جامعة سيدي محمد بن عبد الله بفاس
UNIVERSITE SIDI MOHAMED BEN ABDALLAH DE FES
كلية العلوم ظهر المهراز فاس
FACULTE DES SCIENCES DHAR EL MEHRAZ FES

N° d'Ordre : **08/2021**

Formation Doctorale : Sciences des Matériaux et Procédés Industriels.

Discipline : Physique des matériaux.

Spécialité : Sciences des matériaux pour l'énergie et l'environnement.

Laboratoire : Physique du Solide.

THESE DE DOCTORAT

Présentée par

EL-BAKKARI KAMAL

Effets des perturbations extérieures sur les propriétés optoélectroniques des impuretés donneurs et des excitons dans les anneaux quantiques

Soutenue le 03 février 2021 devant le jury composé de :

Pr. Anouar Jorio	***F.S.D.M- Fès***	***Président***
Pr. Mohamed Kerouad	***F.S-Meknès***	***Rapporteur***
Pr. Izeddine Zorkani	***F.S.D.M- Fès***	***Examinateur***
Pr. Bouchta El Amrani	***E.N.S - Fès***	***Rapporteur***
Pr. Karoum Limame	***C.R.M.E.F- Fès***	***Examinateur***
Pr. El Mustapha Feddi	***E.N.S.A.M- Rabat***	***Examinateur***
Pr. Khalid Rahmani	***F.P- Beni Mellal***	***Rapporteur***
Pr. Ahmed Sali	***F.S.D.M- Fès***	***Directeur de thèse***

Année universitaire : 2020-2021

Remerciements

Ce présent travail de thèse a été effectué au sein du Laboratoire de Physique du Solide (L.P.S) de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz Fès, Université Sidi Mohamed Ben Abdellah, sous la direction du Professeur ***Ahmed Sali****.*

Mon premier remerciement est adressé, d'abord, à mon directeur de recherche Monsieur le Professeur ***Ahmed Sali*** *qui n'a jamais cessé d'avoir pleine confiance en me donnant un sujet de thèse original et prometteur, et de m'avoir aidé à faire mes premiers pas dans la recherche, dans un environnement très agréable et sans lui cette thèse n'aurait pas été possible. Je le remercie pour sa disponibilité, et malgré ses charges, il a toujours pris le temps de répondre très clairement à mes questions. Ses compétences scientifiques et ses grandes qualités humaines m'ont été d'un grand soutien matériel et moral, pendant les moments difficiles, aussi je le remercie pour les encouragements et les conseils qu'il n'a jamais cessé de me prodiguer. Veuillez trouver ici toute ma gratitude Monsieur Ahmed Sali.*

Je tiens aussi à remercie Monsieur ***Anouar Jorio****, Professeur à la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz de Fès pour l'intérêt qu'il a manifesté pour mon travail et pour avoir assumé la tâche de président du jury.*

Que Messieurs, ***Mohamed Kerouad****, Professeur à la Faculté des Sciences de Meknès,* ***Bouchta El Amrani****, Professeur à l'Ecole Normale Supérieure de Fès et* ***Khalid Rahmani****, Professeur à la Faculté Poly-disciplinaire de Beni Mellal ont examiné le présent travail avec beaucoup de minutie et m'ont fait l'honneur de le rapporter, je tiens à leur exprimer ici mes vifs remerciements.*

J'adresse tous mes remerciements à Monsieur ***Izeddine Zorkani****, Professeur à la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz de Fès, Monsieur* ***El Mustapha Feddi****, Professeur à l'Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers de Rabat et Monsieur* ***Karoum Limame****, Professeur au Centre Régional des Métiers de l'Education et de la*

Formation de Fès, trouvent ici le témoignage de ma gratitude pour m'avoir fait l'honneur de participer à la commission d'examen.

Je tiens, également, à exprimer mes sincères remerciements à ***Dr. José Bosch Bailach*** *et à* ***Monsieur John Uebersax****, qui m'ont aidé dans les calculs numériques.*

Je ne peux pas, non plus, oublier la présence presque continue durant l'accomplissement de ce travail, de mon cher ami et collègue ***E. Iqraoun*** *qui m'a aidé et soutenu moralement quand il le fallait.*

De même, j'adresse un grand merci à tous mes collègues thésards, auxquels j'exprime ma sincère et amicale gratitude pour l'atmosphère de sympathie et de soutien cordial dont ils m'ont entouré. Un gros merci aussi à l'ensemble des membres du laboratoire du physique du solide L. P. S. et à tous les membres administratifs de la Faculté des Sciences Dhar EL Mahraz de l'Université Sidi Mohamed Ben Abdellah.

Je tiens à remercier tous les professeurs qui ont participé à ma formation, au cours de ce cycle de doctorat, pour toutes les connaissances utiles qu'ils ont partagées avec moi.

Un énorme merci et une reconnaissance éternelle à mes parents pour leur soutien permanant, leur sacrifice et leur patience, pendant des années, à l'égard de mes exigences répétées. De même, j'adresse un grand merci à ma sœur ***Ikram****, et à mes frères* ***Najib*** *et* ***Bilal****.*

Je ne pourrais oublier le soutien de tous mes amis particulièrement : ***L. El khanchoufi****,* ***A. Mazouz****,* ***M. Essalmi****, et je remercie aussi toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin pour venir à bout de ce manuscrit et que j'ai oublié de citer ici.*

Liste des figures

Figure I.1 - Structure cristalline de Zinc-Blende (a) et de Diamant (b). ……..…...…..... 9

Figure I.2 - Structure Wurtzite des nitrures GaN. …….. 10

Figure I.3 - Structure de bande électronique du $GaAs$ dont la bande interdite est reportée en pointillés ; $E_g = 1.42\ eV$ à $300\ K$. ……..…… 12

Figure I.4 - Représentation graphique d'excitons de Wannier-Mott (a) et de Frenkel (b). 17

Figure I.5 - Fonction d'onde de l'état fondamental en absence (courbe en trait plein) et en présence du champ électrique de $10\ kV\ /\ cm$ (courbe en tirets). ……..…. 21

Figure II.1 - Représentation des images AFM des QDs $InAs$ (a) et QR $InGaAs$ (b) réalisées sur des substrats de $GaAs$. ……..…… 31

Figure II.2 - Illustration schématique du principe de la croissance de gouttelettes : (a) dépôt d'une goutte d'un premier matériau (ex : Ga) sur le substrat, (b) recristallisation en présence d'un flux de matériau complémentaire (ex : As). ……...…….. 32

Figure II.3 - (a) Images AFM des nanostructures à base de $GaAs/AlGaAs$ obtenues avec différentes intensités de flux de As au cours du processus de cristallisation, et (b) le profil latéral d'un îlot de QD, simple QR et double QR obtenus. …… 34

Figure II.4 - Schématisation de deux types de potentiel de confinement infini : potentiel de confinement radial (a) et axial (b), R_1, R_2 et H sont les rayons intérieur et extérieur et la hauteur du QR respectivement. ……..…… 37

Figure II.5 - Schématisation des deux types de potentiel de confinement fini : potentiel de confinement radial (a) et axial (b). ……..……..…… 38

Figure II.6 - Allure schématique d'un QR sous l'effet d'un champ électrique F appliqué parallèlement à l'axe z du QR. ……. 41

Figure III.1 - Représentation schématique de la structure du QR considérée dans ce chapitre (a). Les diagrammes schématiques (b) et (c) montrent les projections des dimensions de système QR pour les potentiels de confinements radial $\big(V(\rho)\big)$ et axial $\big(V(z)\big)$ dans les directions xy et xz et pour les potentiels de confinement fini et infini respectivement. ……...…… 51

Figure III.2 - Energie de liaison d'une impureté donneur en fonction de la hauteur H du système QR pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait plein), avec effet

de la NP de la bande de conduction (courbes en tirets) et avec effet combiné du polaron et de la NP (courbes en pointillés). ……..……. 58

Figure III.3 - Energie de liaison d'une impureté donneur en fonction de l'épaisseur radiale ΔR du système QR pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait plein), avec effet de la NP de la bande de conduction (courbes en tirets) et avec effet combiné du polaron et de la NP (courbes en pointillés). ……..…….. 59

Figure III.4 - Energie de liaison d'une impureté donneur en fonction de la position axiale de l'impureté z_0, pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait plein), avec effet de la NP de la bande de conduction (courbes en tirets) et avec effet combiné du polaron et de la NP (courbes en pointillés). ……...…….. 60

Figure III.5 - Energie de liaison d'une impureté donneur en fonction de la position radiale de l'impureté ρ_0, pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini, pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait plein), avec effet de la NP de la bande de conduction (courbes en tirets) et avec effet combiné du polaron et de la NP (courbes en pointillés). …….. 62

Figure III.6 - Energie de liaison d'une impureté donneur hydrogénoïde localisée au centre du système QR en fonction du champ électrique externe F pour deux valeurs différentes de la hauteur H ($H = 1.0a_d^*$ & $2.5a_d^*$) pour les deux types de potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini et pour les paramètres fixes suivants : $R_1 = 0.4a_d^*$ et $\Delta R = 1.6a_d^*$. ……...…… 63

Figure III.7 - Stark shift de l'énergie de liaison d'une impureté donneur hydrogénoïde localisée au centre du système QR en fonction du champ électrique F pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini. ……...……... 64

Figure III.8 - Energie de liaison d'une impureté donneur située au centre du système QR en fonction du champ électrique F avec (courbes en trait plein) et sans (courbes en tirets) la correction polaronique dans le potentiel de confinement infini. …….…….. 65

Figure III.9 - Energie de liaison d'une impureté donneur située au centre du système QR en fonction de la hauteur H du système QR avec (courbes en trait plein) et sans (courbes en tirets) l'effet du polaron et pour deux valeurs du champ électrique ($F = 0$ & $100\ kV/cm$). ……..…… 66

Figure III.10 - Energie de liaison d'une impureté située au centre du système QR en fonction de l'épaisseur radiale ΔR du système QR avec (courbes en trait plein) et sans

(courbes en tirets) effet du polaron et pour deux valeurs du champ électrique ($F = 0$ & $100\ kV/cm$). …….. 67

Figure III.11 - Energie de liaison d'une impureté donneur peu profonde en fonction de la position axiale z_0 de l'impureté confinée dans le système QR, avec et sans l'effet du polaron, en absence (courbes en trait plein) et en présence du champ électrique (courbes en tirets) ($F = 0$ & $100\ kV/cm$). …….. 68

Figure III.12 - Energie de liaison d'une impureté donneur peu profonde en fonction de la position radiale de l'impureté ρ_0 confinée dans le système QR, avec (courbes en trait plein) et sans (courbes en tirets) effet du polaron et pour deux valeurs différentes du champ électrique ($F = 0$ & $100\ kV/cm$). …..…… 69

Figure IV.1 - Représentation schématique de la structure du QR considérée dans ce chapitre (a). Les diagrammes schématiques (b) et (c) montrent les projections des dimensions de système QR pour les potentiels de confinement radial $\big(V(\rho)\big)$ et axial $\big(V(z)\big)$ dans les directions xy et xz et pour les potentiels de confinement fini et infini, respectivement. …… 77

Figure IV.2 - Susceptibilité diamagnétique d'une impureté donneur en fonction de la hauteur H du système QR, pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini, pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait plein), avec effet de la NP de la bande de conduction (courbes en tirets) et avec effet combiné du polaron et de la NP (courbes en pointillées). ……. 82

Figure IV.3 - Susceptibilité diamagnétique d'une impureté donneur en fonction de la position axiale de l'impureté z_0, pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini, pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait plein) et avec effet de la NP de bande de conduction (courbes en tirets)… 83

Figure IV.4 - Polarisabilité d'une impureté donneur hydrogénoïde localisée au centre du système QR en fonction de la hauteur H de QR, avec (courbe en trait plein) et sans (courbe en tirets) effet de la correction polaronique pour le cas d'un potentiel de confinement infini. …… 84

Figure IV.5 - Polarisabilité d'une impureté donneur hydrogénoïde localisée au centre du système QR en fonction de la hauteur H de QR, avec (courbe en trait plein) et sans (courbe en tirets) effet de la correction polaronique pour le cas d'un potentiel de confinement infini. ……...… 85

Figure IV.6 - Polarisabilité d'une impureté donneur hydrogénoïde localisée au centre du système QR en fonction du champ électrique F pour deux valeurs de la

hauteur de QR ($H = 1.5a_d^*$ & $3.0a_d^*$) avec (courbes en trait plein) et sans (courbes en tirets) effet de la correction polaronique pour le cas d'un potentiel de confinement infini. …….. 86

Figure V.1 - Représentation schématique de la structure du QR (a). Les diagrammes schématiques (b) et (c) montrent les projections des dimensions de QR dans les directions xy et xz respectivement. Les potentiels de confinement radial (ρ) et axial (z) sont présentés dans (d) et (e) respectivement. ……..…… 93

Figure V.2 - Energie de liaison de l'exciton en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de QR, pour trois valeurs du $R_1(0.3;\ 0.6\ \&\ 1.0a_{ex})$……..……..…….. 100

Figure V.3 - Energie de liaison de l'exciton en fonction de la hauteur H de QR, pour trois valeurs du $R_1(0.3;\ 0.6\ \&\ 1.0\ a_{ex})$……...…… 101

Figure V.4 - Energie de liaison de l'exciton en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de QR, pour différentes valeurs de la pression hydrostatique ($P = 0;\ 2;\ 3\ \&\ 4\ GPa$) 102

Figure V.5 - Energie de liaison de l'exciton en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de QR, pour différentes valeurs de la température ($T = 0;\ 200;\ 300\ \&\ 500\ K$). …. 103

Figure V.6 - Energie de liaison de l'exciton en fonction de la hauteur H de QR, pour différentes valeurs de pression hydrostatique ($P = 0;\ 2;\ 3\ \&\ 4\ GPa$). ……. 104

Figure V.7 - Energie de liaison de l'exciton en fonction de la hauteur H de QR, pour différentes valeurs de températures ($T = 0;\ 200;\ 300\ \&\ 500\ K$). ……... 104

Figure V.8 - Energie d'émission interbande de l'exciton en fonction de la hauteur H de système QR pour trois valeurs de la concentration d'aluminium ($x = 0.15;\ 0.3\ \&\ 0.45$). …… 105

Figure V.9 - Energie d'émission interbande de l'exciton en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de QR, pour différentes valeurs du pression hydrostatique ($P = 0;\ 2;\ 3\ \&\ 4\ GPa$). …… 106

Figure V.10 - Energie d'émission interbande de l'exciton en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de QR, pour différentes valeurs de températures ($T = 0;\ 200;\ 300\ \&\ 500\ K$). …… 107

Figure V.11 - Energie de liaison de l'exciton à l'état fondamental ($1s$) et premier état excité ($2s$) en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de système QR. L'encart montre l'énergie de liaison à l'état $1s$ et $2s$ fonction de la hauteur H de QR à $T = 0\ K\ \&\ P = 0\ GPa$. ……..…… 108

Figure V.12 - Energie de liaison de l'exciton à l'état fondamental ($1s$) et premiers état excité ($2s$) en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de système QR, pour $P =$

0 GPa (a), $P = 2\ GPa$ (b), $P = 3\ GPa$ (c) et $P = 5\ GPa$ (d) à $T = 0\ K$ et pour les paramètres fixes suivantes $R_1 = 0.3\ a_{ex}$ et $H = 1.0\ a_{ex}$. …….. 109

Figure V.13 - Energie de liaison de l'exciton à l'état fondamental $(1s)$ et premiers état excité $(2s)$ en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de système QR, pour $T = 0\ K$ (a), $T = 200\ K$ (b), $T = 300\ K$ (c) et $T = 500\ K$ (d) à $P = 0\ GPa$ et pour les paramètres fixes suivantes $R_1 = 0.3\ a_{ex}$ et $H = 1.0\ a_{ex}$. 110

Liste des tableaux

Tableau I.1 - Énergie de la bande interdite E_g, masse réduite μ, énergie de liaison E_b^{ex} et rayon de Bohr des excitons dans quelques semi-conducteurs à basse température. …… 18

Tableau III.1 - Constantes physiques caractérisant le GaN utilisées dans notre calcul. ……. 57

Tableau IV.1 - Constantes physiques caractérisant le GaN utilisées dans notre calcul. ……. 81

Tableau V.1 - Constantes physiques caractérisant le $GaAs$ utilisées dans notre calcul. …..... 99

Résumé

Le travail de ce mémoire porte sur l'étude théorique des propriétés électroniques et optiques d'une impureté donneur faiblement liée et d'un exciton confiné dans un anneau quantique (QR) soumis à l'effet des perturbations extérieures. Les calculs ont été effectués via la méthode variationnelle dans le cadre de l'approximation de la masse effective. Dans un premier temps, nous avons examiné les effets de la variation des paramètres géométriques du QR (la hauteur H et l'épaisseur radiale ΔR), la position de l'impureté, la non parabolicité (NP) de la bande de conduction et de l'interaction de l'électron avec les phonons optiques longitudinaux (LO) volumiques sur l'énergie de liaison (E_b), la susceptibilité diamagnétique (χ_{dia}) et la polarisabilité (α_p) d'une impureté confinée dans un QR à base de wurtzite $GaN/Ga_{1-x}Al_xN$ en présence d'un champ électrique externe appliqué suivant la direction z. De plus, nous avons examiné, dans le cas d'un potentiel de confinement infini, l'effet combiné de la NP de la bande de conduction et la correction polaronique sur l'E_b et la χ_{dia}. Nous avons montré que : l'effet de la NP et la correction polaronique entraînent une augmentation de l'énergie de liaison de l'impureté, en particulier lorsque l'impureté est localisée au centre de QR. La susceptibilité diamagnétique χ_{dia} est très sensible à l'effet de la NP de la bande de conduction et de la correction polaronique, en particulier lorsque l'impureté est localisée au centre du système QR. D'autre part, nous avons constaté que pour un fort confinement, la α_p est insensible à l'effet du polaron, alors que pour le régime de confinement intermédiaire et faible, l'effet du polaron tend à diminuer la α_p. Dans un second temps, nous avons développé une étude théorique sur les propriétés optoélectroniques d'un exciton confiné dans le QR à base de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ sous les effets de la pression hydrostatique (P) et de la température (T) en calculant l'énergie de liaison à l'état fondamental E_b^{1s}, premier état excité E_b^{2s} et l'énergie d'émission interbande E_{ph}. Nous avons trouvé que E_b^{1s}, E_b^{2s} et E_{ph} augmentent avec la pression, tandis qu'elles diminuent avec la température. Nous avons également constaté que pour un confinement fort, E_{ph} augmente avec la concentration de l'aluminium, et pour un faible confinement, elle devient indépendante de la hauteur de la barrière de potentiel de confinement.

Mots clé : Impureté donneur; exciton; polaron; anneau quantique; propriétés optoélectroniques; énergie de liaison; énergie d'émission interbande; susceptibilité diamagnétique; polarisabilité; champ électrique; non parabolicité de la bande de conduction; pression hydrostatique; température.

Abstract

The work of this thesis focuses on the theoretical study of the electronic and optical properties of a shallow donor impurity and of an exciton confined in a quantum ring (QR) under the effect of external perturbations. The calculations have been made by means of the variational method within the framework of the effective mass approximation. As a first step, we examined the effects of the variation of the geometric parameters of the QR (height H, radial thickness ΔR), the position of impurity, the conduction band non-parabolicity (NP) and the interaction of electron with the bulk longitudinal optical (LO) phonon on the binding energy (E_b), the susceptibility diamagnetic (χ_{dia}) and the polarizability (α_p) of a shallow donor impurity confined in in a wurtzite $GaN/Ga_{1-x}Al_xN$ QR in the presence of an applied external electric field in the $z-$direction. Moreover, we have investigated the combined effect of conduction band NP and polaronic correction on the E_b and the χ_{dia} in the case of an infinite confining potential. We have shown that the influences of the conduction band NP and polaron yield an increase of the E_b particularly for an on-center donor impurity. The susceptibility diamagnetic χ_{dia} is very sensitive to the effect of conduction band NP and polaronic correction, especially when the impurity is located in the center of the QR system. Also, we have found that for the strong confinement, the α_p is insensitive to the polaron effect, while, for the intermediate and the weak confinement, the effect of the polaron tends to diminish the α_p. Secondly, we developed a theoretical study on the optoelectronic properties of an exciton confined in the QR based on $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ under the influence of the external perturbations namely, hydrostatic pressure (P) and the temperature (T) by calculating the binding energy of the ground state E_b^{1s}, first excited state E_b^{2s} and the interband emission energy E_{ph}. We have observed that the pressure leads to an increasing of the E_b^{1s}, E_b^{2s} and E_{ph}, and the latter quantities are decreasing with temperature. We also found that for small ring height, E_{ph} increases with the aluminum concentration, and for larger QR height, it becomes independent on the barrier height.

Keywords: Donor impurity; exciton; polaron; quantum ring; optoelectronic properties; binding energy; interband emission energy; susceptibility diamagnetic; polarizability; electric field; conduction band non-parabolicity; hydrostatic pressure; temperature.

Table des matières

Introduction générale 1
Références 5

Chapitre I : Matériaux semi-conducteurs III-V : concepts théoriques 7

I.1 Introduction 8
I.2 Généralités sur les semi-conducteurs de type III-V 8
I.2.1 Rappels sur les semi-conducteurs 8
I.2.2 Structure cristalline des semi-conducteurs 9
I.2.2.1 Structure zinc blende 9
I.2.2.2 Structure Wurtzite (Hexagonale) 10
I.2.3 Structure de bande des semi-conducteurs 10
I.2.3.1 Origine de la structure des bandes 10
I.2.3.2 Structure des bandes du $GaAs$ 11
I.3 Approximation de la masse effective 12
I.4 Formalisme de la méthode variationnelle 13
I.5 Etat d'impureté 14
I.5.1 Etat d'impureté dans les semi-conducteurs massifs 14
I.5.2 Etat d'impureté dans les systèmes de faibles dimensions 15
I.6 Etat excitonique 16
I.6.1 Etats excitoniques dans les semi-conducteurs massifs 17
I.6.2 Etats excitoniques dans les systèmes de faibles dimensions 18
I.7 Non parabolicité des bandes 19
I.8 Effet du champ électrique sur les états électroniques des semi-conducteurs 20
I.9 Polarisabilité dans les systémes confinés 23
I.10 Etat polaronique 23
I.11 Susceptibilité diamagnétique 23
Références 26

Chapitre II : Etats électroniques d'une particule dans un anneau quantique 28

II.1 Introduction 29
II.2 Méthodes de croissance des anneaux quantiques 29

II.2.1 Croissance partielle 30
II.2.2 Épitaxie par gouttelettes 32
II.2.3 Épitaxie par gouttelettes MBE d'anneaux quantiques $GaAs/AlGaAs$ 32
II.3 Quelques Applications des QRs 34
II.4 Etats d'une particule confinée dans un anneau quantique 35
II.4.1 Hamiltonien effectif 35
II.4.2 Modèle du potentiel de confinement infini 36
II.4.3 Modèle du potentiel de confinement fini 38
II.5 Particule dans un anneau quantique en présence d'un champ électrique 41
II.5.1 Modèle du potentiel de confinement infini 41
II.5.2 Modèle du potentiel de confinement fini 42
Références 45

Chapitre III : Effets du champ électrique, de la non parabolicité de la bande de conduction et du polaron sur l'énergie de liaison d'une impureté donneur confinée dans un anneau quantique 47

III.1 Introduction 48
III.2 Impureté dans un anneau quantique en présence d'un champ électrique 50
III.2.1 Hamiltonien effectif 50
III.2.2 Choix de la fonction d'essai 51
III.2.3 Effet de la non parabolicité de la bande de conduction 54
III.2.4 Energie de liaison de l'impureté 54
III.3 Correction polaronique sur l'énergie de liaison de l'impureté 54
III.3.1 Hamiltonien effectif 54
III.3.2 Fonction d'onde électronique et énergie du polaron 55
III.3.3 Energie de liaison du polaron 56
III.4 Résultats et discussions 57
Conclusion 69
Références 71

Chapitre IV : Effets du paloron et de la non parabolicité de la bande de conduction sur la susceptibilité diamagnétique et la polarisabilité d'une impureté donneur confinée dans un anneau quantique 74

IV.1 Introduction 75
IV.2 Susceptibilité diamagnétique du donneur 78
IV.3 Polarisabilité du polaron 79
IV.4 Résultats et discussions 80
Conclusion 87
Références 88

Chapitre V: Effets de la pression et de la température sur les propriétés électroniques et optiques d'un exciton confiné dans un anneau quantique à base de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ 90

V.1 Introduction 91
V.2 Energie de liaison de l'exciton confiné dans un anneau quantique 94
V.2.1 Hamiltonien du système 94
V.2.2 Choix de la fonction d'essai 96
V.2.3 Energie de liaison de l'exciton 98
V.2.4 Energie de l'émission interbande 99
V.3 Résultats et discussions 99
Conclusion 111
Références 112
Conclusion générale 112

Introduction générale

Les progrès réalisés dans les technologies de fabrication au cours des dernières décennies ont facilité la réalisation de nouvelles nanostructures de semi-conducteurs dont les propriétés sont adaptées à des applications spécifiques. D'autre part, il est possible de limiter le mouvement des porteurs de charges dans ces nanostructures suivant au moins une des dimensions spatiales sur une distance comparable à la longueur d'onde de Broglie. À cette échelle de longueur, les effets de confinement quantique modifient les propriétés électroniques et optiques et des phénomènes quantiques intéressants apparaissent.

Parmi les sujets les plus importants de la physique moderne de l'état solide à l'échelle nanométrique, il y a les hétérostructures de basse dimensionnalité. En 2000, Alferov et Kroemer ont partagé le prix Nobel de physique « pour le développement des hétérostructures à base de semi-conducteurs utilisés en haute vitesse et optoélectronique », avec Killby « pour sa part dans l'invention du circuit intégré ». Il est possible de fabriquer une hétérostructure, en combinant deux matériaux semi-conducteurs avec des bandes interdites différentes, pour avoir un décalage de bandes souhaitées. Le développement de la physique et de la technologie des hétérostructures à semi-conducteurs a abouti à des réalisations remarquables. Actuellement, la plupart des lasers à double hétérostructure sont basés sur des structures à puits quantiques (QWs), où le mouvement des porteurs est limité à deux directions. Cependant, comme la physique et les applications de ces structures à puits quantiques ont rapidement progressé, la recherche s'est orientée vers des structures de dimensionnalité encore plus faible, comme les structures unidimensionnelles et à dimension zéro, qui sont nommés, respectivement, les fils (QWWs) et les boîtes quantiques (QDs). Ces structures permettent de découvrir de nombreux nouveaux phénomènes et offrent des applications potentielles pour la future technologie.

Le confinement tridimensionnel des porteurs de charge dans une QD transforme le spectre optique continu d'un semi-conducteur massif en un spectre de taille ajustable, de type atomique, comportant une série de pics nets associés à des transitions électroniques discrètes. De plus, le confinement réduit les effets des perturbations externes qui peuvent limiter la durée de vie radiative des résonances excitoniques [1]. Cette durée peut être aussi longue que des nanosecondes à basse température. Ces propriétés électroniques et optiques uniques des QDs ont été exploitées, pour une large gamme d'applications, y compris l'électronique quantique et le traitement de l'information quantique, les communications optiques, les technologies d'affichage, la récupération d'énergie solaire, etc [2].

Avec l'amélioration rapide de la technologie de micro-fabrication des nanostructures, le dopage par des impuretés dans les matériaux semi-conducteurs est devenu important pour contrôler les propriétés électroniques et optiques des dispositifs microélectroniques. En outre, ces dernières années, en utilisant le mode de croissance Stranski-Krastanov, des nanostructures semi-conductrices de différentes dimensions et formes ont été fabriquées expérimentalement [3-7] par des techniques d'épitaxie par faisceau moléculaire. Simultanément, de nombreux travaux théoriques ont été consacrés à l'étude des propriétés des états d'impureté dans divers systèmes de confinement [8-18]. Ces travaux ont déterminé l'énergie de liaison des impuretés confinés dans des nanostructures de semi-conducteurs, telles que les puits quantiques [8-11], les fils quantiques [12-14] et les boîtes quantiques [15-18] en fonction de la largeur du puits, du rayon du fil, du rayon de la boîte et de la position de l'impureté du type donneur dans différents potentiels de confinement (infini et fini). Donc, l'étude des états d'impuretés et de leurs effets sur les propriétés optoélectroniques des nanostructures revêt une importance non seulement scientifique mais aussi appliquée, majeure.

La principale difficulté, pour étudier théoriquement les propriétés électroniques et optiques d'une impureté donneur ou d'un exciton confiné dans les systèmes confinés quantiques, consiste à la résolution de l'équation de Schrödinger. Donc, des méthodes d'approximation, telles que la variationnelle [8-18], la diagonalisation de la matrice [19-20], les éléments finis [21-25] doivent être utilisées. Bien que ces techniques donnent des résultats cohérents avec les données expérimentales, dans la plupart des cas. Elles impliquent beaucoup de travail de calcul, et la précision de la méthode variationnelle dépend, dans une large mesure, de la forme de la fonction d'onde d'essai.

Depuis la fabrication du premier anneau quantique (QR) de type $GaAs/AlGaAs$ [26-27], cette structure a présenté des comportements fascinants, tels que des propriétés électroniques et optiques intéressantes. Le QR est une nouvelle structure de confinement, qui est modélisée par une boîte quantique cylindrique contenant une cavité interne axialement symétrique, fait l'objet de la présente thèse. Le système QR se caractérise par des propriétés différentes de celles des autres nanostructures et il est devenu un outil utile pour l'observation des phénomènes d'interférence, tels que l'effet Aharonov-Bohm induit par le champ magnétique [28]. Grâce à des progrès dans les technologies de croissance des matériaux, tels que la technique d'épitaxie par gouttelettes et la technique d'épitaxie par faisceau moléculaire [26,27,29] on est parvenu à la réalisation et le développement des anneaux quantiques et des doubles anneaux quantiques concentriques (DQRs). Le nombre croissant de travaux expérimentaux [30-34] et théoriques [35-41] a conduit à un intérêt croissant pour ces nanostructures de semi-conducteurs. Mano et

al. [30-31] ont été les premiers à rapporter la réalisation de ce type de structures en utilisant des techniques de croissance épitaxiale en gouttelettes. La structure électronique et les propriétés optiques du QR à base d'arsenic, sous des influences externes, ont été largement étudiées. Li et Xia [35] ont étudié les états électroniques d'un QR de type $InAs\ /\ GaAs$ dans le cadre de la théorie de la fonction enveloppe de masse effective en employant la méthode de diagonalisation matricielle. De plus, Baghramyan et al. [38] ont étudié les effets de la pression hydrostatique, le champ électrique et le champ magnétique sur l'énergie de liaison de l'impureté donneur hydrogénoïde dans les QRs. Ces travaux montrent que les niveaux d'énergie des électrons dépendent sensiblement de l'épaisseur radiale, de la hauteur du QR et de la position de l'impureté.

D'autre part, dans les semi-conducteurs polaires de faibles dimensions, la contribution de l'interaction des porteurs de charges avec les phonons-optiques-longitudinaux volumique (LO) est relativement importante, et par conséquent cette contribution devient un facteur remarquable dans les phénomènes de transport [42-43]. À notre connaissance, il existe peu des travaux théoriques concernant l'étude de l'effet polaronique sur les propriétés optoélectroniques d'un porteur de charge confiné dans le système QR.

Notre travail consiste à étudier les effets de l'application du champ électrique sur les propriétés optoélectroniques des impuretés confinées dans le QR. Nous allons, en particulier, déterminer l'énergie de liaison et la susceptibilité diamagnétique ainsi que la polarisabilité, pour différentes positions de l'impureté dans les potentiels de confinement de profondeur infinie et finie. Nous nous intéressons aussi à l'effet de polaron et de la non parabolicité de la bande de conduction sur les propriétés électroniques et optiques dans la structure QR. Nous allons examiner aussi les propriétés optoélectroniques de l'exciton confiné dans le QR sous l'effet des perturbations extérieures : la température et la pression hydrostatique. Les calculs ont été effectués dans le cadre de l'approximation de la masse effective par la méthode variationnelle.

Ce mémoire est organisé de la façon suivante : Dans le premier chapitre, nous présentons les propriétés structurales et électroniques des matériaux semi-conducteurs principalement des groupes III-V. Ces propriétés sont présentées pour les matériaux massifs et les hétérostructures de basse dimensionnalité. Nous présentons ensuite les approximations et les hypothèses utilisées pour calculer la fonction d'onde d'un électron et l'énergie de liaison d'une impureté peu profonde.

Dans le second chapitre, nous allons exposer quelques méthodes de croissance pour la synthèse des QRs, ainsi que leurs champs d'application. Ensuite, nous déterminons les

fonctions d'onde électronique d'une particule confinée dans le QR, en présence et en absence d'un champ électrique dans les deux types de potentiels de confinement infinis et finis.

Le troisième chapitre sera consacré à l'étude des effets de la variation des paramètres géométriques du QR, à la non parabolicité de la bande de conduction et de l'interaction électron-LO phonon volumique sur l'énergie de liaison d'une impureté donneur hydrogénoïde peu profonde confinée dans un QR à base de $GaN/Ga_{1-x}Al_xN$ en présence d'un champ électrique externe appliqué suivant la direction z.

Dans le quatrième chapitre, nous calculerons la susceptibilité diamagnétique et la polarisabilité d'une impureté confinée dans un QR. L'effet combiné de la non parabolicité de la bande de conduction et du polaron sur la susceptibilité diamagnétique dans le cas de potentiel de confinement infini sera aussi examiné.

Dans le cinquième chapitre, nous allons calculer l'énergie de liaison à l'état fondamental et du premier état excité et l'énergie d'émission interbande d'un exciton confiné dans le QR à base de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ en fonction des paramètres internes (l'épaisseur radiale ΔR et la hauteur H) et sous les effets de la pression hydrostatique et de la température.

Références

[1] Maurizia Palummo, Marco Bernardi and Jeffrey Grossman, Nano Letters **5**, 15 (2015).

[2] A. A. Chistyakov, M. A. Zvaigzne, V. R. Nikitenko, A. R. Tameev, I. L. Martynov, and O. V. Prezhdo, Journal of Physical Chemistry Letters **17**, 8 (2017).

[3] D. Fuster, B. Alen, L. Gonzalez, Y. Gonzalez and J.M. Pastor, J. Cryst. Growth **301**, 705 (2007).

[4] T. Hashimoto, R. Oshima and S. Y. Okada, J. Cryst. Growth **821**, 301 (2007).

[5] T. Raz, D. Ritter and G. Bahi, Appl. Phys. Lett. **82**, 1706 (2003).

[6] S.S. Huang, Z.C. Niu, Z.D. Fang, H.Q. Ni and Z. Gong, Appl. Phys. Lett. **89**, 031921 (2006).

[7] D. Granados and J.M. Garcia, Appl. Phys. Lett. **82**, 2401 (2003).

[8] R.L. Greene and K.K. Bajaj, Solid State Communications **45**, 825 (1983).

[9] S. Chaudhuri, Phys. Rev. B **28**, 4480 (1983).

[10] S. Baskoutas and A.F. Terzis, Eur. Phys. J. B **69**, 237 (2009).

[11] A. Sali, M. Fliyou, L. Roubi and H. Loumrhari, J. Phys. : Condens. Matter **11**, 2427 (1999).

[12] N.P. Montenegro, J. López-Gondar and L.E. Oliveira, Phys. Rev. B **43** (1991) 1824.

[13] A. Sali, M. Fliyou, H. Satori and H. Loumrhari, J. of Phy. Chem. of Solids **64**, 31 (2003).

[14] A. Montes and C.A. Duque, Journal of Applied Physics **81**, 7890 (1997).

[15] N.P. Montenegro and S.T. Pérez-Merchancano, Phys. Rev. B **46**, 9780 (1992).

[16] C. Bose, Journal of Applied Physics **83**, 3089 (1998).

[17] N.V. Lien and N.M. Trinh J. Phys.: Condens. Matter **13**, 2563 (2001).

[18] A. John Peter, Phys. E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **28**, 225 (2005).

[19] G. Rezaei, N.A. Doostimotlagh and B. Vaseghi, Phys. E: Low-dim. Sys. Nano. **43**, 1087 (2011).

[20] A.A. Alia, M.K. Elsaid and A. Shaer, J. of Taibah University for Science **13**, 687 (2019).

[21] R. Khordad, H. Bahramiyan and S.A. Mohammadi, Chin. J. of Physics **54**, 20 (2016).

[22] A. Sali, A. Rezzouk, N. Es-Sbai and M. Ouazzani-Jamil, Indian Journal of Pure & Applied Physic **57**, 483 (2019).

[23] A. Sali, J. Kharbach, A. Rezzouk and M. Ouazzani-Jamil, Superlattices and Microstructures **104**, 93 (2017).

[24] A. Sali and H. Satori, Superlattices and Microstructures **69**, 38 (2014).

[25] H. Satori and A. Sali, Phys. E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **48**, 171 (2014).

[26] Z. Gong, Z.C. Niu, S.S. Huang, Z.D. Fang, B.Q. Sun and J.B. Xia, App. Phys. Lett. **87**, 093116 (2005).

[27] M. Dejarld, K. Reyes, P. Smereka and J.M. Millunchick, App. Phys. Lett. **102**, 133107 (2013).

[28] Z. Barticevic, M. Pacheco and A. Latge, Phys. Rev. B **62**, 6963 (2000).

[29] M. Abbarchi, L. Cavigli, C. Somaschini, S. Bietti, M. Gurioli, A. Vinattieri and S. Sanguinetti, Nanoscale Research Letters **6**, 569 (2011).

[30] T. Mano, T. Kuroda, S. Sanguinetti, T. Ochiai, T. Tateno, J. Kim, T. Noda, M. Kawabe, K. Sakoda, G. Kido and N. Koguchi, Nano. Lett. **5**, 425 (2005).

[31] T. Kuroda, T. Mano, T. Ochiai, S. Sanguinetti, K. Sakoda, G. Kido and N. Koguchi, Phys. Rev. B **72**, 205301 (2005).

[32] J.H. Lee, Z.M. Wang, Z.Y. Abuwaar, N.W. Strom and G.J. Salamo, Nanotechnology **17**, 3973 (2006).

[33] K. Kuroda, T. Kuroda, K. Sakoda, K. Watanabe, N. Koguchi and G. Kido, Appl. Phys. Lett. **88**, 124101 (2006).

[34] S. Sanguinetti, M. Abbarchi, A. Vinattieri, M. Zamfirescu, M. Gurioli, T. Mano, T. Kuroda and N. Koguchi, Phys. Rev. B **77**, 125404 (2008).

[35] S.S. Li and J.B. Xia, Journal of Applied Physics **89**, 3434 (2001).

[36] G. Wang and P. Zhang, J. Appl. Phys. **103**, 063713 (2008).

[37] G. Wang and P. Zhang, International Journal of Modern Physics B **25**, 4687 (2011).

[38] M.G. Barseghyan, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque, Eur. Phys. J. B **84**, 265 (2011).

[39] A. Shahbandari, M.A. Yeranosyan and A.L. Vartanian, Superlattices Microst. **57**, 85 (2013).

[40] H.M. Baghramyan, M.G. Barseghyan, A.A. Kirakosyan, D. Laroze and C.A. Duque, Physica B **449**, 193 (2014).

[41] K. El-Bakkari, A. Sali, E. Iqraoun, A. Rezzouk, N. Es-Sbai and M. Ouazzani Jamil, Physica B: Condensed Matter **538**, 85 (2018).

[42] B. El Amrani, M. Fliyou, M. Barnoussi and M. Bouayad, physica status solidi (b) **219**, 39 (2000).

[43] M. Fliyou, S. Moukhliss, B. El Amrani, physica status solidi (b) **207,** 2 (2000).

Chapitre I

Matériaux semi-conducteurs III-V : concepts théoriques

Sommaire

I.1 Introduction 8
I.2 Généralités sur les semi-conducteurs de type III-V 8
I.2.1 Rappels sur les semi-conducteurs 8
I.2.2 Structure cristalline des semi-conducteurs 9
I.2.2.1 Structure zinc blende 9
I.2.2.2 Structure Wurtzite (Hexagonale) 10
I.2.3 Structure de bande des semi-conducteurs 10
I.2.3.1 Origine de la structure des bandes 10
I.2.3.2 Structure des bandes du $GaAs$ 11
I.3 Approximation de la masse effective 12
I.4 Formalisme de la méthode variationnelle 13
I.5 Etat d'impureté 14
I.5.1 Etat d'impureté dans les semi-conducteurs massifs 14
I.5.2 Etat d'impureté dans les systèmes de faibles dimensions 15
I.6 Etat excitonique 16
I.6.1 Etats excitoniques dans les semi-conducteurs massifs 17
I.6.2 Etats excitoniques dans les systèmes de faibles dimensions 18
I.7 Non parabolicité des bandes 19
I.8 Effet du champ électrique sur les états électroniques des semi-conducteurs 20
I.9 Polarisabilité dans les systémes confinés 23
I.10 Etat polaronique 23
I.11 Susceptibilité diamagnétique 23
Références 26

I.1. Introduction

Les semi-conducteurs III-V provoquent un intérêt, dans les dernières années, tant pour leurs propriétés fondamentales que pour les applications possibles en optoélectronique. La connaissance de ces propriétés se révèle essentielle, mais il faut forcément savoir que ces propriétés macroscopiques sont très reliées aux structures de base de ces matériaux, c.à.d. qu'il faut descendre jusqu'à l'échelle atomique.

