constituants. En effet dans un puit quantique à fort confinement l'effet du champ électrique sur les états d'énergie est très faible.

Avec des rayons $b > 0.8 a^*$, la figure 4-6 représente le cas du confinement faible. Cette figure montre qu'au fur et à mesure que le rapport a/b tend vers 1, l'énergie de liaison tend vers la valeur $4R^*$ correspondant au puits quantique. Lorsque a/b varie entre 0 et 1, la boîte quantique s'agrandie au détriment du puit quantique qui l'entoure. Dans ce cas, l'électron du donneur se trouve confinée dans un puits quantique très étroit de profondeur infinie. On remarque que pour

chaque valeur de b donnée, l'énergie de liaison augmente avec a/b et présente un minimum à une valeur critique $(a/b)_{crit}$. Ce minimum d'énergie se déplace vers les petites valeurs de a/b pour des rayons $b < 2a^*$ et s'annule pour des valeurs $b > 2a^*$. Il est intéressant de mentionner que le rapport critique $(a/b)_{crit}$ sépare la région où l'énergie Coulombienne est dominante (région $a/b < (a/b)_{crit}$) et la région où l'énergie cinétique est prépondérante (région $a/b > (a/b)_{crit}$).

Nous avons rapporté dans la figure 4-7, la polarisabilité électrique de l'impureté du donneur en fonction du rapport a/b pour quatre valeurs du rayon extérieur b et pour une intensité du champ électrique ($f = 0.2$). Cette figure illustre la concurrence entre le confinement géométrique (la taille du QDQW) et le confinement du champ électrique sur la polarisabilité.

Pour les grandes valeurs du rapport a/b , le confinement géométrique est très remarquable, et la fonction d'onde de l'électron est très localisée. La polarisabilité électrique de l'impureté devient moins importante et relativement insensible aux rayons extérieurs b du QDQW. En revanche pour les faibles valeurs du rapport a/b (la grande couche sphérique), l'effet du champ électrique prédomine. La polarisabilité dépend fortement de la taille du puits quantique. Nous notons que la polarisabilité diminue à mesure que le rapport a/b augmente.

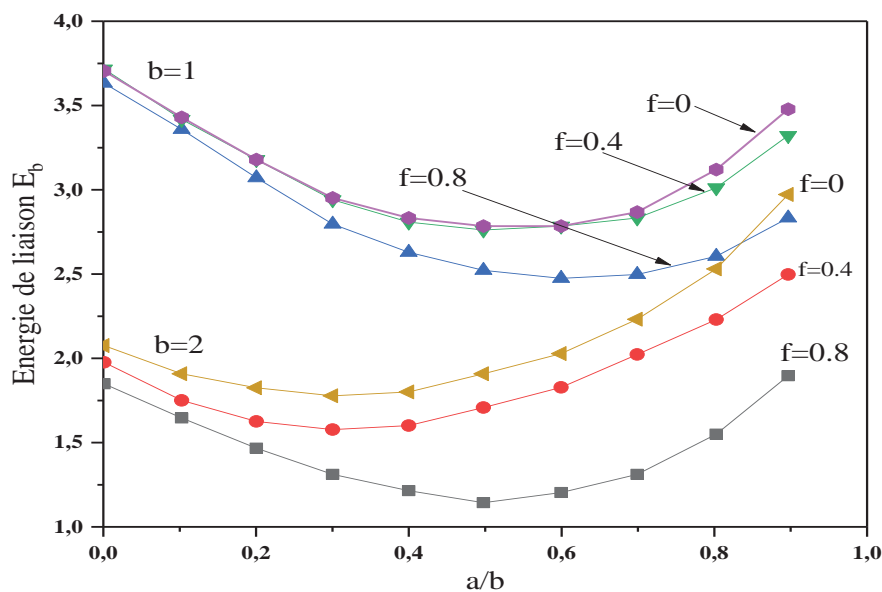


Figure 4-5 : Variation de l'énergie de liaison E_b en fonction du rapport (a/b) pour différentes valeurs du rayon extérieur du QDQW et pour différentes valeurs du champ électrique.

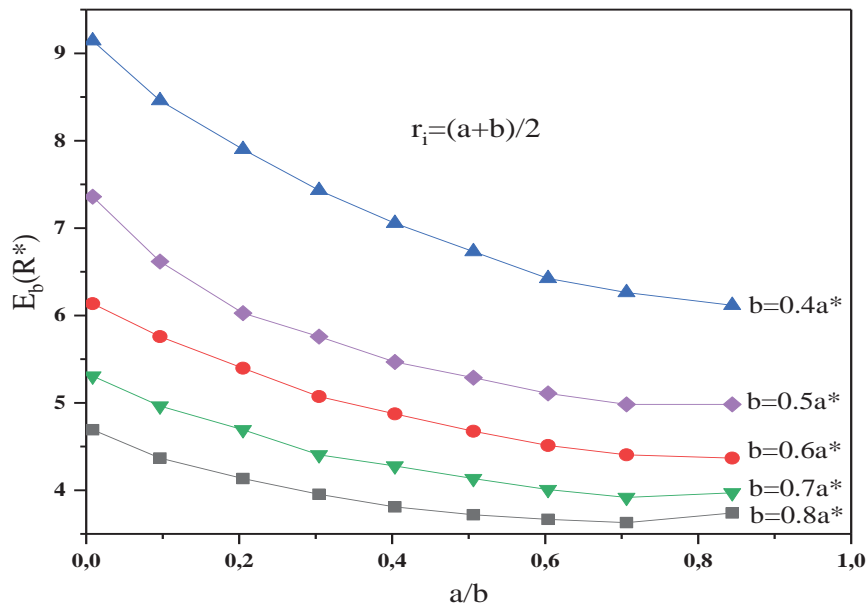


Figure 4-6 : Variation de l'énergie de liaison E_b en fonction du rapport a/b pour différentes valeurs du rayon extérieur du QDQW : $b \leq 0.8a^*$ (confinement géométrique fort).