Dans un premier temps, nous faisons des rappels sur les propriétés générales des semi-conducteurs III-V massifs, à savoir leurs différentes structures cristallines, ainsi que leurs propriétés électroniques, ensuite nous rappelons dans un contexte bien connu les modèles de résolution et d'approximation qui seront utilisés, par la suite, dans les systèmes confinés.

Dans un deuxième temps, nous présentons les notions de confinement ou la dimensionnalité et ses effets sur les propriétés des matériaux dans les systèmes confinés. Après avoir discuté les états d'impureté ainsi que le concept d'exciton et ses différents types qui existent puis ses caractéristiques principales, nous donnons ensuite les solutions du problème d'une impureté donneur et d'un exciton dans les matériaux massifs.

I.2. Généralités sur les semi-conducteurs de type III-V

I.2.1. Rappels sur les semi-conducteurs

Les semi-conducteurs III-V sont des matériaux constitués d'un ou plusieurs éléments trivalents appartenant à la III^{ème} colonne du tableau périodique de Mendeleïev et d'éléments pentavalents appartenant à la V^{ème} colonne.

Les sortes des semi-conducteurs III-V composés, les plus typiques sont :

- **Semi-conducteurs binaires** : ce sont les composés de type III-V et II-VI où la règle d'octet est vérifiée. A titre d'exemples pour les matériaux III-V, on trouve : Arséniure de gallium ($GaAs$) est un émetteur de lumière meilleur que le Si, Nitrure de gallium (GaN), Phosphure de gallium (GaP), Arséniure d'aluminium ($AlAs$), Antimoniure d'aluminium ($AlSb$), etc.
- **Semi-conducteurs ternaires** : ces matériaux se composent de trois éléments chimiques, deux éléments de même groupe (III ou V) et un élément d'un autre groupe (V ou III, respectivement). A titre d'exemple, on cite : Arséniure de gallium-aluminium ($AlGaAs$) qui a été utilisé dans les dispositifs optoélectroniques comme les diodes lasers [1] et les transistors [2]; Arséniure-nitrure de gallium ($GaAsN$), Arséniure-phosphure de gallium ($GaAsP$), Nitrure de gallium-aluminium ($AlGaN$), Phosphure de gallium-aluminium ($AlGaP$), etc.

– **Semi-conducteurs quaternaires** : ce sont des alliages composés de quatre éléments et sont de deux types :

- Deux éléments de même colonne III et deux éléments d'une autre colonne V.
- Trois éléments de même colonne III ou V et un élément d'une autre colonne V ou III, respectivement.

A titre d'exemple, on cite : Arséniure-nitrure de gallium-aluminium ($AlGaAsN$), Arséniure-nitrure de gallium-indium ($InGaAsN$), Arséniure-nitrure d'aluminium-indium ($InAlAsN$), Arséniure-antimoniure-nitrure de gallium ($GaAsSbN$).

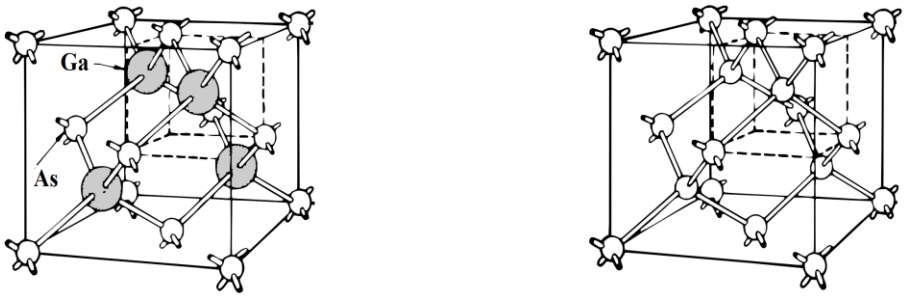
Par la suite, nous exposons quelques propriétés concernant les semi-conducteurs III-V de type binaires.

I.2.2. Structure cristalline des semi-conducteurs

Habituellement, les semi-conducteurs III-V se cristallisent dans l'une des structures suivantes : structure Zinc blende (Cubique), structure Wurtzite (Hexagonale) et structure diamant [3-4].

I.2.2.1. Structure zinc blende

Si deux atomes différents des semi-conducteurs s'ordonnent selon un réseau de Bravais cubique, à face centrée (CFC), dite structure de type zinc-blende. Ces semi-conducteurs appartiennent, dans ce cas, au groupe du tétraèdre T_d, c'est typiquement le cas des matériaux III-V tels que $GaAs$, $AlAs$, InP,$HgTe$ et $CdTe$ où les atomes du groupe III-cations Ga ou In occupent les sites de coordonnées $(-1/8, -1/8, -1/8)$ et les atomes du groupe V-anions As ou P sont situés aux $(+1/8, +1/8, +1/8)$ comme illustré sur la figure I.1.a [5]. Si les deux atomes sont similaires (Si, Ge,C), cette structure est celle du diamant. Les semi-conducteurs qui cristallisent dans ce système appartiennent au groupe de l'octaèdre O_h (figure I.1.b).



(a) **(b)**

Figure I.1 : Structure cristalline de Zinc-Blende (a) et de Diamant (b).

I.2.2.2. Structure Wurtzite (Hexagonale)

Les nitrures d'éléments III peuvent se cristalliser sous la forme hexagonale, appelée structure Wurtzite (voir figure I.2) et qui est plus stable thermodynamiquement que la structure de zinc-blende. Dans cette structure, le motif est composé de 2 atomes différents. Les deux atomes occupent les deux positions $(0, 0, 0)$ et $(1/3, 2/3, 1/2)$. Cette structure est définie par les paramètres a et c (voir figure I.2).

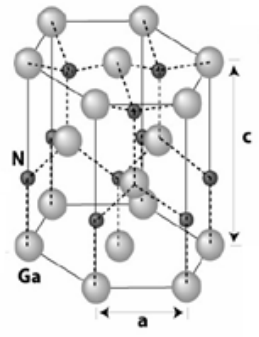


Figure I.2 : Structure Wurtzite des nitrures GaN [6].

I.2.3. Structure de bande des semi-conducteurs

La compréhension de la structure de bande d'un semi-conducteur est nécessaire pour la réalisation des dispositifs électroniques.

I.2.3.1. Origine de la structure des bandes

La détermination des structures des bandes requiert la résolution de l'équation de Schrödinger qui permet de déterminer l'énergie en fonction du vecteur d'onde k. Considérons un cristal sans impureté (cristal idéal) et nous supposons que les noyaux sont fixés à leurs sites de réseau (approximation adiabatique), l'Hamiltonien d'un électron de la couche externe dans le réseau est :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + V(r) \qquad \text{(I. 1)}$$

où m_e est la masse de l'électron libre et $V(r)$ le potentiel périodique avec une périodicité égale à la constante du réseau. Le théorème de Bloch nous dit que la solution de l'équation de Schrödinger associée à l'Hamiltonien (I.1) peut s'écrire sous la forme :

$$\phi_{nk}(r) = e^{ikr}u_{nk}(r) \qquad \text{(I. 2)}$$

où $u(r)$est une fonction ayant la même périodicité que le réseau.

Lorsqu'on fait varier n et k, une série discrète d'intervalles continus de valeurs permises de l'énergie $E_{nk}(r)$ est présentée, qui constitue le spectre électronique d'un électron ayant une impulsion k. Ces intervalles sont normalement appelés bandes électroniques du cristal et sont

représentés dans la première zone de Brillouin (Z.B). Alors, il s'agit d'une image simplifiée et que de nombreuses propriétés de la structure de la bande ne peuvent être expliquées de cette manière simplifiée. Une explication plus précise et plus détaillée peut-être trouvée dans de nombreux articles et livres [7-8].

I.2.3.2. Structure des bandes du GaAs

Dans les composés binaires III-V comme le $GaAs$, il y a 8 électrons extérieurs par unité de cellule qui contribuent aux liaisons chimiques et aux propriétés électroniques. Ces électrons s'hybrident pour former des liaisons tétraédriques entre un type d'atome (Ga) et ses voisins les plus proches (As). En effet, les orbitales de chaque atome (s-like ou p-like) s'hybrident avec une orbitale de l'atome voisin, ce qui produit deux niveaux : un niveau de liaison et un niveau d'anti-liaison, en raison du grand nombre de cellules unitaires, ces niveaux s'élargissent en bandes [8]. Les niveaux de liaison sont complètement remplis d'électrons à $T = 0$, et forment les bandes de valence tandis que les niveaux d'anti-liaison forment les bandes de conduction (bande vide). Un des points importants de la structure de bande est la valeur de l'énergie séparant le maximum de la bande valence du minimum de la bande de conduction qui est appelée le "gap" du matériau. Dans le cas de $GaAs$, leur gap correspondent à la même valeur du vecteur d'onde $k = 0$, c'est le centre de zone de Brillouin nommée point Γ. Dans ces matériaux, les transitions entre les bandes de valence et de conduction seront alors, le plus souvent, radiatives. Cette caractéristique leur confère des propriétés optiques remarquables.

Dans la phase cubique et au voisinage du point Γ , la bande de conduction (B.C) est unique, par contre la bande de valence (B.V) est subdivisée au point Γ_8 en deux niveaux, l'un correspond aux bandes de trous lourds (HH) et l'autre aux bandes de trous légers (LH). Le niveau Γ_7 correspond à la bande de trous "split-off" (SH) décalée de Δ_{SO} par rapport à Γ_8. Cette séparation est due à l'interaction spin-orbite (bande des trous lourds HH et bande des trous légers LH).

En absence de couplage spin-orbite, les trois bandes de valence (qui proviennent de la liaison des orbitales p) sont dégénérées au point Γ. Le couplage spin-orbite soulève cette dégénérescence six fois et donne lieu à un quadruplet et un doublet.

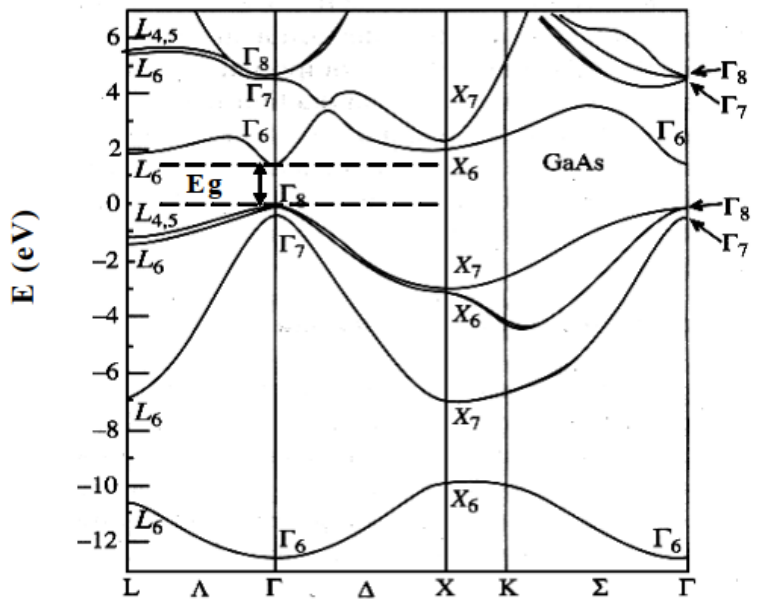


Figure I.3 : Structure de bande électronique du $GaAs$ dont la bande interdite est reportée en pointillés ; $E_g = 1.42\ eV$ à $300\ K$ [9].

I.3. Approximation de la masse effective

L'approximation de la masse effective (Théorie $k.p$ à une bande) dans les semi-conducteurs permet de tenir en considération, principalement, des interactions entre les différentes bandes d'énergies. La majorité des modèles de structure électronique de nanomatériaux reposent sur l'approximation de la masse effective, dans laquelle la détermination des états d'un porteur de charge confiné dans un nano-cristal se fait grâce à la méthode de la fonction enveloppe [4] au voisinage du centre de Z.B, et les autres états s'obtiennent par périodicité et rabattement dans cette zone.

Généralement, la solution de l'équation de Schrödinger se fait au voisinage de la première Z.B et les autres valeurs de $E_n(\vec{k})$ dans l'espace des $\vec{k}$ se déterminent grâce à la périodicité et au rabattement dans cette zone, où :

$$E_n(\vec{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \qquad \text{(I. 3)}$$

avec m^* est la masse effective d'un porteur de charge qui dépend de la bande dans laquelle il se trouve. Elle est aussi proportionnelle à l'inverse de la courbure des bandes, c'est-à-dire :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\left(\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}\right) \qquad \text{(I. 4)}$$

Habituellement, les masses effectives des porteurs sont plus légères que la masse de l'électron libre dans le vide m_0. Par exemple, pour le $GaAs$ la masse effective de l'électron est $m_e^* = 0.067m_0$, la masse du trou lourd est $m_{hh}^* = 0.45m_0$ [10].

I.4. Formalisme de la méthode variationnelle

Dans la plupart des applications de la mécanique quantique, on doit faire appel à des diverses méthodes d'approximation pour la résolution de l'équation de Schrödinger. La méthode variationnelle est la plus utilisée [11-12].

On va étudier un cas simple pour l'application de la méthode variationnelle. Soit E_0 l'énergie de l'état fondamental d'un Hamiltonien H, $|0\rangle$ le vecteur propre correspondant :

$$H|0\rangle = E_0|0\rangle \tag{I. 5}$$

Soit $|\varphi\rangle$ un vecteur unitaire des états de l'espace de Hilbert, écrivons la valeur moyenne de H dans l'état $|\varphi\rangle$:

$$\langle\varphi|H|\varphi\rangle = \sum_{n,m} c_m^* c_n \langle m|H|n\rangle = \sum_n E_n |c_n|^2 \tag{I. 6}$$

on en déduit :

$$\langle\varphi|H|\varphi\rangle - \langle 0|H|0\rangle = \sum_n (E_n - E_0)|c_n|^2 \geq 0 \tag{I. 7}$$

puisque $|c_n|^2 = 1$ et $E_n \geq E_0$. La méthode variationnelle consiste à construire un vecteur d'essai $|\varphi(\alpha)\rangle$ dépendant d'un paramètre α ou de plusieurs paramètres α_i variés (d'où le nom de « méthode variationnelle »). Le résultat (I.7) montre que :

$$\langle H\rangle(\alpha) = \langle\varphi(\alpha)|H|\varphi(\alpha)\rangle \geq E_0 \tag{I. 8}$$

Le meilleur résultat, pour E_0 dans le cadre de la paramétrisation choisie, sera obtenu en cherchant le minimum de $H(\alpha)$:

$$\frac{d}{d\alpha}\langle H\rangle(\alpha)\Big|_{\alpha=\alpha_0} = 0 \tag{I. 9}$$

et une borne supérieure sur E_0 est ;

$$E_0 \leq \langle\varphi(\alpha_0)|H|\varphi(\alpha_0)\rangle \tag{I. 10}$$

Pour comparer deux choix différents de fonctions d'essai ($|\varphi(\alpha)\rangle$ et $|\tilde{\varphi}(\beta)\rangle$), on compare les deux minima et le choix préférable est celui qui donne la valeur minimale de H. Pour un vecteur dépendant de plusieurs paramètres variationnels $\alpha_1, \ldots \alpha_p$, on cherche les valeurs

optimales de ces paramètres jusqu'à atteindre le minimum de $\langle H \rangle$, c'est-à-dire qu'on applique les conditions :

$$\frac{d}{d\alpha_i}\langle H\rangle(\alpha_1, \dots \alpha_p)\Big|_{\alpha_j=\alpha_{j0}} = 0 \qquad (\text{I. } 11)$$

I.5. Etat d'impureté

Le plus important progrès dans le domaine du développement des semi-conducteurs est la possibilité d'incorporer des impuretés dans le réseau en substituant un atome du réseau cristallin par un autre atome de type différent (dopage). L'introduction des impuretés dans le cristal donne naissance à des niveaux d'énergie situés dans la bande interdite. La position de ces niveaux dépend du type d'impureté (donneur ou accepteur) ou si ces impuretés sont profondes ou peu profondes. Les niveaux impuretés peu profondes sont situés près des bandes permises (bande de conduction et bande de valence), par contre les impuretés profondes sont situées presque au milieu du gap. Si on obtient des électrons libres en introduisant des atomes étrangers au cristal en plus de ceux nécessaire pour établir les liaisons chimiques avec les atomes voisins du réseau, on nomme ce type d'atomes incorporés des impuretés donneurs. D'autre part, il est pareillement possible d'introduire des atomes d'impuretés dans le réseau qui ont un déficit d'un électron. Ce type d'impureté accepte un électron afin de réaliser une liaison avec le cristal semi-conducteur et produisant un état vide dans la bande de valence (trou). Ce genre d'atomes sont connus sous le nom d'accepteurs. Alors, ce trou, créé à l'intérieur du réseau, peut participer à la conductivité.

I.5.1. Etats d'impuretés dans les semi-conducteurs massifs

Pour les matériaux macroscopiques ou massifs, les porteurs de charge se déplacent librement dans les trois directions de l'espace. Ici, nous étudions le cas d'un donneur peu profond où les électrons sont faiblement liés, afin d'appliquer avec assez de réussite l'approximation de la masse effective. L'équation de Schrödinger d'une impureté, du type donneur, peu profonde, dans le potentiel coulombien s'écrit :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon r}\right)F(\vec{r}) = EF(\vec{r}) \qquad (\text{I. } 12)$$

où ϵ est la constante diélectrique statique et $F(\vec{r})$ la fonction enveloppe. L'équation (I-12) est semblable à celle de l'électron dans l'atome d'hydrogène. Ainsi les états énergétiques du "type hydrogénoïde", qui se situent légèrement en dessous de la B.C, sont donnés par :

$$E_n = -\frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2 n^2} (n = 1,2,3, \ldots \text{ etc.}) \quad \text{(I. 13)}$$

On en déduit l'énergie d'ionisation :

$$E_n = -\frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2} \quad \text{(I. 14)}$$

et le rayon de Bohr effectif:

$$a^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m^* e^2} = \epsilon \frac{m_0}{m^*} a_0 \quad \text{(I. 15)}$$

qui est beaucoup plus grand que le rayon de Bohr a_0. La fonction enveloppe de l'état fondamental est :

$$F_{1s}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} exp(-{}^r/_a) \quad \text{(I. 16)}$$

où a est un paramètre variationnel.

I.5.2. Etats d'impuretés dans les systèmes de faibles dimensions

L'évolution des techniques de croissance des matériaux à travers les techniques d'épitaxie [13-14] permet la réalisation de nouvelles structures à l'échelle nanométrique appelées nanostructure. Dans les matériaux nano-structurés, les porteurs de charge sont confinés dans une, deux ou trois directions de l'espace. Lorsque la taille de ce type de matériau diminue, les propriétés électroniques et optiques de la matière et donc du composant électronique se modifient à cause de confinement quantique. Ce confinement ne se produit que si la taille du matériau est égale ou inférieure à la longueur d'onde de Broglie λ_B, cette distance étant de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres pour les semi-conducteurs usuels, est donnée par :

$$\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m_e^*(E - E_g)}} \quad \text{(I. 17)}$$

Le confinement des porteurs de charge dans une seule direction de l'espace suivant l'axe de croissance et où le mouvement des porteurs est libre dans le plan des couches, a été beaucoup étudié dans des structures du système bidimensionnel ou puits quantique (QW).

L'énergie de l'électron dans ce type de structure est :

$$E_{e,n_z} = \frac{\hbar^2 k_\parallel^2}{2m_e^*} + E_{n_z} \quad \text{(I. 18)}$$

où $k_{\parallel}$ est le vecteur d'onde de l'électron dans le plan (x, y), et E_{n_z} est l'énergie de confinement qui dépend des caractéristiques du QW, comme la hauteur de la barrière (finie ou infinie) et la largeur du puits. L'énergie de liaison d'un électron confiné dans ces structures à potentiel de confinement infini est quatre fois plus grande que celle dans les cas massifs [15] :

$$E_{2D}^{b} = 4E_{3D}^{b} \tag{I. 19}$$

Le confinement des porteurs de charge dans deux directions de l'espace permet la réalisation d'une structure appelée fil quantique (QWW). L'énergie des électrons dans ces types de structures est :

$$E_{e,n} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e^*} + E_{n_y} + E_{n_z} \tag{I. 20}$$

L'énergie de liaison de l'état fondamental d'un électron confiné dans un QWW est 2 à 3 fois celle du QW et 6 fois celle du cas massif [16].

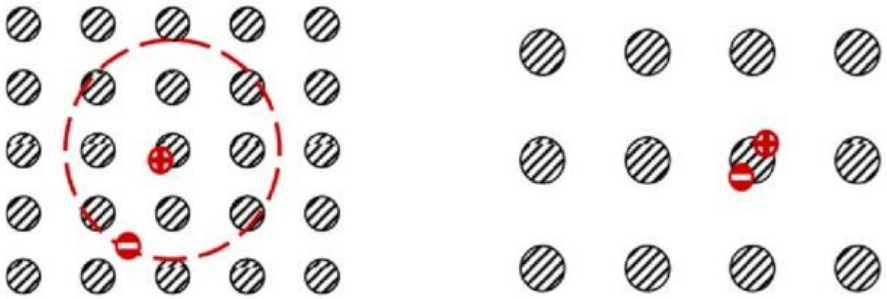
Le confinement des porteurs de charge dans les trois directions de l'espace permet la réalisation d'une structure nommée boîte quantique (QD) ou nano-cristaux. Dans ce cas, le spectre d'énergie de l'électron ne varie plus de manière continue, mais il est entièrement discret comme celui d'un atome. C'est dans cette propriété des boîtes que réside l'importance de leur intérêt pour la réalisation de nombreuses applications.

I.6. Etat excitonique

Quand un électron de la B.V reçoit une énergie supérieure ou égale à l'énergie de gap lors d'une absorption de photon ou d'une excitation thermique, cet électron saute vers la B.C, alors qu'un trou est laissé dans la B.V. D'où une quasi-particule formée par l'électron (charge négative) et le trou (charge positive) qui forment un état lié appelé exciton. Grâce à l'énergie attractive coulombienne de l'exciton, leur énergie sera moindre à celle d'un électron et d'un trou libre. L'exciton peut circuler librement dans le cristal ou interagir avec les défauts du réseau, et dans ce cas on parle d'exciton lié. C'est grâce à cette particule qu'on trouve l'apparition de pics d'absorption intenses dans le gap des matériaux semi-conducteurs.

La durée de vie de l'exciton est de l'ordre de centaines de ps à ns, et un processus peut se manifester quand l'électron retourne à la B.V, en d'autres termes, les électrons et les trous se recombinent et émettent des photons. Ce processus est appelé luminescence et représente le processus opposé de l'absorption. La luminescence est une caractéristique importante de la photoluminescence à basse température.

Lorsque l'interaction entre l'électron et le trou est forte, comme dans le cas des cristaux ioniques, l'exciton est dénommé exciton de Frenkel (Figure I.4.b). Au contraire, dans la majorité des semi-conducteurs où l'interaction coulombienne est faible, l'exciton est appelé l'exciton de Wannier-Mott (Figure I.4.a).



(a) **(b)**

Figure I.4 : Représentation graphique d'excitons de Wannier-Mott (a) et de Frenkel (b).

Nous ne discuterons ici que les excitons de Wannier-Mott dans les semi-conducteurs. Ces excitons peuvent être décrits, de façon pratique, dans le cadre de l'approximation de la masse effective qui tient compte de l'effet du potentiel cristallin périodique et décrivent les électrons et les trous comme des quasi-particules libres ayant une dispersion parabolique et caractérisées par des masses effectives dépendantes du matériau cristallin.

I.6.1. Etats excitoniques dans les semi-conducteurs massifs

Considérons un exciton, ayant un centre de masse en mouvement quantifié, qui peut se déplacer dans le cristal ayant une constante diélectrique ϵ. La fonction d'onde du mouvement relatif électron-trou est $\varphi(r)$ et peut être trouvée grâce à la résolution de l'équation de Schrödinger. Puisque la masse des trous est généralement plus grande que celle des électrons, alors le système de deux particules ressemble à un atome d'hydrogène, avec l'électron chargé négativement gravitant autour du trou chargé positivement :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon r}\right)\varphi(r) = E\varphi(r) \qquad (\text{I. } 21)$$

avec : $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, est l'opérateur Laplacien. La masse μ utilisée dans cette équation est la masse réduite de l'exciton où $\mu = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*}$ et $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ est la distance entre l'électron et le trou. Les solutions de l'Eq. (I.21) sont bien connues, elles correspondent aux fonctions propres de l'atome d'hydrogène avec deux remplacements :

$$m_0 \to \mu, e^2 \to \frac{e^2}{\epsilon} \tag{I.22}$$

alors, la fonction d'onde de l'état fondamental de l'exciton est :

$$\varphi_{1s}(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} \mathrm{e}^{-r/a_B} \tag{I.23}$$

où le rayon de Bohr est :

$$a_B = \frac{\hbar^2 \epsilon}{\mu e^2} \tag{I.24}$$

L'énergie de liaison de l'exciton à l'état fondamental est :

$$E_b^{3D} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2} = \frac{\hbar^2}{2\mu a_B^2} \tag{I.25}$$

Compte tenu de la différence entre la masse réduite μ et la masse d'électrons libres, et en considération de la constante diélectrique dans le dénominateur, on peut estimer que l'énergie de liaison de l'exciton est inférieure d'environ trois ordres de grandeur à la constante de Rydberg. Le tableau I.1 montre les énergies de liaison et les rayons de Bohr pour les excitons Wannier-Mott dans quelques matériaux semi-conducteurs.

Semi-conducteurs	$E_g(eV)$	μ/m_0	$E_b^{ex}(meV)$	$a_B(\text{Å})$
$GaAs$	1.5152	0.044	3.6	155
InP	1.4814	0.055	4.8	120
$CdTe$	1.595	0.085	10.5	65
$ZnSe$	2.8052	0.119	19.9	41

Tableau I.1 : Energie de la bande interdite E_g, masse réduite μ, énergie de liaison E_b^{ex} et rayon de Bohr des excitons dans quelques semi-conducteurs à basse température [17].

I.6.2. Etats excitoniques dans les systèmes de faibles dimensions

Le calcul de l'énergie de liaison de l'exciton, dans les systèmes confinés, est similaire à celui de l'impureté. En effet, on a recours à des méthodes numériques, notamment l'approche variationnelle. Divers travaux [18-21] ont montré que l'énergie de liaison de l'exciton augmente lorsque la taille décroît dans des systèmes confinés pour les modèles de potentiels de confinement fini et infini.

Comme le confinement induit une levée de dégénérescence des états des trous lourds et des trous légers, cela conduit à la formation de deux systèmes d'excitons dont la dénomination est associée à leurs masses effectives (exprimées en termes des paramètres de Luttinger [22] γ_1 et γ_2) : trou lourd m_{hh} et trou léger m_{lh}, tels que :

$$\frac{1}{m_{hh}} = \frac{1}{m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2) \tag{I. 26}$$

et

$$\frac{1}{m_{lh}} = \frac{1}{m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2) \tag{I. 27}$$

Dans les structures 2D, nous considérons le modèle idéalisé d'un puits quantique de profondeur infinie. Le calcul de l'énergie de liaison s'avère simple et est donné par (voir par exemple [23]) :

$$E_b^{2D} = E_g - \frac{E_b^{3D}}{\left(n - \frac{1}{2}\right)^2} \tag{I. 28}$$

En comparant ce résultat avec celui d'un semi-conducteur volumique (Eq. I.25), on trouve alors que le confinement des porteurs permet d'augmenter considérablement l'énergie de liaison de l'exciton. Dans l'état fondamental $1s$, quand le potentiel de confinement est infini, l'énergie de liaison de l'exciton est quatre fois supérieure celle dans un système à trois dimensions :

$$E_b^{2d} = 4E_b^{3d} \tag{I. 29}$$

La conséquence est que les transitions excitoniques dans les systèmes à puits quantiques persistent même à température ambiante. Évidemment, dans le cas des structures réelles, ces effets sont amortis, mais l'augmentation de l'énergie de liaison reste toutefois significative lorsque L tend vers zéro. Le rayon de Bohr à l'état fondamental $1s$ est égal à la moitié de sa valeur à trois dimensions :

$$a_b^{2d} = \frac{a_b^{3d}}{2} \tag{I. 30}$$

I.7. Non parabolicité des bandes

En réalité, les bandes sont de nature non parabolique. Le modèle de masse effective est utile pour quelques points k où les bandes ont tendance à rester paraboliques. En effet, la structure de la bande devient non parabolique lorsque nous nous déplaçons dans une direction spécifique à l'intérieur du cristal.

De petites largeurs des systèmes confinés et de grande barrière de potentielle, c'est-à-dire lorsque l'effet de confinement augmente, pourraient exiger l'inclusion de la non parabolicité de la bande de conduction [24]. Ekenberg [25] a décrit l'inclusion de la non parabolicité sur la structure des puits quantiques. Cette méthode peut rendre compte, avec précision, d'une variété de phénomènes physiques, mais elle est compliquée analytiquement.

Des procédures plus simples ont été proposées par divers auteurs pour le problème d'un donneur peu profond dans un puits quantique. Par exemple, Chaudhuri et Bajaj [24] ont utilisé le remplacement simple suivant :

$$m^* \rightarrow m^*(E) = a_0 + a_1 E + a_2 E^2 + a_3 E^3 + \cdots + a_n E^n \qquad (\text{I}.31)$$

où a_n représente une série des constantes. Étant donné les valeurs de ces constantes, les effets de la non parabolicité peuvent être incorporés dans l'équation (I.12) simplement en considérant que la masse effective est fonction de l'énergie E. Cette possibilité est certainement beaucoup plus simple. En ce qui concerne les calculs ci-dessous, il convient de noter que Chaudhuri et Bajaj [24] ont montré que, même avec des barrières potentielles relativement importantes, la non parabolicité de la bande n'était significative que pour des puits plus étroits que la moitié du rayon de Bohr du donneur. Ce qui, pour le cas de $Ga_{1-x}Al_xAs$, serait< 50Å, et pour $Cd_{1-x}Mn_xTe$, serait < 35Å.

I.8. Effet du champ électrique sur les états électroniques des semi-conducteurs

Nous exposons un bref rappel concernant l'effet d'un champ électrique uniforme sur l'état d'impureté de type donneur peu profond, confiné dans les systèmes bidimensionnels.

Nous supposons que l'impureté de type donneur est placée au centre du QW, afin de simplifier les calculs, on néglige l'effet de la non parabolicité et la masse effective similaire dans les matériaux puits et barrières. Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, 1'Hamiltonien d'une impureté dans un QW en présence d'un champ électrique F le long de l'axe de croissance (longitudinal z) s'écrit comme suit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + V(r) - \frac{e^2}{\epsilon r} + qFz \qquad (\text{I}.32)$$

où pour un électron, $q = -e$ et pour un trou $q = +e$.

Comme le montre la figure I.5, l'effet d'un champ électrique suivant l'axe z est d'additionner un potentiel linéaire, qui est égal à $-eFz$ pour un électron dans la bande de conduction.

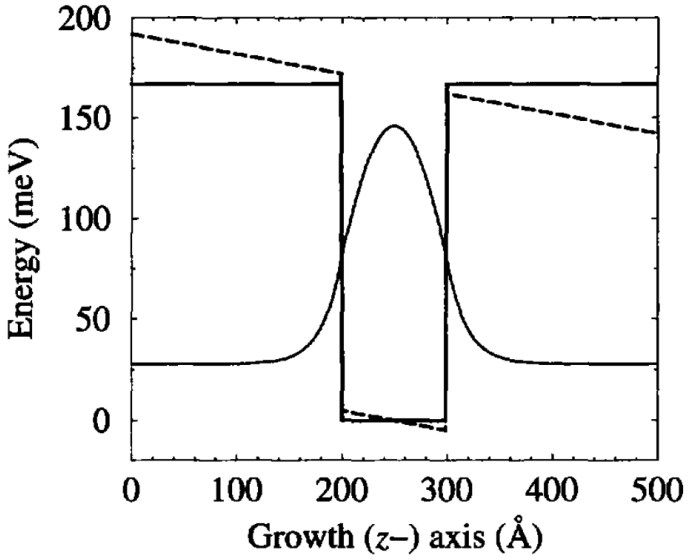


Figure I. 5 : Fonction d'onde de l'état fondamental en absence (courbe en trait plein) et en présence du champ électrique de 10 $kV\ /\ cm$ (courbe en tirets) [26].

L'effet des faibles champs électriques sur les niveaux d'énergie de confinement dans un QW peut être examiné par la théorie des perturbations du premier ordre de façon approximative. Si le potentiel de perturbation est donné par V' la variation du niveau d'énergie fondamental est exprimé par Schiff [27]:

$$\Delta E^{(1)} = \langle \Psi_1 | V' | \Psi_1 \rangle \tag{I.33}$$

pour le champ électrique le long de l'axe z comme perturbation; cela se traduit alors par :

$$\Delta E^{(1)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^*(z)(-eFz)\psi_1(z)\, dz \tag{I.34}$$

Il est nécessaire de trouver une solution complète (non perturbée) concernant les états propres à ce système confiné. Dans le cadre d'approximation de la fonction enveloppe et de la masse effective, l'équation (I.32) devient :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + [V(z) - eFz]\psi = E\psi \tag{I.35}$$

Cette nouvelle équation n'a pas de solution standard de combinaisons linéaires de fonctions trigonométriques et exponentielles, et donc une approche différente est requise. Tout d'abord, réorganisons l'équation (I.35) pour donner :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} - \frac{2m_e^*}{\hbar^2}[V(z) - eFz - E]\psi = 0 \tag{I.36}$$

puis en effectuant les substitutions suivantes :

$$\alpha = \frac{2m_e^*}{\hbar^2}[V(z) - E] \tag{I.37}$$

et

$$\beta = \frac{2m_e^*}{\hbar^2}(-eF) \tag{I.38}$$

L'équation de Schrödinger devient :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} - (\alpha + \beta z)\psi = 0 \tag{I.39}$$

Considérons la substitution supplémentaire :

$$z' = \frac{\alpha + \beta z}{\gamma} \tag{I.40}$$

où γ est une constante encore inconnue. Ensuite, puisque z' est une fonction linéaire du premier ordre de z :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = \frac{\partial^2\psi}{\partial z'^2} \times \left(\frac{\partial z'}{\partial z}\right)^2 \tag{I.41}$$

c'est-à-dire :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = \frac{\beta^2}{\gamma^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial z'^2} \tag{I.42}$$

La substitution dans l'équation (I.39) donne alors :

$$\frac{\beta^2}{\gamma^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial z'^2} - \gamma z'\psi = 0 \tag{I.43}$$

si γ^2est égales à β^2, alors la transformation complète est :

$$z' = \left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\left[\frac{V(z) - E}{(eF)^{\frac{2}{3}}} - (eF)^{\frac{1}{3}}z\right] \tag{I.44}$$

et l'équation de Schrödinger peut s'écrit comme :

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial z'^2} - z'\psi = 0 \tag{I.45}$$

L'équation (I.45) a une solution standard qui est une combinaison linéaire de fonctions Airy Ai (Bi) (voir Abramowitz et Stegun [28], p. 446) :

$$\psi(z') = \mathrm{A}\, Ai(z') + \mathrm{B}\, Bi(z') \tag{I.46}$$

L'énergie de confinement des porteurs de charge est affectée par le champ électrique, et l'énergie de liaison de l'exciton diminue quand l'intensité du champ électrique augmente à cause des fonctions d'ondes qui sont délocalisées [29]. Pour une impureté hydrogénoïde, son énergie de liaison augmente ou diminue avec le champ selon la position de cette impureté dans le puits [30].

I.9. Polarisabilité dans les systèmes confinés

L'application d'un champ électrique peuvent interagir avec les atomes qui constituent le matériau. En effet, cette interaction provoque des mouvements des porteurs de charges et s'exprime sous forme d'une polarisation reliée à ce champ électrique, au niveau microscopique par une polarisabilité.

Les semi-conducteurs, en général, sont des matériaux polarisables pouvant conduire de l'électricité, ainsi que les propriétés des diélectriques et des conducteurs. Ainsi les semi-conducteurs deviennent plus polarisables en présence des impuretés de type donneur hydrogénoïde.

La polarisabilité d'une impureté donneur peut être déterminée dans les systèmes confinés à l'aide de la méthode variationnelle. Cette approche a été utilisée dans le cas des QWs [36-38], des QWWs [39-40] et des QDs [41-42]. L'expression de la polarisabilité est donnée par :

$$\alpha_p = \frac{P}{F} \tag{I.50}$$

avec F étant l'intensité du champ électrique appliqué, et P le moment dipolaire électrique, défini comme étant la différence de la valeur moyenne de $\langle -ez \rangle$ en présence et en absence du champ électrique, soit :

$$P = \langle -ez \rangle_{F \neq 0} - \langle -ez \rangle_{F=0} \tag{I.51}$$

La polarisabilité peut être calculée également par une autre méthode. Elle est donnée en fonction des énergies de l'électron en présence $E(\eta)$ et en absence $E(0)$ du champ électrique par la relation suivante [43] :

$$\alpha_p = 2 \lim_{\eta \to 0} \frac{E(0) - E(\eta)}{\eta^2} \tag{I.52}$$

I.10. Etat polaronique

Les ions du cristal ne sont pas fixes, mais animés d'un mouvement oscillant autour de leur position d'équilibre dont le quanta d'énergie est appelé phonon. En effet, dans les semi-

conducteurs polaires et les cristaux ioniques, un électron supplémentaire interagissant de manière répulsive avec les ions négatifs et attractifs avec les ions positifs, entraîne une déformation locale du réseau qui l'accompagne dans son mouvement. Ce sont les modes de phonons optiques longitudinaux des vibrations du réseau. L'électron se couple avec le champ de polarisation provoquée par ces déformations, et il en résulte une quasi-particule appelée polaron [31]. Quand le paquet d'ondes d'un électron interagissant avec les phonons se prolonge sur une grande distance devant la cellule élémentaire, il s'agit d'un gros polaron, ou polaron de Fröhlich (le cas de semi-conducteurs de type III-V, II-VI et I-VII).

La force de l'interaction entre l'électron et les phonons est décrite par un paramètre sans dimension dénoté par α_0. Ce paramètre dit couplage de Fröhlich [32, 33], permet d'estimer l'intensité du couplage électron-phonon dans les semi-conducteurs. Cette interaction est donc naturellement renforcée dans les cristaux polaires. Alors, le couplage électrons-phonon modifie les propriétés électroniques et optiques dans les semi-conducteurs polaires selon la force de couplage [34,35]. Nous nous intéressons, dans cette partie, à une correction due à l'interaction éléctron-phonons polaires de Fröhlich sur les états électroniques d'une impureté. L'Hamiltonien du système est décrit dans le cadre de l'approximation de la masse effective :

$$H = H_{el} + \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{LO} a_{\vec{q}}^{+} a_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} \left(V_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} a_{\vec{q}} + V_{\vec{q}}^{*} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} a_{\vec{q}}^{+} \right) \qquad (\text{I.47})$$

où H_{el} est l'Hamiltonien décrivant l'interaction électron-impureté. La deuxième et la troisième partie de l'Eq. (I.47) décrivent le champ du phonon LO et l'interaction électron-phonon respectivement. $a_{\vec{q}}(a_{\vec{q}}^{+})$ est l'opérateur d'annihilation (création) du phonon LO avec fréquence ω_{LO} et vecteur d'onde $\vec{q}$. $V_{\vec{q}}$ mesure la force du couplage entre l'électron et les phonons longitudinaux optiques (LO) qui peut être donnée comme :

$$V_{\vec{q}} = -\frac{i\,\hbar\omega_{LO}}{q}\left(\frac{4\pi\alpha_0}{\Omega}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\hbar}{2m^{*}\omega_{LO}}\right)^{\frac{1}{4}} \qquad (\text{I.48})$$

avec :

$$\alpha_0 = \left(\frac{e^2}{2\hbar\omega_{LO}}\right)\left(\frac{2m^{*}\omega_{LO}}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0}\right) \qquad (\text{I.49})$$

comme paramètre de couplage électron-phonon, Ω est le volume de matériaux, et $\varepsilon_\infty(\varepsilon_0)$ est la constante diélectrique optique (statique).