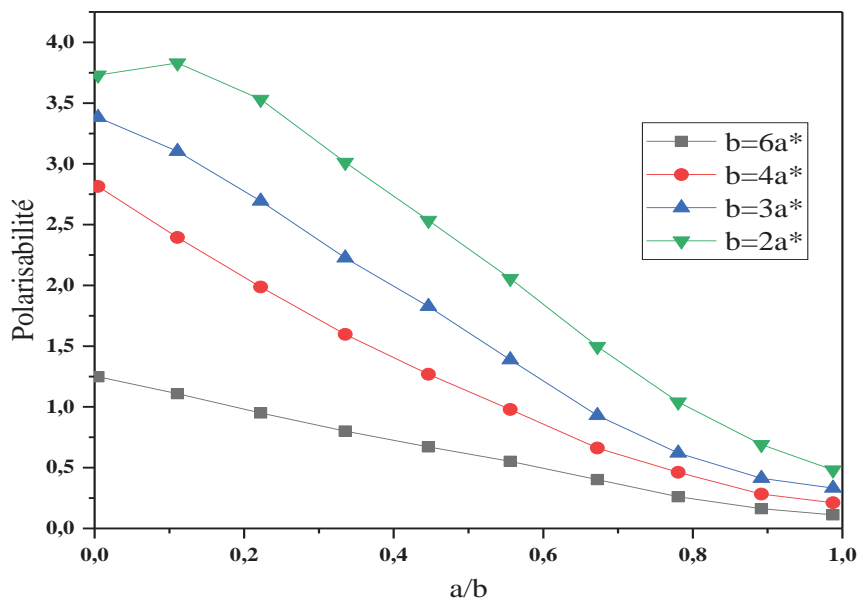


Figure 4-7 : Polarizabilité d'une impureté en fonction du rapport (a/b) pour différentes valeurs du rayon extérieur b .

4.2.3. Conclusion

Dans cette partie nous avons montré l'influence du champ électrique externe sur le dopant unique dans les boîtes quantiques sphériques cœur/coquille. Nos calculs ont été réalisés dans le cadre de l'approximation de la masse effective à l'aide d'une méthode variationnelle perturbatrice en considérant une barrière de potentiel infinie. Nous avons montré que la polarisabilité et l'énergie de liaison dépendent fortement du confinement géométrique, de la position d'impureté et du champ électrique.

L'effet du champ électrique est bien remarquable dans les boîtes quantiques de grandes tailles et devient faible pour celles de petites tailles (effet du confinement géométrique est prépondérant).

Nous avons montré l'existence d'une valeur critique $(a/b)_{crit}$ qui représente la limite entre le confinement tridimensionnel et le confinement superficiel sphérique. En outre, notre analyse démontre la grande influence de la position du dopant dans le matériau de la coquille.

4.3. Effets de la géométrie des points quantiques inhomogènes sur la susceptibilité diamagnétique

4.3.1. Formalisme théorique

Dans cette partie, nous considérons une impureté donneur confinée dans un point quantique d'AlAs(core)/GaAs(shell)/AlAs, soumise à un champ magnétique externe B (0,0, B) supposé uniforme le long de la direction Z. Le potentiel de confinement est assumé par le modèle d'un puits infini. Nous étudions les changements de l'énergie de liaison et de la susceptibilité diamagnétique due aux effets simultanés du champ magnétique, de la position du dopant unique et de l'épaisseur du cœur et de la coquille.

4.3.1.1. Point quantique sphérique de type Cœur/coquille

L'Hamiltonien d'un dopant unique dans une boîte quantique de forme sphérique soumis à un champ magnétique uniforme B peut être écrit comme suit :

$$H = -\nabla^2 - \frac{e}{\epsilon_0 r_{eD}} + \frac{1}{4} r^2 \gamma^2 \sin^2(\theta) + V_{conf}(r) \quad (4.14)$$

Où ϵ est la constante diélectrique en tenant compte de toute polarisation du système, \vec{r} et \vec{r}_i sont respectivement les vecteurs positions de l'électron et de l'impureté et e est la charge de élémentaire.

Avec r_{ed} est la distance entre l'électron et l'impureté, $r_{ed} = |\vec{r} - \vec{r}_i| = \sqrt{r^2 + r_i^2 - 2rr_i \cos(\theta)}$

$V_{conf}(r)$ est le potentiel du puit infini qui s'exprimer par :

$$V_{conf}(r) = \begin{cases} 0 & a < r < b \\ \infty & r < a \text{ and } r > b \end{cases} \quad (4.15)$$

Notons a^* (Rayon de Bohr effectif) l'unité de longueur et R^* (le Rydberg effectif) l'unité d'énergie telle que :

$$a^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m_e^* e^2} \text{ et } R^* = \frac{m_e^* e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2}. \quad \gamma \text{ est la fréquence cyclotronique effective définie par :}$$

$$\gamma = \frac{eB\hbar}{2m^* cR^*} \text{ qui est un paramètre sans dimension qui mesure l'intensité du champ magnétique.}$$

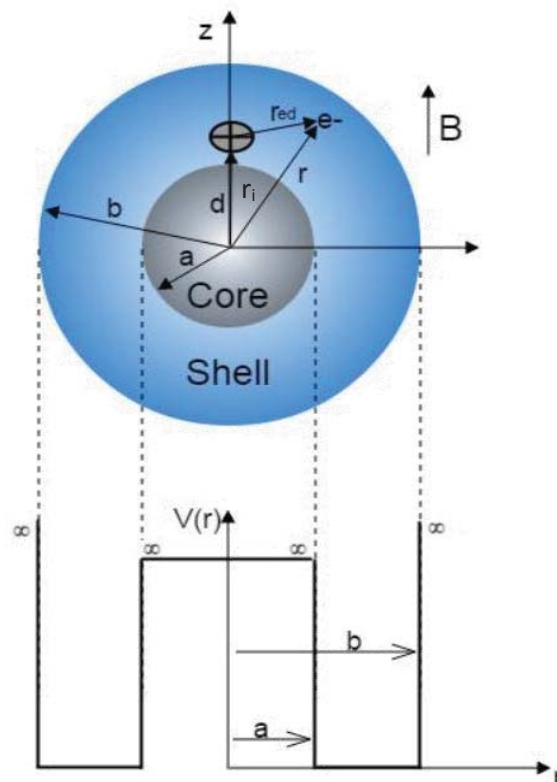


Figure 4-8 : Schéma d'un point quantique sphérique avec une impureté donneur excentrée.

4.3.1.1.1. Choix de la fonction d'onde

La présence de l'impureté dans une position excentrée rompt la symétrie sphérique du système. En conséquence l'équation de Schrödinger $H\psi(r, \theta, \varphi) = E\psi(r, \theta, \varphi)$ n'admet plus de solutions analytiques exactes. Dans cette partie, nous utilisons une méthode d'approximation pour déterminer l'état fondamental ainsi que l'énergie qui lui est associée. Nous avons opté pour la méthode variationnelle. La fonction d'onde d'essai ψ_0 est choisie en suivant la procédure de la seconde perturbation qui fournit une bonne approche pour traiter des problèmes impliquant plus d'une perturbation, puis on peut écrire :

$$\psi_0(r) = \frac{\text{Sin}[K(r-a)]}{r} \exp - \alpha(r^2 - 2rr_i \cos(\theta) + r_i^2) \quad (4.16)$$

α est un paramètre variationnel et K est un paramètre proportionnel à l'inverse de la différence entre le rayon total b de la boîte quantique et le rayon a de la couche interne $K = \pi/b - a$.