Les effets de l'interaction électron-phonon s'expliquent comme suit :

(1) elle entraîne une baisse de l'énergie de l'électron au repos, c'est-à-dire un décalage de la position relative des bandes de conduction et de valence ;
(2) elle donne lieu à une diffusion de l'électron par les phonons, et détermine donc la mobilité de l'électron.

I.11. Susceptibilité diamagnétique

Les atomes sont constitués de particules chargées qui se déplacent bien séparées de manière indépendante et peuvent présenter des moments magnétiques. Un matériau peut avoir des réponses magnétiques différentes : une réponse diamagnétique est celle pour laquelle la sensibilité a une valeur négative. Les travaux de M. Faraday suggèrent que le diamagnétisme représente une contribution faible, mais est un phénomène qui existe dans presque tous les matériaux. Son origine s'explique au niveau atomique par la loi d'induction de Faraday.

Un modèle théorique proposé par Langevin en 1905 [44], en utilisant la théorie des perturbations stationnaires redonne l'expression de la susceptibilité diamagnétique atomique :

$$\chi_{dia} = -\frac{e^2}{6mc^2}\sum_i \langle r_i^2 \rangle \qquad (\text{I.53})$$

où $-e$ est la charge de l'électron, c la célérité de la lumière, m la masse de l'électron et $\langle r_i^2 \rangle$ est le carré moyen de la distance du i^{ème} électron au noyau.

Références

[1] Y. Hasumi, A. Kozen, J. Temmyo and H. Asahi, IEEE Electron Device Lett. **8**, 10 (1987).

[2] F.S. Pavone and M. Inguscio, Appl. Phys. B **56** 118 (1993).

[3] S. Laval, Physique des semi-conducteurs III-V, Ecole d'été d'optoélectronique (2002).

[4] Gerald Bastard, Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures, Les editions de physique, Paris, (1988).

[5] Paul Harrison, Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures, Second Edition, (2005).

[6] G. Rakotonanahary, Spectroscopie des transitions excitoniques dans des puits quantiques $GaN/AlGaN$, thèse de doctorat, université de Clermont II, 24 janvier (2012).

[7] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin, Solid state Physics, Saunders College Publishing (1976).

[8] P.Y. Yu and M. Cardona, Fundamentals of Semiconductor: Physics and Material Properties, Spring-Verlag, Berlin, (2001).

[9] P.Y. Yu and M. cardona, Fundamental of Semiconductors, Springer (1996).

[10] Wtodzimierz Nakwaski, Physica B **210**, 1 (1995).

[11] I. Knowles and R. Wallace, Numer. Math. **70**, 91 (1995).

[12] I.F.I. Mikhail and I. M. M. Ismail, Superlattices Microstruct. **48**, 388 (2010).

[13] G. Biasiol, A. Gustafsson, K. Leifer and E. Kapon, Phys. Rev. B **65**, 205306 (2002).

[14] D.K. Goswami, B. Satpati, P.V. Satyam and B. Nath Dev, Current science **84**, 903 (2003).

[15] G. Bastard, Phys. Rev. B. **24**, 4714 (1981).

[16] F.J. Ribeiro and A. Latgé, Phys. Rev. B. **50**, 14722 (1994).

[17] K.W. Böer and U.W. Pohl, Excitons. In: Semiconductor Physics. Springer, Cham. (2015).

[18] B. Gerlach, J. Wüsthoff, M.O. Dzero and M.A. Smondyrev, Phys. Rev. B. **58**, 10568 (1998).

[19] H. Mathieu, P. Lefebvre and P. Christol, Phys. Rev. B. **46**, 4092 (1992).

[20] J.W. Brown and H.N. Spector, Phys. Rev. B. **35**, 3009 (1987).

[21] R. Harris, J. Terblans, H. Swart, Superlattices Microstruct. **86**, 456 (2015).

[22] R.L. Greene and K.K. Bajaj, Solid State Communications **88**, 955 (1993).

[23] N. Peyghambarian, S.W. Koch and A. Mysyrowicz, Introduction to semiconductor optics, Prentice-Hall Inc., New jersey (1993).

[24] S. Chaudhuri and K.K. Bajaj, Phys. Rev. B **29**, 1803 (1984).

[25] U. Ekenberg, Phys. Rev. B **40**, 7714 (1989).

[26] P. Harrison, Quantum Wells, Wires and Dots, John Wiley & Sons Ltd (2000).

[27] L.I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill, London, (1968).

[28] M. Abramowitz, I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications Inc., New York, (1965).

[29] M. Cai, Y. Liu, W. Liu and T. Yu, Physica B: Condensed Matter **176**, 327 (1992).

[30] J.A. Brum, C. Priester and G. Allan, Phys. Rev. B **32**, 2378 (1985).

[31] H. Fröhlich, H. Pelzeret and S. Zienau, Phil.Mag. **41**, 221 (1950).

[32] E. Rosencher and B. Vinter, Optoélectronique. Masson, Paris, (1998).

[33] P.Y.Yu and M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors Physics and Material Properties. Springer, Berlin, (2001).

[34] H. Satori, M. Fliyou, A. Sali, A. Nougaoui and L. Tayebi, Phy. Low-Dim. Stuct. **1**, 73 (2001).

[35] A. Sali, M. Fliyou and H. Loumrhari, Phys. stat. Sol. (b) **199**, 165 (1997).

[36] V. Narayani and B. Sukumar, Solid State Commun. **90**, 579 (1994).

[37] R.B. Santiago, L.E. Oliveira and Albuquerque Castro, J, Phys. Rev. B **46**, 4041 (1992).

[38] A.L. Morales, A. Montes, S.Y. Lopez and A. Duque, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 987 (2002).

[39] C.A. Duque, A. Montes and A.L. Morales, Physica B **302**, 84 (2001).

[40] E. Kasapoglu, H. Sari and I. Sokmen, Physica B **315**, 261 (2002) 261.

[41] K. El Messaoudi, A. Zounoubi, I. Zorkani and A. Jorio, phys. stat. sol. (b) **233**, 270 (2002).

[42] E. Feddi, E. Assaid, E. Dujardin, B. Stébé and J. Diouri, Phys. Scr. **62**, 88 (2000).

[43] M. El Saïd and M. Tomak, Phys. Stat. Sol. B **171**, 29 (1992).

[44] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer and B. Roulet, Eléments de physique statistique, Hermann Editeurs des sciences et des arts, Paris, (2001).

Chapitre II

Etats électroniques d'une particule dans un anneau quantique

Sommaire

II.1 Introduction 29
II.2 Méthodes de croissance des anneaux quantiques 29
II.2.1 Croissance partielle 30
II.2.2 Épitaxie par gouttelettes 32
II.2.3 Épitaxie par gouttelettes MBE d'anneaux quantiques $GaAs/AlGaAs$ 32
II.3 Quelques Applications des QRs 34
II.4 Etats d'une particule confinée dans un anneau quantique 35
II.4.1 Hamiltonien effectif 35
II.4.2 Modèle du potentiel de confinement infini 36
II.4.3 Modèle du potentiel de confinement fini 38
II.5 Particule dans un anneau quantique en présence d'un champ électrique 41
II.5.1 Modèle du potentiel de confinement infini 41
II.5.2 Modèle du potentiel de confinement fini 42
Références 45

II.1. Introduction

Les anneaux quantiques (Quantum Rings : QRs) sont des nanostructures sous forme d'anneau qui confinent les porteurs de charges (électrons et trous) dans toutes les dimensions, ce qui produit des niveaux d'énergie discrets. Ce chapitre est consacré à la compréhension des états des porteurs dans les QRs. La première partie spécifie les diverses méthodes de croissance des QRs et quelques exemples de leurs applications. Dans la seconde partie du chapitre, nous avons déterminé les états électroniques d'un porteur de charge (électron ou trou) confiné dans les anneaux quantiques en fonction des paramètres géométriques (la hauteur H, les rayons interne R_1et externe R_2 et la hauteur de la barrière) en absence et en présence d'un champ électrique en utilisant l'approche de la masse effective.

II.2. Méthodes de croissance des anneaux quantiques

Le développement rapide des technologies de micro et de nano-processus, comme la lithographie à faisceau d'électrons et le fraisage de faisceau d'ions, permet de construire des nanostructures de différentes géométries. Cependant, les micro- et nano-procédés peuvent induire des défauts et une infection de ces nanostructures et donc affecter leurs propriétés physiques et les performances des dispositifs [1-4]. Ces problèmes sont résolus par le développement et la réalisation de la croissance auto-assemblée de nanostructures de semi-conducteurs à l'aide de techniques épitaxiales avancées, telles que l'épitaxie par jets moléculaires (ou MBE : Molecular Beam Epitaxy) et le procédé de dépôt chimique métallo-organique en phase vapeur (MOCVD : Metal Organic Chemical Vapor Deposition). En conséquence, ces nanostructures auto-assemblées sont largement étudiées pour des applications dans les dispositifs optoélectroniques, la cryptographie quantique, les ordinateurs quantiques, etc. [1, 2], ainsi, des dispositifs QD à haute performance ont été récemment présentés [5].

De plus, la technique de croissance auto-assemblée peut également être utilisée pour construire des nanostructures avec des géométries complexes, telles que les QRs. Physiquement, les structures en anneau ont des trous dans leur centre géométrique, ce qui définit théoriquement la capacité de piéger un seul flux magnétique à l'intérieur et offre donc une opportunité intéressante d'étudier les phases de la fonction d'onde électronique dans les expériences magnéto-optiques [6].

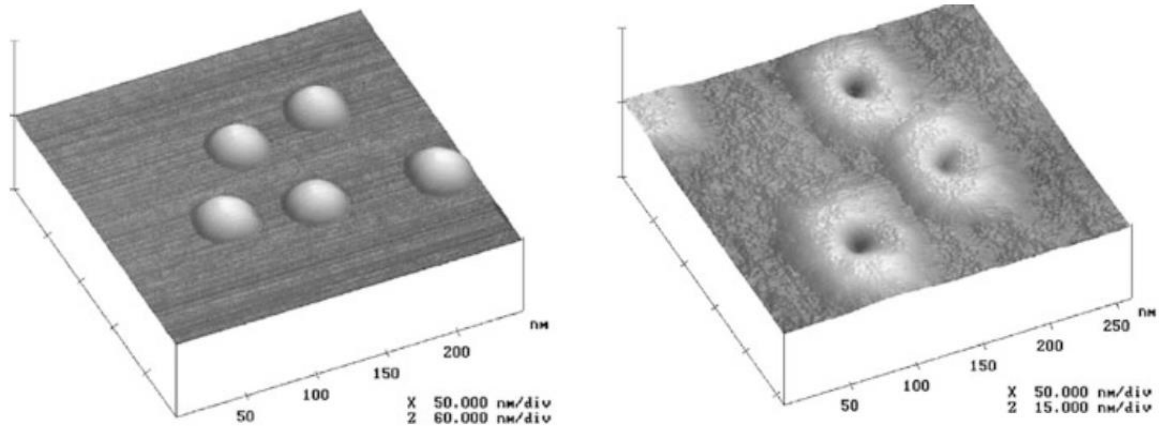
Une nouvelle technique épitaxiale, telle que l'épitaxie par gouttelettes [7] a été développée pour la fabrication de QR. Diverses techniques spectroscopiques ont été développées pour étudier les propriétés optiques, électriques et magnétiques de ces structures annulaires [8–13].

Il existe généralement deux types de techniques épitaxiales pour fabriquer des QRs de semi-conducteurs : (1) croissance partielle et (2) épitaxie par gouttelettes. Ces techniques de croissance seront discutées ci-dessous :

II.2.1. Croissance partielle

La technique de croissance partielle est basée sur un processus de recouvrement et de recuit des QDs auto-assemblés. Tout d'abord, les QDs auto-assemblés sont fabriqués selon le mode de croissance standard S-K (Stranski-Krastanov) de petite taille (un diamètre de 10 à 30 nm), et une structure cristalline parfaite (exempte de défauts).

Dans cette croissance S-K, la croissance épitaxiale commence par une croissance bi-dimensionnelle couche par couche, et l'énergie de déformation (causée par le décalage du réseau) accumulée dans le système augmente à mesure que l'épaisseur épicouche augmente. Lorsque l'épaisseur de la couche épitaxiale dépasse une valeur critique (caractérise la transition 2D/3D dans le mode de croissance de S-K), le système devient instable et essaie de détendre son énergie de déformation en formant des îlots tridimensionnels, où a lieu la transition d'une croissance bidimensionnelle (couche de mouillage : wetting layer WL, constituent des réservoirs qui fournissent la matière nécessaire à la croissance des îlots) à croissance tridimensionnelle (îlots). L'épaisseur critique est déterminée par le décalage du réseau entre la couche épitaxiale et le substrat. Par exemple, les QDs auto-assemblés $InAs/GaAs$ sont formés généralement lorsque la couche d'$InAs$ déposée est plus épaisse que 2 monocouches (monolayers MLs). D'autre part, les QDs auto-assemblés sont partiellement recouverts d'une fine couche de recouvrement, par exemple une couche de $GaAs$. En outre, les QDs partiellement couverts sont recuits pendant une courte période à haute température (généralement > 450 ℃). Pendant le processus de recuit, les QDs auto-assemblés se transforment en QR en raison de la migration des atomes vers l'extérieur ou le processus de démouillage. Il convient de souligner que pour garantir la formation d'anneaux quantiques, les QDs auto-assemblés doivent être partiellement, pas complètement, couverts et doivent être recuits pendant une courte période.



(a) **(b)**

Figure II.1 : Représentation des images AFM des QDs $InAs$ (a) et QRs $InGaAs$ (b) réalisées sur des substrats de $GaAs$ [14].

La figure II.1 montre les images de microscopie à force atomique (AFM) des QDs d'$InAs$ obtenues avant le recouvrement partiel et celles des QRs d'$InGaAs$ obtenues après la croissance partielle et le recuit. Comme le montre la figure II.1 (a), les QDs $InAs$ ont une hauteur moyenne de $\sim 6\ nm$ et un diamètre moyen de $\sim 20\ nm$, ce qui est tout à fait normal pour les QDs $InAs$ auto-assemblés formés par le processus S-K. Cependant, après une croissance partielle et un recuit, la forme des nano-îlots change radicalement de points en forme de lentille en îlots en forme d'anneau, comme le montre la figure II.1(b). Par rapport aux QDs de l'$InAs$ les structures en anneau présentent une taille latérale accrue (entre 60 et 140 nm dans le diamètre extérieur), une hauteur réduite (environ 2 nm) et un trou central bien défini d'environ 20 nm de diamètre. Ces îlots sont donc une sorte d'anneaux à l'échelle nanométrique, généralement appelés QRs. On observe que le diamètre du trou central est comparable au diamètre des QDs, ce qui indique une relation d'évolution entre les QDs et les QRs. La formation de QR $InGaAs$ ici pourrait être causée par la diffusion vers l'extérieur des atomes In de QD et leur alliage ultérieur avec la matrice $GaAs$ environnante. Il est bien connu que pendant la croissance des QDs auto-assemblée, la température de croissance a une influence significative sur la cinétique de croissance du système et donc sur la morphologie des QDs [15, 16]. De même, lors de la croissance partielle des QDs, la température du processus de recuit aura également un effet significatif sur la migration des atomes d'In et donc sur la morphologie et la composition des QRs [17]. A une température de recuit plus élevée comme 470℃, [17], les atomes In sont très mobiles et la migration vers l'extérieur des atomes In depuis le sommet non couvert de chaque QD est importante, laissant derrière elle un profond trou au centre épuisé en $InAs$. Par

conséquent, une structure en anneau complète est formée. En revanche, à des températures de recuit plus basses, comme 450℃, les atomes In ne sont pas aussi mobiles qu'ils le sont à des températures plus élevées, et moins d'atomes In migrent hors des QDs, ce qui donne des structures de type volcanique (pas de trou profond au centre).

II.2.2. Épitaxie par gouttelettes

L'épitaxie par gouttelettes est un autre type de technique de croissance auto-assemblée pour les nanostructures de semi-conducteurs, qui a été développé, ces dernières années [18, 19]. En comparaison avec la croissance de S-K, où les atomes des groupes III et V sont déposés simultanément pendant la croissance des nanostructures, pour l'épitaxie en gouttelettes, les atomes du groupe III et du groupe V sont déposés de manière consécutive. Comme le montre la figure II.2, l'épitaxie des gouttelettes comprend généralement deux étapes principales [19, 20] : la première étape consiste à déposer sur la surface un seul matériau du groupe III à faible point de fusion, tels que Ga et In dont les atomes forment des gouttes ultrafines ; la deuxième étape est de recristalliser ces gouttes en déposant uns éléments du groupe V. Koguchi et al. [21] ont appliqué la même approche pour de substrats $GaAs$. Ils ont utilisé du Ga pour former des gouttes sur le substrat, puis un flux $d'As$ pour recristalliser ces gouttes. Évidemment, l'épitaxie par gouttelettes, différente de la croissance S-K, ne repose pas sur le décalage du réseau dans le système pour former des nanostructures. Ainsi, cette technique de croissance permet d'obtenir des nanostructures à la fois compatibles et non-compatibles. De plus, cette méthode donne plus de liberté avec la forme des QDs, ce qui permet de faire des structures diverses comme, par exemple, des QDs de forme d'anneaux et des boîtes dans des nano-trous.

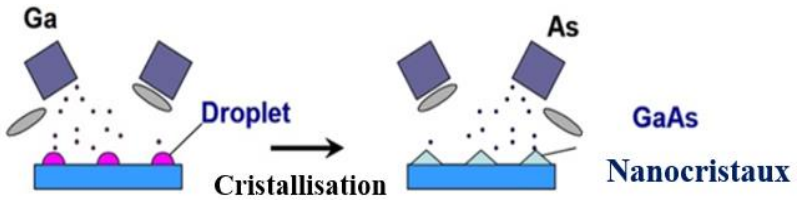
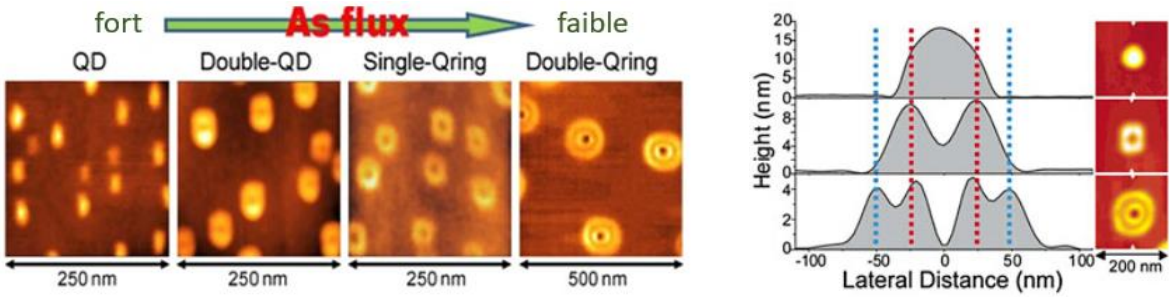


Figure II.2 : Illustration schématique du principe de la croissance de gouttelettes : (a) dépôt d'une goutte d'un premier matériau (ex : Ga) sur le substrat, (b) recristallisation en présence d'un flux de matériau complémentaire (ex : As) [18].

II.2.3. Épitaxie par gouttelettes MBE d'anneaux quantiques $GaAs/AlGaAs$

En réglant les paramètres de croissance pendant le processus de cristallisation des gouttelettes de Ga, des structures quantiques $GaAs/AlGaAs$ de haute qualité optique peuvent

être obtenues, notamment les QDs, les QRs simples et des doubles QRs concentriques. Le processus d'épitaxie de gouttelettes pour les nanostructures de $GaAs/AlGaAs$ est le suivant [18, 19] : premièrement, une couche barrière d'$AlGaAs$ d'épaisseur $0{,}1\ \mu m$ est cultivée sur un substrat de $GaAs$ (001) à 580℃. En second lieu la température du substrat est réduite à $200-350$℃ avec la pression de l'atmosphère résiduelle As inférieure à $1{,}3\times10^{-6}\ Pa$. En troisième lieu, des gouttelettes de Ga liquide sont déposées sur le substrat en fournissant ~4 ML, l'équivalent d'atomes de Ga. Le diamètre moyen des gouttes de Ga qui en résultent est d'environ 10 à 50 nm. Ensuite, le flux moléculaire de As est introduit dans la chambre de croissance à 200℃ pour cristalliser les gouttes de Ga et former des nanostructures de $GaAs$. Des nanostructures de $GaAs$ de différentes formes peuvent être obtenues en faisant varier les conditions de croissance. La figure II.3 montre les images AFM des nanostructures de $GaAs$ obtenues par cristallisation avec différentes intensités de flux de As. Lorsque le flux de As est égal à $2{,}7\times10^{-2}\ Pa$ (pression équivalente au faisceau : beam equivalent pressure (BEP)) est utilisé, les QDs standards de $GaAs$ sont formés à cause de la suppression de la diffusion du Ga sur la surface du substrat [20, 22]. Avec la réduction de l'intensité du flux de As pendant le processus de cristallisation, les trous centraux deviennent progressivement visibles. Lorsque le flux de As est réduit à $1{,}3\times10^{-3}\ Pa$ BEP, les trous centraux des îlots deviennent très clairs et des anneaux simples bien définis sont obtenus [22, 23]. On note également que lorsque le flux de As intermédiaire de $8\times10^{-3}\ Pa$ BEP est utilisé, la forme des nanostructures devient hautement anisotrope, et les doubles QDs couplés latéralement sont obtenus [23]. Avec une réduction supplémentaire du flux de As à $1{,}3\times10^{-4}\ Pa$, les structures à double anneau sont obtenues avec un trou central bien défini [19]. Ainsi, des nanostructures de $GaAs$ de formes variées peuvent être obtenues en modifiant simplement les conditions de croissance pendant le processus d'épitaxie des gouttelettes. La figure II.3 (b) montre les profils latéraux de certaines nanostructures typiques mesurées par AFM. Il est observé que les anneaux simples et les anneaux intérieurs des anneaux doubles présentent la même taille latérale que la taille de base des gouttelettes initiales, indiquant la cristallisation efficace sur les bords des gouttelettes. Cependant, l'anneau extérieur des doubles QRs présente un diamètre plus important que les gouttelettes de Ga initiales, suggérant que les atomes de Ga migrent loin des gouttelettes, et les atomes $d'As$ migrent vers les gouttelettes. Les détails de ces nouveaux QR à base de $GaAs/AlGaAs$ se trouvent dans les Réfs. [18,19].



(a) **(b)**

Figure II.3 : (a) Images AFM des nanostructures à base de $GaAs/AlGaAs$ obtenues avec différentes intensités de flux de As au cours du processus de cristallisation, et (b) le profil latéral d'un îlot de QD, simple QR et double QR obtenus [18].

II.3. Quelques Applications des QRs

Dans ce paragraphe, nous allons exposer quelques exemples d'applications qui n'utilisent pas les propriétés topologiques des QRs, puis un certain nombre d'exemples qui sont basés sur des caractéristiques induites par la topologie.

Les structures QRs à base de $InAs/GaAs$ ont été analysées pour leur utilisation dans les détecteurs térahertz (THz), car ils donnent lieu à un courant d'obscurité très faible [24]. Les QRs à base de $GaAs/AlGaAs$ ont été proposés dans les cellules solaires parce que ces QRs, sans contrainte, pourraient offrir un meilleur rendement quantique [25]. Dans ces exemples d'applications, ni la topologie, ni la répartition de charge en forme d'anneau ne sont essentielles pour le fonctionnement de ces dispositifs.

Les applications suivantes utilisent la géométrie particulière de l'anneau. En raison du fait que les QRs à base de $InAs/GaAs$ sont souvent asymétriques [26]. Ils peuvent donner lieu à une forte anisotropie optique [27, 28]. Cette propriété peut être utile dans les situations où la détection ou manipulation de la polarisation optique est nécessaire. Le potentiel dans les QRs de type II est indépendant de toute anisotropie dans le plan, dont il a été démontré qu'ils fonctionnent comme des dispositifs de mémoire à longue durée de stockage en raison de la séparation spatiale de l'électron et du trou, qui empêche la recombinaison des porteurs [29]. Dans ces dispositifs, le trou est confiné dans le point de potentiel, alors que l'électron est confiné dans le potentiel de l'anneau qui tourne autour du point.

Les applications les plus intéressantes sont celles qui sont basées sur les propriétés topologiques de la géométrie des anneaux. Sans surprise, ces applications se situent dans le domaine de l'informatique quantique, où la manipulation de spin est essentielle. Par exemple,

des retournements de spin séquentiels ont été observés dans le complexe lithographique QRs à base de $GaAs/AlGaAs$ [30].

Des résultats expérimentaux ont été obtenus qui ont montré la capacité de sonder des flips de spin individuels, ce qui constitue une étape importante vers un contrôle précis du spin. La détection des spins flips a été possible grâce au spectre électronique caractéristique de la structure QR. La relaxation du spin dans les QRs et les QDs a été étudiée en détail par Zipper et al. [31]. Les auteurs indiquent une plus grande stabilité de spin dans un QR que dans un QD, en soutenant l'utilisation des QRs comme un qubit de spin. Ils soulèvent également une discussion sur la manipulation de l'état quantique dans un QR en relation avec son utilisation comme qubit de spin [31]. En résumé, les études en cours ont révélé les grandes potentialités des QRs comme éléments de base pour un large domaine d'applications, en commençant par des détecteurs THz, des cellules solaires efficaces et des dispositifs de mémoire, et plus loin pour faire tourner des qubits pour l'informatique quantique.

II.4. Etats d'une particule confinée dans un anneau quantique

II.4.1. Hamiltonien effectif

Considérons un porteur de charge (électron e ou trou h) de masse effective m_i confiné dans un anneau quantique. Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, l'Hamiltonien effectif d'une particule seule i dans le QR s'écrit :

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m_i^{*w,b}}\nabla_i^2 + V_i(\rho_i, z_i) \qquad \text{(II. 1)}$$

Le premier terme de l'équation II.1 représente l'opérateur de l'énergie cinétique du porteur de charge, où $m_i^{*w}\left(m_i^{*b}\right)$ est la masse effective du porteur de charge dans le matériau puits (barrière) et $V_i(\rho_i, z_i)$ représente le potentiel de confinement du porteur de charge.

Pour obtenir la forme de l'Hamiltonien sans dimension, nous avons inclus les unités atomiques réduites. Pour l'énergie, nous avons utilisé le Rydberg effectif $R^* = \frac{m_i^{*w}e^4}{2\epsilon^2\hbar^2}$, et le rayon de Bohr effectif $a^* = \frac{\epsilon\hbar^2}{m_i^{*w}e^2}$ comme unité de longueur, où ϵ est la constante diélectrique statique. Pour repérer la position de l'électron, il est naturel d'utiliser les coordonnées cylindriques (ρ_i, z_i, φ_i) grâce à la géométrie du domaine de confinement. Alors l'Hamiltonien (II.1) se simplifie à :

$$\frac{H_i}{R^*} = -\frac{m_i^{*w}}{m_i^{*w,b}}\left(\frac{1}{\rho_i}\frac{\partial}{\partial\rho_i}\left(\rho_i\frac{\partial}{\partial\rho_i}\right) + \frac{\partial^2}{\partial {z_i}^2}\right) + \frac{V_i(\rho_i, z_i)}{R^*} \qquad \text{(II. 2)}$$

Les états électroniques $\psi_i(\rho_i, z_i, \varphi_i)$ des porteurs de charge confinés dans le QR et leurs énergies associés E_i sont déterminés en résolvant l'équation de Schrödinger dans le cadre de l'approximation de la masse effective. L'équation de Schrödinger s'écrit alors *:*

$$H_i\psi_i(\rho_i, z_i, \phi_i) = E_i\psi_i(\rho_i, z_i, \phi_i) \tag{II. 3}$$

L'équation (II. 3) peut être écrite en coordonnées cylindriques comme :

$$\left[\frac{m_i^{*w}}{m_i^{*w,b}}\left(\frac{\partial^2}{\partial {\rho_i}^2}+\frac{1}{\rho_i}\frac{\partial}{\partial \rho_i}+\frac{1}{{\rho_i}^2}\frac{\partial^2}{\partial {\varphi_i}^2}+\frac{\partial^2}{\partial {z_i}^2}\right)+\left(E_i - V(\rho_i, z_i)\right)\right]\psi_i(\rho_i, z_i, \phi_i) = 0 \tag{II. 4}$$

En raison de la géométrie du QR, la fonction d'onde électronique solution de l'équation (II.4) peut s'écrire :

$$\psi_i(\rho_i, z_i, \phi_i) = \frac{e^{\mathrm{i}m\varphi_i}}{\sqrt{2\pi}} f_m(\rho_i)g(z_i), \quad m = 0, \pm1, \pm2, \ldots \tag{II. 5}$$

II.4.2. Modèle du potentiel de confinement infini

Si l'énergie du porteur de charge E_i est négligeable devant la hauteur de potentiel de confinement, alors, dans ce cas, la particule est confinée dans le potentiel de confinement de hauteur infini comme le montre la figure II.4. Ce potentiel est donné par :

$$V(\rho_i, z_i) = \begin{cases} 0 & si\ \ R_1 \le \rho_i \le R_2\ et\ |z_i| \le \dfrac{H}{2} \\ \infty & Ailleurs. \end{cases} \tag{II. 6}$$

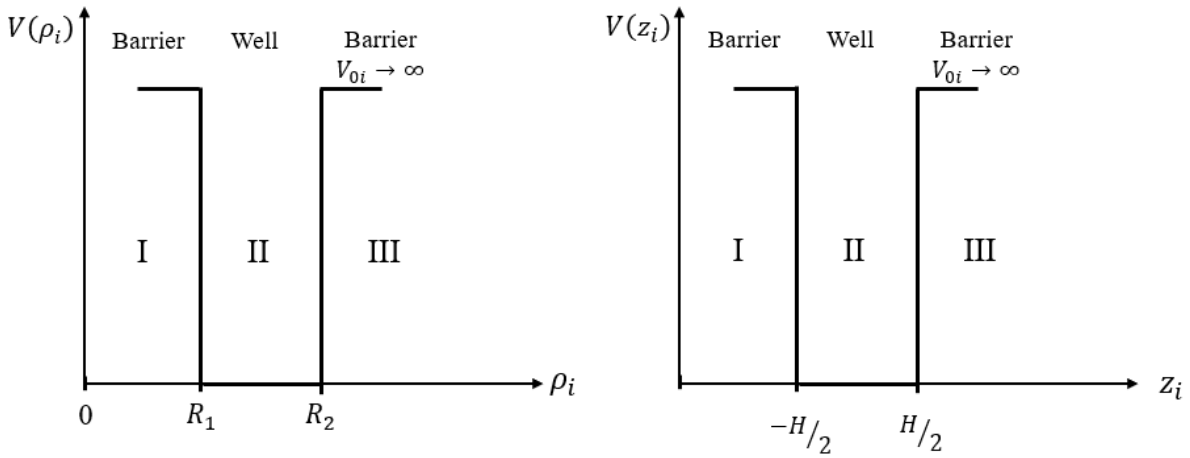
Dans ce modèle de potentiel de confinement, la fonction d'onde radiale $f_m(\rho_i)$ et la fonction d'onde électronique axiale $g(z_i)$ obéissent aux équations de Schrödinger suivantes :

$$\begin{cases} {\rho_i}^2\dfrac{d^2 f_m(\rho_i)}{d{\rho_i}^2} + \rho_i\dfrac{df_m(\rho_i)}{d\rho_i} + [(\beta_i\rho_i)^2 - m^2]f_m(\rho_i) = 0 & si \quad R_1 \le \rho_i \le R_2 \\ f_m(\rho_i) = 0 & si\ \ \rho_i < R_1\ et\ \rho_i > R_2, \end{cases} \tag{II. 7}$$

et :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2}{\partial {z_i}^2} g(z_i) + {k_{1i}}^2 g(z_i) = 0 & si \quad |z_i| \le \dfrac{H}{2} \\ g(z_i) = 0 & si \quad |z_i| > \dfrac{H}{2} \end{cases} \tag{II. 8}$$

où : $\beta_i = \sqrt{E_{\rho i}}$ et $k_{1i} = \sqrt{E_{zi}}$.



(a) **(b)**

Figure II.4 : Schématisation de deux types de potentiel de confinement infini : potentiel de confinement radial (a) et axial (b), R_1, R_2 et H sont les rayons intérieur et extérieur et la hauteur du QR, respectivement.

La partie radiale de la fonction d'onde $f_m(\rho_i)$ dans chaque région du système (solution de l'équation II. 7) s'écrit alors :

$$f_m(\rho_i) = \begin{cases} C_{1i} J_m(\beta_i \rho_i) + C_{2i} Y_m(\beta_i \rho_i) & si \quad R_1 \leq \rho_i \leq R_2 \\ 0 & si \quad \rho_i < R_1 \text{ et } \rho_i > R_2 \end{cases} \qquad \text{(II. 9)}$$

$J_m(Y_m)$ est la fonction de Bessel de première espèce (deuxième espèce) d'ordre m.

Si on pose $C_{1i} = N_i$, avec N_i est la constante de normalisation et $C_{2i} = N_i N_{0i}$, donc la fonction d'onde radiale à l'état fondamentale devient dans le matériau puits :

$$f_0(\rho_i) = N_i[J_0(\beta_i \rho_i) + N_0 Y_0(\beta_i \rho_i)] \qquad \text{(II. 10)}$$

N_{0i} est obtenue par l'application des conditions aux limites à $\rho_i = R_1$, soit :

$$N_{0i} = -\frac{J_0(\beta_i R_1)}{Y_0(\beta_i R_1)} \qquad \text{(II. 11)}$$

$g_i(z_i)$ définie dans l'équation (II.5) est la partie axiale de la fonction d'onde (solution de l'équation II. 8), peut s'écrire sous la forme :

$$g(z_i) = \begin{cases} cos(k_{1i} z_i) & si \quad |z_i| \leq \dfrac{H}{2} \\ 0 & si \quad |z_i| > \dfrac{H}{2} \end{cases} \qquad \text{(II. 12)}$$

Par l'application des conditions aux limites de la fonction d'onde radiale $f_0(\rho_i)$ à $\rho_i = R_2$ et la fonction d'onde axiale $g_i(z_i)$ à $z_i = \frac{H}{2}$, nous obtenons les équations transcendantales II.13, II.14 qui nous permettent de déterminer l'énergie de confinement de l'état fondamental radial $E_{\rho i}$ et axiale E_{zi}, respectivement :

$$J_0(\beta_i R_2) - \frac{J_0(\beta_i R_1)}{Y_0(\beta_i R_1)} Y_0(\beta_i R_2) = 0 \qquad \text{(II. 13)}$$

et

$$cos\left(k_{1i}\frac{H}{2}\right) = 0 \qquad \text{(II. 14)}$$

L'énergie de confinement du porteur de charge confiné dans le QR est donnée par :

$$E_i = E_{\rho i} + E_{zi} \qquad \text{(II. 15)}$$

II.4.3. Modèle du potentiel de confinement fini

Lorsque les énergies des porteurs de charge ne sont plus négligeables devant la barrière de potentiel, les états électroniques sont modifiés par la prise en compte de la hauteur finie du potentiel. Le mouvement des porteurs de charge d'énergie $E_i < V_{0i}$ n'est plus borné dans le volume du QR et les porteurs de charge ont une probabilité non nulle de se trouver à l'extérieur du QR par l'effet tunnel. Ce potentiel est donné par :

$$V(r_i) = \begin{cases} 0 & si \quad R_1 < \rho_i < R_2 \text{ et } |z_i| \leq \dfrac{H}{2} \\ V_{0i} & Ailleurs \end{cases} \qquad \text{(II. 16)}$$

V_{0i} est le potentiel de confinement du porteur de charge dans chaque région du QR, comme le montre la figure II.5.

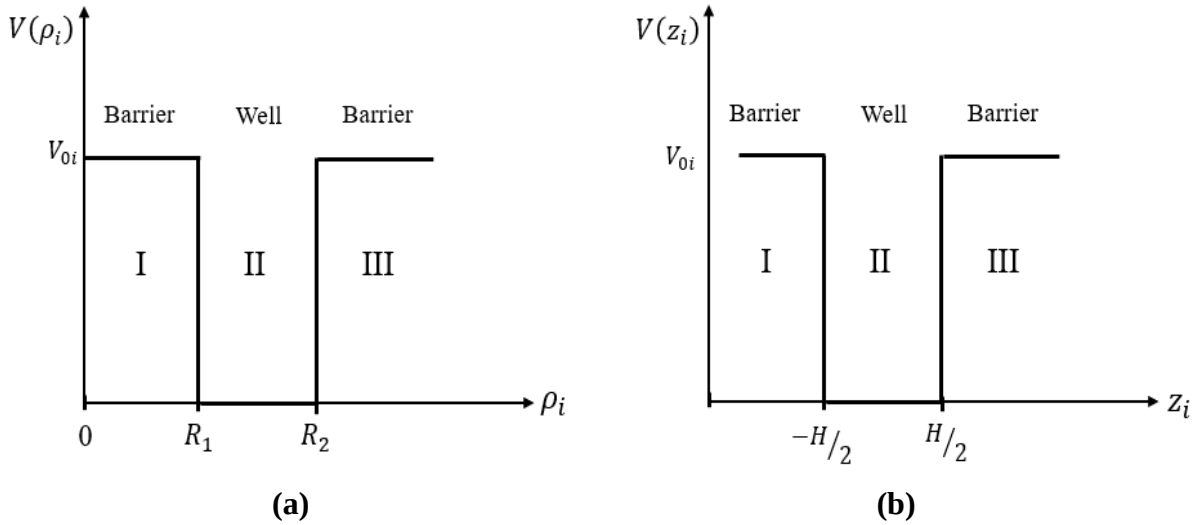


Figure II.5 : Schématisation des deux types de potentiel de confinement fini : potentiel de confinement radial (a) et axial (b).

Dans ce modèle de potentiel de confinement, les fonctions d'onde électronique radiale $f_m(\rho_i)$ et axiale $g(z_i)$ satisfont aux équations de Schrödinger suivantes (en remplaçant l'équation II.5 dans II.4) :

$$\begin{cases} {\rho_i}^2 \dfrac{d^2 f_m(\rho_i)}{d{\rho_i}^2} + \rho_i \dfrac{d f_m(\rho_i)}{d\rho_i} + [(\alpha_i \rho_i)^2 - m^2] f_m(\rho_i) = 0 \ \text{ si} \quad R_1 \le \rho_i \le R_2 \\ {\rho_i}^2 \dfrac{d^2 f_m(\rho_i)}{d{\rho_i}^2} + \rho_I \dfrac{d f_m(\rho_i)}{d\rho_i} + [(\beta_i \rho_i)^2 - m^2] f_m(\rho_i) = 0 \ \text{ si } \rho_i > R_1 \ et \ \rho_i > R_2 \end{cases} \quad (II.17)$$

α_i et β_i sont des constantes de l'énergie de confinement radiale à l'état fondamental et sont données par :

$$\alpha_i = \sqrt{\frac{m_b^*}{m_w^*}\left(V_{0i} - E_{\rho i}\right)} \quad (II.18)$$

et $$\beta_i = \sqrt{E_{\rho i}} \quad (II.19)$$

La fonction radiale $f_m(\rho_i)$ dans chaque région du système s'écrit comme :

$$f_m(\rho_i) = \begin{cases} f_0^I(\rho_i) = C_{1i} I_m(\alpha_i \rho_i) & \text{si} \quad 0 \le \rho_i < R_1 \\ f_0^{II}(\rho_i) = C_{2i} J_m(\beta_i \rho_i) + C_{3i} Y_m(\beta_i \rho_i) & \text{si} \quad R_1 \le \rho_i \le R_2 \\ f_0^{III}(\rho_i) = C_{4i} K_m(\alpha_i \rho_i) & \text{si} \quad \rho_i > R_2 \end{cases} \quad (II.20)$$

avec $J_m(Y_m)$ et $I_m(K_m)$ sont respectivement la fonction de Bessel de premier espèce (deuxième espèce) et la fonction de Bessel modifiée de premier espèce I_0 (deuxième espèce) de l'ordre m $(m = 0,1,2\ldots)$.