4.3.1.2. Point quantique cylindrique de type Cœur/coquille

L'Hamiltonien dans le cas d'un dopant unique dans une boîte quantique de forme cylindrique soumis à un champ magnétique uniforme B peut être écrit comme suit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla^2 - \frac{e}{\varepsilon |\vec{r} - \vec{r}_i|} + V_w^e(r_e) + \frac{\hbar^2 e^2 B^2}{8m_e^* c^2} \rho_{eD}^2 \quad (4.17)$$

Où m_e^* est la masse effective de l'électron, ε est la constante diélectrique en tenant compte de toute polarisation du système, \vec{r} et \vec{r}_i sont respectivement les vecteurs positions de l'électron et de l'impureté et e est la charge élémentaire.

$V_w^e(r_e)$ est le potentiel du puit infini qui s'exprime par :

$$V_w^e(r_e) = V_1^e(\rho_e) + V_2^e(Z_e) \quad (4.18)$$

L'Hamiltonien peut se simplifier en coordonnées cylindriques (ρ, φ, z) comme suit :

$$H = -\left(\frac{\partial^2}{\partial \rho_e^2} + \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial}{\partial \rho_e} + \frac{1}{\rho_e^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_e^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \right) - \frac{2}{\sqrt{\rho_{eD}^2 + (z_e - z_D)^2}} + V_1^e(\rho_e) + V_2^e(Z_e) + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho_{eD}^2 \quad (4.19)$$

Avec r_{ed} est la distance entre l'électron et l'impureté : $\rho_{eD} = \sqrt{\rho_e^2 + \rho_D^2 - 2\rho_e \rho_D \cos(\varphi_e - \varphi_D)}$.

z_e et z_D sont respectivement les coordonnées de l'électron et du donneur le long de la direction

z . Les potentiels de confinement des électrons dans le plan (xy) sont exprimés comme suit :

$$V_1^e(\rho_e) = \begin{cases} 0 & a < \rho_e < b \\ \infty & r < a \text{ et } r > b \end{cases} \quad (4.20)$$

$$\text{Et} \quad V_2^e(z_e) = \begin{cases} 0 & |z_e| \leq \frac{h}{2} \\ \infty & \text{Ailleurs} \end{cases} \quad (4.21)$$

Où h est la hauteur de la boîte cylindrique.

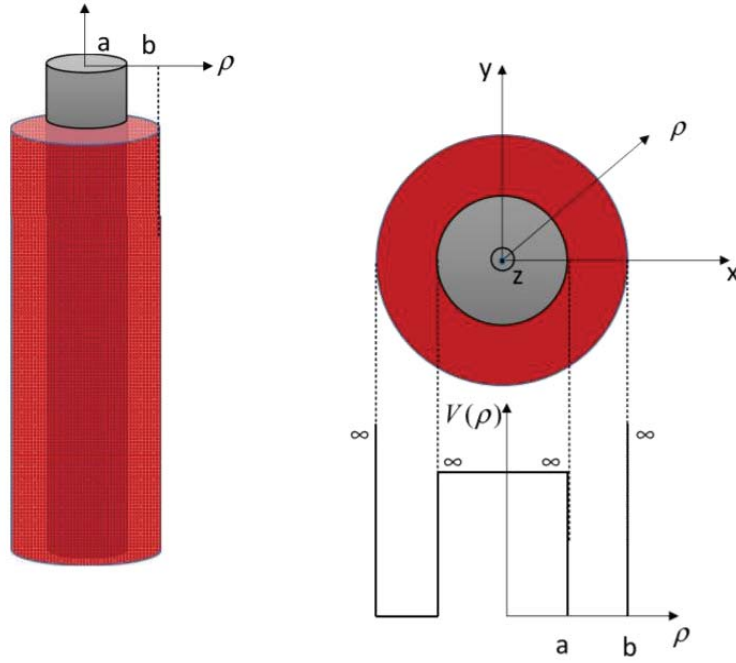


Figure 4-9 : Schéma d'un point quantique de type cœur/coquille à géométrie cylindrique.

4.3.1.2.1. Choix de la fonction d'onde

L'énergie de l'état fondamental du dopant E_D^0 et la fonction d'onde ψ_D^0 correspondante sont des solutions de l'équation de Schrödinger $H\psi_D^0(\rho_e, z_e, \varphi_e) = E_D^0\psi_D^0(\rho_e, z_e, \varphi_e)$.

Cette équation ne peut pas être résolue analytiquement, et la solution peut alors être obtenue en utilisant, par exemple, la méthode variationnelle. Pour construire la fonction d'onde d'essai, nous examinons d'abord l'énergie électronique et la fonction d'onde sans potentiel coulombienne. Dans ce cas, la fonction d'onde correspondante peut être écrite comme suit :

$$\psi_0(\rho_e, z_e, \varphi_e) = f_e(\rho_e)g_e(z_e)e^{im\varphi_e} \quad (4.22)$$

Avec :

$$f_e(\rho_e) = AJ_m(K_{mm}\rho_e) + BY_m(K_{mm}\rho_e) \quad \text{et} \quad g_e(Z_e) = \sin\left(\frac{l\pi Z_e}{h} + \frac{l\pi}{2}\right)$$

A et B sont des constantes, et J_m et Y_m sont des fonctions de Bessel [40].

D'autre part, l'énergie de l'état fondamental de l'impureté (correspondant à $m=0$ et $l=1$) peut être complétée par l'introduction de deux exponentielles reflétant l'interactions coulombienne latérales et longitudinales. Dans ces conditions, la fonction d'onde d'essai peut s'écrire comme suit :

$$\psi_0(\rho_e, z_e, \varphi_e) = Nf_e(\rho_e)g_e(z_e)\exp(-\alpha\rho_{eD})\exp(-\beta(z_e - z_D)^2) \quad (4.23)$$

α et β sont des paramètres variationnelles et N la constante de normalisation.

4.3.1.3. Point quantique cubique de type Cœur/coquille

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective l'Hamiltonien du mouvement de l'électron en interaction coulombienne avec l'impureté placée à la position $r_0 = (x_0, y_0, z_0)$, dans une boîte quantique de forme cubique soumis à un champ magnétique uniforme B peut être écrit comme suit :

$$H = -\frac{1}{2m^*} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \frac{e^2}{\epsilon_0 \sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2 + (z-z_0)^2}} + V(r) \quad (4.24)$$

Où m^* est la masse effective de l'électron, ϵ est la constante diélectrique. La hauteur de barrière potentielle est :

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{Pour } L_1 \leq |x| \leq L_2, L_1 \leq |y| \leq L_2, L_1 \leq |z| \leq L_2 \\ \infty & \text{Ailleurs} \end{cases} \quad (4.25)$$

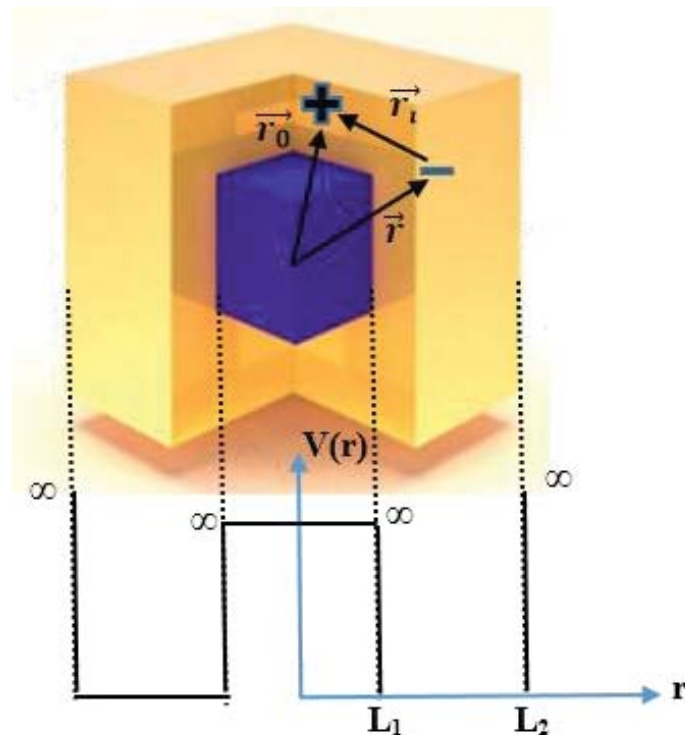


Figure 4-10 : Structure inhomogène des points quantiques de forme cubique. Les signes (+) et (-) représentent respectivement le symbole du donneur ionisé et de l'électron.

4.3.1.3.1. Choix de la fonction d'onde

Pour déterminer les valeurs propres de l'hamiltonien, nous utilisons la méthode variationnelle, et pour cela nous estimons la fonction d'onde de l'état 1s comme suit :

$$\psi_D^0 = N \sin\left(\pi\left(\frac{x-L_1}{L_2-L_1}\right)\right) \sin\left(\pi\left(\frac{y-L_1}{L_2-L_1}\right)\right) \sin\left(\pi\left(\frac{z-L_1}{L_2-L_1}\right)\right) \exp\left[-\left(\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{8b^2} + \frac{(z-z_0)^2}{8a^2}\right)\right] \quad (4.26)$$

N est un facteur de normalisation et a, b sont les paramètres variationnelle. Le terme exponentiel est introduit afin de prendre en compte les interactions de Coulomb entre l'électron et le donneur ionisé.

4.3.1.3.2. Energie de liaison du dopant E_b

L'énergie de liaison E_b de l'impureté à l'état fondamental est définie comme étant la différence entre l'énergie de confinement obtenue en absence de l'impureté et l'énergie de l'état fondamental en présence de l'impureté qui s'exprime par :

$$E_D^0 = \min_{\alpha, \beta} \frac{\langle \psi_0 | H | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} \quad (4.27)$$

$$\text{Alors : } E_b = E_z^0 - E_D^0 \quad (4.28)$$

4.3.1.3.3. Susceptibilité diamagnétique

La susceptibilité diamagnétique d'une impureté donneur confiné dans un point quantique, dans l'unité atomique (a.u) est donnée par :

$$\chi_{dia} = -\frac{e^2}{6m^* \varepsilon_0 c^2} \left\langle \left(\vec{r} - \vec{r}_0 \right)^2 \right\rangle \quad (4.29)$$

Avec c est la vitesse de la lumière et $\left\langle \left(\vec{r} - \vec{r}_0 \right)^2 \right\rangle$ la valeur moyenne du carré de la distance entre l'électron et le noyau.

4.3.2. Résultats et discussions

Dans ce qui suit, nous allons nous concentrer sur l'influence de la taille de la structure cœur/coquille, de la position du donneur et de l'intensité du champ magnétique sur l'état fondamental du dopant unique, en tenant compte des différentes géométries du point quantique.

Nous commençons notre discussion en étudiant la variation de l'énergie de liaison pour trois valeurs représentatives du champ magnétique ($\gamma=0, 0.4$ et 0.8) en fonction de la taille du cœur et de la coquille. Selon la figure 4-11, nous pouvons remarquer que l'énergie de liaison a un minimum d'environ $\left(\frac{L_1}{L_2}\right)$ ou $\left(\frac{a}{b}\right)=0.5$. Nous en déduisons que lorsque l'impureté est placée au centre du puits quantique GaAs, l'énergie de liaison est minimale. En plus, l'augmentation du champ magnétique induit une augmentation de l'énergie de liaison. Ceci peut s'expliquer par le fait que le champ magnétique a un second confinement, qui s'ajoute au confinement géométrique, et par conséquent la fonction d'onde devient fortement localisée au centre du point intérieur où l'électron est bien lié à l'impureté ce qui se traduit par une augmentation de l'énergie de liaison.

Dans la figure 4-12 nous avons tracé la variation de la susceptibilité diamagnétique d'une impureté donneur située au centre en fonction du rapport (L_1/L_2), et pour différentes formes du point quantique non homogène : (a) sphérique, (b) cubique et (c) cylindriques. Nous remarquons que $|\chi_{dia}|$ augmente avec l'augmentation du rayon externe du point quantique.