Si nous posons $C_{3i} = N_i$ et $C_{2i} = N_i N_{0i}$, où N_i est la constante de normalisation, et en utilisant la relation de continuité de la fonction d'onde radiale $f_m(\rho_i)$ à $\rho_i = R_1$ et à $\rho_i = R_2$, nous obtenons une expression des coefficients C_{1i} et C_{4i} de la forme :

$$C_{1i} = \frac{J_m(\beta_i R_1) + N_{0i} Y_m(\beta_i R_1)}{I_m(\alpha_i R_1)} \quad (II.21)$$

et

$$C_{4i} = \frac{J_m(\beta_i R_2) + N_{0i} Y_m(\beta_i R_2)}{K_m(\alpha_i R_2)} \quad (II.22)$$

Par suite, la partie radiale de la fonction d'onde électronique $f_0(\rho_i)$ à l'états fondamental devient :

$$f_0(\rho_i) = \begin{cases} f_0^I(\rho_i) = \dfrac{J_0(\beta_i R_1) + N_{0i} Y_0(\beta_i R_1)}{I_0(\alpha_i R_1)} I_0(\alpha_i \rho) & si \quad 0 \le \rho_i < R_1 \\ f_0^{II}(\rho_i) = J_0(\beta_i \rho_i) + N_{0i} Y_0(\beta_i \rho_i) & si \quad R_1 \le \rho_i \le R_2 \\ f_0^{III}(\rho_i) = \dfrac{J_0(\beta_i R_2) + N_{0e} Y_0(\beta_i R_2)}{K_0(\alpha_i R_2)} K_0(\alpha_i \rho_i) & si \quad \rho_i > R_2 \end{cases} \quad (II.23)$$

N_{0i} peut être déterminé à partir de la continuité de la dérivation de $f_0(\rho_i)$ à $\rho_i = R_1$, ce qui donne l'expression suivante:

$$N_{0i} = \frac{-m_b^* \beta_i I_0(\alpha_i R_1) J_1(\beta_i R_1) - m_w^* \alpha_i J_0(\beta_i R_1) I_1(\alpha_i R_1)}{m_w^* \alpha_i Y_0(\beta_i R_1) I_1(\alpha_i R_1) + m_b^* \beta_i I_0(\alpha_i R_1) Y_1(\beta_i R_1)} \tag{II.24}$$

Par l'application des conditions aux limites suivantes :

$$\begin{cases} f_0^I(\rho_i = R_1) = f_0^{II}(\rho_i = R_1) \\ f_0^{II}(\rho_i = R_2) = f_0^{III}(\rho_i = R_2) \\ \frac{1}{m_b^*} f_0^{I\prime}(\rho_i = R_1) = \frac{1}{m_w^*} f_0^{II\prime}(\rho_i = R_1) \\ \frac{1}{m_w^*} f_0^{II\prime}(\rho_i = R_2) = \frac{1}{m_b^*} f_0^{III\prime}(\rho_i = R_2) \end{cases} \tag{II.25}$$

nous obtenons l'équation transcendantale qui nous permet d'obtenir l'énergie de confinement de l'état fondamental du porteur de charge le long de la direction radiale $E_{\rho i}$.

La fonction d'onde électronique axiale, $g(z_i)$ satisfait à l'équation de Schrödinger suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial^2}{\partial {z_i}^2} g(z_i) + {k_{1i}}^2 g(z_i) = 0 \qquad si \qquad |z_i| \le \frac{H}{2} \\ \frac{\partial^2}{\partial {z_i}^2} g(z_i) + {k_{2i}}^2 g(z_i) = 0 \qquad si \qquad |z_i| > \frac{H}{2} \end{cases} \tag{II.26}$$

k_{1i} et k_{2i} sont des constantes de l'énergie axiale de l'état fondamental et sont données par les équations suivantes :

$$k_{1i} = \sqrt{E_{zi}} \tag{II.27}$$

et

$$k_{2i} = \sqrt{\frac{m_b^*}{m_w^*}(V_{0i} - E_{zi})} \tag{II.28}$$

La fonction axiale $g(z_i)$ solution de l'équation II.26), s'écrit dans chaque région du système comme :

$$g(z) = \begin{cases} g^I(z_i) = A_{zi}\, exp(k_2 z) \qquad si \qquad z < -\frac{H}{2} \\ g^{II}(z_i) = \cos(k_1 z) \qquad si \qquad |z| \le \frac{H}{2} \\ g^{III}(z_i) = A_{zi}\, exp(-k_2 z) \qquad si \qquad z > \frac{H}{2} \end{cases} \tag{II.29}$$

A_{zi} et k_{1i} sont déterminés par les conditions aux limites à $z = \frac{H}{2}$ qui aboutissent aux équiations transcendantes suivantes :

$$A_{zi} = cos\left(k_{1i}\frac{H}{2}\right) exp\left(k_{2i}\frac{H}{2}\right) \quad \text{(II. 30)}$$

et

$$tan\left(k_{1i}\frac{H}{2}\right) = \frac{m_b^*}{m_w^*}\frac{k_{2i}}{k_{1i}} \quad \text{(II. 31)}$$

II.5. Particule dans un anneau quantique en présence d'un champ électrique

II.5.1. Modèle du potentiel de confinement infini

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, l'Hamiltonien décrit dans le système d'unités atomiques pour un porteur de charge confiné dans un QR à potentiel de confinement infini et soumis à l'effet d'un champ électrique F appliqué parallèlement à l'axe z du QR (figure II.6) est donné par :

$$H_i = \begin{cases} -\nabla_i^2 + \eta^* z_i + V_i(\rho_i, z_i) & si \quad R_1 \leq \rho_i \leq R_2 \; et \; |z_i| \leq \frac{H}{2} \\ 0 & Ailleurs \end{cases} \quad \text{(II. 32)}$$

où η^* qui caractérise l'intensité du champ électrique est donné par :

$$\eta^* = \frac{ea^*F}{R^*} \quad \text{(II. 33)}$$

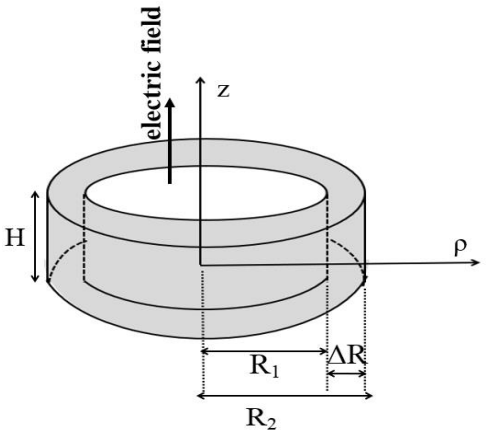


Figure II.6 : Allure schématique d'un QR sous l'effet d'un champ électrique F appliqué parallèlement à l'axe z du QR.

Puisque l'équation de Schrödinger d'un porteur de charge confiné dans le QR est séparable $(H_i = H_i(\rho_i, \phi) + H_i(z) + V_e(\rho_e, z_e))$ et le champ électrique est appliqué le long de la direction z. Alors, la solution radiale de l'équation de Schrödinger en présence du champ électrique est identique à celle obtenue dans l'équation II.10.

La fonction d'onde électronique axiale $g(z_i)$ en présence du champ électrique F peut prendre la forme suivante :

$$g(z_i) = D_{1i}Ai(\xi_i) + D_{2i}Bi(\xi_i) \qquad \text{(II. 34)}$$

avec : $Ai(\xi_i)$ $\left(Bi(\xi_i)\right)$ représente la fonction de Airy du premier espèce (deuxième espèce), où ξ_i est donnée par :

$$\xi_i = \left(\frac{\eta^* z_i - E_{zi}}{\eta^{*2/3}}\right) \qquad \text{(II. 35)}$$

Les constantes D_{1i} et D_{2i} dans l'équation II.34 sont déterminées par les conditions aux limites à $z_i = -\frac{H}{2}$ et sont données par :

$$D_{1i} = Bi(\xi_i^-) \qquad \text{(II. 36)}$$

et $$D_{2i} = -Ai(\xi_i^-) \qquad \text{(II. 37)}$$

où ξ_i^- est la valeur de ξ_i calculée à $z_i = -\frac{H}{2}$:

$$\xi_i^- = \left(\frac{\eta^*\left(-H/2\right) - E_{zi}}{\eta^{*2/3}}\right) \qquad \text{(II. 38)}$$

En utilisant la relation de continuité de la fonction d'onde axiale $g(z_i)$ à $z_i = \frac{H}{2}$:

$$g\left(z_i = \frac{H}{2}\right) = 0 \qquad \text{(II. 39)}$$

on aboutit à l'équation transcendantale suivante :

$$Bi(\xi_i^-)Ai(\xi_i^+) - Ai(\xi_i^-)Bi(\xi_i^+) = 0 \qquad \text{(II. 40)}$$

où :

$$\xi_i^+ = \left(\frac{\eta^*\left(H/2\right) - E_{zi}}{\eta^{*2/3}}\right) \qquad \text{(II. 41)}$$

A partir de cette équation, on peut déterminer l'énergie de confinement axiale E_{zi} du porteur de charge à l'état fondamental en présence de l'effet du champ électrique.

II.5.2. Modèle du potentiel de confinement fini

L'Hamiltonien d'un porteur de charge confiné dans un QR à potentiel de confinement fini en présence d'un champ électrique F parallèle à l'axe z, est donné dans le cadre de l'approximation de la masse effective par :

$$H_i = \begin{cases} -\nabla_i^2 + \eta^* z_i + V_i(\rho_i, z_i) & si \quad R_1 \le \rho_i \le R_2 \text{ et } |z_i| \le \dfrac{H}{2} \\ -\dfrac{m_w^*}{m_b^*}\nabla_i^2 + V_i(\rho_i, z_i) & Ailleurs \end{cases} \qquad \text{(II. 42)}$$

La solution radiale de l'équation de Schrödinger en présence du champ électrique est identique à celle obtenue dans l'équation II.23.

La fonction d'onde électronique axiale $g(z_i)$ en présence du champ électrique F peut prendre la forme suivante (solution de l'équation II.42) :

$$g(z_i) = \begin{cases} g^I(z_i) = A_{1i}\, exp\left(k_{1i}\left(z_i + \dfrac{H}{2}\right)\right) & si \quad z_i < -\dfrac{H}{2} \\ g^{II}(z_i) = D_{1i}Ai(\xi_i) + D_{2i}Bi(\xi_i) & si \quad |z_i| \le \dfrac{H}{2} \\ g^{III}(z_i) = A_{2i}\, exp\left(k_{2i}\left(z_i - \dfrac{H}{2}\right)\right) & si \quad z_i > \dfrac{H}{2} \end{cases} \qquad \text{(II. 43)}$$

où : $Ai(\xi_i)\big(Bi(\xi_i)\big)$ représente la fonction de Airy du premier espèce (deuxième espèce). Les paramètres k_{1i}, k_{2i} sont données par :

$$k_{1i} = \sqrt{\frac{m_b^*}{m_w^*}\left(V_{0i} - \eta^* \frac{H}{2} - E_{zi}\right)} \qquad \text{(II. 44)}$$

et

$$k_{2i} = \sqrt{\frac{m_b^*}{m_w^*}\left(V_{0i} + \eta^* \frac{H}{2} - E_{zi}\right)} \qquad \text{(II. 45)}$$

Les constantes A_{z1} et A_{z2} dans l'équation II.43 sont déterminées par les conditions aux limites à $z_i = -\frac{H}{2}$ et $z_i = \frac{H}{2}$ et sont données par :

$$A_{1i} = D_{1i}Ai(\xi_i^-) + D_{2i}Bi(\xi_i^-) \qquad \text{(II. 46)}$$

et

$$A_{2i} = D_{1i}Ai(\xi_i^+) + D_{2i}Bi(\xi_i^+) \qquad \text{(II. 47)}$$

où $\xi_i^-(\xi_i^+)$ est la valeur de ξ_i calculée à $z_i = -\frac{H}{2}\left(z_i = \frac{H}{2}\right)$:

En utilisant la relation de continuité de la dérivée de la fonction d'onde axiale $g(z_i)$ à $z_i = \pm\frac{H}{2}$, on aura :

$$\begin{cases} \dfrac{1}{m_b^*}\dfrac{dg^I(z_i)}{dz_i}\Big|_{z=-H/2} = \dfrac{1}{m_w^*}\dfrac{dg^{II}(z_i)}{dz_i}\Big|_{z_i=-H/2} \\ \dfrac{1}{m_b^*}\dfrac{dg^{III}(z_i)}{dz_i}\Big|_{z=H/2} = \dfrac{1}{m_w^*}\dfrac{dg^{II}(z_i)}{dz_i}\Big|_{z_i=H/2} \end{cases} \quad \text{(II. 48)}$$

L'énergie de confinement axiale de l'état fondamental E_{zi} du porteur de charge en présence de l'effet du champ électrique peut être obtenue en résolvant l'équation transcendantale issue des conditions aux limites (Equation II.48), soit :

$$\begin{aligned} & m_b^{*2}\eta^{*2/3}[Ai'(\xi_i^+)Bi'(\xi_i^-) - Ai'(\xi_i^-)Bi'(\xi_i^+)] \\ & + m_b^* m_w^* k_{1i}\eta^{*1/3}[Ai(\xi_i^-)Bi'(\xi_i^+) - Bi(\xi_i^-)Ai'(\xi_i^+)] \\ & + m_b^* m_w^* k_{2i}\eta^{*1/3}[Ai(\xi_i^+)Bi'(\xi_i^-) - Ai'(\xi_i^-)Bi(\xi_i^+)] \\ & + m_w^{*2} k_{1i}k_{2i}[Ai(\xi_i^-)Bi(\xi_i^+) - Ai(\xi_i^+)Bi(\xi_i^-)] = 0 \end{aligned} \quad \text{(II. 49)}$$

où :

$$Ai'(\xi_i)[Bi'(\xi_i)] = \frac{dAi(\xi_i)[Bi(\xi_i)]}{d\xi_i} \quad \text{(II. 50)}$$

Références

[1] D. Bimberg, M. Grundmann and N.N. Ledentsov, Quantum Dot Heterostructures, Wiley, New York, (1998).

[2] P. M. Petroff, A. Lorke and A. Imamoglu, Phys. Today **54**, 46 (2001).

[3] L. Wang, A. Rastelli, S. Kiravittaya, M. Benyoucef and O.G. Schmidt, Adv. Mater. **21**, 2601 (2009).

[4] R. Songmuang, S. Kiravittaya, O.G. Schmidt, Appl. Phys. Lett. **82**, 2892 (2003).

[5] Z.M. Wang, Quantum Dot Devices, Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology, vol. **13**, Springer, Berlin, (2012).

[6] M. Büttiker, Y. Imry and R. Landauer, Phys. Lett. A **96**, 365 (1983).

[7] D. Granados, J. M. García, T. Ben and S.I. Molina, Appl. Phys. Lett. **86**, 071918 (2005).

[8] H. Pettersson, R.J. Warburton, A. Lorke, K. Karrai, J.P. Kotthaus, J.M. Garcia and P.M. Petroff, Physica E **6**, 510 (2000).

[9] R.J. Warburton, C. Schäflein, D. Haft, F. Bickel, A. Lorke, K. Karrai, J.M. Garcia, W. Schoenfeld and P.M. Petroff, Nature **405**, 926 (2000).

[10] W. Lei, C. Notthoff, A. Lorke, D. Reuter and A.D. Wieck, Appl. Phys. Lett. **96**, 033111 (2010).

[11] T.C. Lin, C.H. Lin, H.S. Ling, Y.J. Fu, W.H. Chang, S.D. Lin and C.P. Lee, Phys. Rev. B **80**, 081304R (2009).

[12] C.H. Lin, H.S. Lin, C.C. Huang, S.K. Su, S.D. Lin, K.W. Sun, C.P. Lee, Y.K. Liu, M.D. Yang, J.L. Shen, Appl. Phys. Lett. **94**, 183101 (2009).

[13] A. Lorke, R.J. Luyken, A.O. Govorov, J.P. Kotthaus, J.M. Garcia and P.M. Petroff, Phys. Rev. Lett. **84**, 2223 (2000).

[14] V. M. Fomin, Physics of Quantum Rings, pp30 (2014).

[15] W. Lei, H.H. Tan and C. Jagadish, Appl. Phys. Lett. **95** 013108 (2009).

[16] W. Lei, J. Nanopart. Res. **13**, 1647 (2011).

[17] H.S. Ling and C.P. Lee, J. Appl. Phys. **102**, 024314 (2007).

[18] T. Mano, T. Kuroda, K. Kuroda and K. Sakoda, J. Nanophotonics **3**, 031605 (2009).

[19] T. Mano, T. Kuroda, S. Sanguinetti, T. Ochiai, T. Tateno, J. Kim, T. Noda, M. Kawabe, K. Sakoda, G. Kido and N. Koguchi, Nano Lett. **5**, 425 (2005).

[20] T. Mano and N. Koguchi, J. Cryst. Growth **278**, 108 (2005).

[21] N. Koguchi, K. Ishige and S. Takahashi, Journal of Vacuum Science & Technology B. **11**, 787 (1993).

[22] K. Watanabe, N. Koguchi and Y. Gotoh, Jpn. J. Appl. Phys. **39**, L79 (2000).

[23] M. Yamagiwa, T. Mano, T. Kuroda, T. Takeno, K. Sakoda, G. Kido, N. Koguchi and F. Minami, Appl. Phys. Lett. **89**, 113115 (2006).

[24] G. Huang, W. Guo, P. Bhattacharya, G. Ariyawansa and A.G.U. Perera, Appl. Phys. Lett. **94**, 101115 (2009).

[25] J. Wu, Z.M. Wang, V.G. Dorogan, S. Li, Z. Zhou, H. Li, J. Lee, E.S. Kim and G.J. Salamo, Appl. Phys. Lett. **101**, 043904 (2012).

[26] P. Offermans, P.M. Koenraad, J.H. Wolter, D. Granados, J.M. García, V.M. Fomin, V.N. Gladilin and J.T. Devreese, Appl. Phys. Lett. **87**, 131902 (2005).

[27] D. Granados, J.M. García, J. Cryst. Growth **251**, 213 (2007).

[28] W. Zhang, Z. Su, M. Gong, C.-F. Li, G.C. Guo and L. He, Europhys. Lett. **83**, 67004 (2008).

[29] R.J. Young, E.P. Smakman, A.M. Sanchez, P. Hodgson, P.M. Koenraad, M. Hayne, Appl. Phys. Lett. **100**, 082104 (2012).

[30] E. Rasanen, A. Muhle, M. Aichinger, R.J. Haug, Phys. Rev. B **84**, 165320 (2011).

[31] E. Zipper, M. Kurpas, J. Sadowski, M.M. Maska, J. Phys. Condens. Matter **23**, 115302 (2011).

Chapitre III

Effets du champ électrique, de la non parabolicité de la bande de conduction et du polaron sur l'énergie de liaison d'une impureté donneur confinée dans un anneau quantique

Sommaire

III.1 Introduction 48

III.2 Impureté dans un anneau quantique en présence d'un champ électrique 50

III.2.1 Hamiltonien effectif 50

III.2.2 Choix de la fonction d'essai 51

III.2.3 Effet de la non parabolicité de la bande de conduction 54

III.2.4 Energie de liaison de l'impureté 54

III.3 Correction polaronique sur l'énergie de liaison de l'impureté 54

III.3.1 Hamiltonien effectif 54

III.3.2 Fonction d'onde électronique et énergie du polaron 55

III.3.3 Energie de liaison du polaron 56

III.4 Résultats et discussions 57

Conclusion 69

Références 71

III.1. Introduction

Récemment, les matériaux nanostructurés ont ouvert la voie à des recherches approfondies dans les domaines théorique et appliqué. Parmi ces matériaux, le GaN a attiré l'attention des chercheurs en raison de sa large bande interdite directe, en particulier sur l'étude de ces propriétés optoélectroniques [1-2]. Très récemment, certains travaux publiés ont montré que les nanomatériaux à base de GaN ont été utilisés dans diverses applications telles que les diodes électroluminescentes (LED) et les cellules solaires [3-4].

Expérimentalement, de nombreux nouveaux procédés de fabrication ont utilisé les matériaux nanostructurés pour fabriquer les anneaux quantiques (QRs). T. Kuroda et al. [5] ont fabriqué les QRs et les doubles anneaux quantiques (DQRs) en utilisant la technique d'épitaxie par gouttelettes. Grâce à la technique de l'épitaxie par gouttelettes multiples, les auteurs de la Réf. [6] ont fabriqué des structures QR-dot alignées verticalement, ils ont confirmé que cette technique peut offrir un vaste potentiel pour créer des nanostructures complexes utilisées dans les nouvelles technologies de l'information quantique.

Plusieurs études théoriques ont été axées sur l'étude des propriétés optoélectroniques d'une impureté confinée dans une variété des systèmes nanostructurés tels que le puit quantique (QW), le fil quantique (QWW) et la boîte quantique (QD). Les résultats globaux de toutes ces études indiquent que les propriétés optoélectroniques peuvent être modifiées par l'impureté de type donneur [7-10]. L'effet d'incorporation des impuretés dans le QR et le DQR a été examiné et discuté par de nombreux chercheurs à l'aide de diverses méthodes, notamment : la méthode variationnelle [7-9,11-17], la diagonalisation exacte [18] et la technique de fonction enveloppe [19]. Les documents mentionnés ci-dessus ont discuté les effets de la hauteur, le rayon intérieur, le rayon extérieur et la position de l'impureté sur l'énergie de liaison (E_b) d'une impureté donneur dans les QRs et DQRs.

L'application d'un champ électrique externe provoque une polarisation de la distribution des porteurs de charge, qui modifie les états d'énergie. La structure du nitrure GaN de wurtzite (WZ) est fortement influencée par le champ électrique fort que la structure du zinc blend (ZB), ceci est dû à la grande symétrie de cette dernière, les polarisations piézoélectriques sont donc mineures dans la structure ZB [20].

Le point commun des documents cités ci-dessus est que les calculs ont été effectués dans l'approximation d'une structure de bande de conduction parabolique. Mais en réalité, lorsque nous passons à des niveaux d'énergie plus élevés, la structure des bandes de conduction n'est

pas parabolique. Par conséquent, l'effet de la non parabolicité (NP) de la bande de conduction devient progressivement important au fur et à mesure que le degré de confinement augmente, c'est-à dire en passant des matériaux massifs vers les structures boîtes quantiques [21-27]. L'effets de la NP de la bande de conduction et de la pression sur E_b à l'état fondamental d'une impureté confinée dans un QD sphérique de type $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ ont été étudiés dans la Ref. [21]. Leurs résultats soulignent que l'effet de la NP de la bande de conduction entraîne une augmentation de l'E_b dans le régime de confinement fort (pour des petits rayons de la boîte) pour une valeur donnée de la pression. Par conséquent, l'effet de la NP doit être nécessairement incorporé dans nos calculs pour obtenir des résultats plus précis.

L'interaction électron-phonon dans les matériaux polaires dont la constante de couplage électron-phonon est importante joue un rôle essentiel dans les propriétés électroniques et optiques des impuretés confinées dans les nanostructures, c'est pourquoi de nombreuses études théoriques et expérimentales [28-31] ont examiné les propriétés du polaron dans les nanostructures polaires. Les effets du couplage électron-phonon et des perturbations extérieurs tels que les champs électriques et magnétiques sur les propriétés électroniques des QDs ont attiré l'attention de nombreux auteurs [32-37]. Dans la Ref. [34], les auteurs ont analysé l'effet du polaron sur l'E_b d'une impureté donneur dans un QD sphérique sous l'effet d'un champ électrique externe. Ils ont découvert que l'E_b augmente avec l'effet de l'interaction électron-phonon et que le champ électrique externe augmente la contribution des phonons sur l'E_b. L'énergie de l'électron à l'état fondamental avec et sans effet du polaron dans un double QR à base de $GaAs$ en présence des champs électriques et magnétiques a été examinée par A. Shahbandari et al. [37]. Leurs résultats indiquent que l'application des champs électriques et magnétiques engendre une augmentation du confinement électronique qui, à son tour, améliore le couplage électron-phonon.

À notre connaissance, l'effet combiné du polaron et de la NP de la bande de conduction sur l'E_b d'une impureté peu profonde confinée dans le système QR en utilisant la méthode variationnelle n'a pas encore été étudié.

Dans ce chapitre, nous allons nous concentrer sur le calcul de l'énergie de liaison d'une impureté donneur confinée dans un QR à base de $GaN/Ga_{1-x}Al_xN$ sous l'effet d'un champ électrique externe appliqué suivant la direction axiale, dans le cadre de l'approximation de la masse effective. Pour le modèle de potentiel de confinement fini, les différences des paramètres physiques (constante diélectrique et masse effective de l'électron) entre la région du puit et de

matériau barrière ont été prises en considération. De plus, nous avons examiné dans le cas d'un potentiel de confinement infini l'effet combiné du polaron et de la NP de la bande de conduction sur l'E_b.

III.2. Impureté dans un anneau quantique en présence d'un champ électrique

III.2.1. Hamiltonien effectif

Considérons un électron couplé à une impureté donneur confinée dans le système QR à base de $GaN/Ga_{1-x}Al_xN$ dont les paramètres géométriques du QR : $R_2, R_1, \Delta R = R_2 - R_1$ et H sont le rayon extérieur, le rayon intérieur, l'épaisseur radiale et la hauteur du QR respectivement, comme le montre la figure III.1.

L'Hamiltonien H_{el} d'un électron à l'intérieur du système QR à base de $GaN/Ga_{1-x}Al_xN$ en interaction avec une impureté donneur en présence d'un champ électrique F externe appliqué suivant la direction z est donné par :

$$H_{el} = -\frac{\hbar^2}{2m^*_{(w/b)}}\nabla^2 + V(r) + eFz - \frac{e^2}{\epsilon_{(w/b)}|r - r_0|} \qquad \text{(III. 1)}$$

Le dernier terme de l'équation III.1 représente l'interaction Coulombienne entre l'électron et l'impureté. $m^*_{(w/b)}$ et $\epsilon_{(w/b)}$ sont respectivement la masse effective de l'électron et la constante diélectrique statique en WZ $GaN\ /Ga_{1-x}Al_xN$, où les indices w et b sont liés aux matériaux puit GaN et barrière $Ga_{1-x}Al_xN$ respectivement et r_0 est la position de l'impureté.

m^*_b et ϵ_b sont exprimées en fonction de la fraction molaire en aluminium x [38,39] :

$$m^*_b = m^*_w(1-x) + 0.3x \qquad \text{(III. 2)}$$

et

$$\epsilon_b = \epsilon_w(1-x) + 8.5x \qquad \text{(III. 3)}$$

Dans l'équation III.1, $V(r)$ décrit le potentiel de confinement de l'électron. Nous considérons le cas réaliste où l'électron est confiné dans le système QR par des murs de potentiel de hauteur fini :

$$V(r) = \begin{cases} 0 & si \quad R_1 \le \rho \le R_2 \quad et \ |z| \le \dfrac{H}{2} \\ V_0 & ailleurs \end{cases} \qquad \text{(III. 4)}$$

Pour obtenir la forme de l'Hamiltonien sans dimension, nous avons inclus les unités atomiques réduites. Pour l'énergie, nous avons utilisé le Rydberg effectif $R^*_d = \frac{\bar{m}e^4}{2\bar{\epsilon}^2\hbar^2}$ et le rayon

de Bohr $a_d^* = \frac{\bar{\epsilon}\hbar^2}{\bar{m}e^2}$ comme unité de longueur et $\eta^* = \frac{ea_d^* F}{R_d^*}$ définit le champ électrique dans ce système d'unité atomique où : $\bar{m} = \sqrt{m_w^* m_b^*}$ et $\bar{\epsilon} = \sqrt{\epsilon_w \epsilon_b}$. Avec ces considérations et avec l'utilisation les coordonnées cylindriques, l'Hamiltonien III.1 se simplifie à :

$$\frac{H_{el}}{R_d^*} = -\frac{\bar{m}}{m^*_{(w/b)}}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\frac{V(r)}{R_d^*}+\eta^* z - 2\frac{\bar{\epsilon}}{\epsilon_{(w/b)}\sqrt{(\rho-\rho_0)^2+(z-z_0)^2}} \qquad \text{(III. 5)}$$

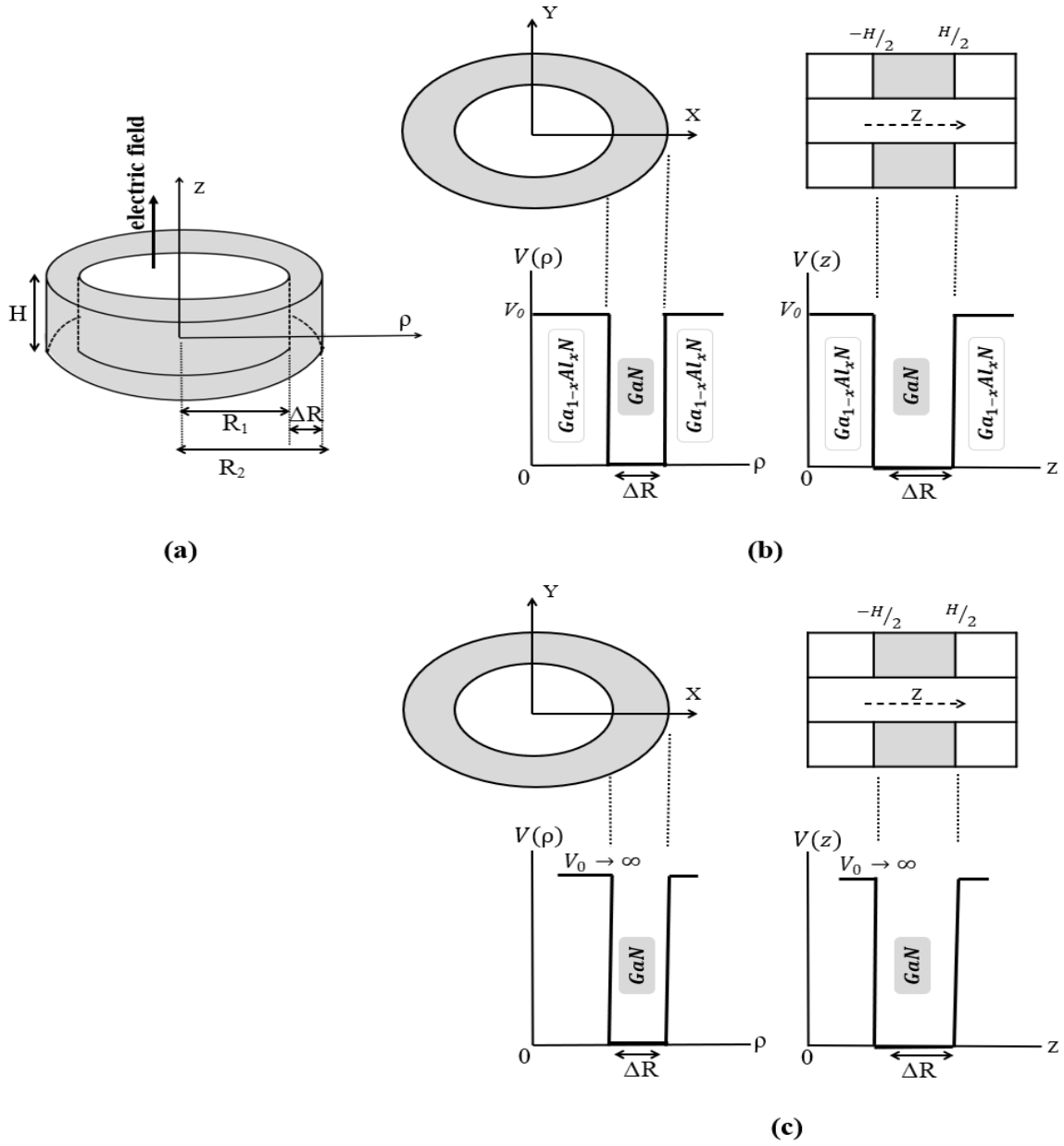


Figure III.1 : Représentation schématique de la structure du QR considérée dans ce chapitre (a). Les diagrammes schématiques (b) et (c) montrent les projections des dimensions de système QR pour les potentiels de confinements radial $(V(\rho))$ et axial $(V(z))$ dans les directions xy et xz et pour les potentiels de confinement fini et infini respectivement.

III.2.2. Choix de la fonction d'essai

Pour étudier l'interaction électron-impureté à l'intérieur du QR, nous choisissons la fonction d'onde variationelle séparable, c'est-à-dire [13] :

$$\phi(\rho, z, a, b) = Nf(\rho)g(z)e^{-\left(a\,(\rho-\rho_0)^2+b(z-z_0)^2\right)} \qquad \text{(III. 6)}$$

où N est une constante de normalisation et $e^{-\left(a\,(\rho-\rho_0)^2+b(z-z_0)^2\right)}$ est une partie variationnelle de la fonction d'onde, avec a et b sont des paramètres variationnels.

Dans l'équation III.6, $f(\rho)$ est la partie radiale de la fonction d'onde décrivant le confinement quantique de l'électron dans le système QR en absence de l'impureté peut s'écrire sous la forme :

$$f(\rho) = \begin{cases} C_1 I_0(\alpha\rho) & si \quad 0 \le \rho < R_1 \\ J_0(\beta\rho) + N_0 Y_0(\beta\rho) & si \quad R_1 \le \rho \le R_2 \\ C_3 K_0(\alpha\rho) & si \quad \rho > R_2 \end{cases} \qquad \text{(III. 7)}$$

avec : $J_0(Y_0)$ et $I_0(K_0)$ sont respectivement la fonction de Bessel de premier espèce (deuxième espèce) et la fonction de Bessel modifiée de premier espèce (deuxième espèce) de l'ordre 0.

où C_1 et C_3 sont calculés en utilisant la continuité de $f(\rho)$ en $\rho = R_1$ et en $\rho = R_2$, N_0 peut être déterminé à partir de la continuité de la dérivation de $f(\rho)$ en $\rho = R_1$, ce qui nous donne les expressions suivantes :

$$C_1 = \frac{J_0(\beta R_1) + N_{0e} Y_0(\beta R_1)}{I_0(\alpha R_1)} \qquad \text{(III. 8)}$$

$$C_3 = \frac{J_0(\beta R_2) + N_{0e} Y_0(\beta R_2)}{K_0(\alpha R_2)} \qquad \text{(III. 9)}$$

et

$$N_0 = \frac{-m_b^* \beta I_0(\alpha R_1) J_1(\beta R_1) - m_w^* \alpha J_0(\beta R_1) I_1(\alpha R_1)}{m_w^* \alpha Y_0(\beta R_1) I_1(\alpha R_1) + m_b^* \beta I_0(\alpha R_1) Y_1(\beta R_1)} \qquad \text{(III. 10)}$$

où les paramètres α et β sont donnés par :

$$\alpha = \sqrt{\frac{m_b^*}{\bar{m}}\left(V_0 - E_\rho\right)} \qquad \text{(III. 11)}$$

et

$$\beta = \sqrt{\frac{m_w^*}{\bar{m}} E_\rho} \qquad \text{(III. 12)}$$

et E_ρ désigne l'énergie de l'électron dans la direction radiale ρ en absence de l'impureté, et peut être calculée par la résolution de l'équation transcendantale suivante :

$$\begin{vmatrix} I_0(\alpha R_1) & -J_0(\beta R_1) & -Y_0(\beta R_1) & 0 \\ 0 & J_0(\beta R_2) & Y_0(\beta R_2) & -K_0(\alpha R_2) \\ \frac{\alpha}{m_b^*} I_1(\alpha R_1) & \frac{\beta}{m_w^*} J_1(\beta R_1) & \frac{\beta}{m_w^*} Y_1(\beta R_1) & 0 \\ 0 & -\frac{\beta}{m_w^*} J_1(\beta R_2) & -\frac{\beta}{m_w^*} Y_1(\beta R_2) & \frac{\alpha}{m_b^*} K_1(\alpha R_2) \end{vmatrix} = 0 \qquad \text{(III. 13)}$$

Dans l'équation III.6, $g(z)$ décrit la fonction d'onde électronique axiale en absence de l'impureté et prend la forme suivante [13] :

$$g(z) = \begin{cases} A_{z1}\, exp\left(k_1\left(z + \frac{H}{2}\right)\right) & si \quad z < -\frac{H}{2} \\ D_{z1} Ai(\xi) + D_{z2} Bi(\xi) & si \quad |z| \le \frac{H}{2} \\ A_{z2}\, exp\left(k_2\left(z - \frac{H}{2}\right)\right) & si \quad z > \frac{H}{2} \end{cases} \qquad \text{(III. 14)}$$

où $Ai(\xi)$ $\left(Bi(\xi)\right)$ représente la fonction de Airy du premier espèce (deuxième espèce). Les paramètres k_1, k_2 et ξ sont donnés par :

$$k_1 = \sqrt{\frac{m_b^*}{\overline{m}}\left(V_0 - \eta^* \frac{H}{2} - E_z\right)} \qquad \text{(III. 15)}$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{m_b^*}{\overline{m}}\left(V_0 + \eta^* \frac{H}{2} - E_z\right)} \qquad \text{(III. 16)}$$

et

$$\xi = \frac{m_w^*}{\overline{m}}\left(\frac{\eta^* z - E_z}{\eta^{*2/3}}\right) \qquad \text{(III. 17)}$$

On détermine les constantes A_{z1} et A_{z2} dans l'équation III.14 par l'application des conditions aux limites à $z = -\frac{H}{2}$ et $z = \frac{H}{2}$, ce qui donne :

$$A_{z1} = D_{z1} Ai(\xi^-) + D_{z2} Bi(\xi^-) \qquad \text{(III. 18)}$$

et

$$A_{z2} = D_{z1} Ai(\xi^+) + D_{z2} Bi(\xi^+) \qquad \text{(III. 19)}$$

où $\xi^{-}(\xi^{+})$ est la valeur de ξ calculée à $z = -\frac{H}{2}\left(z = \frac{H}{2}\right)$.

E_z est l'énergie de confinement de l'électron dans la direction z en absence de l'impureté, et peut être calculée numériquement par la résolution de l'équation transcendantale suivante :

$$\begin{vmatrix} \frac{k_1}{m_b^*} & -\frac{1}{m_w^*}\frac{\partial}{\partial z}\left(Ai(\xi^{-})\right) & -\frac{1}{m_w^*}\frac{\partial}{\partial z}\left(Bi(\xi^{-})\right) & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_w^*}\frac{\partial}{\partial z}\left(Ai(\xi^{+})\right) & \frac{1}{m_w^*}\frac{\partial}{\partial z}\left(Bi(\xi^{+})\right) & \frac{k_2}{m_b^*} \\ 1 & -Ai(\xi^{-}) & -Bi(\xi^{-}) & 0 \\ 0 & -Ai(\xi^{+}) & -Bi(\xi^{+}) & 1 \end{vmatrix} = 0 \qquad \text{(III. 20)}$$

III.2.3. Effet de la non parabolicité de la bande de conduction

L'effet de la NP de la bande de conduction a été pris en compte dans notre étude, à travers la masse effective de l'électron m^*, qui est exprimée en fonction de l'énergie de sous-bande (E_e). D'après S. Syed et al. [44], la correction de la masse effective dans un WZ GaN est donnée par :

$$m_{np}^* = m^*\left(1 + \frac{2KE_e}{E_g}\right) \qquad \text{(III. 21)}$$

avec $K = 1$ et $E_g = 3.5\ eV$ où m^* est la masse effective de l'électron dans l'approximation d'une bande parabolique.

III.2.4. Energie de liaison de l'impureté

L'énergie de liaison de l'impureté donneur peut profond E_b est définie par la différence entre l'énergie de l'électron en absence de l'impureté et l'énergie de l'état lié minimisée (énergie de l'impureté) par rapports aux deux paramètres variationnels a et b, soit :

$$E_b = E_e - min_{a,b}\langle\phi(\rho, z, a, b)|H_{el}|\phi(\rho, z, a, b)\rangle \qquad \text{(III. 22)}$$

où $E_e = E_\rho + E_z$ est l'énergie de confinement de l'électron dans le système QR.