Lorsque le rapport $\left(\frac{a}{b}\right)$ ou $\left(\frac{L_1}{L_2}\right)$ varie entre 0 et 1, la susceptibilité diamagnétique présente un minimum pour les différentes tailles du point quantiques. En revanche, lorsque le rapport tend vers la limite a^* il est clair que le confinement géométrique induit est dominant et la fonction d'onde est plus concentrée autour de l'impureté. Nos résultats montrent que pour les grandes boîtes quantiques, le fort confinement géométrique entraîne une diminution plus impressionnante de la valeur absolue de la susceptibilité diamagnétique $|\chi_{dia}|$. Cette dernière converge vers une valeur limite a^* qui correspond à un puits quantique 2D étroit.

Dans le but d'expliquer le comportement de la susceptibilité diamagnétique et comprendre la physique sous-jacente liée à l'influence du champ magnétique nous présentons dans la figure 4-13 la variation de la susceptibilité diamagnétique en fonction du rapport $\left(\frac{a}{b}\right)$ ou $\left(\frac{L_1}{L_2}\right)$ pour différentes valeurs du champ magnétique ($\gamma=0, 0.4$ et 0.8). Il semble que la valeur absolue de la susceptibilité diamagnétique diminue au fur et à mesure que le rapport $\left(\frac{a}{b}\right)$ ou $\left(\frac{L_1}{L_2}\right)$ augmente. Ainsi nous remarquons que la variation de $|\chi_{dia}|$ sous l'effet du champ magnétique

n'est pas prononcée pour les petites valeurs du rapport $\left(\frac{a}{b}\right)$ des boîtes quantiques en raison de la domination du confinement géométrique. Lorsque le champ magnétique augmente la valeur absolue de la susceptibilité diamagnétique $|\chi_{dia}|$ diminue. Ceci est peut-être dû à l'effet du confinement fort qui s'ajoute par l'intensité du champ magnétique appliqué.

Discutons l'influence de la position du dopant sur la susceptibilité diamagnétique en considérant arbitrairement que le donneur ionisé est situé au milieu de la coquille. Les variations de la susceptibilité diamagnétique d'un donneur excentré, en fonction du rapport $\left(\frac{a}{b}\right)$ ou $\left(\frac{L_1}{L_2}\right)$ présentées dans la figure 4-14 révèlent des résultats intéressants.

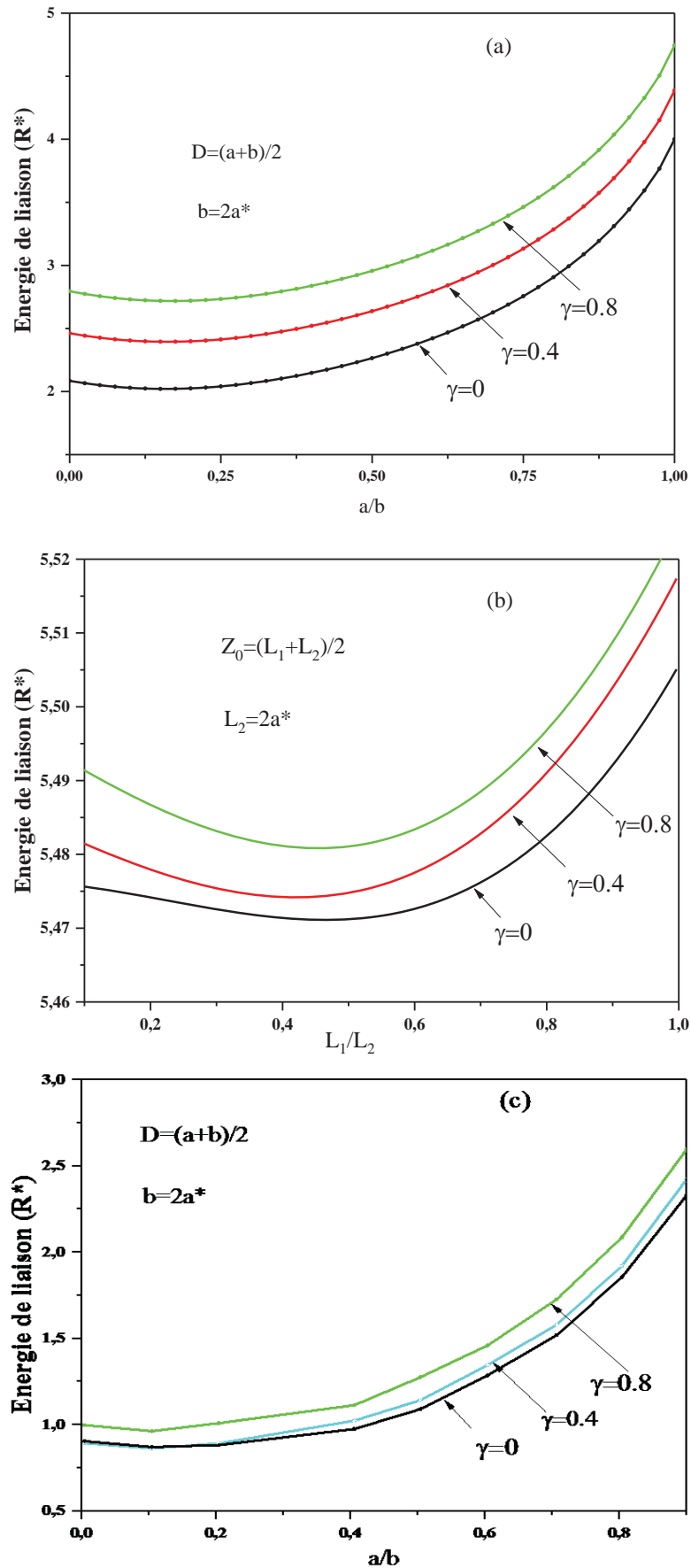


Figure 4-11 : Evolution de l'énergie de liaison E_b d'une impureté donneur située au centre pour différentes formes du point quantique non homogène : (a) sphérique, (b) cubique et (c) cylindriques.