III.3. Correction polaronique sur l'énergie de liaison de l'impureté

III.3.1. Hamiltonien effectif

Considérons un électron localisé dans la structure QR couplé à une impureté donneur et interagissant avec le mode de phonon LO (optiques longitudinaux) volumique. L'Hamiltonien du système est donné dans le cadre de l'approximation de la masse effective par :

$$H = H_{el} + \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{LO} a_{\vec{q}}^{+} a_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} \left(V_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} a_{\vec{q}} + V_{\vec{q}}^{*} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} a_{\vec{q}}^{+} \right) \qquad \text{(III. 23)}$$

où H_{el} est l'Hamiltonien décrivant l'interaction électron-impureté. Le deuxième et le troisième terme de l'équation III.23 décrivent respectivement le champ de phonon LO volumique et l'interaction électron-phonon. $a_{\vec{q}}(a_{\vec{q}}^{+})$ est l'opérateur d'annihilation (création) du phonon LO de fréquence ω_{LO} et de vecteur d'onde $\vec{q}$. $V_{\vec{q}}$ est l'amplitude du couplage électron- phonon, donnée par [35, 37]:

$$V_{\vec{q}} - \frac{i\,\hbar\omega_{LO}}{q} \left(\frac{4\pi\alpha_0}{\Omega} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\hbar}{2m^{*}\omega_{LO}} \right)^{\frac{1}{4}} \qquad \text{(III. 24)}$$

avec :

$$\alpha_0 = \left(\frac{e^2}{2\hbar\omega_{LO}} \right) \left(\frac{2m^{*}\omega_{LO}}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right) \qquad \text{(III. 25)}$$

désignant la constante de couplage électron-phonon, Ω est le volume de la structure QR, m^{*} est la masse effective de l'électron et $\varepsilon_\infty(\varepsilon_0)$ est la constante diélectrique optique (statique).

III.3.2. Fonction d'onde électronique et énergie du polaron

La fonction d'onde du système en présence des phonons LO volumique est appelée la fonction d'onde de Landau-Pekar, définie comme étant le produit entre la fonction d'onde électronique $\phi(\rho, z, a\,, b)$ et la fonction d'onde de phonon LO volumique. Nous travaillons à basse température pour adopter l'état vide de phonon [37] :

$$\psi = \phi(\rho, z, a\,, b) exp\left(\sum_{\vec{q}} \left(f_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{+} - f_{\vec{q}}^{*} a_{\vec{q}} \right) \right) |0\rangle \qquad \text{(III. 26)}$$

où $|0\rangle$ est l'état vide du phonon. Nous considérons la transformation canonique de Pekar pour séparer l'Hamiltonien H du système en deux contributions liées au l'électron et au phonon :

$$H' = e^{-S} H e^{S} \qquad \text{(III. 27)}$$

avec S est un opérateur donné par :

$$S = \sum_{\vec{q}} \left(f_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{+} - f_{\vec{q}}^{*} a_{\vec{q}} \right) \qquad \text{(III. 28)}$$

où $f_{\vec{q}}$ est un paramètre variationnel déterminé en minimisant l'énergie totale du polaron. L'expression de l'énergie du polaron s'écrit :

$$E^{e-ph} = \left\langle \psi \middle| H' \middle| \psi \right\rangle$$

$$= \langle \phi | H_{el} | \phi \rangle + \sum_{\vec{q}} \hbar \omega_{LO} \left| f_{\vec{q}} \right|^2 + \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}} \langle \phi | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \phi \rangle f_{\vec{q}} + \sum_{\vec{q}} V_{\vec{q}}^{*} \langle \phi | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \phi \rangle f_{\vec{q}}^{*} \qquad \text{(III. 29)}$$

Pour déterminer le paramètre $f_{\vec{q}}$, on utilise la condition variationnelle :

$$\frac{\partial E^{e-ph}}{\partial f_{\vec{q}}^{*}} = 0 \qquad \text{(III. 30)}$$

Le calcul de l'équation III.30 fournit :

$$f_{\vec{q}} = -\frac{V_{\vec{q}}^{*}}{\hbar \omega_{LO}} \langle \phi | e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \phi \rangle \qquad \text{(III. 31)}$$

En remplaçant l'équation III.31 dans l'équation III.29, on obtient l'énergie du polaron :

$$E^{e-ph}(a\,, b) = \langle \phi | H_{el} | \phi \rangle - \sum_{\vec{q}} \frac{\left| V_{\vec{q}} \right|^2}{\hbar \omega_{LO}} \left| \langle \phi | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \phi \rangle \right|^2 \qquad \text{(III. 32)}$$

III.3.3. Energie de liaison du polaron

L'énergie de liaison du polaron E_b^{el-ph} est définie comme étant la différence entre l'énergie de l'électron sans interaction Coulombienne E_e et l'énergie de l'impureté en tenant compte de l'effet des phonons $E^{e-ph}(\alpha_0, a_0\,, b_0)$, soit :

$$E_b^{el-ph} = E_e - E^{e-ph}(\alpha_0, a_0\,, b_0) \qquad \text{(III. 33)}$$

où a_0 et b_0 sont respectivement les valeurs de a et b qui minimise $E^{e-ph}(a\,, b)$. Après le calcul de la somme sur $\vec{q}$, l'E_b^{el-ph} s'écrit :

$$E_b^{el-ph} = E_e - \frac{\alpha_0 a_d^{*}}{2\pi^2} \left(\frac{\hbar \omega_{LO}}{R_d^{*}} \right)^{\frac{1}{2}} \int \frac{\mathrm{d}\vec{q}}{\mathrm{q}^2} \left| \langle \psi(\rho, z, a_0\,, b_0) | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \psi(\rho, z, a_0\,, b_0) \rangle \right|^2 \qquad \text{(III. 34)}$$

III.4. Résultats et discussions

Dans les résultats numériques, nous avons appliqué notre modèle à un système QR à base de matériau WZ $GaN/Ga_{1-x}Al_xN$ à potentiels de confinement fini et infini sous l'effet d'un champ électrique externe. L'énergie de liaison de l'impureté donneur peu profond est calculée en fonction des paramètres géométriques du QR (la hauteur H, le rayon intérieur R_1, le rayon extérieur R_2, l'épaisseur radiale ΔR et la position de l'impureté r_0) et de la concentration en aluminium x avec et sans effet de la NP de la bande de conduction. En outre, nous avons examiné dans le cas d'un modèle de potentiel de confinement infini l'effet combiné de la NP de la bande de conduction et du polaron sur l'énergie de liaison de l'impureté donneur. Les paramètres physiques adoptés dans nos calculs sont représentés dans le tableau III.1.

m^*	$m_w^* = 0.2$ [41]
ϵ_r	$\epsilon_w = 9.8$ [41]
Rayon de Bohr	$a_d^* = \frac{\bar{\epsilon}\hbar^2}{\bar{m}e^2} = 2.43\ nm$
Rydberg effectif	$R_d^* = \frac{\bar{m}e^4}{2\bar{\epsilon}^2\hbar^2} = 30.52\ meV$
$\hbar\omega_{LO}$	$92.5\ meV$ [41]
α_0	0.45 [41]

Tableau III.1 : Constantes physiques caractérisant le GaN utilisées dans notre calcul.

La figure III.2 montre la variation de l'E_b d'une impureté donneur située au centre de QR ($\rho_0 = 0.5(R_1 + R_2)a_d^*$ & $z_0 = 0.0a_d^*$) en fonction de la hauteur H de QR pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini en absence de champ électrique. Il apparaît sur la figure que la variation de l'E_b en fonction de la hauteur dans le cas d'un potentiel infini se comporte différemment que dans le cas d'un potentiel fini. En effet, les valeurs de l'E_b pour le modèle de potentiel de confinement infini sont supérieures à celles du modèle fini, ce comportement est analogue à celui obtenu dans les autres boîtes quantiques pour des formes géométriques différentes [22-23, 42]. L'origine de cette différence peut s'expliquer par le fait que le potentiel de confinement infini rend la fonction d'onde de l'impureté plus localisée à l'intérieur du QR et cela conduit à une augmentation de l'E_b. En plus, on remarque que l'E_b augmente clairement avec x pour des hauteurs H étroites de système QR et cette augmentation

devient plus faible pour des hauteurs H plus grandes. Ceci peut être dû au fait que l'augmentation de la hauteur de la barrière du matériau qui améliore le confinement de l'électron et qui donne une amélioration de l'E_b.

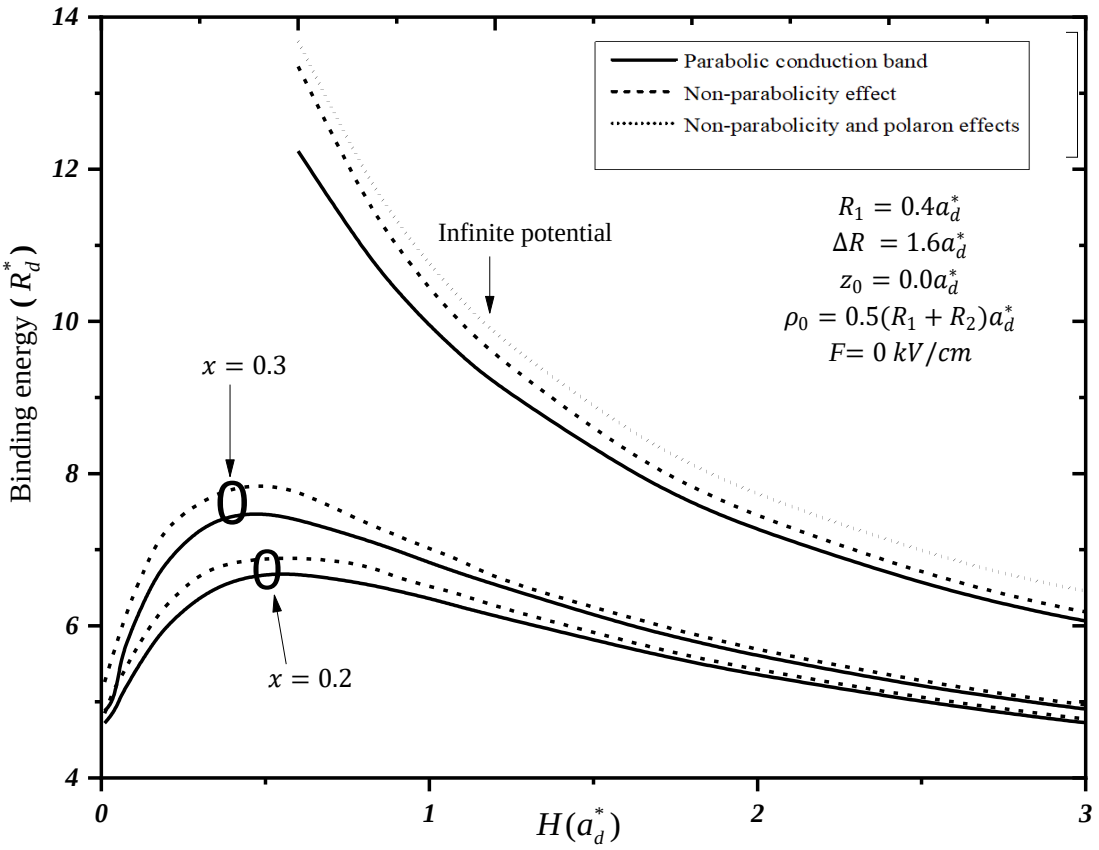


Figure III.2 **:** Energie de liaison d'une impureté donneur en fonction de la hauteur H du système QR pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait plein), avec effet de la NP de la bande de conduction (courbes en tirets) et avec effet combiné du polaron et de la NP (courbes en pointillés).

De plus, on peut observer que l'inclusion de l'effet de la NP de la bande de conduction a un effet important sur $l'E_b$ uniquement pour les structures QRs très petites (pour des petites hauteurs H) et cet effet est d'autant important que la hauteur du matériau barrière augmente. Ce dernier comportement confirme les résultats attendus liés à l'augmentation remarquable de l'effet de la NP de la bande de conduction dans le cas d'un potentiel de hauteur infini. Les résultats représentés ci-dessus au moyen de l'approche variationnelle en absence de l'effet du polaron sont conformes aux études précédentes [22-23] utilisant la méthode des éléments finis. De plus, la figure montre que la correction polaronique de l'énergie de liaison est prononcée dans le régime de faible confinement (les grandes valeurs de H) et domine l'effet de la NP de la bande de conduction, alors que lorsque la hauteur H du QR diminue, la différence d'énergie due à

l'effet de la NP de la bande de conduction devient progressivement plus importante et domine l'effet polaronique.

La figure III.3 montre la dépendance de l'E_b en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de système QR pour les mêmes paramètres géométriques que ceux de la figure III.2, pour $H = 1.0a_d^*$ et $F = 0\ kV/cm$. Le comportement de l'E_b en fonction de ΔR est similaire à celui de la figure III.2. La comparaison entre les figures III.2 et III.3 révèle que les valeurs de l'E_b sont plus élevées pour le cas de E_b en fonction de ΔR (figure III.3) dans les différents cas.

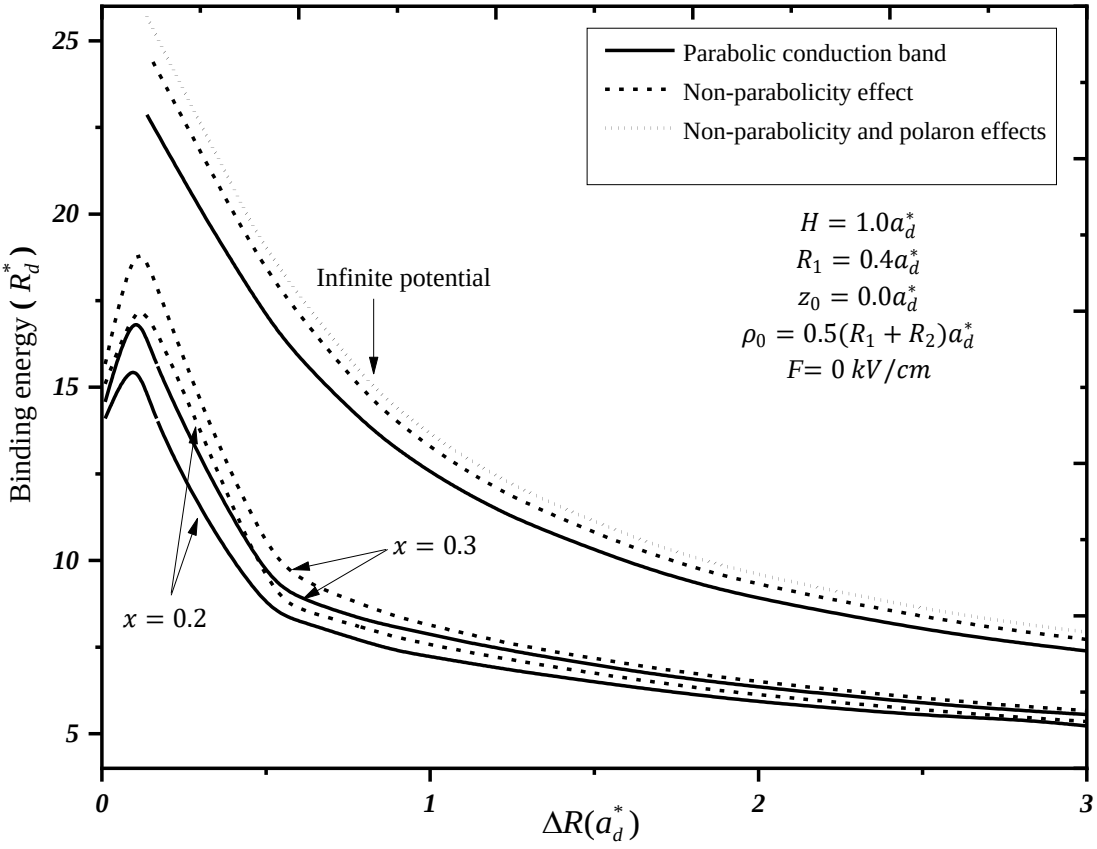


Figure III.3 : Energie de liaison d'une impureté donneur en fonction de l'épaisseur radiale ΔR du système QR pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait plein), avec effet de la NP de la bande de conduction (courbes en tirets) et avec effet combiné du polaron et de la NP (courbes en pointillés).

De plus, l'effet de la NP de la bande de conduction sur l'énergie de liaison de l'impureté dans la direction radiale ρ est plus prononcé que la direction axiale z, cette différence peut s'expliquer par le fort confinement dans la direction radiale (confinement dans deux directions x et y). Nous voyons également que l'influence de la concentration en aluminium x et l'effet combiné du polaron et de la NP de la bande de conduction est plus prononcé dans la figure III.3 pour la même raison décrite ci-dessus.

Dans la figure III.4, nous avons représenté la variation de l'E_b en fonction de la position axiale z_0 d'une impureté confinée dans le système QR, pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini, pour $\rho_0 = 0.5(R_1 + R_2)a_d^*$ et pour un champ électrique nul. Chaque courbe de la figure montre que l'E_b augmente d'abord, atteint une valeur maximale, puis diminue à mesure que la position de l'impureté z_0 passe de $-0.5a_d^*$ à $0.5a_d^*$. La valeur de l'E_b présente un maximum lorsque l'électron est placé au centre axial de système QR ($z_0 = 0.0a_d^*$) où la densité de probabilité électronique est maximale, puisque dans cette position l'électron et l'impureté sont fortement liés l'un à l'autre.

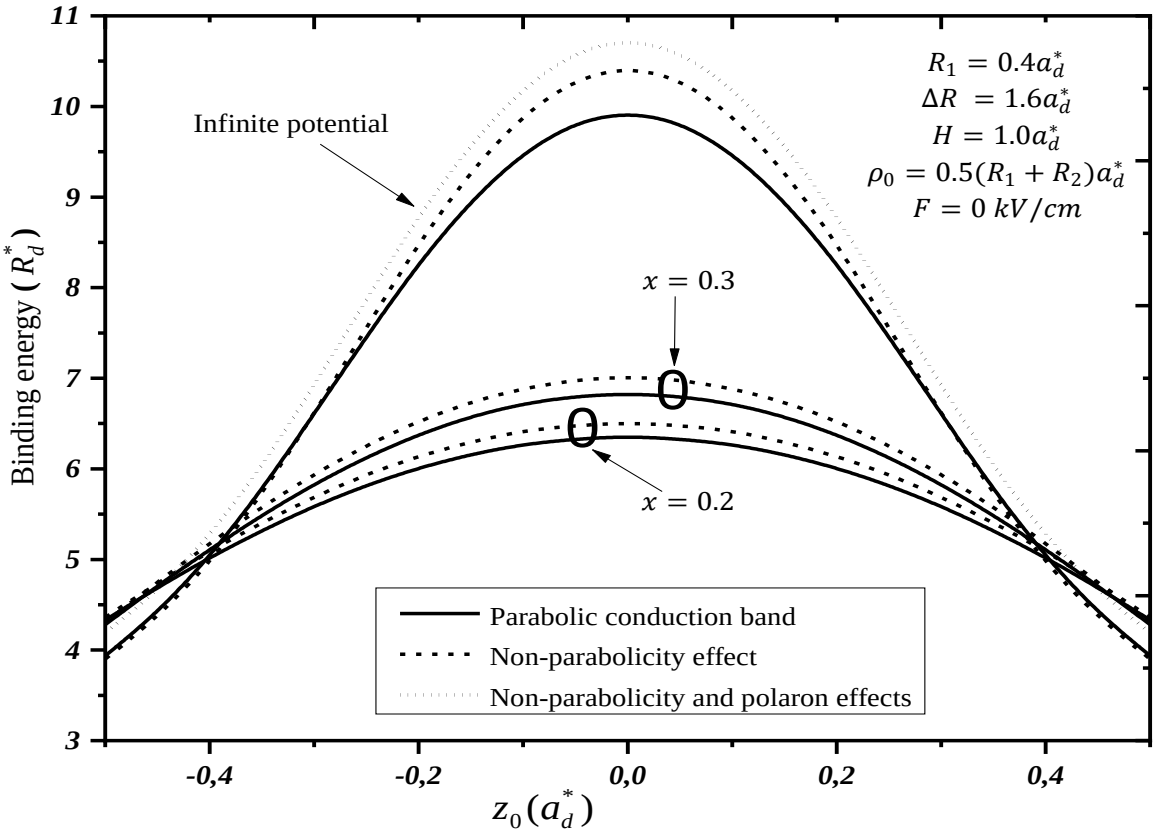


Figure III.4 : Energie de liaison d'une impureté donneur en fonction de la position axiale de l'impureté z_0, pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait plein), avec effet de la NP de la bande de conduction (courbes en tirets) et avec effet combiné du polaron et de la NP (courbes en pointillés).

De plus, lorsque l'impureté se déplace du centre vers les bords du système QR, l'électron et l'impureté sont moins liés et par conséquent, l'E_b diminue. Ces résultats sont en accord avec d'autres études théoriques antérieures [8, 13]. D'autre part, la figure indique également que l'effet de la NP de la bande de conduction sur l'E_b est plus remarquable lorsque la position axiale de l'impureté se situe au centre du système QR pour les deux types potentiels de

confinement fini et infini. On peut également remarquer à partir de la figure que plus la concentration en Al augmente de $x = 0.2$ à 0.3, plus l'effet de la NP de la bande de conduction sur l'E_b devient important et cet effet est clairement visible dans le cas de potentiel de confinement infini dû à la forte localisation de la fonction d'onde électronique de l'état fondamental près du centre de système QR. Pour $|z_0| > 0.3a_d^*$, le couplage électron-phonon a un effet majeur sur $l'E_b$ par rapport à la contribution de la NP de la bande de conduction. Alors que, lorsque l'impureté se déplace de $z_0 = \pm 0.3a_d^*$ vers le centre de système QR, l'impact dû à l'effet de la NP de la bande de conduction devient de plus en plus significatif et domine l'effet polaronique.

Comme illustré sur la figure III.5, nous avons représenté la variation du E_b en fonction de la position radiale de l'impureté ρ_0 dans le système QR pour une valeur fixe de la position axiale $z_0 = 0.0a_d^*$ avec $F = 0\ kV/cm$ pour les trois cas : une bande parabolique, avec effet de la non parabolicité de la bande de conduction et avec l'effet combiné de la non parabolicité et de l'effet de phonon. On observe le même comportement que celui de la figure III.4, c'est-à-dire que l'E_b augmente, prend une valeur maximale puis diminue lorsque l'impureté se déplace de la position $\rho_0 = 0$ aux positions de bords du système, cette diminution s'explique par l'interaction Coulombienne entre l'impureté et l'électron qui s'affaiblit progressivement à mesure que l'impureté s'éloigne du milieu de la structure QR. On peut noter aussi que la valeur maximale de l'E_b se trouve au milieu radial de système matériau QR défini par $\rho_0 = 0.5(R_1 + R_2)a_d^*$ qui rend la distribution de la fonction d'onde de l'électron essentiellement autour du centre du matériau QR. De plus, nous voyons sur la même figure que lorsque les effets de la NP de la bande de conduction et la correction polaronique sont étudiés simultanément, l'E_b présente approximativement le même effet que celui de la figure III.4. En outre, lorsque la concentration en Al augmente jusqu'à 0.3, le confinement spatial des électrons devient plus fort, ce qui rend la fluctuation de l'énergie de liaison de l'impureté et son maximum plus importants, cette situation est bien observée dans le cas d'un potentiel de confinement infini. Aussi, cet effet est clairement visible lorsque l'impureté est confinée dans la direction radiale (figure III.5) que dans la direction axiale (figure III.4).

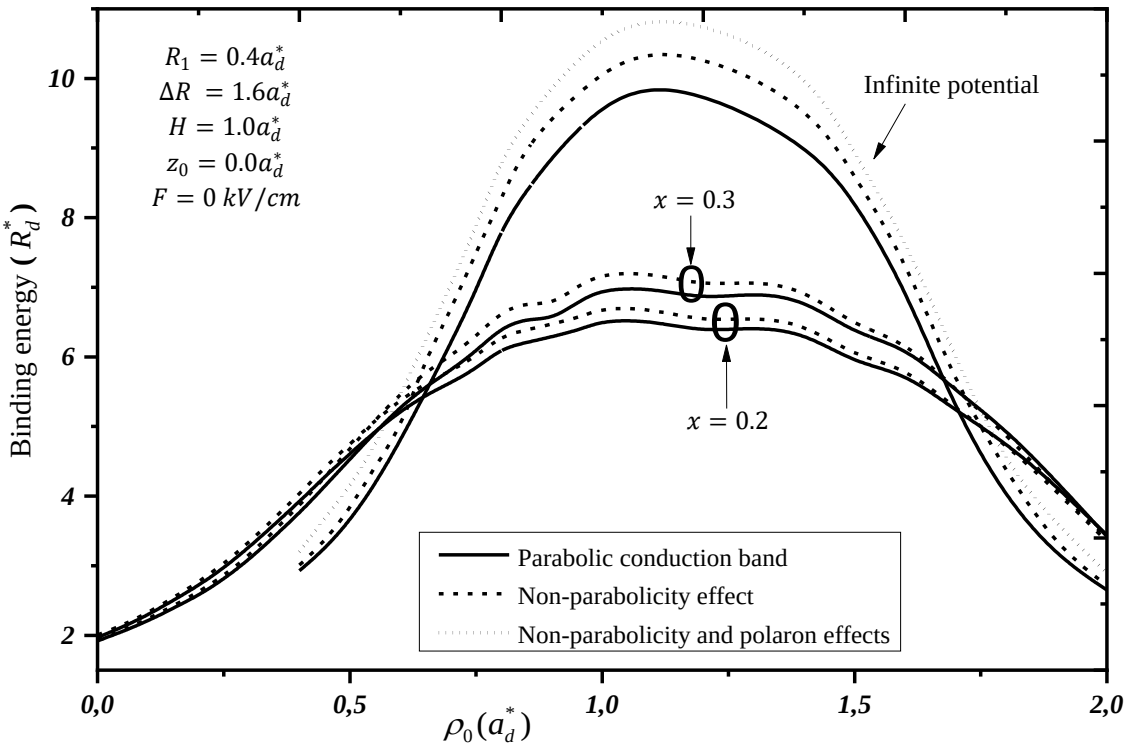


Figure III.5 : Energie de liaison d'une impureté donneur en fonction de la position radiale de l'impureté ρ_0, pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini, pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait plein), avec effet de la NP de la bande de conduction (courbes en tirets) et avec effet combiné du polaron et de la NP (courbes en pointillés).

Dans la Figure III.6, nous avons illustré l'E_b d'une impureté de type donneur localisée au centre du système QR en fonction du champ électrique externe F pour deux valeurs différentes de la hauteur H ($H = 1.0a_d^*$ & $2.5a_d^*$), dans le cas des potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini. D'après la figure III.6, il apparaît que pour $H = 1.0a_d^*$, l'E_b reste pratiquement constant dans toutes les valeurs de F dans les deux cas de potentiel de confinement, cela peut être attribué au fort confinement électronique. En revanche, pour les systèmes QRs épais comme $H = 2.5a_d^*$, l'E_b reste pratiquement constant dans le régime de faible champ électrique, cette situation est bien observée dans le cas de potentiel de confinement infini. D'autre part, il y a une diminution évidente du l'E_b dans le régime de champ électrique élevé où l'effet de confinement est faible devant celui du champ électrique.

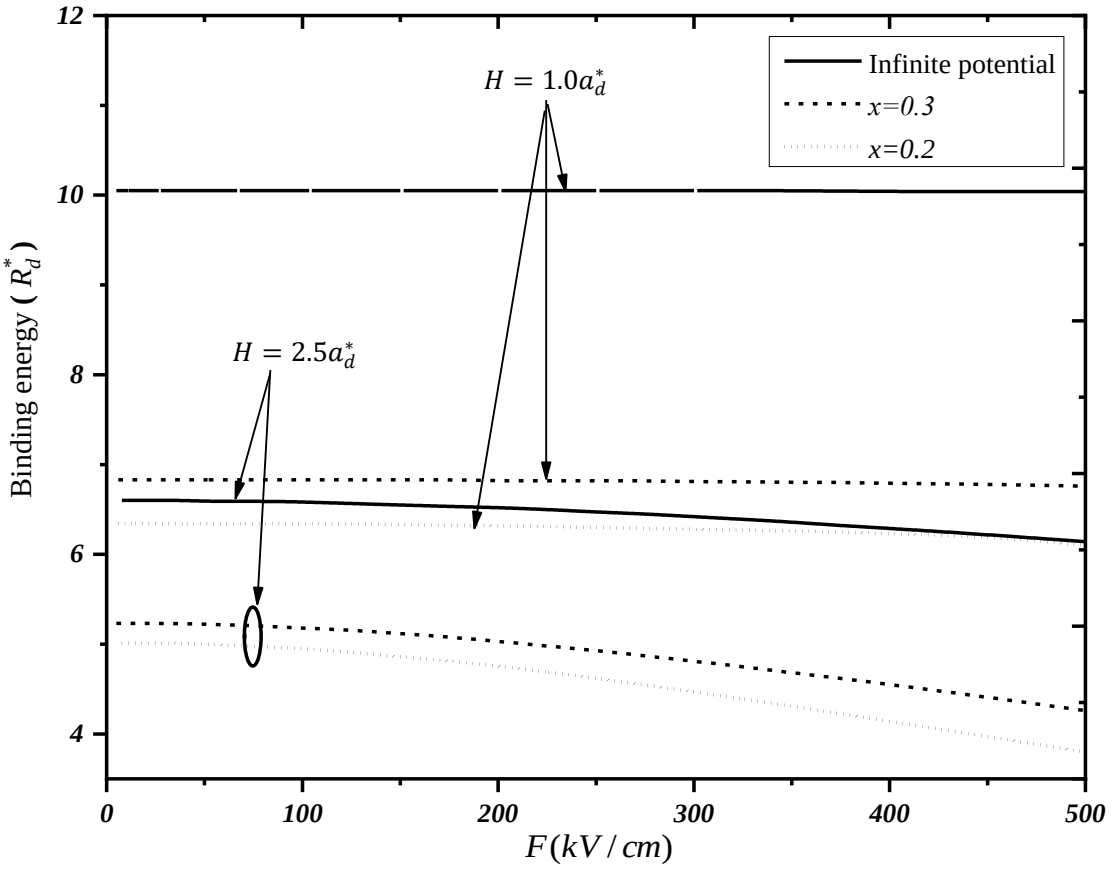


***Figure III.6* :** Energie de liaison d'une impureté donneur hydrogénoïde localisée au centre du système QR en fonction du champ électrique externe F pour deux valeurs différentes de la hauteur H ($H = 1.0a_d^*$ & $2.5a_d^*$) pour les deux types de potentiel de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini et pour les paramètres fixes suivants : $R_1 = 0.4a_d^*$ et $\Delta R = 1.6a_d^*$.

La variation du stark shift de l'énergie de liaison (différence entre E_b en présence et en absence du champ électrique) d'une impureté donneur localisée au centre du QR en fonction du champ électrique F pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini est représentée sur la figure III.7, avec les mêmes paramètres que ceux utilisés dans la figure III.6 et pour $H = 2.5a_d^*$. Nous constatons que pour des valeurs du champ électrique extérieur inférieur à $F_1 = 60\ kV/cm$, il n'y a pas clairement de Stark shift. Cela signifie que le champ électrique ne peut surmonter le confinement quantique que lorsque le champ électrique est supérieur à F_1. Au contraire, pour des valeurs du champ électriques supérieure à F_1. De plus, on constate que la variation d'énergie (stark shift) diminue au fur et à mesure que l'intensité du champ électrique augmente et que cette diminution est très prononcée pour la concentration $x = 0.2$.

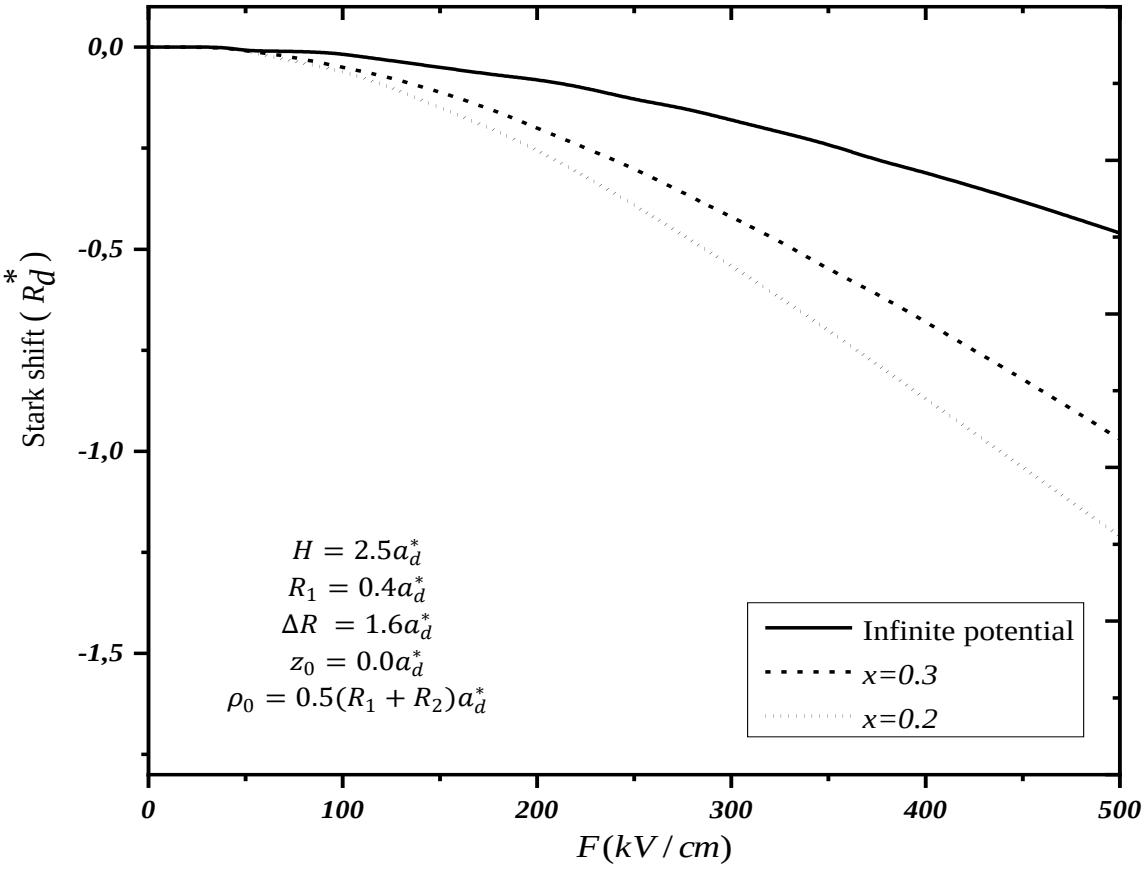


Figure III.7 : Stark shift de l'énergie de liaison d'une impureté donneur hydrogénoïde localisée au centre du système QR en fonction du champ électrique F pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini.

La figure III.8 montre la variation de l'énergie de liaison à l'état fondamental d'une impureté donneur située au centre du système QR en fonction du champ électrique F avec (courbes en trait plein) et sans (courbes en tirets) la correction polaronique, avec les mêmes paramètres utilisés dans la figure III.7. Par comparaison avec le cas sans phonon, on peut constater que le couplage électron-phonon joue un rôle important, il provoque une augmentation significative de l'énergie de liaison, ce comportement est en accord avec celui constaté dans les Refs. [28,29,35]. De plus, les résultats numériques montrent que la contribution des phonons LO augmente légèrement avec l'augmentation du champ électrique, ce qui est en accord avec les études précédentes [35]. Le consensus général de cette figure est que la correction polaronique est importante pour les semiconducteurs polaires tels que le GaN et ne peut pas être négligée.

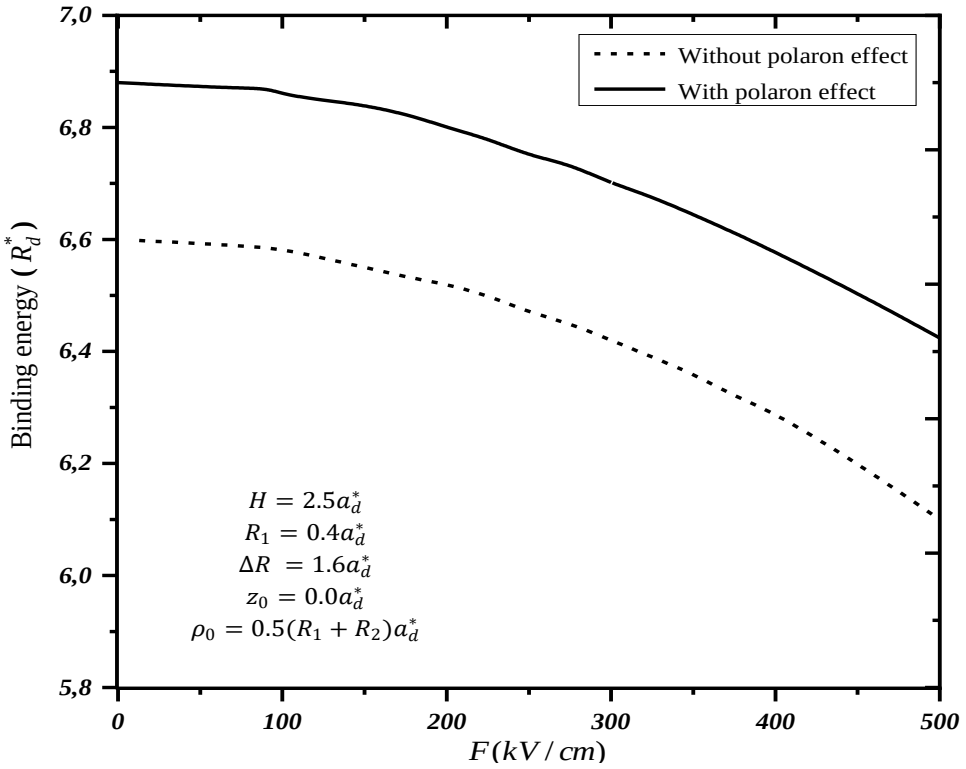


Figure III.8 : Energie de liaison d'une impureté donneur située au centre du système QR en fonction du champ électrique F avec (courbes en trait plein) et sans (courbes en tirets) la correction polaronique dans le potentiel de confinement infini.

L'énergie de liaison de l'impureté localisée au centre du système QR sans (courbes en tirets) et avec effet du polaron (courbes en trait plein) en présence ($F = 100\ kV/cm$) et en absence de champ électrique en fonction de la hauteur H de la structure QR est représentée sur la figure III.9. Comme il est indiqué ci-dessous, pour une valeur fixe du champ électrique, $l'E_b$ diminue à mesure que la hauteur H du système QR augmente et cette diminution est bien marquée pour le faible confinement quantique. La même figure montre que l'effet du polaron sur l'E_b est légèrement remarquable dans le régime de faible confinement le long de la direction axiale et cet effet est un peu plus important pour $F = 100\ kV/cm$. Nous pouvons expliquer ce dernier comportement par une faible augmentation de la contribution du phonon à l'E_b en présence du champ électrique, ce qui confirme les résultats précédents (figure III.8).

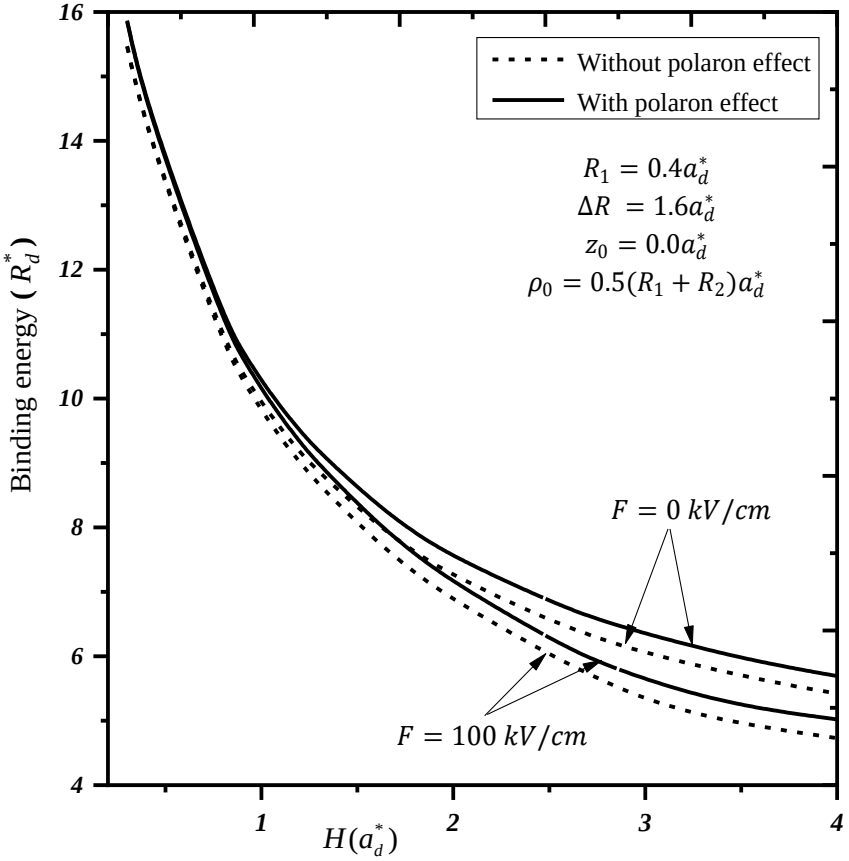


Figure III.9 : Energie de liaison d'une impureté donneur située au centre du système QR en fonction de la hauteur H du système QR avec (courbes en trait plein) et sans (courbes en tirets) l'effet du polaron et pour deux valeurs du champ électrique ($F = 0$ & $100\ kV/cm$).