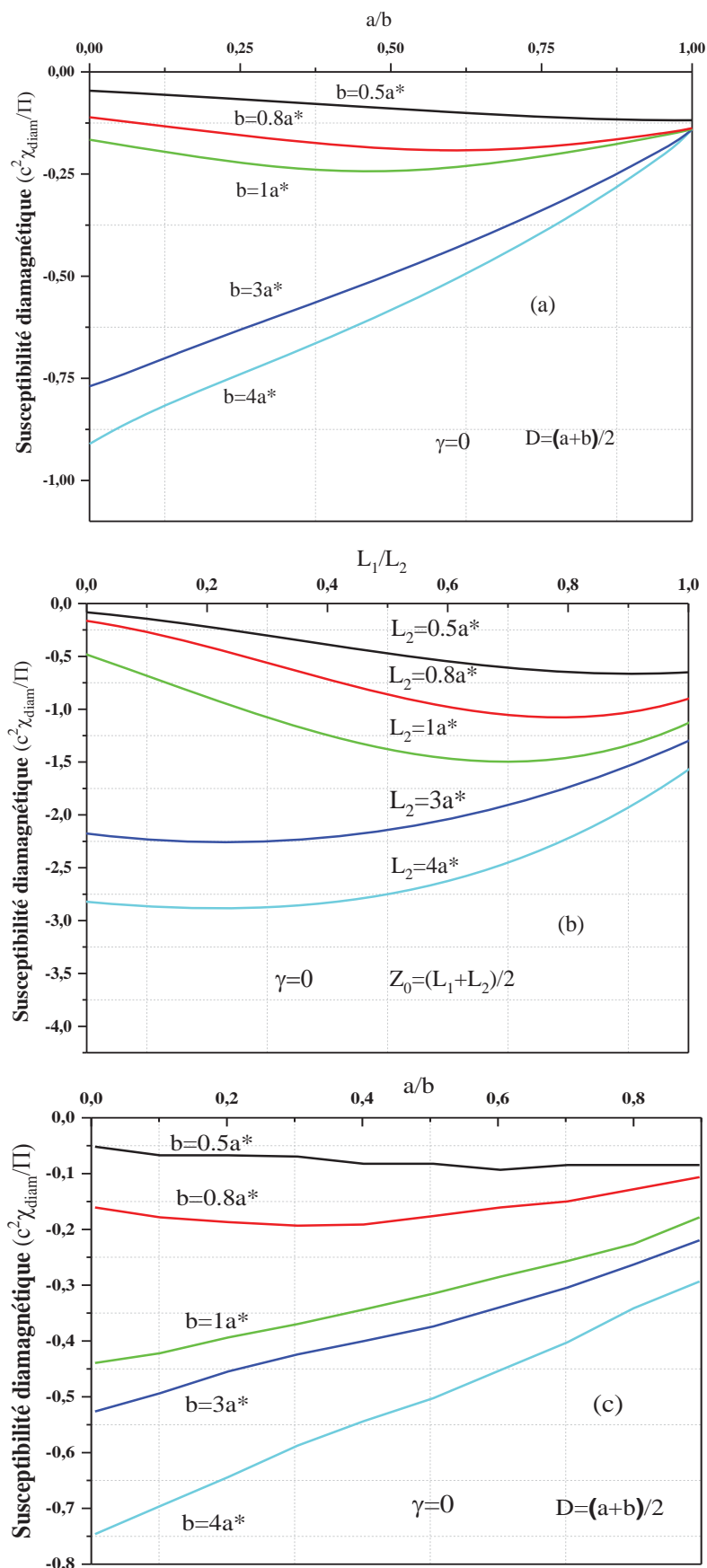


Figure 4-12 : Susceptibilité diamagnétique χ_{dia} d'une impureté donneur située au centre pour différentes formes des points quantiques non homogènes : (a) sphérique, (b) cubique et (c) cylindriques.

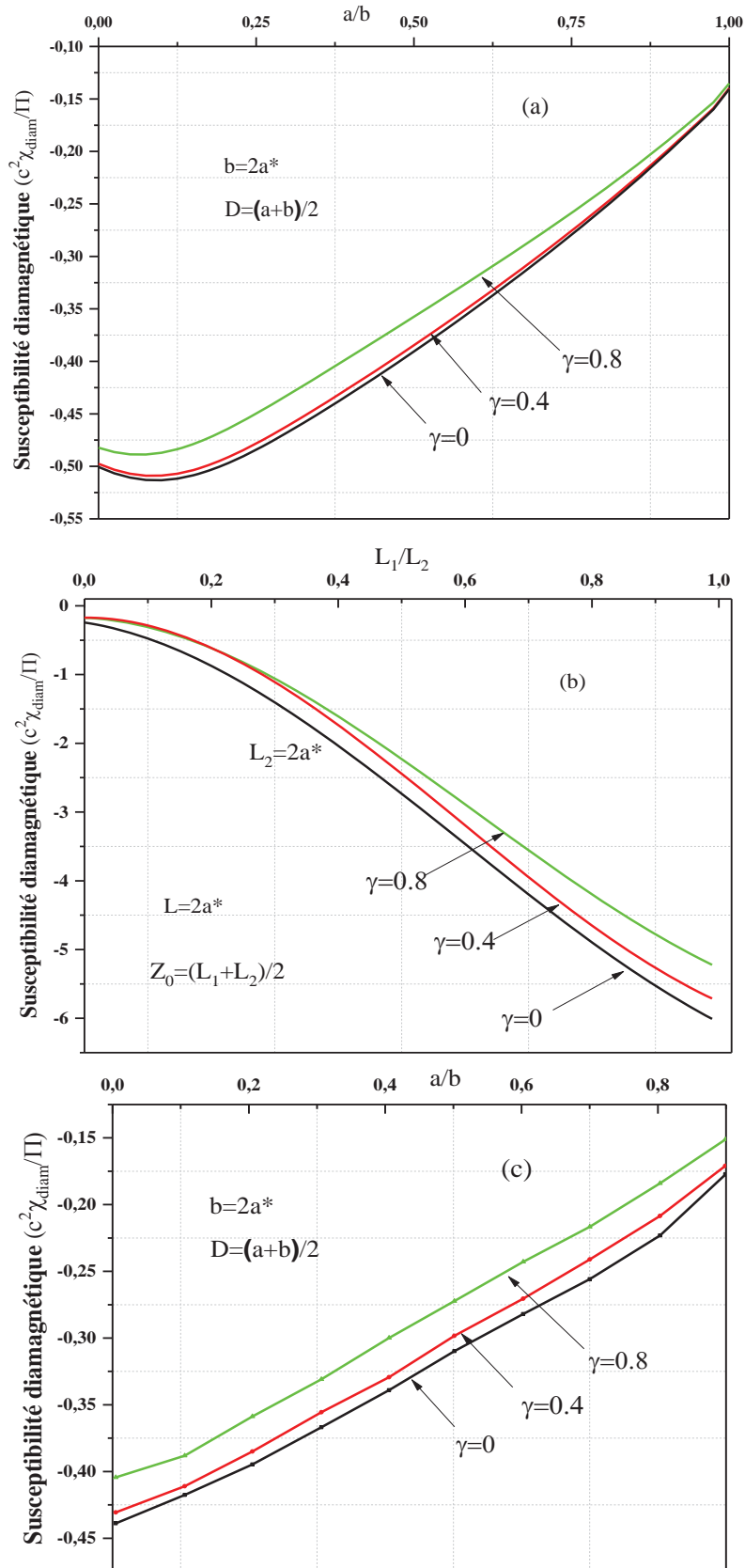


Figure 4-13 : Susceptibilité diamagnétique pour trois valeurs représentatives du champ magnétique ($\gamma=0, 0.4$ et 0.8) dans les différentes formes du point quantique non homogène : (a) sphérique, (b) cubique et (c) cylindriques.