La figure III.10 montre la dépendance de l'E_b en fonction l'épaisseur radiale ΔR du système QR en présence ($F = 100\ kV/cm$) et en absence de champ électrique, avec les mêmes paramètres de la figure III.9 et pour $H = 2.0a_d^*$. Comme nous pouvons le voir sur cette figure, l'effet de couplage électron-phonon augmente avec la diminution de l'épaisseur radiale du système QR. Ce résultat est en accord avec les études précédentes présentant un effet du polaron sur l'E_b dans les QDs de différentes formes géométriques [34-35,40] et dont les résultats communs indiquent que la contribution du couplage électron-LO phonon sur l'E_b est plus remarquable pour les QDs étroites (fort confinement quantique). En outre, pour les deux cas, avec et sans phonon, la figure révèle que l'effet de champ électrique est considérable pour les petits QDs. De plus, nos calculs indiquent que la correction de l'E_b par l'effet polaronique est plus significative pour l'épaisseur radiale ΔR (figure III.10) que pour la hauteur du système QR (figure III.9).

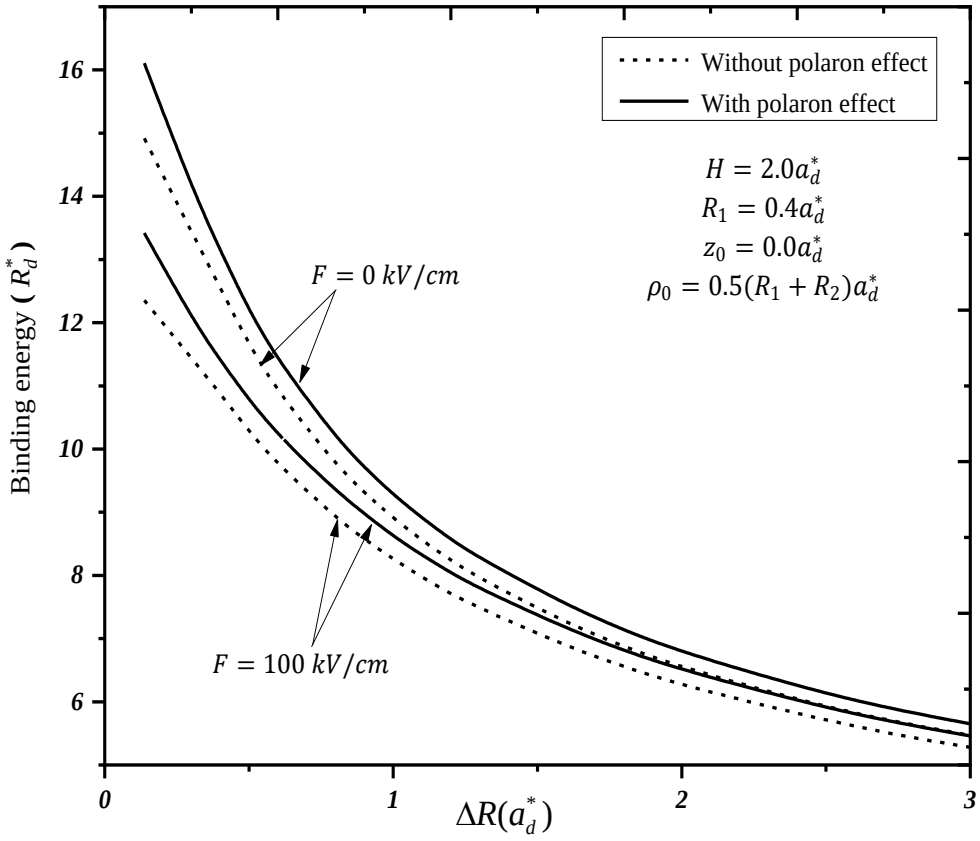


Figure III.10 : Energie de liaison d'une impureté située au centre du système QR en fonction de l'épaisseur radiale ΔR du système QR avec (courbes en trait plein) et sans (courbes en tirets) effet du polaron et pour deux valeurs du champ électrique ($F = 0$ & $100\ kV/cm$).

Nous avons étudié dans la figure III.11 la variation de l'E_b en fonction de la position axiale de l'impureté z_0, avec et sans l'effet du polaron en présence et en absence du champ électrique ($F = 0$ & $100\ kV/cm$) et pour $\rho_0 = 0.5(R_1 + R_2)a_d^*$. La figure montre clairement que l'E_b avec et sans effet du polaron a un maximum, qui se déplace vers le côté gauche du QR avec l'augmentation de l'intensité du champ électrique, parce que la distribution de la charge est déplacée vers la gauche. De plus, les calculs montrent que la contribution de la correction polaronique sur l'E_b est importante lorsque l'impureté est localisée au milieu du système QR ($\rho_0 = 0.5(R_1 + R_2)a_d^*$ et $z_0 = 0.0a_d^*$), puisque dans cette position, la fonction d'onde de l'impureté est plus localisée, il en résulte une augmentation de l'interaction entre l'électron et le phonon LO, ce qui conduit à une amélioration de l'E_b. Ces résultats sont en accord avec ceux obtenus dans la Ref. [43].

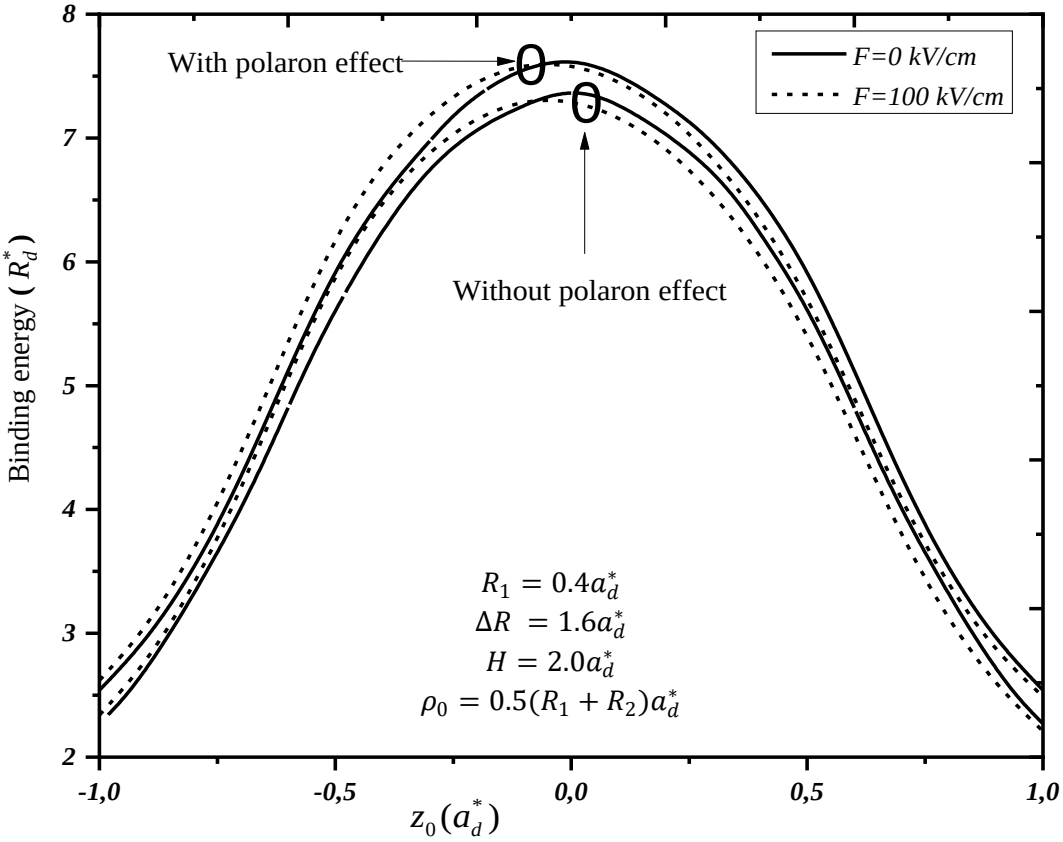


Figure III.11 : Energie de liaison d'une impureté donneur peu profonde en fonction de la position axiale z_0 de l'impureté confinée dans le système QR, avec et sans l'effet du polaron, en absence (courbes en trait plein) et en présence du champ électrique (courbes en tirets) ($F = 0$ & $100\ kV/cm$).

Les résultats numériques de la variation de l'E_b en fonction de la position radiale de l'impureté ρ_0, avec et sans la correction polaronique pour deux valeurs du champ électrique ($F = 0$ & $100\ kV/cm$) sont représentés sur la figure III.12 pour $z_0 = 0.0a_d^*$. On peut également constater que l'effet du champ électrique appliqué et la correction polaronique sur l'E_b sont plus prononcés lorsque l'impureté est située à la position $\rho_0 = 0.5(R_1 + R_2)a_d^*$. Nos résultats numériques indiquent que la contribution du phonon LO volumique sur l'E_b dépend fortement de la position de l'impureté (z_0, ρ_0) et de l'intensité du champ électrique. La comparaison entre les figures III.11 et III.12 révèle que la contribution des phonons LO sur E_b est plus significative dans le cas de la variation E_b en fonction de de la position radiale de l'impureté.

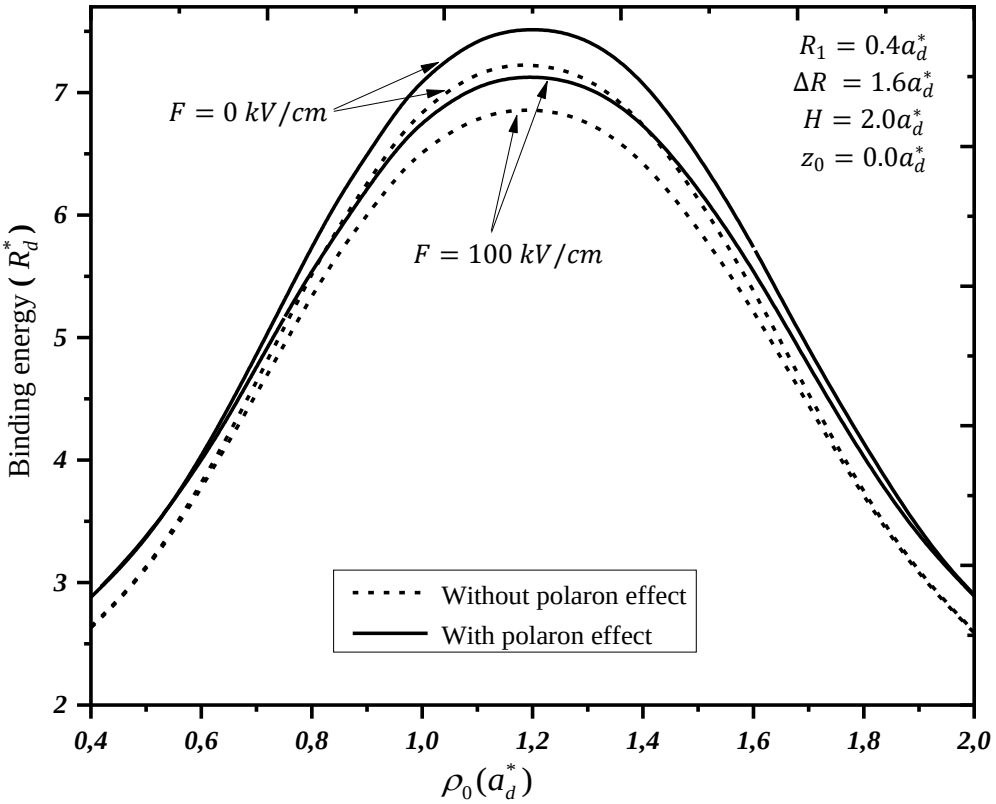


Figure III.12 : Energie de liaison d'une impureté donneur peu profonde en fonction de la position radiale de l'impureté ρ_0 confinée dans le système QR, avec (courbes en trait plein) et sans (courbes en tirets) effet du polaron et pour deux valeurs différentes du champ électrique ($F = 0$ & $100\ kV/cm$).

III.5. Conclusion

En conclusion, en utilisant une approche variationnelle, nous avons étudié les effets de la variation des paramètres géométriques du système QR (hauteur, épaisseur radiale et position de l'impureté), la NP de la bande de conduction et de l'interaction électron-LO phonon volumique sur l'énergie de liaison d'une impureté donneur hydrogénoïde peu profonde confinée dans un anneau quantique à base de WZ $GaN/Ga_{1-x}Al_xN$ en présence d'un champ électrique externe appliqué suivant la direction z. Dans les calculs, nous avons pris en considération les différences des valeurs des paramètres physiques (constante diélectrique et masse effective de l'électron) entre la région du puit GaN et la région du matériau barrière $Ga_{1-x}Al_xN$. Nous avons également examiné l'effet combiné de la NP de la bande de conduction et du polaron sur l'énergie de liaison dans le cas de potentiel de confinement infini. Les résultats numériques indiquent que l'influence de la NP de la bande de conduction et la correction polaronique

entraînent une augmentation de l'E_b, en particulier lorsque l'impureté se déplace de l'interface entre les deux matériaux vers le centre de QR. De plus, l'E_b diminue avec le champ électrique, en particulier pour les grandes hauteurs de QR.

Références

[1] S.J. Pearton, F. Ren, A.P. Zhang and K.P. Lee, Materials Science and Enginnering: R: Reports **55**, 212 (2000).

[2] A. Hass Bar-Ilan, S. Zamir, O. Katz, B. Meyler and J. Salzman, Materials Science and Engineering A **302**, 14 (2001).

[3] D. Cao, C. Zhao, X. Yang and H. Xiao, Journal of Alloys and Compounds **806**, 487 (2019).

[4] C.A. Hernández-Gutiérrez, Y.L. Casallas-Moreno, D. Cardona, Yu. Kudriavtsev, G.S. Rodríguez, R. Mendoza-Pérez, G.C. Puente, V.H. Mendez-Garcia, S. G. Hernández, M. A. Quevedo-Lopez and M. López-López, Superlattices Microstruct. **136**, 106298 (2019).

[5] T. Kuroda, T. Mano, T. Ochiai, S. Sanguinetti, K. Sakoda, G. Kido, N. Koguchi, Phys. Rev. B **72**, 205301 (2005).

[6] M. Elborg, T. Noda, T. Mano, T. Kuroda, Y. Yao, Y. Sakuma, K. Sakoda, J. Cryst. Growth **477**, 239 (2017).

[7] G. Wang and P. Zhang, J. Appl. Phys. **103**, 063713 (2008).

[8] G. Wang and P. Zhang, Int. J. Modern Phys. B **25**, 4687 (2011).

[9] M.G. Barseghyan, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque, Eur. Phys. J. B **84**, 265 (2011).

[10] E. Iqraoun, A. Sali, A. Rezzouk, E. Feddi, F. Dujardin, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque, Philosophical Magazine **97**, 1445 (2017).

[11] M.G. Barseghyan, A. Hakimyfard, A.A. Kirakosyan, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque, Superlattices Microstruct. **51**, 119 (2012).

[12] H.M. Baghramyan, M.G. Barseghyan, C.A. Duque and A.A. Kirakosyan, Physica E **48**, 164 (2013).

[13] G. Wang, X. Duan and W. Chen, Journal of Nanomaterials **2013**, 240563 (2013).

[14] R.L. Restrepo, A.L. Morales, J.C. Martínez-Orozco, H.M. Baghramyan, M.G. Barseghyan, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque, Physica B **453**, 140 (2014).

[15] H.M. Baghramyan, M.G. Barseghyan, A.A. Kirakosyan, D. Laroze and C.A. Duque, Physica B **449**, 198 (2014).

[16] G. Wang, X. Duan and R. Zhou, Advances in Condensed Matter Physics **2015**, 594176 (2015).

[17] K. El-Bakkari, A. Sali, E. Iqraoun, A. Rezzouk, N. Es-Sbai and M. Ouazzani Jamil, Physica B: Condensed Matter **538**, 85 (2018).

[18] B. Szafran and F.M. Peeters, Phys. Rev. B **72**, 155316 (2005).

[19] B. Jia, Z. Yu, Y. Liu, Z. Chen, W. Yao, W. Zhao, H. Ye and H. Feng, Physica E **42**, 82 (2009).

[20] L. Jiang, H. Wang, H. Wu, Q. Gong and S. Feng, J. Appl. Phys. **105**, 053710 (2009).

[21] G. Rezaei, N.A. Doostimotlagh and B. Vaseghi, Commun. Theor. Phys. **56**, 377 (2011).

[22] A. Sali, J. Kharbach, A. Rezzouk and M. Ouazzani Jamil, Superlattices Microstruct. **104**, 93 (2017).

[23] A. Sali, A. Rezzouk, N. Es-Sbai and M. Ouazzani Jamil, Indian Journal of Pure & Applied Physics **57**, 483 (2019).

[24] M. Revathi and A. John Peter, Int. J. Nanoparticles **5**, 7 (2012).

[25] S. Chaudhuri and K.K. Bajaj, Phys. Rev. B **29**, 1803 (1984).

[26] A. Sivakami and M. Mahendran, Physica B **405**, 1403 (2010).

[27] A.Vanitha and A. John Peter, Superlattices Microstruct. **46**, 679 (2009).

[28] N. Es-Sbai, A. Sali, M. Fliyou and E. Abarkan, J. Appl. Phys. **91**, 2093 (2002).

[29] A. Sali, M. Fliyou and H. Loumrhari, Journal of Physics and Chemistry of Solids **59**, 625 (1998).

[30] G. Callsen, Gerald M. O. Pahn, S. Kalinowski, C. Kindel, J. Settke, J. Brunnmeier, C. Nenstiel, T. Kure, F. Nippert, A. Schliwa, A. Hoffmann, T. Markurt, T. Schulz, M. Albrecht, S. Kako, M. Arita and Y. Arakawa, Phys. Rev. B **92**, 235439 (2015).

[31] R. Charrour, M. Bouhassoune, M. Fliyou, D. Bria and A. Nougaoui, J. Phys. : Condens. Matter **12**, 4817 (2000).

[32] L. Shi and Z. Yan, J. Appl. Phys. **110**, 024306 (2011).

[33] D. Liu, Jun-j. Shi and K. S. A. Butcher, Superlattices Microstruct. **40**, 180 (2006).

[34] Y.F. Huangfua and Z.W. Yan, Physica E **40**, 2982 (2008).

[35] A.L. Vartanian, L.A. Vardanyan and E.M. Kazaryan, phys. stat. sol. (b) **245**, 123 (2008).

[36] M.A. Yeranosyan, A.L. Vartanian, A. Shahbandari and A.A. Kirakosyan, Physica B **456**, 365 (2015).

[37] A. Shahbandari, M.A. Yeranosyan and A.L. Vartanian, Superlattices Microstruct. **57**, 85 (2013).

[38] H. El Ghazi, A. Jorio and I. Zorkani, Physica B **426**, 155 (2013).

[39] S.A. McGill, K. Cao, W.B. Fowler and G.G. DeLeo, Phys. Rev. B **57**, 15 (1998).

[40] S. Syed, J.B. Heroux, Y.J. Wang, M.J. Manfra, R.J. Molnar and H.L. Stormer, Appl. Phys. Lett. **83**, 4553 (2003).

[41] D.V. Melnikov and W. Beall Fowler, Phys. Rev. B **64**, 195335 (2001).

[42] H. Satori and A. Sali, Physica E **48**, 171 (2013).

[43] A.L. Vartanian, L.A. Vardanyan and E.M. Kazaryan, Physics Letters A **360**, 649 (2007).

Chapitre IV

Effets du paloron et de la non parabolicité de la bande de conduction sur la susceptibilité diamagnétique et la polarisabilité d'une impureté donneur confinée dans un anneau quantique

Sommaire

IV.1 Introduction 75
IV.2 Susceptibilité diamagnétique du donneur 78
IV.3 Polarisabilité du polaron 79
IV.4 Résultats et discussions 80
Conclusion 87
Références 88

IV.1. Introduction

Récemment, la susceptibilité diamagnétique (χ_{dia}) d'une impureté donneur dans les systèmes à basse dimension a également attiré l'attention de nombreux auteurs [1-10]. Nithiananthi et al. [1] ont étudié la susceptibilité diamagnétique en tenant compte de la non parabolicité (NP) de la bande de conduction. Rajamohan et al. [2] ont déterminé la susceptibilité diamagnétique d'une impureté donneur hydrogénoïde dans les systèmes de nanostructures QWW et QD à base de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ ayant des potentiels de confinement différents. Kilicarslan et al. [3] ont calculé l'énergie de liaison et la susceptibilité diamagnétique d'une impureté dans un puits quantique à base de $GaAs/Ga_xln_{1-x}N_yAs_{1-y}$ en présence d'un champ magnétique. Rezaei et al. [4] ont étudié les valeurs propres d'énergie, l'énergie de liaison et la susceptibilité diamagnétique d'une impureté hydrogénoïde centrée et confinée dans des points quantiques sphériques de type $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. Muthu et al. [5] ont estimé la susceptibilité diamagnétique dans le puits quantique du système $GaAs/AlGaAs$. Koksal et al. [6] ont étudié les effets du champ magnétique sur la susceptibilité diamagnétique et l'énergie de liaison d'une impureté hydrogénoïde dans un fil quantique. Kilicarslan et al. [7] ont étudié la susceptibilité diamagnétique et l'énergie de liaison d'un donneur dans un puits quantique en fonction des paramètres d'anisotropie de masse et en présence d'un champ magnétique externe. Les effets de la non parabolicité de la bande de conduction et de la pression sur l'E_b à l'état fondamental et la susceptibilité diamagnétique d'une impureté confinée dans un QD sphériques $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ ont été étudiés dans la Ref. [8]. Leurs résultats soulignent que l'effet de la NP de la bande de conduction donne naissance à une augmentation de χ_{dia} pour un rayon et une pression fixe. Par suite, pour étudier la susceptibilité diamagnétique dans ce type de matériaux comme le GaN, on doit tenir compte de l'effet de la non parabolicité de la bande de conduction pour obtenir des résultats meilleurs qu'en cas d'une bande parabolique.

Au cours des deux dernières décades, il y a eu un intérêt croissant pour le sujet concernant les états d'impuretés et les propriétés électriques dans diverses hétérostructures [11-17]. Par exemple, Khordad et al. [11] ont calculé la polarisabilité (α_p) d'une impureté donneur dans un QWW, et ont constaté dans leurs calculs que la position de l'impureté et la direction du champ électrique appliqué jouent un rôle important dans les propriétés électronique dans leur système. Thoai et al. [12] ont également calculé la polarisabilité d'une impureté hydrogénoïde dans un QWW, leurs résultats montrent une grande influence de la hauteur de la barrière de potentiel, la position de l'impureté, la direction du champ électrique appliqué sur la polarisabilité de

l'impureté. Osório et al. [13] ont constaté que la polarisabilité de l'impureté diminue à mesure que les dimensions du fil quantique diminuent, jusqu'à ce qu'elles atteignent un minimum à une certaine valeur de la largeur QWW, puis augmente à mesure que la largeur devient plus petite. Des calculs théoriques des effets du champ électrique sur les niveaux d'énergie dans un fil quantique (QWW) de type $Ga(In)As\ /\ GaAs$ et sur la polarisabilité dépendante de la géométrie d'un donneur peu profond dans un QWW de section rectangulaire ont été également rapportés [18-20]. D'une manière générale, la polarisabilité augmente avec la taille de la structure et avec l'augmentation du champ électrique.

Des études théoriques [21-25] montrent que les propriétés électroniques et optiques d'une impureté donneur confinée dans les systèmes à basse dimension peuvent être modifier grâce à l'effet du polaron qui dépend la force du couplage électron-phonon. A titre d'exemple, dans la Réf. [25], les auteurs ont déterminé l'effet du polaron sur l'énergie de l'électron à l'état fondamental dans un double QR à base de $GaAs$ sous l'effet des champs électrique et magnétique. Ils ont découvert que l'application des champs électriques et magnétiques externe conduit à une amélioration du confinement électronique qui, à son tour, augmente la contribution de couplage électron-phonon.

Peu d'études théoriques ont été porté sur l'effet du polaron sur la polarisabilité d'impureté donneur [26-29]. L'E_b et la α_p en fonction de la dimension du QWW rectangulaire avec et sans effet du polaron ont été calculées dans la Ref. [26]. Leurs résultats indiquent que la α_p augmente avec les géométries du QWW et diminue avec la correction polaronique. Les résultats de l'article [27] démontrent que l'effets des phonons optiques longitudinaux (LO) sont significatives et ne doivent pas être ignorés dans les calculs de l'E_b, la α_p et du coefficient diamagnétique. De plus, H. Satori et al. [28] ont observé que l'effet du polaron sur la α_p et $l'\ E_b$ est plus considérable pour une QD sphérique polaire $CuCl$ par rapport à une QD sphérique faiblement polaire $GaAs$.

À notre connaissance, l'effet combiné du polaron et de la NP de la bande de conduction sur la χ_{dia} d'une impureté donneur peu profonde confinée dans une structure QR par la méthode variationnelle n'ont pas encore été étudiés.

Le but de ce chapitre est d'examiner la susceptibilité diamagnétique et la polarisabilité d'une impureté donneur confinée dans un système QR à base de $GaN/Ga_{1-x}Al_xN$ sous l'effet d'un champ électrique externe appliqué dans la direction z, par la méthode variationnelle et dans le cadre de l'approximation de la masse effective.

Dans notre étude, nous avons tenu compte des différences des paramètres physiques tels que la constante diélectrique et la masse effective de l'électron entre la région du puits GaN et la région du système barrière ($Ga_{1-x}Al_xN$) pour le cas d'un potentiel de confinement fini. De plus, nous avons examiné dans le cas d'un potentiel de confinement infini l'effet combiné du polaron et de la NP de la bande de conduction sur la χ_{dia}. D'autre part, nous avons étudié l'influence de la variation les dimensions du QR et la correction polaronique sur la α_p.

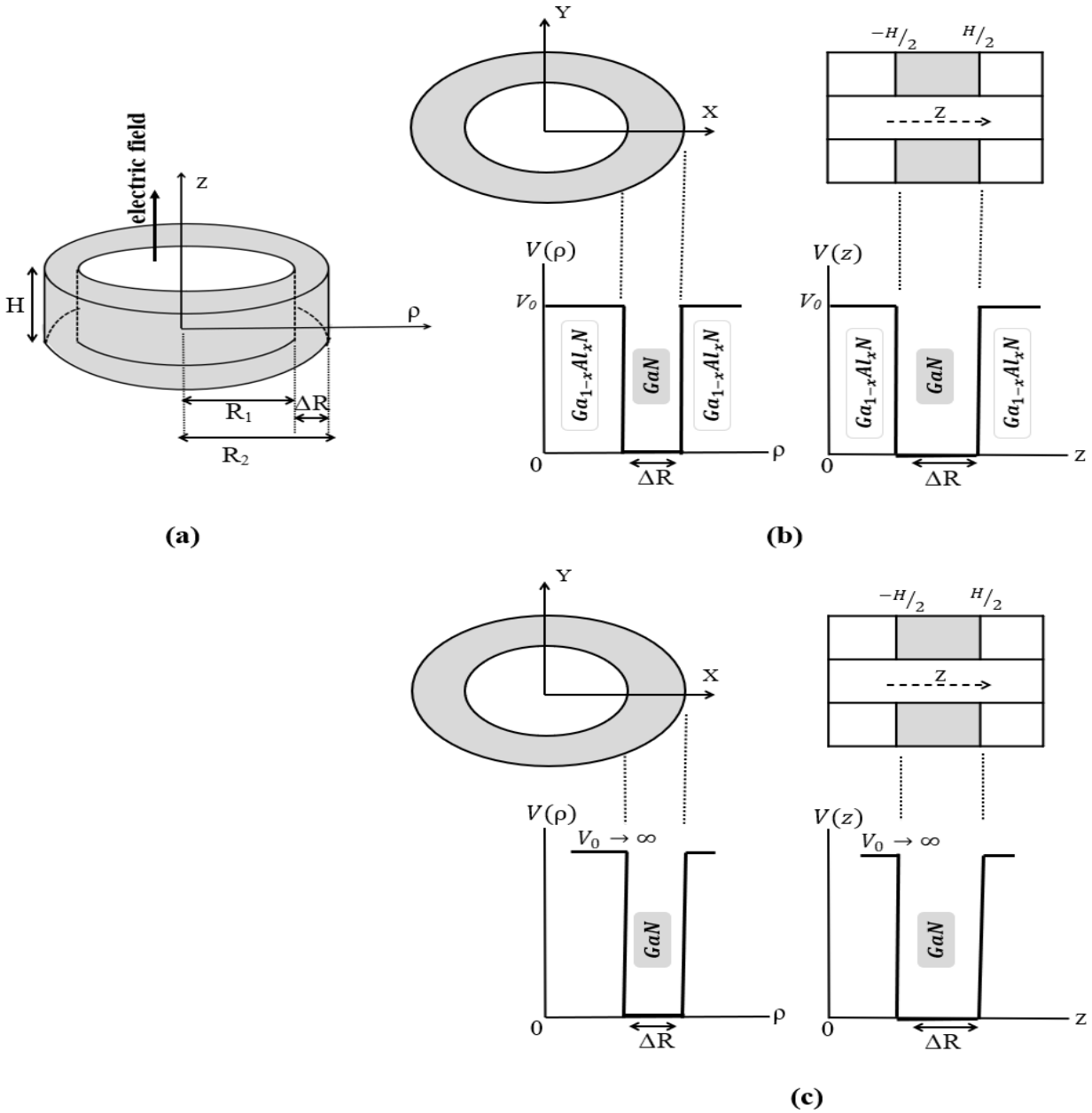


Figure IV.1 : Représentation schématique de la structure du QR considérée dans ce chapitre (a). Les diagrammes schématiques (b) et (c) montrent les projections des dimensions de système QR pour les potentiels de confinement radial $(V(\rho))$ et axial $(V(z))$ dans les directions xy et xz et pour les potentiels de confinement fini et infini respectivement.

Dans le chapitre précédent, nous avons déterminé les fonctions d'onde et les énergies de confinement d'une impureté donneur confinée dans un anneau quantique pour les deux types de potentiels de confinement fini et infini en absence et en présence d'un champs électrique extérieur appliqué suivant l'axe z. Nous utilisons ces résultats dans ce chapitre pour déterminer la susceptibilité diamagnétique et la polarisabilité de l'impureté confiné dans un système QR (la figure IV.1) avec et sans l'effet du polaron et de la non parabolicité de la bande de conduction.

IV.2. Susceptibilité diamagnétique du donneur

La fonction d'onde choisie par la méthode variationnelle pour déterminer l'énergie de l'état fondamental doit être testée en évaluant la susceptibilité diamagnétique (χ_{dia}) associée à une impureté donneur dans un système QR de type $GaN/Ga_{1-x}Al_xN$.

La susceptibilité diamagnétique χ_{dia}, est exprimée par [8] :

$$\chi_{dia} = -\frac{e^2}{6m^*\epsilon c^2}\langle(\rho-\rho_0)^2+(z-z_0)^2\rangle \qquad \text{(IV. 1)}$$

où c est la célérité de la lumière et $\langle(\rho-\rho_0)^2+(z-z_0)^2\rangle$ est la distance au carré entre l'impureté et l'électron, donnée par :

$$\langle(\rho-\rho_0)^2+(z-z_0)^2\rangle = \frac{IR^2}{IR^0}+\frac{IZ^2}{IZ^0} \qquad \text{(IV. 2)}$$

Pour le potentiel de confinement infini, les expressions IR et IZ sont données par :

$$IR^P = \int_{R_1}^{R_2}(\rho-\rho_0)^P\left[J_0(\beta\rho)-\frac{J_0(\beta R_1)}{Y_0(\beta R_1)}Y_0(\beta\rho)\right]^2 e^{-2b\,(\rho-\rho_0)^2}\rho d\rho dz \qquad \text{(IV. 3)}$$

$$IZ^P = \int_{-H/2}^{H/2}(z-z_0)^P\left(\cos\left(\frac{\pi z}{H}\right)\right)^2 e^{-2a\,(z-z_0)^2}dz \qquad \text{(IV. 4)}$$

Pour le potentiel de confinement fini $\langle(\rho-\rho_0)^2+(z-z_0)^2\rangle$ est donnée par :

$$\langle(\rho-\rho_0)^2+(z-z_0)^2\rangle = \frac{I^2+J^2+K^2}{FR}+\frac{H^2+G^2+F^2}{FZ} \qquad \text{(IV. 5)}$$

avec:

$$I^P = \int_0^{R_1} (\rho - \rho_0)^P [C_1 I_0(\alpha\rho)]^2 e^{-2b\,(\rho-\rho_0)^2} \rho d\rho dz \qquad (IV.6)$$

$$J^P = \int_{R_1}^{R_2} (\rho - \rho_0)^P [J_0(\beta\rho) + N_0 Y_0(\beta\rho)]^2 e^{-2b\,(\rho-\rho_0)^2} \rho d\rho dz \qquad (IV.7)$$

$$K^P = \int_{R_2}^{\infty} (\rho - \rho_0)^P [C_3 K_0(\alpha\rho)]^2 e^{-2b\,(\rho-\rho_0)^2} \rho d\rho dz \qquad (IV.8)$$

$$H^P = \int_{-\infty}^{-H/2} (z - z_0)^P {A_z}^2 e^{2k_2 z} e^{-2a\,(z-z_0)^2} dz \qquad (IV.9)$$

$$G^P = \int_{-H/2}^{H/2} (z - z_0)^P (\cos(k_1 z))^2 e^{-2a\,(z-z_0)^2} dz \qquad (IV.10)$$

$$F^P = \int_{H/2}^{\infty} (z - z_0)^P {A_z}^2 e^{-2k_2 z} e^{-2a\,(z-z_0)^2} dz \qquad (IV.11)$$

$$FR = I^0 + J^0 + K^0 \qquad (IV.12)$$

$$FZ = H^0 + G^0 + F^0 \qquad (IV.13)$$

IV.3. Polarisabilité du polaron

Parmi les propriétés physiques intéressantes dans les systèmes de faible dimension en présence d'un champ électrique appliqué est la polarisabilité (α_p).

Pour la plupart des systèmes diélectriques linéaires, la polarisabilité peut être définie à partir de la différence moyenne du moment dipolaire *P* en présence et en absence du champ électrique appliqué. On peut définir la polarisabilité à partir de l'expression du moment dipolaire électrique P définie comme suit :

$$P = -e[\langle\phi|z|\phi\rangle_{F\neq 0} - \langle\phi|z|\phi\rangle_{F=0}] \qquad (IV.14)$$

Pour calculer la polarisabilité du polaron α_p dans le système QR, nous utilisons la méthode variationnelle. La α_p est donnée par [26, 29] :

$$\alpha_p = -\frac{e}{F}[\langle\phi|z|\phi\rangle_{F\neq 0} - \langle\phi|z|\phi\rangle_{F=0}] \qquad (IV.15)$$

Les paramètres a_0 et b_0 obtenus à partir de l'équation III. 34 (chapitre précédent), avec et sans effet du polaron, sont introduits dans l'équation IV.15 pour calculer la α_p.

où :

$$\langle\phi|z|\phi\rangle_{F\neq 0} = \frac{\int_{-H/2}^{H/2}\left(D_{1e}Ai(\xi_e) + D_{2e}Bi(\xi_e)\right)^2 z\, e^{-2a\,(z-z_0)^2}dz}{\int_{-H/2}^{H/2}\left(D_{1e}Ai(\xi_e) + D_{2e}Bi(\xi_e)\right)^2 e^{-2a\,(z-z_0)^2}dz} \tag{IV.16}$$

et

$$\langle\phi|z|\phi\rangle_{F=0} = \frac{\int_{-H/2}^{H/2}\left(\cos\left(\frac{\pi z}{H}\right)\right)^2 z\, e^{-2a\,(z-z_0)^2}dz}{\int_{-H/2}^{H/2}\left(\cos\left(\frac{\pi z}{H}\right)\right)^2 e^{-2a\,(z-z_0)^2}dz} \tag{IV.17}$$

où $Ai(\xi_e)$ $\left(Bi(\xi_e)\right)$ dans l'équation IV.16 représente la fonction d'Airy du premier espèce (deuxième espèce), avec ξ_e donnée par :

$$\xi_e = \frac{m_w^*}{\overline{m}}\left(\frac{\eta^* z - E_z}{\eta^{*2/3}}\right) \tag{IV.18}$$

Les constantes D_{1e} et D_{2e} dans l'équation IV.16 sont déterminées par les conditions aux limites en $z = \frac{H}{2}$ et sont données par :

$$D_{1e} = Bi(\xi_e^+) \tag{IV.19}$$

et

$$D_{2e} = -Ai(\xi_e^+) \tag{IV.20}$$

où ξ_e^+ est la valeur de ξ_e calculée pour $z = \frac{H}{2}$:

$$\xi_e^+ = \frac{m_w^*}{\overline{m}}\left(\frac{\eta^*\left(H/2\right) - E_z}{\eta^{*2/3}}\right) \tag{IV.21}$$

IV.4. Résultats et discussions

Pour les calculs numériques, nous allons appliquer notre modèle à la structure QR à base de $GaN/Ga_{1-x}Al_xN$ sous l'effet d'un champ électrique pour les potentiels de confinement fini et infini. La susceptibilité diamagnétique χ_{dia} de l'impureté donneur peu profonde est calculée en fonction des paramètres géométriques du système QR (la hauteur H, l'épaisseur radiale ΔR et la position de l'impureté) et de la concentration en aluminium x avec et sans effet de la NP de la bande de conduction. Ainsi, nous avons examiné dans le modèle de potentiel de confinement infini l'effet combiné de la NP et du polaron sur la χ_{dia}. De plus, nous avons étudié l'effet de la

variation de la taille de QR sur la α_p sans et avec effet du polaron. Les paramètres physiques adoptés dans nos calculs sont représentés dans le tableau IV.1.

m^*	$m_w^* = 0.2$ [30]	$m_b^* = m_w^*(1-x) + 0.3x$
ϵ_r	$\epsilon_w = 9.8$ [30]	$\epsilon_b = \epsilon_w(1-x) + 8.5x$ [31,32]
Bohr radius	$a_d^* = \frac{\bar{\epsilon}\hbar^2}{\bar{m}e^2} = 2.43\ nm$	$\bar{m} = \sqrt{m_w^* m_b^*}$ et $\bar{\epsilon} = \sqrt{\epsilon_w \epsilon_b}$
Rydberg	$R_d^* = \frac{\bar{m}e^4}{2\bar{\epsilon}^2\hbar^2} = 30.52\ meV$	
$\hbar\omega_{LO}$	$92.5\ meV$ [30]	
α_0	0.45 [30]	

Tableau IV.1 : Constantes physiques caractérisant le GaN utilisées dans notre calcul.

La susceptibilité diamagnétique χ_{dia} dépendante de la hauteur H d'une impureté donneur peu profonde localisée au centre du système QR est illustrée dans la figure IV.2 pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait pleine) et avec effet de la NP de la bande de conduction (courbes en tirets) et pour les deux types de potentiels de confinement fini ($x = 0{,}2$ & $0{,}3$) et infinis. Nous avons aussi examiné l'effet combinée de la NP et du polaron (courbes en pointillées) dans le cas de potentiel de confinement infini. On peut observer que dans tous les cas (potentiels fini et infini), la χ_{dia} diminue avec l'augmentation de H, ce qui traduit la réduction du confinement comme le démontrent les études dans les réfs. [8, 33]. En outre, la figure indique que la χ_{dia} augmente avec la concentration en aluminium jusqu'à $x = 0.3$, cela est dû à l'augmentation du confinement avec x. Ainsi, la χ_{dia} déterminée pour le cas du potentiel de confinement infini est supérieur à celle du modèle de la barrière de hauteur fini, puisque la localisation de la fonction d'onde augmente avec la concentration x, ce qui fait que $\langle r^2 \rangle$ est plus élevée pour les grandes hauteurs de potentiels de confinement et selon l'équation IV.1, la χ_{dia} augmente pour le cas du modèle de potentiel de confinement infini. On constate aussi, sur la même figure, que l'effet de l'introduction de la NP de la bande de conduction et l'effet combiné de la NP et du plaron augmente la χ_{dia}, en particulier pour les grandes hauteurs de QR où l'effet de confinement quantique est faible. Nos résultats de l'effet de la NP de la bande de conduction sur la χ_{dia} sont en bon accord avec les investigations réalisées dans la Ref. [8], concernant les études traitées sur la χ_{dia} d'une impureté confinée dans une boîte quantique de forme sphérique. En comparant les figures IV.2 et III.2, il semble que l'effet de la NP sur le comportement du χ_{dia} en fonction de la hauteur H de système QR diffère de celui du E_b (figure III.2), autrement

dit, cet effet diminue à mesure que la hauteur H du QR diminue, contrairement au cas correspondant à $l'E_b$.