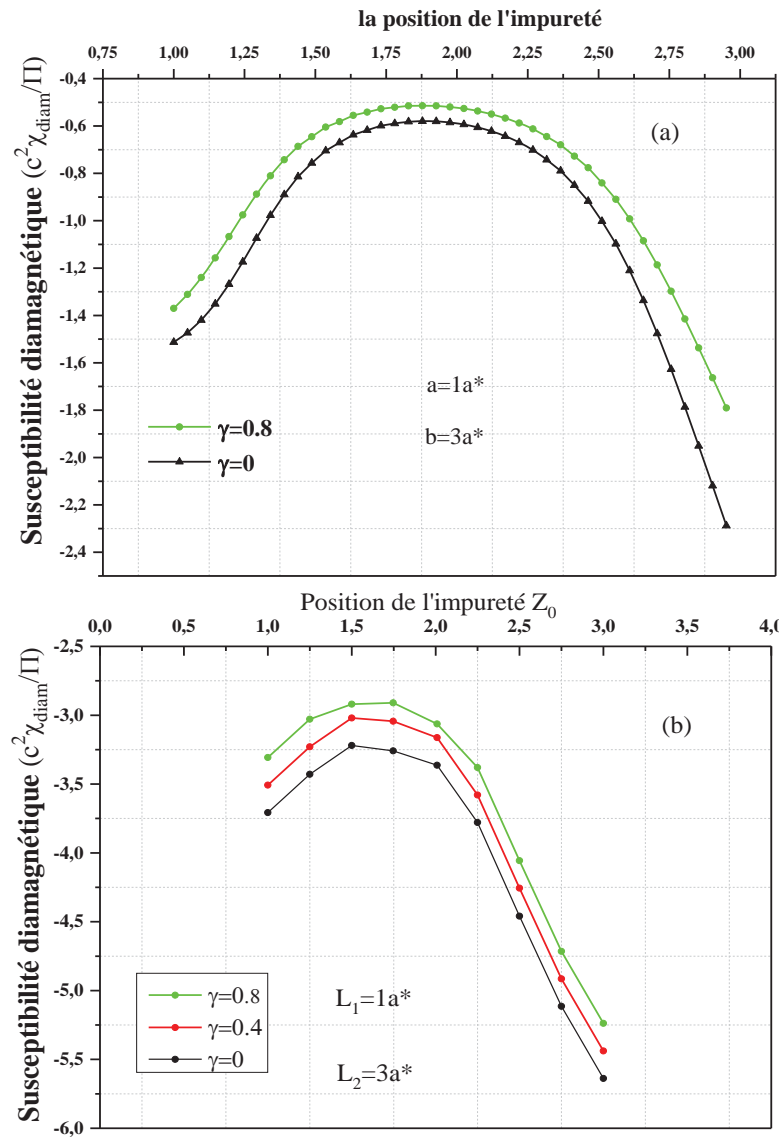


Figure 4-14 : Susceptibilité diamagnétique en fonction de la position de l'impureté pour trois valeurs représentatives du champ magnétique ($\gamma=0, 0.4$ et 0.8) dans les différentes formes géométriques : (a) sphérique, (b) cubique.

4.3.3. Conclusion

Dans cette partie, notre objectif principal était l'étude de l'énergie de liaison et la susceptibilité diamagnétique d'une impureté de type donneur ionisée et placée à l'intérieur d'une nanostructure de type cœur/coquille pour trois différentes formes (sphériques, cubique et cylindriques). Nous avons commencé par l'introduction de l'équation de Schrödinger effective qui décrit le système dans le cadre de l'approximation de la masse effective pour les trois formes géométriques. Puis, nous avons cherché les solutions de cette équation via le principe variationnel de Hass afin d'étudier les variations de l'énergie de liaison E_b et la susceptibilité diamagnétique χ_{dia} en fonction du rapport des rayons du cœur et de la coquille, pour différentes tailles et formes géométriques de la nanostructure. Les résultats obtenus montrent que : (i) L'énergie de liaison E_b et la susceptibilité diamagnétique dépendent fortement de la taille et de la forme du point quantique inhomogène, et qu'elles s'accroissent au fur et à mesure que le rapport des rayons diminue. (ii) La variation de la susceptibilité diamagnétique est beaucoup appréciable précisément pour les points quantiques inhomogènes de grande tailles. (iii) Le champ magnétique reste un facteur très important qui affecte les propriétés optoélectroniques des points quantiques inhomogènes pour les différents formes géométriques (induit un fort confinement autour de l'impureté).

Nous espérons que ces résultats intéressants seront utiles pour comprendre les comportements liés à la perturbation du champ magnétique dans les structures cœur/coquille.

Références bibliographiques du 4^{ème} chapitre

- [1] Djillali Nasri, Nadir Sekkal, *Physica E* **42**,2257–2263 (2010).
- [2] I. F. I. Mikhail and I. M. M. Ismail, *phys. stat. sol. (b)* **244**, No. 10, 3647–3659 (2007).
- [3] M. Kırak, S.Yılmaz, M. Sahin and M. Gençaslan, *Journal of Applied Physics* **109**, 09, 4309 (2011).
- [4] Jayanta Ganguly, Surajit Saha, Aindrila Bera, Manas Ghosh, *Superlattices and Microstructures* **98**,385-399 (2016).
- [5] Aindrila Bera, Surajit Saha, Jayanta Ganguly, Manas Ghosh, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **98**,190–197 (2016).
- [6] Erfan Owji, Alireza Keshavarz, Hosein Mokhtari, *Superlattices and Microstructures* **98**,276-282 (2016).
- [7] Xiaobo Feng, Guiguang Xiong, XI Zhang, et al., *Physica B* **383**,207 (2006).
- [8] Shaohua Gong, Duanzheng Yao, Xiaobo Feng, et al., *Microelectron. J.* **37**,904 (2006).
- [9] Xi Zhang, Guiguang Xiong, Xiaobo Feng. *Physica E* **33**,120–124 (2006).
- [10] X.N. Liu and D.Z. Yao, *Eur. Phys. J. B* **78**, 95–102 (2010).
- [11] Xing. Yan, Wang. Zhi-Pin and Wang Xu, *Chinese Physics B*, Vol **18** No 5, 1674-1056/1935-07 (2009).
- [12] J.Silva-Valencia N.Porrás-Montenegro, International report, *ICTP*, IC/95/216 (1995).
- [13] H. E. Porteanu, E. Lifshitz, M. Pflughoefft, A. Eychmüller, and H. Weller, *phys. stat. sol. (b)*, **226**, 219, (2001).
- [14] V.Ranjan and Vijay A Singh, *J. Phys: Condens. Matter.*, **13**, 8105, (2001).
- [15] J. Khamkhami, E. Feddi, A. Assaid, F. Dujardin, B. Stebe and J. Diouri., *Phys. Low. Dim. Struct.*, 9/10, 131 (2001).