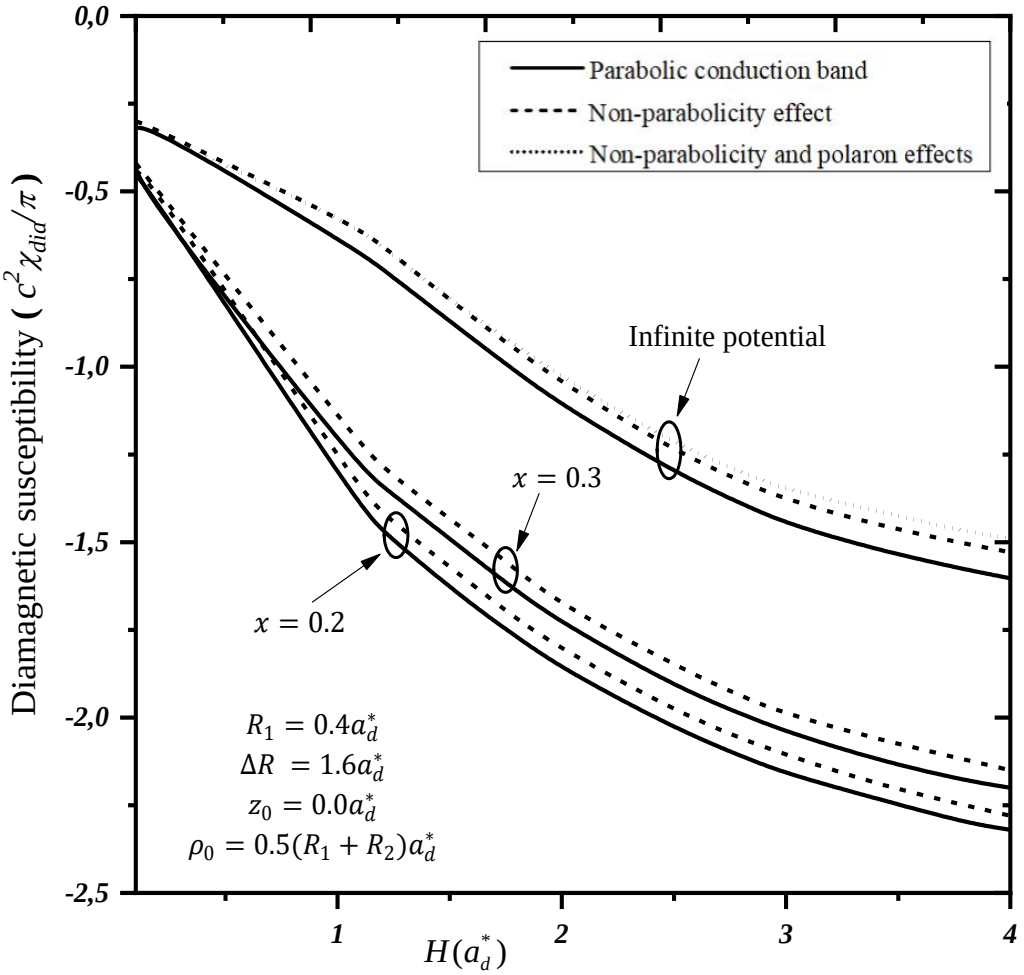


Figure IV.2 : Susceptibilité diamagnétique d'une impureté donneur en fonction de la hauteur H du système QR, pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini, pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait plein), avec effet de la NP de la bande de conduction (courbes en tirets) et avec effet combiné du polaron et de la NP (courbes en pointillées).

La susceptibilité diamagnétique χ_{dia} de l'impureté donneur en fonction de la position axiale de l'impureté z_0 dans le cas de potentiels de confinement réaliste ($x = 0.2$ & 0.3) et infini ont été comparés dans la figure IV.3, pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait plein) et avec effet de la NP de la bande de conduction (courbes en tirets) et pour $\rho_0 = 0.5(R_1 + R_2)a_d^*$. Nous remarquons que la χ_{dia} augmente au fur et à mesure que l'impureté se déplace du bord vers le centre du QR et que sa valeur maximale est atteinte pour une impureté donneur situé au centre de QR ($z_0 = 0.0a_d^*$). Ce comportement est analogue à celui obtenu dans le cas

d'une impureté confinée dans la boîte quantique sphérique [34]. La figure montre aussi que l'effet dû à la NP de la bande de conduction sur la χ_{dia} est assez important pour une impureté située au centre du système QR pour les deux types de potentiel de confinement. Nous n'avons pas pu comparer nos résultats, en raison de l'absence des résultats expérimentaux dans la littérature concernant la χ_{dia} pour la structure QR à base de GaN.

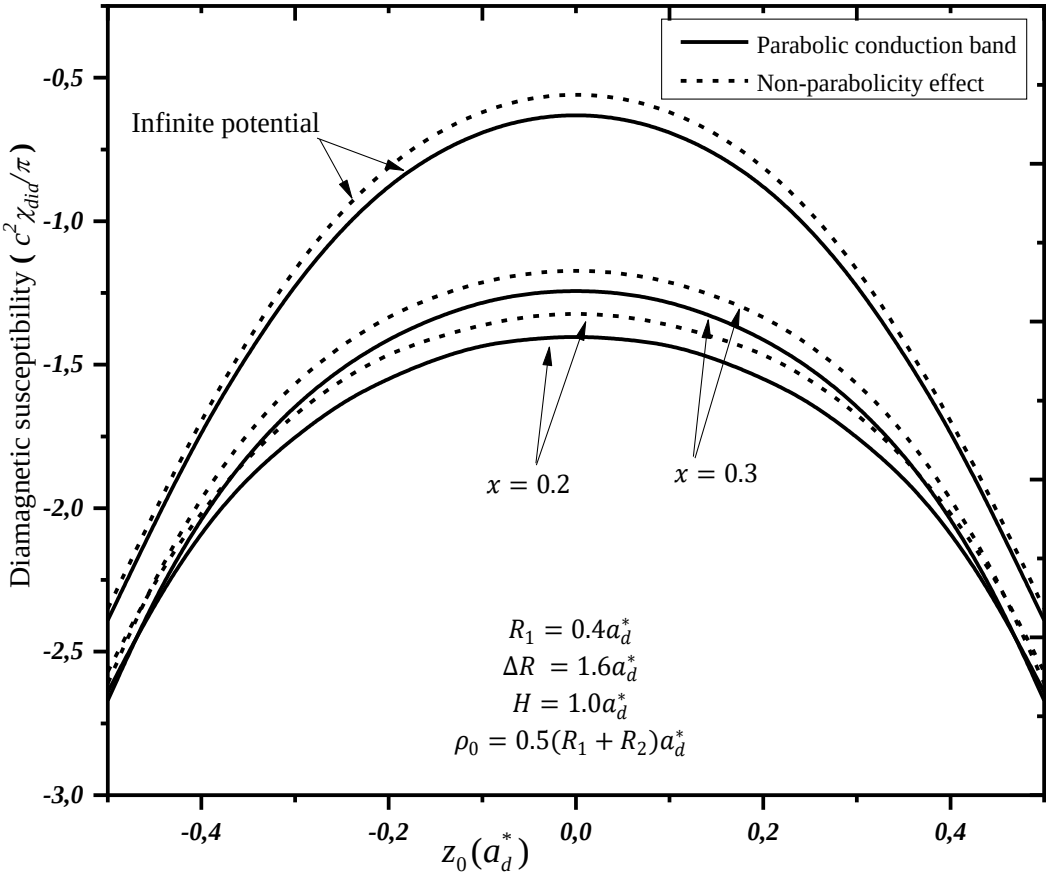


Figure IV.3 : Susceptibilité diamagnétique d'une impureté donneur en fonction de la position axiale de l'impureté z_0, pour les potentiels de confinement fini ($x = 0.2$ & 0.3) et infini, pour une bande de conduction parabolique (courbes en trait plein) et avec effet de la NP de bande de conduction (courbes en tirets).

Nous avons représenté sur la figure IV. 4 la variation de la polarisabilité α_p d'une impureté donneur placée au centre de système QR en fonction de la hauteur H de QR, avec (courbe en trait plein) et sans (courbes en tirets) effet de la correction polaronique et pour $F = 200\ kV/cm$ dans le cas d'un potentiel de confinement infini. Deux points importants peuvent être relevés à partir de cette figure. Premièrement, la variation de la α_p peut être divisée en deux régions : pour une hauteur inférieure à la valeur critique $H_c = 1.25a_d^*$ à partir de laquelle les deux

courbes correspondant au cas avec et sans effet du polaron commencent à se séparer l'une de l'autre, la α_p reste presque constante, ceci est dû à la prédominance de l'effet de confinement géométrique. Au-delà de la valeur de H_c, la α_p augmente de façon linéaire avec la diminution de confinement (H augmente) avec et sans effet du polaron. Deuxièmement, la α_p diminue avec la correction polaronique surtout pour le faible confinement quantique. Cette diminution peut être expliquée par le fait que la contribution des phonons LO volumique entraîne une réduction de l'accélération de l'électron dans la direction du champ électrique appliqué (z), en particulier pour les grandes hauteurs de QR. Ce comportement est en accord avec les résultats obtenus dans les Refs. [28-29].

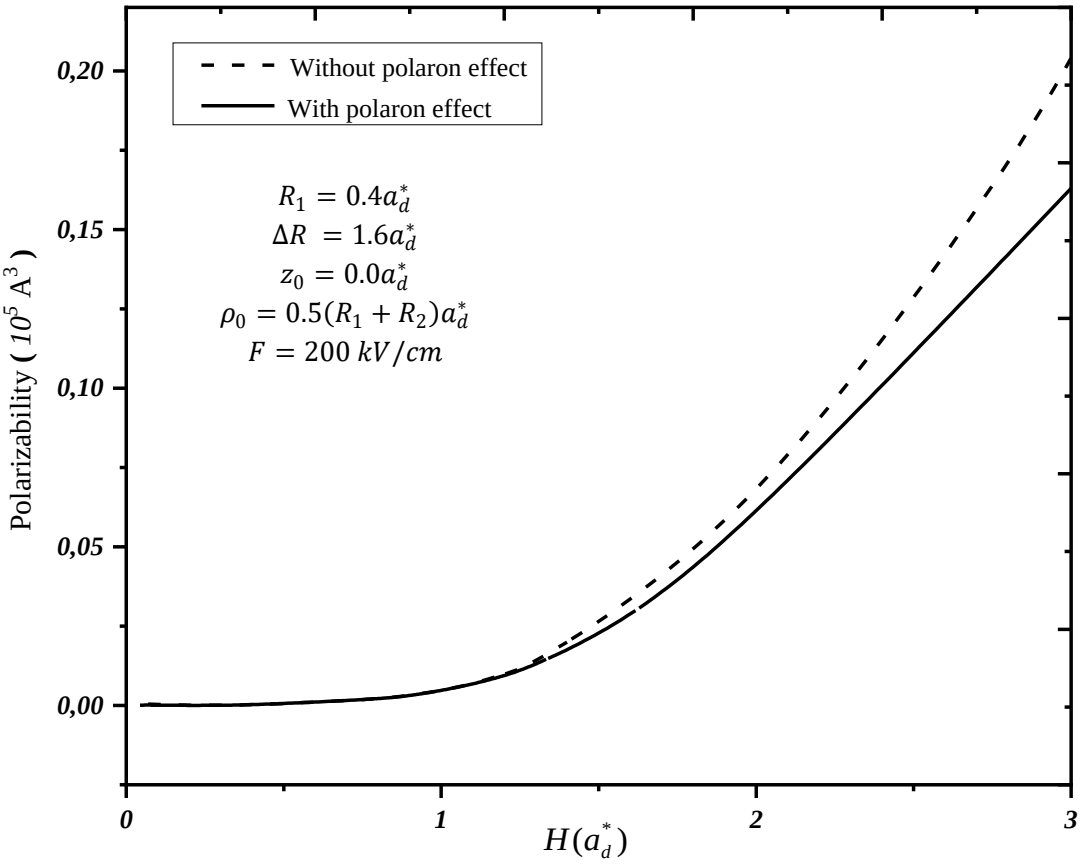


Figure IV. 4 : Polarisabilité d'une impureté donneur hydrogénoïde localisée au centre du système QR en fonction de la hauteur H de QR, avec (courbe en trait plein) et sans (courbe en tirets) effet de la correction polaronique pour le cas d'un potentiel de confinement infini.

Sur la figure IV. 5, nous représentons la variation du α_p d'une impureté donneur située au centre du QR en fonction de l'épaisseur radiale ΔR du QR, avec (courbe en trait plein) et sans (courbe en tirets) effet du polaron en gardant les mêmes paramètres que ceux de la figure IV.

4. Comme nous l'observons à partir de la figure, le comportement de la α_p en fonction de l'épaisseur radiale ΔR en absence de l'effet polaronique diffère de celui en fonction de la hauteur H du système QR (figure IV. 4), c'est-à-dire que la α_p augmente presque linéairement avec l'augmentation de l'épaisseur radiale. On observe également que la contribution de l'effet du polaron est obtenue pour les grandes valeurs de ΔR, et cet effet est plus notable que la figure IV. 4 (en fonction de la hauteur H du QR). Cette différence peut être attribuée à la raison suivante : lorsque l'électron est déplacé dans la direction axiale, le confinement est plus faible que celui dans la direction radiale et ensuite, comme prévu, la correction polaronique à la α_p est plus marquée pour l'épaisseur radiale (figure IV. 5) que pour la hauteur du QR (figure IV. 4).

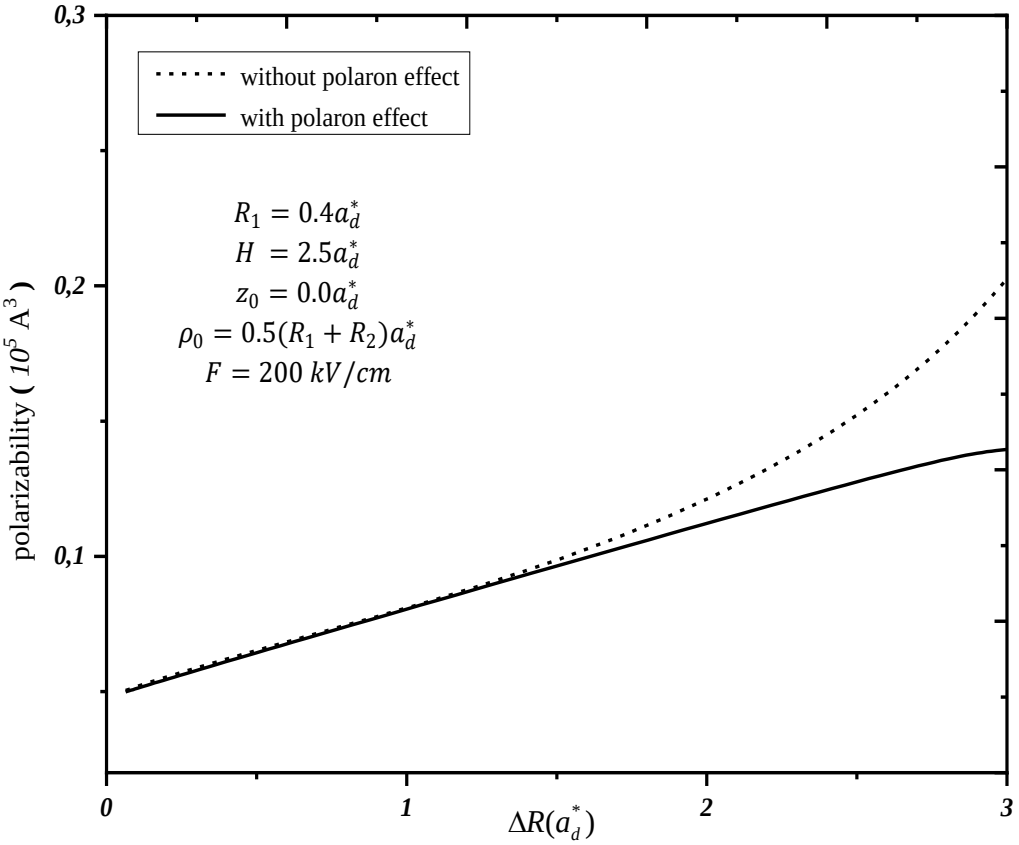


Figure IV. 5 : Polarisabilité d'une impureté donneur hydrogénoïde localisée au centre du système QR en fonction de la hauteur H de QR, avec (courbe en trait plein) et sans (courbe en tirets) effet de la correction polaronique pour le cas d'un potentiel de confinement infini.

La variation de la α_p d'une impureté donneur en fonction du champ électrique externe F appliqué pour deux valeurs différentes de la hauteur de système QR ($H = 1.5a_d^*$ & $3.0a_d^*$) avec et sans effet du polaron est illustrée dans la figure IV. 6. Nous remarquons à partir de la figure

que pour un QR épais ($H = 3.0a_d^*$), la α_p diminue avec l'augmentation de F, en particulier dans le régime de faible champ électrique. Par contre, pour une hauteur plus petite de QR ($H = 1.5a_d^*$) la α_p reste constante pour toutes les valeurs de champ électrique. Autrement dit, à mesure que la dimension de QR diminue, l'effet de confinement quantique prédomine et il est donc difficile de déplacer encore l'électron sous l'effet du champ électrique. Ces comportements sont en accord avec les résultats publiés dans les Refs. [35-36]. De plus, la même figure indique que l'effet polaronique est d'autant important que l'effet de confinement quantique est faible ($H = 3.0a_d^*$), il tend à diminuer la polarisabilité et cette diminution est plus notable pour les QR épais. Cette constatation est en accord avec nos discussions ci-dessus.

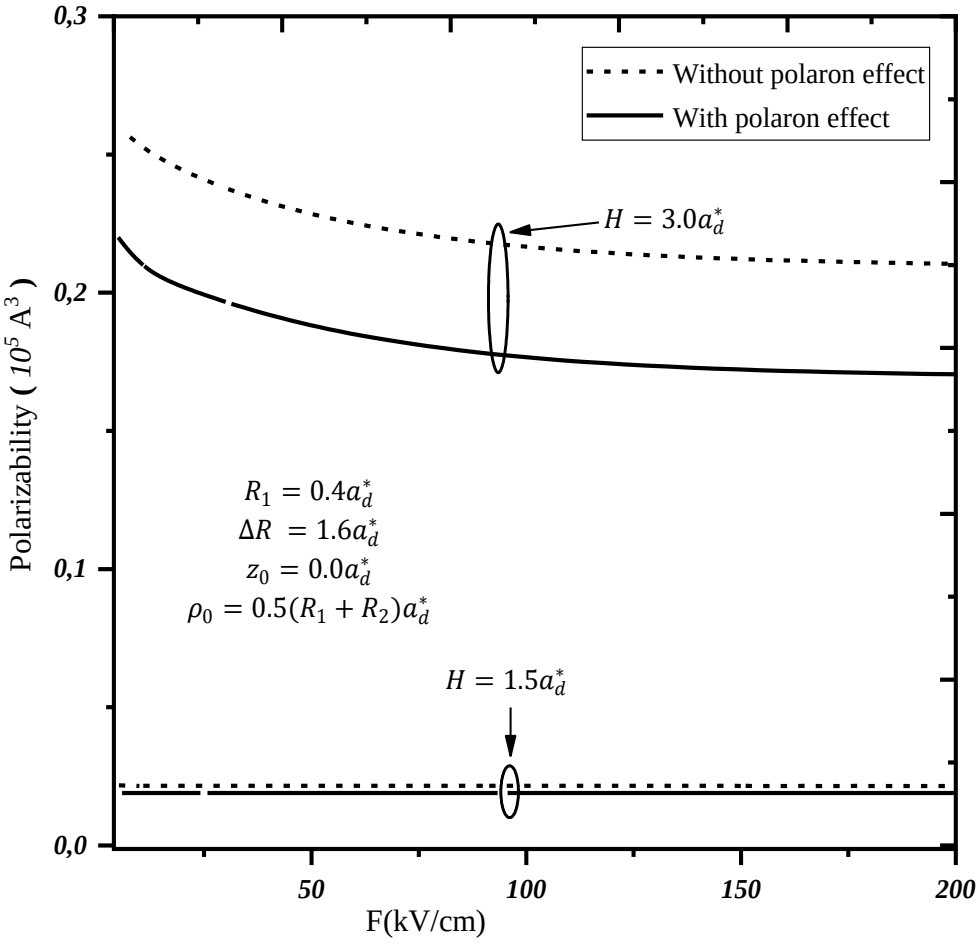


Figure IV.6 : Polarisabilité d'une impureté donneur hydrogénoïde localisée au centre du système QR en fonction du champ électrique F pour deux valeurs de la hauteur de QR ($H = 1.5a_d^*$ & $3.0a_d^*$) avec (courbes en trait plein) et sans (courbes en tirets) effet de la correction polaronique pour le cas d'un potentiel de confinement infini.

IV.5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons examiné la variation de la susceptibilité diamagnétique et de la polarisabilité d'une impureté donneur hydrogénoïde peu profonde confinée dans la structure anneau quantique à base de WZ $GaN/Ga_{1-x}Al_xN$ en fonction des paramètres géométriques du QR (la hauteur, l'épaisseur radiale et la position de l'impureté), en tenant compte l'effet de la NP de la bande de conduction et de l'interaction électron-LO phonon volumique. Dans le cas de potentiel de confinement infini, nous avons introduit l'effet combiné de la NP et du polaron sur la susceptibilité diamagnétique. Nous avons montré que l'effet de la NP de la bande de conduction et la correction polaronique provoquent une augmentation de la χ_{dia}, en particulier lorsque l'impureté est localisée au centre du système QR. Nos résultats montrent également que la polarisabilité augmente avec les paramètres géométriques du QR et se réduit avec l'intensité du champ électrique. D'autre part, nous avons constaté que pour un fort confinement, la α_p est insensible à l'effet du polaron, alors que pour le confinement intermédiaire et le confinement faible (pour les QRs épais), l'effet du polaron tend à diminuer la α_p.

Références

[1] P. Nithiananthi and K. Jayakumar, Solid State Commun. **137**, 427 (2006).

[2] C. Rajamohan, A. Merwyn Jasper, D. Reuben, P. Nithiananthi and K. Jayakumar, J. Math. Chem. **44**, 743 (2008).

[3] E. Kilicarslan, S. Sakiroglu, E. Kasapoglu, H. Sari and I. Sokmen, Superlattices Microstruct. **48**, 305 (2010).

[4] G. Rezaei, N.A. Doostimotlagh and B. Vaseghi, Physica E **43**, 1087 (2011).

[5] N. Muthu Irulayee and K.N. Krishnan, Physica E **41**, 193 (2008).

[6] M. Koksal, E. Kilicarslan, H. Sari and I. Sokmen, Physica B **404**, 3850 (2009).

[7] E. Kilicarslan, S. Sakiroglu, M. Koksal, H. Sari and I. Sokmen, Physica E **42**, 1531 (2010).

[8] G. Rezaei, N.A. Doostimotlagh and B. Vaseghi, Commun. Theor. Phys. **56**, 377 (2011).

[9] G. Safarpour, M. Barati, M. Moradi, S. Davatolhagh and A. Zamani, Superlattices and Microstructures **52**, 387 (2012).

[10] A.M. Jasper, D. Reuben and K. Jayakumar, phys. stat. sol. (b) **243**, 4020 (2006).

[11] R. Khordad, A. Gharaati and M. Haghparast, Curr. Appl. Phys. **10**, 199 (2010).

[12] D.B. Tran Thoai, Q.C. Ninh and H.T. Cao, Solid State Commun. **104**, 11 (1997).

[13] F.A.P. Osório, A.N. Borges, A.A. Caparicab, J.R. Leite, Solid State Commun. **103**, 375 (1997).

[14] Dong Liua, Jun-jie Shia and K.S.A. Butcher, Superll. and Microstructures **40**, 180 (2006).

[15] G.X. Wang, Li-Li. Zhang and H. Wei, Hindawi Advances in Condensed Matter Physics **2017**, 5652763 (2017).

[16] G. Wang, X. Duan, W. Chen, Hindawi Publishing Corporation Journal of Nanomaterials **2013**, 240563 (2013).

[17] M.G. Barseghyan, A. Hakimyfard, A.A. Kirakosyan, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque, Superlattices and Microstructures **51**, 119 (2012).

[18] H. Thien Cao and D. Tran Thoai, Solid State Commun. **97**, 643 (1996).

[19] V. Narayani and B. Sukumar, Solid State Commun. **90**, 579 (1994).

[20] C.A. Duque, A. Montes and A.L. Morales, Physica B **302**, 84 (2001).

[21] N. Es-Sbai, A. Sali, M. Fliyou and E. Abarkan, J. Appl. Phys. **91**, 2093 (2002).

[22] A. Sali, M. Fliyou and H. Loumrhari, Journal of Physics and Chemistry of Solids **59**, 625 (1998).

[23] G. Callsen, G.M.O. Pahn, S. Kalinowski, C. Kindel, J. Settke, J. Brunnmeier, C. Nenstiel, T. Kure, F. Nippert, A. Schliwa, A. Hoffmann, T. Markurt, T. Schulz, M. Albrecht, S. Kako, M. Arita and Y. Arakawa, Phys. Rev. B **92**, 235439 (2015).

[24] R. Charrour, M. Bouhassoune, M. Fliyou, D. Bria and A. Nougaoui, J. Phys: Condens. Matter **12**, 4817 (2000).

[25] Y.F. Huangfua and Z.W. Yan, Physica E **40**, 2982 (2008).

[26] I. Zorkani and L. Filali, phys. stat. sol. (b) **215**, 999 (1999).

[27] E. Feddi, M. El Haouari, E. Assaid, B. Stébé and J. El Khamkhami, Phys. Rev. B **68**, 235313 (2003).

[28] H. Satori, A. Sali and K. Satori, Physica E **14**, 184 (2002).

[29] L. Filali and I. Zorkani, Physica Scripta **65**, 530 (2002).

[30] D.V. Melnikov and W. Beall Fowler, Phys. Rev. B **64**, 195335 (2001).

[31] H. El Ghazi, A. Jorio and I. Zorkani, Physica B **426**, 155 (2013).

[32] S.A. McGill, K. Cao, W.B. Fowler and G.G. DeLeo, Phys. Rev. B **57**, 15 (1998).

[33] P. Nithiananthi and K. Jayakumar, Solid State Commun. **137**, 427 (2006).

[34] A. Mmadi, K. Rahmani, I. Zorkani and A. Jorio, Superlattices Microstruct. **57**, 27 (2013).

[35] C.A. Duque, A. Montes and A.L. Morales, Physica B **84**, 302 (2001).

[36] M. Koksal, E. Kasapoglu, H. Sari and I. Sokmen, phys. stat. sol. (c) **4**, 332 (2007).

Chapitre V

Effets de la pression et de la température sur les propriétés électroniques et optiques d'un exciton confiné dans un anneau quantique à base de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$

Sommaire

V.1 Introduction 91
V.2 Energie de liaison de l'exciton confiné dans un anneau quantique 94
V.2.1 Hamiltonien du système 94
V.2.2 Choix de la fonction d'essai 96
V.2.3 Energie de liaison de l'exciton 98
V.2.4 Energie de l'émission interbande 99
V.3 Résultats et discussions 99
Conclusion 111
Références 112

V.1. Introduction

Récemment les recherches ont rendu possible la réalisation des boîtes quantiques sous la géométrie d'un anneau nommé anneaux quantiques (QRs) [1]. Expérimentalement, différentes techniques de croissance ont été utilisées pour fabriquer le QR comme l'épitaxie en gouttelettes, et l'épitaxie par jets moléculaire [4-6]. Récemment, T. Mano et al.[7] ont fabriqué les doubles anneaux quantiques concentriques de différentes tailles par la technique de l'épitaxie des gouttelettes. Les chercheurs ont accru leur attention pour étudier le QR dans les applications des dispositifs [2,3], dû à des propriétés significatives (optiques et électroniques) de ce type de point quantique.

De nombreuses chercheurs ont étudié théoriquement les propriétés des porteurs de charge et des impuretés de type donneur dans les QRs. Les niveaux d'énergie de l'électron dans un QR à base de $InAs/GaAs$ a été montré dans la Réf. [8], leurs résultats montrent que les niveaux d'énergie de l'électron sont sensiblement influencés par les paramètres géométriques de QR. Wang et al. [9-11] ont déterminé l'effet du confinement géométrique et de la position de l'impureté confiné dans un QR à base de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ sur l'énergie de liaison par l'utilisation de l'approximation de la masse effective. Dans un travail précédent [12], les auteurs ont calculé l'énergie de liaison et la section efficace de photoionisation de l'impureté dans le Pöschl–Teller QR $InAs$ en fonction des paramètres géométriques, la position de l'impureté et de l'intensité du champ magnétique. Ils ont également montré que l'énergie de liaison de l'impureté diminue avec l'augmentation de la hauteur et le rayon extérieur de QR, alors qu'elle augmente avec le rayon intérieur. Leurs résultats ont également montré que la diminution (augmentation) de l'énergie de liaison conduit à un décalage de la section efficace de photoionisation vers les basses énergies : redshift (hautes énergies : blueshift).

Au cours des dernières années, diverses études théoriques ont été proposées pour étudier l'influence de la température et de la pression hydrostatique sur les propriétés électroniques et optiques d'une impureté confinée dans les QRs [13-16]. Barseghyan et al. [13] ont étudié les effets de la pression, des champs électriques et magnétiques sur les propriétés électroniques de l'impureté de type donneur confinée dans un QR à base de $InAs$ avec un potentiel de Pöschl-Teller, en utilisant la méthode variationnelle. Les résultats de leurs recherches indiquent que pour des valeurs fixes des champs électriques et magnétiques, l'énergie de liaison de l'impureté augmente avec la pression appliquée. L'énergie de liaison et la section efficace de photoionisation d'une impureté confinée dans un double QR de type $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ ont été calculées en fonction des paramètres géométriques de la structure, la position de l'impureté,

la pression hydrostatique et la température [14,15]. Le coefficient d'absorption optique d'un électron dans un QR $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ en présence de la pression et du champ électrique latéral a été déterminé par Manaselyan et al. [16] utilisant la technique de diagonalisation exacte. Leurs résultats montrent que pour une géométrie fixe de QR, l'effet de la pression peut conduire à un décalage vers le bleu et le rouge du coefficient d'absorption optique intrabande.

Le problème du confinement des excitons dans les nanostructures a été largement étudié en raison de leurs applications habituellement réservées à l'optoélectronique et à l'électronique. Les effets de la température et de la pression sur les excitons confinés dans les boîtes quantiques ont également été étudiés théoriquement dans de nombreux travaux [17-23], leurs résultats communs montrent que pour une température fixe, l'énergie de liaison de l'exciton augmente avec la pression appliquée, mais elle diminue avec la température pour une pression fixe. Certains articles de recherche se sont concentrés sur le calcul de l'énergie d'émission interbande pour comprendre les propriétés optiques de l'exciton confiné dans les nanostructures [18-22,24,25]. Dans un récent travail, El Yadri et al. [17] ont étudié les effets combinés de la pression et de la température sur l'énergie de liaison et l'énergie d'émission interbande d'un exciton confiné dans un disque quantique bidimensionnel de type $GaAs$, au moyen d'une approche variationnelle. Les résultats de leurs recherches indiquent que l'énergie d'émission interbande de l'exciton a été augmentée avec la pression.

Peu d'études théoriques de l'exciton dans les systèmes des QRs [26-29] ont été examinées. Par exemple, Song et al. [26] ont utilisé la méthode matricielle analytique pour déterminer l'énergie de séparation électron-trou et la susceptibilité linéaire sous l'effet d'un champ magnétique externe au moyen d'un potentiel de confinement parabolique. L'énergie de liaison d'un exciton dans le système QR à base de $CdTe/ZnTe$ en fonction du champ électrique et de l'épaisseur de la couche de mouillage a été examinée via la méthode des éléments finis [27]. Il a été constaté que l'énergie de liaison de l'exciton diminue lorsque le rayon extérieur, l'intensité du champ électrique et l'épaisseur de la couche de mouillage augmentent. Par l'utilisation de la méthode de diagonalisation exacte, Wen-Fang [28] a étudié l'énergie de liaison de l'exciton en fonction de la géométrie de la structure QR et l'intensité du champ magnétique avec un potentiel de confinement parabolique, il a trouvé que l'énergie de liaison de l'exciton diminue avec l'augmentation de rayon du QR, et cette diminution est plus rapide dans les petits QRs.

Dans ce chapitre, nous allons étudier les propriétés optoélectroniques d'un exciton confiné dans le système QR à base de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ (figure V.1(a)) sous l'effet des perturbations extérieures : la température et la pression hydrostatique, en suivant une approche variationnelle

dans le cadre de l'approximation de la masse effective. La différence entre les masses effectives de l'électron et du trou entre la région puit $GaAs$ et la barrière $Ga_{1-x}Al_xAs$ a été prise en considération. Nous choisissons le potentiel de confinement fini (infini) dans la direction axiale z (direction radiale ρ) comme le montre la figure V.1(d) (e).

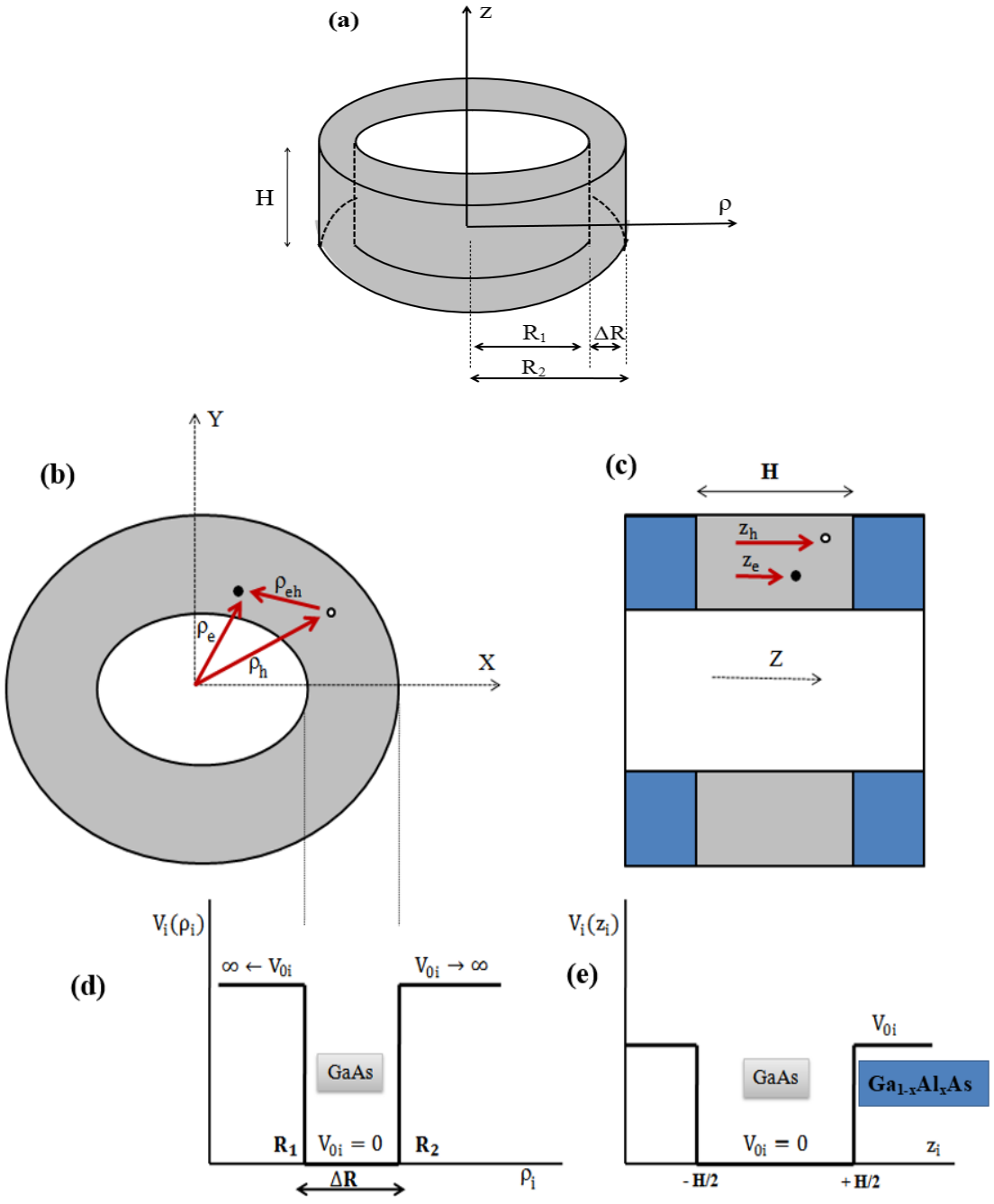


Figure V.1 : Représentation schématique de la structure du QR (a). Les diagrammes schématiques (b) et (c) montrent les projections des dimensions de QR dans les directions xy et xz respectivement. Les potentiels de confinement radial (ρ) et axial (z) sont présentés dans (d) et (e) respectivement.

V.2. Energie de liaison de l'exciton confiné dans un anneau quantique

V.2.1. Hamiltonien du système

Considérons un exciton de trou lourd confiné dans un système QR à base de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ (Figure V.1(a)), avec les paramètres géométriques : H, R_1, R_2 et $\Delta R = R_2 - R_1$ qui sont la hauteur, le rayon intérieur, le rayon extérieur et l'épaisseur radiale du QR, respectivement. Dans le cadre de l'approximation de la masse effective et en présence de la pression hydrostatique (P) et de la température (T), l'Hamiltonien effectif du système s'écrit :

$$H_{ex}(T,P) = -\frac{\hbar^2}{2m_e^{*(w/b)}(T,P)}\nabla_e^2 + V_e(r_e,T,P) - \frac{\hbar^2}{2m_{hh}^{*(w/b)}(T,P)}\nabla_{hh}^2 + V_{hh}(r_{hh},T,P) - \frac{e^2}{\epsilon(T,P)\,|r_e - r_{hh}|} \quad (V.1)$$

$m_i^{*w}(T,P)$ ($m_i^{*b}(T,P)$) est la masse effective dépendante de la pression et de la température dans le matériau $GaAs$ ($Ga_{1-x}Al_xAs$), i se réfère à l'électron (e) ou le trou lourd (hh). Pour l'électron, les masses effectives sont données par [30-32] :

$$m_e^{*w}(T,P) = \left[1 + 7.51\left(\frac{2}{E_g(T,P)} + \frac{1}{E_g(T,P)+\Delta_0}\right)\right]^{-1} m_0 \quad (V.2)$$

et

$$m_e^{*b}(T,P) = (m_e^{*w}(T,P) + 0.0835x)m_0 \quad (V.3)$$

avec m_0 est la masse de l'électron libre, $\Delta_0 = 0.341\ eV$ et $E_g(T,P)$ sont la séparation spin-orbite de la bande de valence et l'énergie de gap du $GaAs$ respectivement, $E_g(T,P)$ est donné en unités d'eV par [30]:

$$E_g(T,P) = 1.519 - \frac{5.405\times10^{-4}\times T^2}{T+204}[K^{-1}] + 107\times10^{-3}[GPa^{-1}]P - 3.77\times10^{-3}[GPa^{-2}]P^2 \quad (V.4)$$

où x dans l'équation V.3 est la fraction molaire en aluminium.

Les masses effectives des trous lourds m_{hh}^{*w} et m_{hh}^{*b} sont déterminées à partir des expressions suivantes [33,34] :

$$m_{hh}^{*w}(P) = [a_1 + (a_2P + a_3P^2)]m_0 \quad (V.5)$$

et

$$m_{hh}^{*b}(P) = (m_{hh}^{*w}(P) + 0.42x)m_0 \quad (V.6)$$

avec $a_1 = 0.134$, $a_2 = -0.1\times10^{-2}[GPa^{-1}]$ et $a_3 = 5.5\times10^{-4}[GPa^{-2}]$.