Conclusion générale

Conclusion générale

L'objectif de notre travail était d'étudier un ensemble des perturbations extérieures sur les propriétés optoélectroniques d'une boîte quantique cœur/coquille de type I inversé. Les calculs ont été faits dans le cadre de l'approximation de la masse effective et à l'aide de l'approche variationnelle. Nous avons présenté dans le premier chapitre une aperçue générale sur les nanostructures, leurs classifications, leurs méthodes de croissance et leurs champs d'application. Nous avons également rappelé les différentes techniques de résolution numérique.

Dans le deuxième chapitre, nous avons discuté le cadre théorique de l'approche variationnelle. Puis nous avons donné un rappel sur le formalisme relatif au problème d'un électron confiné dans une boîte quantique. Ensuite, nous avons parlé de l'effet du champ magnétique sur les points quantiques homogènes. Nous avons présenté une étude sur l'effet des excitations extérieurs telles que : la pression hydrostatique, la température et le champ magnétique sur la polarisabilité et l'énergie de liaison d'une impureté donneur confinée dans une boîte quantique cubique à base de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}Al. Les calculs ont été réalisés en considérant une barrière finie. Les résultats trouvés montrent une sensibilité remarquable de l'énergie de liaison par rapport à la taille de la boîte quantique. Aussi, la température et la pression hydrostatique ont un effet considérable sur l'énergie de liaison et la polarisabilité dans les semi-conducteurs de faibles dimensions et particulièrement pour les boîtes quantiques de grandes tailles. L'énergie de liaison augmente avec la pression hydrostatique. Ce qui reflète la forte localisation de l'impureté. D'autre part, l'effet de la pression est remarquable sur la polarisabilité et devient plus important pour les grandes boites. Par contre, l'énergie de liaison diminue avec la température. Il est également noté que pour $T < 200\text{K}$ l'énergie de liaison diminue lentement que par rapport à $T > 200\text{K}$. Les résultats montrent en général que la température, la pression hydrostatique et le champ magnétique jouent un rôle important dans la polarisation des points quantiques. Ceci montre la possibilité de contrôler les transitions d'énergie de l'impureté en ajustant sur les paramètres de ces excitations extérieures et la taille de la structure.

Dans le troisième chapitre, nous avons étudié l'effet de la pression hydrostatique et du champ électrique en présence de l'interaction électron-phonon (e-p), sur l'énergie de liaison, la polarisabilité, et la section efficace de photoionisation (PCS) d'une impureté donneur localisée dans une boiite quantique cubique inhomogène (cœur/coquille) à base de GaAs/GaAlAs. Les

résultats trouvés montrent que l'énergie de liaison, la polarisabilité et le PCS dépendent fortement du champ électrique, de la taille du QB, de la pression hydrostatique et de la correction polaronique : (i) l'énergie de liaison dépend fortement de la largeur intérieure et extérieure du point quantique cubique, ainsi que de l'intensité du champ électrique. (ii) La polarisabilité augmente en augmentant la largeur extérieure de la boîte quantique. L'influence de l'introduction de la pression hydrostatique est plus prononcée. Elle réduit rapidement l'intensité de la polarisabilité du donneur. De plus, le confinement géométrique augmente l'importance de l'interaction électron-phonon. (iii) L'influence de l'augmentation de la largeur extérieure conduit à un décalage vers les hautes énergies du PCS, tandis que le pic du PCS augmente. L'effet combiné de la pression hydrostatique et du champ électrique provoque un décalage vers les basses énergies du PCS et une réduction de l'amplitude du pic. De plus, le PCS est fortement affectée par la position des impuretés.

Le quatrième chapitre est divisé en deux parties. La première partie est réservée à l'étude de l'effet du champ électrique externe sur la polarisabilité et l'énergie de liaison d'une impureté donneur confinée dans une boîte quantique sphérique de type cœur/coquille. Les résultats trouvés dans le cadre de l'approximation de la masse effective à l'aide d'une méthode variationnelle perturbatrice en considérant une barrière de potentiel infinie, montrent que la polarisabilité et l'énergie de liaison dépendent fortement de la taille de la boîte quantique, de la position de l'impureté et du champ électrique.

Nous avons montré l'existence d'une valeur critique $\left(\frac{a}{b}\right)_{crit}$ qui représente la limite entre le confinement tridimensionnel et le confinement superficiel sphérique.

La deuxième partie porte sur l'étude comparative de l'énergie de liaison et de la susceptibilité diamagnétique d'une impureté de type donneur ionisé placée à l'intérieur d'une nanostructure de type cœur/coquille pour trois différentes formes géométriques (sphérique, cubique et cylindrique). Les résultats obtenus montrent que : (i) L'énergie de liaison et la susceptibilité diamagnétique dépendent fortement de la taille et de la forme géométrique du point quantique inhomogène, et qu'elles s'accroissent au fur et à mesure que le rapport des rayons interne et externe diminue. (ii) La variation de la susceptibilité diamagnétique est beaucoup appréciable pour les points quantiques inhomogènes de grande tailles. (iii) Le champ magnétique reste un facteur très important qui affecte les propriétés optoélectroniques des points quantiques inhomogènes pour les différentes formes géométriques (induit un fort confinement autour de l'impureté).

En perspective, nous envisageons aussi de refaire les calculs pour d'autres matériaux et aussi avec d'autres méthodes de résolution numérique autre que la méthode variationnelle tels que les éléments finis, la différence finie et la théorie de la densité fonctionnelle (DFT)...etc, et aussi de faire des études expérimentales en ce domaine.