Le dernier terme de l'équation V.1 représente le potentiel de l'interaction Coulombienne entre l'électron et le trou, où $\epsilon\,(T,P)$ est la constante diélectrique statique dépendante de la pression et de la température donnée par la relation [30,34,35] :

$$\epsilon(T,P)\begin{cases}12.74\; e^{9.4\times10^{-5}(T-75.6)}\times e^{-1.67\times10^{-2}P}\;, & T\leq 200K\\ 13.18\; e^{20.4\times10^{-5}(T-300)}\times\; e^{-1.73\times10^{-2}P}, & T>200K\end{cases} \qquad (V.7)$$

Le potentiel de confinement qui confine les porteurs de charges dans le système QR peut être modifié sous l'influence de la pression hydrostatique, car cette dernière induit un croisement de la bande de conduction $\Gamma - X$ particulièrement dans le cas des pressions élevées [41] ($P > 4GPa$). Ainsi, comme le montre le travail de H. M. Baghramyan et al. [41], le potentiel de confinement doit être exprimé en fonction des paramètres $P_1(x)$ et $P_2(x)$ décrivant le croisement $\Gamma - X$, où la pression $P_1(x)$ est la valeur correspondante au croisement entre les minimum des bandes Γ et X dans $Ga_{1-x}Al_xAs$, et la pression $P_2(x)$ correspondant au croisement entre le minimum de bande Γ dans le puit $GaAs$ et le minimum de bande X du matériau barrière $Ga_{1-x}Al_xAs$. Dans notre calcul, nous allons nous limiter aux valeurs des pressions $0-4\;GPa$, où il n'y a pas l'effet de croisement $\Gamma - X$. En effet, pour les pressions au-delà de $4\;GPa$, une transition aura lieu de bande directe à la bande indirecte dans le $GaAs$ [30]. Compte tenu des considérations ci-dessus, le potentiel de confinement $V_i(r_i,T,P)$ ($i = e, hh$) dans l'équation V.1 peut s'écrit comme suit :

$$V_i(r_i,T,P)\begin{cases}0 & si\quad R_1\leq\rho_i\leq R_2\quad et\;\; |z_i|\leq\dfrac{H}{2}\\ V_{0i}(x,T,P) & si\qquad\qquad |z_i|>\dfrac{H}{2}\\ \infty & si\qquad \rho_i<R_1\quad et\;\; \rho_i>R_2\end{cases} \qquad (V.8)$$

Les expressions de $V_{0e}(x,T,P)$ et $V_{0hh}(x,T,P)$ sont données par [20] :

$$V_{0e}(x,T,P) = 0.658\;\Delta E_g(x,T,P) \qquad (V.9)$$

et

$$V_{0hh}(x,T,P) = 0.342\;\Delta E_g(x,T,P) \qquad (V.10)$$

où $\Delta E_g(x,T,P)$ est la différence de l'énergie de gap entre les matériaux $GaAs$ et $Ga_{1-x}Al_xAs$, elle est exprimée en unité d'eV par [30,34] :

$$\Delta E_g(x,T,P) = 1.155x + 0.37x^2 - 1.3\times10^{-2}x\;[GPa^{-1}]P - 1.15\times10^{-4}x\;[K^{-1}]T \quad (V.11)$$

Les dimensions du QR $\left(R_{1,2}(P),H(P)\right)$ sont modifiées sous l'effet de la pression hydrostatique selon les expressions suivantes [14,36,37] :

$$R_{1,2}(P) = R_{1,2}(0)\sqrt{1 - 2(S_{11} + 2 \times S_{12})P} \quad (V.12)$$

et

$$H(P) = H(0)(1 - (S_{11} + 2 \times S_{12})P) \quad (V.13)$$

avec $R_{1,2}(0)$ et $H(0)$ sont les géométries de QR en absence du pression, $S_{11} = 11.6 \times 10^{-3}\, GPa^{-1}$ et $S_{12} = -37 \times 10^{-4} GPa^{-1}$ sont les constantes de compliance de $GaAs$ [38].

Nous avons utilisé les unités atomiques réduites, pour obtenir la forme de l'Hamiltonien sans dimension. Pour l'énergie, nous avons introduit le Rydberg de l'exciton $R_{ex}(0,0) = \frac{\mu(0,0)e^4}{2\epsilon^2(0,0)\hbar^2}$, et le rayon de Bohr de l'exciton $a_{ex}(0,0) = \frac{\epsilon(0,0)\hbar^2}{\mu(0,0)e^2}$ comme unité de longueur, qui sont évalués à $P = 0\ GPa$ et $T = 0\ K$, avec $\frac{1}{\mu(0,0)} = \frac{1}{m_e^{*w}(0,0)} + \frac{1}{m_{hh}^{*w}(0,0)}$ où $\mu(0,0)$ présente la masse réduite dans le matériau $GaAs$.

En utilisant les coordonnées de Hylleraas $(\rho_e, \rho_{hh}, \rho_{eh})$ [39], l'Hamiltonien effectif peut s'écrire en unités atomiques sous la forme :

$$\frac{H_{ex}}{R_{ex}(0,0)} = -\frac{\mu_1(0,0)}{m_e^{*w}(T,P)}\left(\frac{\partial^2}{\partial {\rho_e}^2} + \frac{1}{\rho_e}\frac{\partial}{\partial \rho_e} + \frac{{\rho_{eh}}^2 + {\rho_e}^2 - {\rho_{hh}}^2}{\rho_e \rho_{eh}}\frac{\partial^2}{\partial \rho_e \partial \rho_{eh}}\right) - \frac{\mu_1(0,0)}{m_e^{*w,b}(T,P)}\frac{\partial^2}{\partial {z_e}^2}$$

$$-\frac{\mu_1(0,0)}{m_{hh}^{*w}(T,P)}\left(\frac{\partial^2}{\partial {\rho_{hh}}^2} + \frac{1}{\rho_{hh}}\frac{\partial}{\partial \rho_{hh}} + \frac{{\rho_{eh}}^2 + {\rho_{hh}}^2 - {\rho_e}^2}{\rho_{hh}\rho_{eh}}\frac{\partial^2}{\partial \rho_{hh}\partial \rho_{eh}}\right) - \frac{\mu_1(0,0)}{m_{hh}^{*w,b}(T,P)}\frac{\partial^2}{\partial {z_{hh}}^2}$$

$$-\frac{\mu_1(0,0)}{\mu^{w,b}(T,P)}\left(\frac{\partial^2}{\partial {\rho_{eh}}^2} + \frac{1}{\rho_{eh}}\frac{\partial}{\partial \rho_{eh}}\right) - 2\frac{\epsilon(0,0)}{\epsilon(T,P)\sqrt{\rho_{eh}^2 + (z_e - z_{hh})^2}} + \frac{V_e(r_e,T,P)}{R_{ex}(0,0)}$$

$$+\frac{V_{hh}(r_{hh},T,P)}{R_{ex}(0,0)} \quad (V.14)$$

V.2.2. Choix de la fonction d'essai

Pour décrire l'interaction coulombienne entre les porteurs de charge dans le système QR, nous choisissons la fonction d'onde de l'état fondamental $1s$ (premier état excité $2s$) suivante :

$$\Psi_{ex}^{1s(2s)} = \phi_e(\rho_e, z_e, T, P)\phi_h(\rho_h, z_h, T, P)\Psi_{eh}^{1s(2s)}(\rho_{eh}|, z_e - z_h|) \quad (V.15)$$

où :

$$\phi_i(\rho_i, z_i, T, P) = f_i(\rho_i, T, P)g_i(z_i, T, P)(i = e, hh) \quad (V.16)$$

décrit le confinement des porteurs de charge non corrélés et correspond à la solution exacte de l'équation de Schrödinger en absence de l'interaction Colombienne, tel que:

$$\begin{cases} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i^{*w}(T,P)}\nabla_i^2 + V_{0i}(\rho_i,T,P)\right) f_i(\rho_i,T,P) = E_{\rho i}(T,P) f_i(\rho_i,T,P) & (V.17) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i^{*w,b}(T,P)}\nabla_i^2 + V_{0i}(z_i,T,P)\right) g_i(z_i,T,P) = E_{zi}(T,P) g_i(z_i,T,P) & (V.18) \end{cases}$$

La partie radiale de la fonction d'onde en absence de potentiel Coulombienne (solution de l'équation V.17) s'écrit alors :

$$f_i(\rho_i,T,P) = C_{1i}\, J_0(\beta_i\rho_i) + C_{2i}\, Y_0(\beta_i\rho_i) \quad (V.19)$$

où $J_0(Y_0)$ est la fonction de Bessel de première espèce (deuxième espèce) d'ordre 0 et le paramètre β_i est donné par:

$$\beta_i = \sqrt{\frac{m_i^{*w}(T,P)}{\mu(0,0)} E_{\rho i}(T,P)} \quad (V.20)$$

Si on pose $C_{1i} = N_i$, avec N_i la constante de normalisation et $C_{2i} = N_i N_0$, la fonction d'onde radiale $f_i(\rho_i,T,P)$ devient :

$$f_i(\rho_i,T,P) = N_i[J_0(\beta_i\rho_i) + N_{0i}Y_0(\beta_i\rho_i)] \quad (V.21)$$

La partie axiale de la fonction d'onde $g_i(z_i,T,P)$ décrite dans l'équation V.16 (solution de l'équation V.18), peut s'écrire sous la forme :

$$g_i(\rho_i,T,P) = \begin{cases} A_{zi}(T,P)\, exp(k_{2i}(T,P)z_i) & si \quad z_i < -H/2 \\ cos(k_{1i}(T,P)z_i) & si \quad |z_i| \le H/2 \\ A_{zi}\,(T,P) exp(-k_{2i}(T,P)z_i) & si \quad z_i > H/2 \end{cases} \quad (V.22)$$

où k_{1i} et k_{2i} sont données par :

$$k_{2i} = \sqrt{\frac{m_i^{*b}(T,P)}{\mu(0,0)}\left(V_{0i}(T,P) - E_{zi}(T,P)\right)} \quad (V.23)$$

et

$$k_{1i} = \sqrt{\frac{m_i^{*w}(T,P)}{\mu(0,0)} E_{zi}(T,P)} \quad (V.24)$$

N_{0i} et A_{zi} sont des constantes déterminées par les conditions aux limites pour $\rho_i = R_1$ et $z_i = H/2$ respectivement et sont données par :

$$N_{0i} = -\frac{J_0(\beta_i R_1)}{Y_0(\beta_i R_1)} \quad (V.25)$$

et $$A_{zi} = cos\left(k_{1i}\frac{H}{2}\right) exp\left(k_{2i}\frac{H}{2}\right) \quad (V.26)$$

La fonction $\Psi^{1s}(\rho_{eh}, z_{eh})(\Psi^{2s}(\rho_{eh}, z_{eh}))$ dans l'équation V.15 est la partie variationnelle décrivant le mouvement interne de l'exciton. On choisit une fonction d'onde séparable utilisée par S. Le Goff [39] avec deux paramètres variationnels α et γ pour l'état fondamental $1s$ (premier état excité $2s$ [40]) :

$$\Psi^{1s}(\rho_{eh}, z_{eh}) = e^{-(\alpha\,\rho_{eh} + \gamma\,(z_e - z_h)^2)} \quad (V.27)$$

et

$$\Psi^{2s}(\rho_{eh}, z_{eh}) = \rho_{eh} e^{-(\alpha\,\rho_{eh} + \gamma\,(z_e - z_h)^2)} \quad (V.28)$$

V.2.3. Energie de liaison de l'exciton

En présence de potentiel Coulombienne, une solution analytique de l'équation de l'équation de Schrödinger ne peut être obtenue, elle est presque impossible. Nous déterminons par la suite les énergies en proposant une fonction d'essai par la méthode variationnelle. Les énergies à l'état fondamental et du premier état excité sont déterminées numériquement par la minimisation de l'énergie moyenne :

$$\langle E_{1s,2s}(\alpha,\gamma)\rangle = \frac{\langle\, \Psi_{ex}^{1s,2s} | H_{ex} |\, \Psi_{ex}^{1s,2s}\rangle}{\langle\, \Psi_{ex}^{1s,2s} |\, \Psi_{ex}^{1s,2s}\rangle} \quad (V.29)$$

L'énergie de liaison de l'exciton $E_{1s,2s}^{b}(T,P)$, est définie comme étant la différence entre l'énergie de confinement obtenue en absence de potentiel coulombien et l'énergie en sa présence, soit :

$$E_b^{1s,2s}(T,P) = E_e(T,P) + E_{hh}(T,P) - \langle E_{1s,2s}(\alpha,\gamma)\rangle_{min_{\alpha,\gamma}} \quad (V.30)$$

où

$$E_e(T,P) = E_{\rho e}(T,P) + E_{ze}(T,P)\left(E_{hh}(T,P) = E_{\rho hh}(T,P) + E_{zhh}(T,P)\right) \quad (V.31)$$

$E_{zi}(T,P)$ et $E_{\rho i}(T,P)(i = e, hh)$ sont les énergies de confinement en absence du potentiel coulombien, suivant les directions axiales z et radial ρ, respectivement et sont déterminées à partir des équations transcendantales suivantes:

$$J_0(\beta_i R_2) - \frac{J_0(\beta_i R_1)}{Y_0(\beta_i R_1)} Y_0(\beta_i R_2) = 0 \quad (V.32)$$

et $$tan\left(\frac{k_{1i}H}{2}\right) - \frac{m_i^{*w}k_{2i}}{m_i^{*b}k_{1i}} = 0 \qquad (V.33)$$

V.2.4. Energie de l'émission interbande

D'une manière générale, le spectre de photoluminescence est caractérisé par l'émission proche de l'énergie de la bande interdite, elle est associée à la recombinaison radiative des électrons de la B.C avec des trous de la B.V. Pour étudier les propriétés optiques de l'exciton dans le système QR et sous les effets de la pression hydrostatique et de la température, nous avons calculé l'énergie d'émission interbande E_{Ph}, en utilisant la relation suivante [24] :

$$E_{Ph}(T,P) = E_e(T,P) + E_{hh}(T,P) + E_g(T,P) - E_b^{1s}(T,P) \qquad (V.34)$$

V.3. Résultats et discussions

Nous discutons dans ce paragraphe les résultats numériques des propriétés électroniques et optiques d'un exciton de trou lourd en suivant une approche numérique. Pour les applications numériques, nous choisissons le système QR à base de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, car c'est le plus utilisé et dans lequel tous les paramètres physiques sont bien connus. Les constantes physiques caractérisant le $GaAs$ sont représentés dans le tableau V.1 ci-dessous et nous considérons que la concentration en aluminium est $x = 0.3$.

	$m_e^{*w}(0,0)$	$m_{hh}^{*w}(0,0)$	$\mu(0,0)$	$\epsilon\,(0,0)$	$a_{ex}(0,0)$	$R_{ex}(0,0)$
$GaAs$	$0.067\ m_0$	$0.134\ m_0$	$0.0447\ m_0$	12.65	$14.98\ nm$	$3.79\ meV$

Table V.1 : Constantes physiques caractérisant le $GaAs$ utilisées dans notre calcul.

La figure V.2 affiche la variation de l'énergie de liaison à l'état fondamental de l'exciton E_b^{1s} en fonction de l'épaisseur radiale ΔR du QR, pour trois valeurs du rayon intérieur R_1(0.3, 0.6 & 1 a_{ex}) et pour $H = 1.0\ a_{ex}$ à $T = 0\ K$ et $P = 0\ GPa$. Nous remarquons que pour une valeur fixe de R_1, l'E_b^{1s} augmente avec la diminution de l'épaisseur radiale, en raison de l'accroissement de l'énergie coulombienne due au couplage électron-trou lourd. De plus, on peut facilement voir d'après la figure que pour un rayon intérieur plus petit, l'E_b^{1s} devient élevée particulièrement pour $\Delta R < 1.0\ a_{ex}$, où l'effet du confinement quantique est plus prononcé et pour lequel l'électron se trouve à une distance plus proche de trou. Ces résultats indiquent clairement que la modification du rayon intérieur de QR a une influence importante sur l'E_b^{1s}.

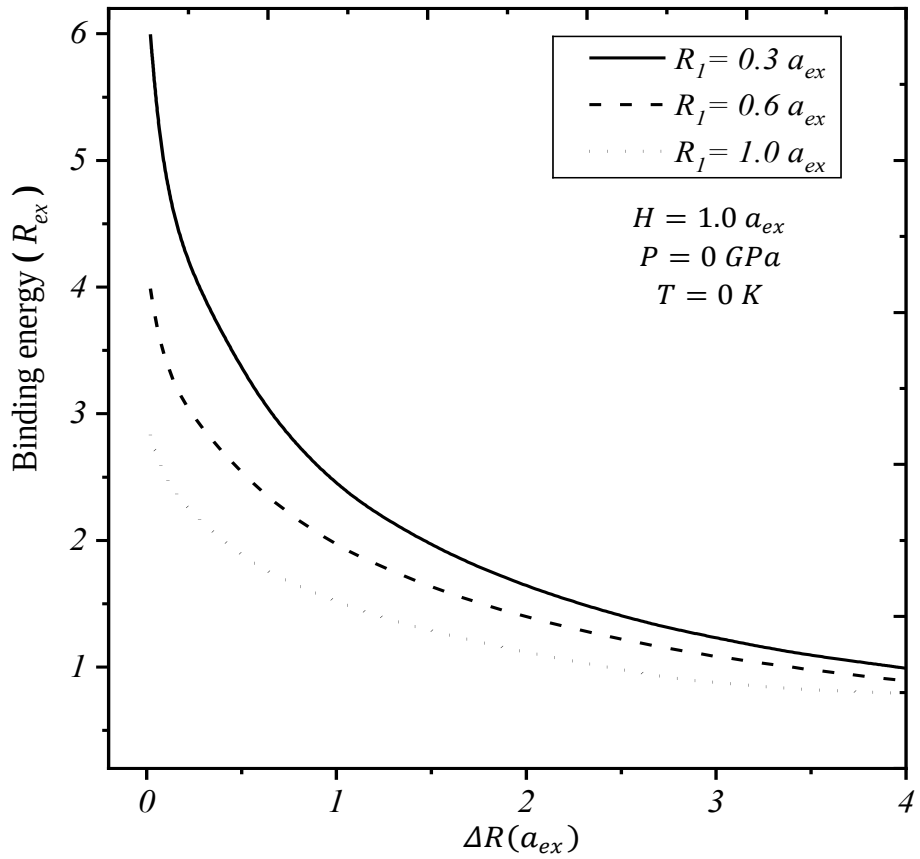


Figure V.2 : Energie de liaison de l'exciton en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de QR, pour trois valeurs du $R_1(0.3;\ 0.6\ \&\ 1.0a_{ex})$.

Sur la figure V.3, nous avons fixé l'épaisseur radiale et nous avons représenté la dépendance de l'E_b^{1s} en H pour trois valeurs du $R_1(0.3;\ 0.6\ \&\ 1.0\ a_{ex})$. En effet, pour une valeur fixe de R_1, lorsque H diminue, l'effet de confinement quantique augmente, ce qui conduit à une augmentation du E_b^{1s} , jusqu'à atteindre un pic où la stabilité de l'exciton est maximale. Lorsque la hauteur H diminue au-dessous de la valeur qui correspond au pic, l'effet tunnel se produit et la probabilité de trouver les porteurs de charge dans le matériau barrière augmente, ce qui entraîne à une réduction du E_b^{1s}. On observe également sur la figure que l'énergie de liaison augmente lorsque R_1 diminue. On peut expliquer ce comportement par l'augmentation de l'effet du confinement spatial entre les porteurs de charges dans la direction radiale, ce qui donne une amélioration de l'E_b^{1s}. La comparaison entre les figures V.2 et V.3 révèle que le comportement de la variation de E_b^{1s} avec ΔR est différent de celui que H. Nous pouvons attribuer cette différence par le choix du potentiel de confinement fini suivant la direction axiale et du potentiel infini le long de la direction radiale ρ.

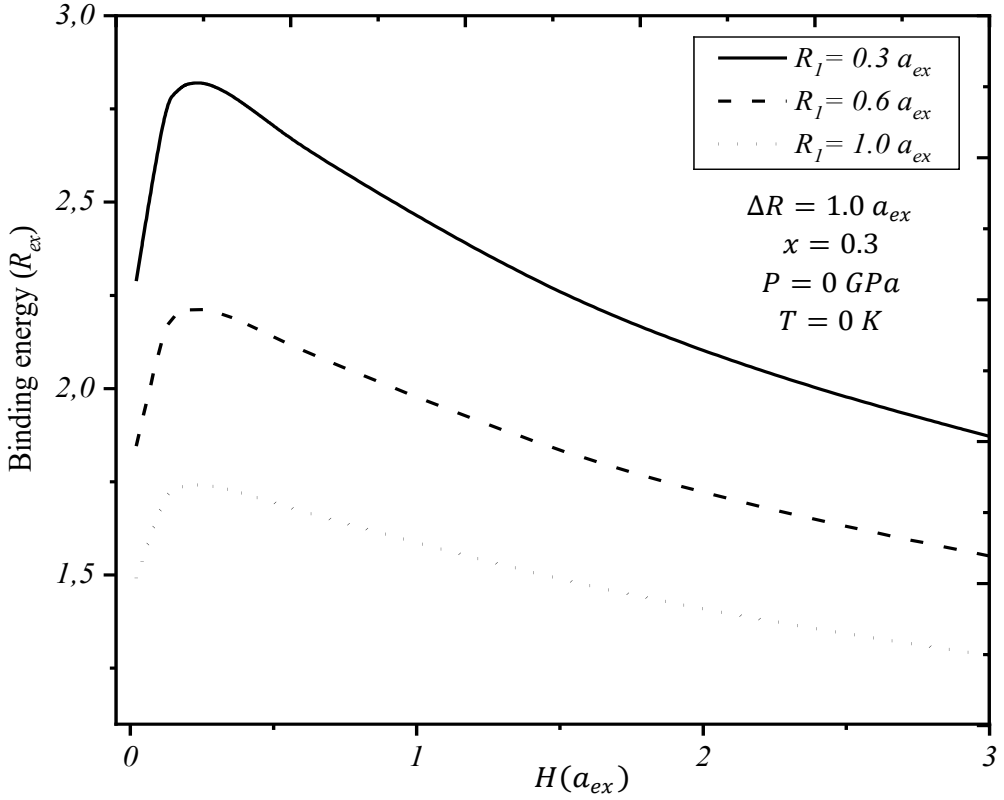


Figure V.3 : Energie de liaison de l'exciton en fonction de la hauteur H de QR, pour trois valeurs du $R_1(0.3;\ 0.6\ \&\ 1.0\ a_{ex})$.

La variation de l'E_b^{1s} en fonction de ΔR sous l'effet de la pression ($P = 0;\ 2;\ 3\ \&\ 4\ GPa$) est représentée sur la figure V.4, pour $R_1 = 0{,}3\ a_{ex}$ et $H = 1.0\ a_{ex}$ et à $T = 0\ K$. Pour des valeurs fixes de ΔR, on observe que l'E_b^{1s} augmente avec la pression, puisque cette dernière a pour rôle de renforcer l'effet de confinement entre l'électron et le trou, ce qui rend l'énergie Coulombienne plus prononcée et cela produit à une augmentation de l'E_b^{1s}. D'autres raisons pour cette augmentation de l'E_b^{1s} avec la pression est l'incrément (diminution) des masses effectives des porteurs de charge et l'énergie de gap (la constant diélectrique, les dimensions géométriques : $R_{1,2}(P), H(P)$). La même figure indique que la pression a un effet très significatif sur E_b^{1s} pour les grandes valeurs de l'épaisseur radiale ΔR de QR.

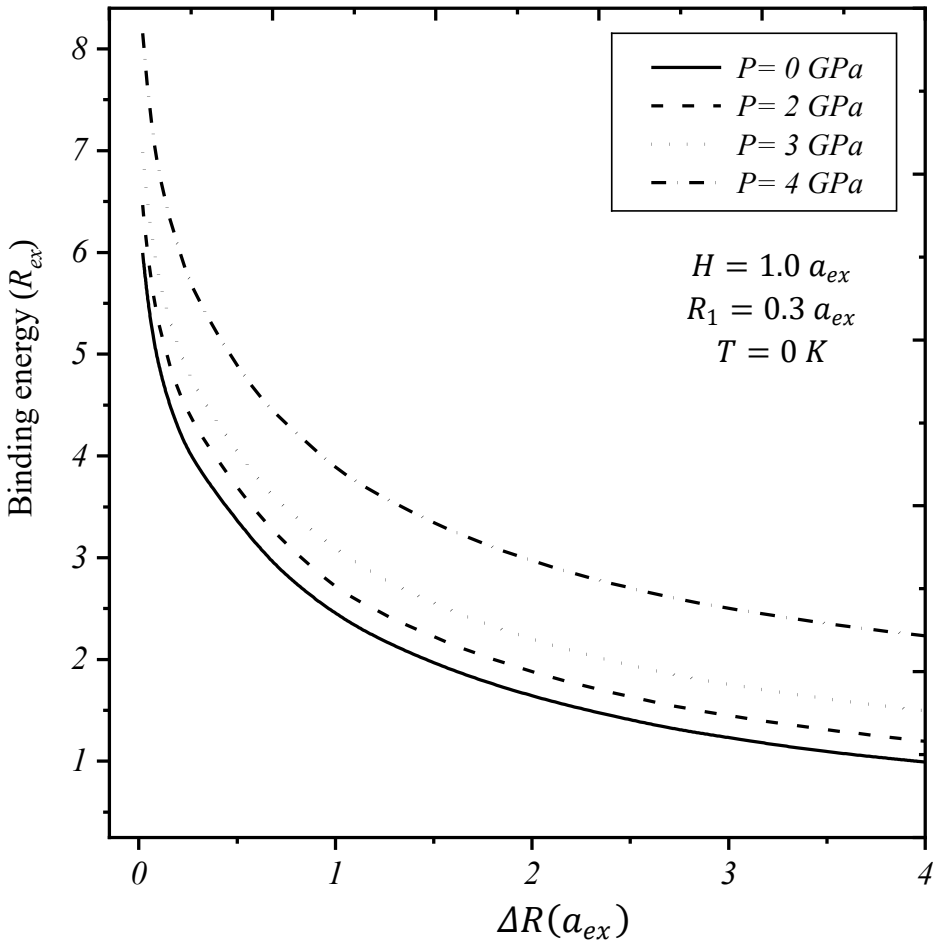


Figure V.4 : Energie de liaison de l'exciton en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de QR, pour différentes valeurs de la pression hydrostatique ($P = 0;\ 2;\ 3\ \&\ 4\ \ GPa$).

Nous avons repris les paramètres internes de QR utilisés sur la figure V.4, et nous avons tracé sur la figure V.5 la variation de l'E_b^{1s} en fonction du ΔR pour différentes valeurs du températures ($T = 0;\ 200;\ 300\ \&\ 500\ K$) et pour $P = 0\ GPa$. La figure montre bien que la température n'a pratiquement aucun effet sur l'E_b^{1s} pour les faibles épaisseurs radiales ΔR, ce qui signifie que dans ces régions, l'effet de confinement spatial est plus dominant que celui de la température, par ailleurs, elle a un effet plus prononcé avec l'augmentation du ΔR. Contrairement à l'effet de la pression présenté sur la figure V.4, l'E_b^{1s} diminue avec la température, car cette dernière a tendance à séparer spatialement l'électron et le trou, par conséquent, l'énergie coulombienne devient plus faible ce qui entraîne une diminution de l'E_b^{1s} et l'exciton sera moins stable si la température augmente.

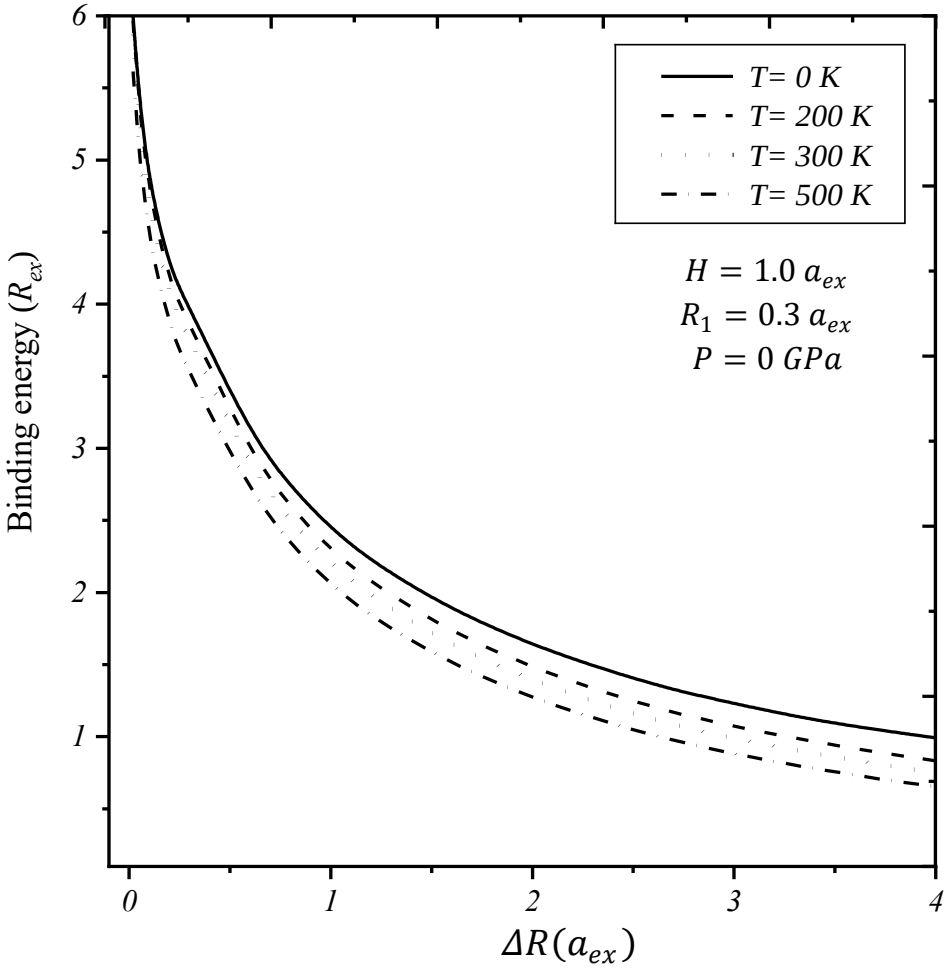


Figure V.5 : Energie de liaison de l'exciton en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de QR, pour différentes valeurs du température ($T = 0;\ 200;\ 300\ \&\ 500\ K$).

Sur les figures V.6 et V.7, nous avons représenté l'effet de la pression et de la température sur l'énergie de liaison de l'exciton E_b^{1s} en fonction de la hauteur H de QR respectivement, pour une valeur fixe de la concentration en aluminium $x = 0.3$. On constate que la pression et la température présentent les mêmes effets que ceux présentés sur les figures V.4 et V.5. La comparaison entre les figures V.4 et V.6 et les figures V.5 et V.7 montrent que l'effet des paramètres externes (la pression et la température) sur E_b^{1s} sont plus prononcés dans les figures V.5 et V.7 (confinement axial). En effet, dans le cas du confinement radial, l'effet des perturbations extérieures sera moins prononcé car l'effet du confinement est dominant (confinement dans deux directions).

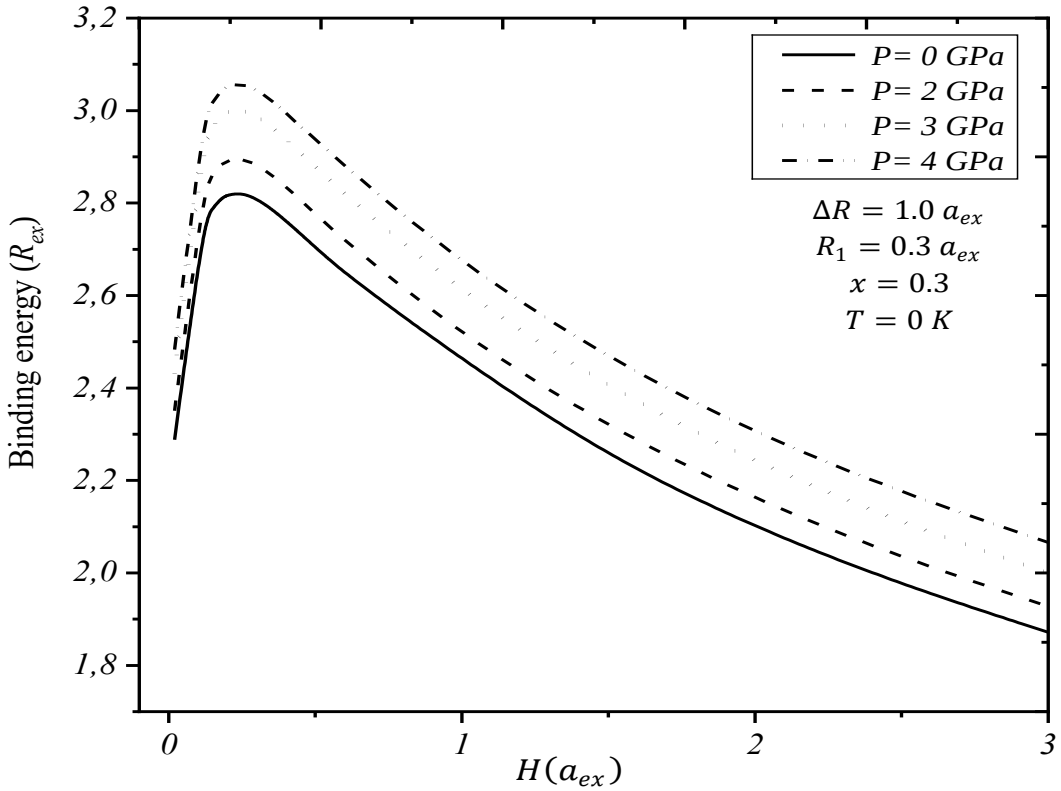


Figure V.6 : Energie de liaison de l'exciton en fonction de la hauteur H de QR, pour différentes valeurs de pression hydrostatique ($P = 0;\ 2;\ 3\ \&\ 4\ \ GPa$).

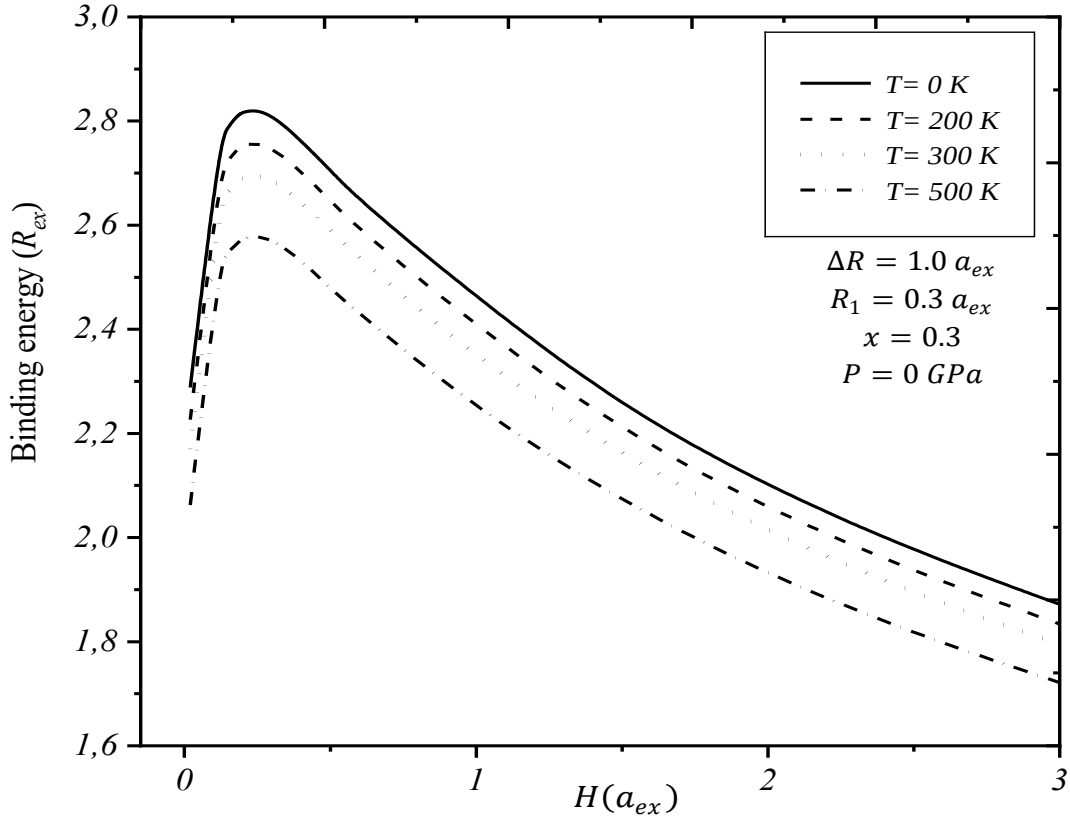


Figure V.7 : Energie de liaison de l'exciton en fonction de la hauteur H de QR, pour différentes valeurs du températures ($T = 0;\ 200;\ 300\ \&\ 500\ K$).

La figure V.8 montre la dépendance de l'énergie d'émission interbande E_{ph} en fonction de la hauteur H de l'exciton confiné dans le système QR pour différentes valeurs de la concentration d'aluminium ($x = 0.15;\ 0.3$ & 0.45) pour $P = 0\ GPa$ et $T = 0\ K$. Pour toutes les valeurs du x, l'E_{ph} augmente lorsque la hauteur H du QR devient plus petite. En effet, la diminution de dimensions de QR entraîne une compression de la fonction d'onde et l'incrémentation des énergies de confinement (E_e et E_{hh}), et selon l'équation (V.34) l'E_{ph} augmente. Cette augmentation est plus prononcée pour $H < 20\ nm$. D'autre part, dans la région définie par $H > 20\ nm$ (limite de saturation), la hauteur de la barrière de potentiel a un effet négligeable sur l'E_{ph}, car la distance entre les porteurs de charge est plus grande et l'exciton ressemble à un environnement du cas massif.

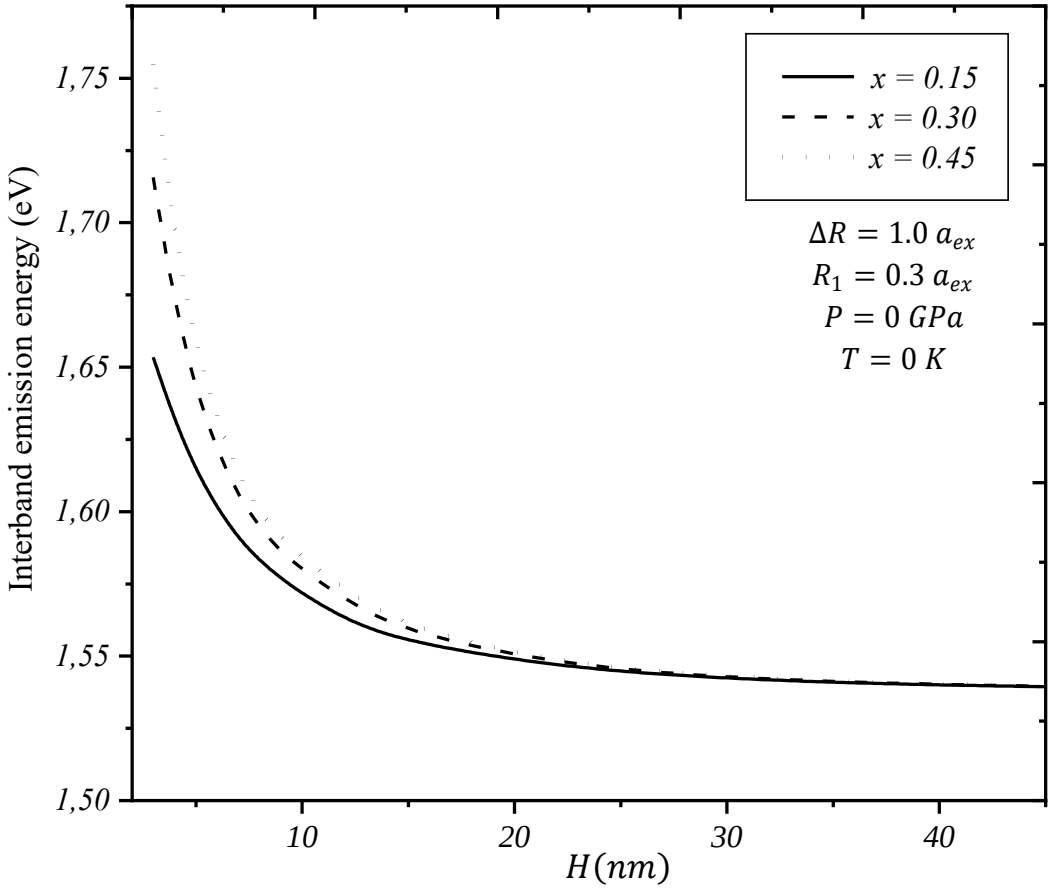


Figure V.8 : Energie d'émission interbande de l'exciton en fonction de la hauteur H de système QR pour trois valeurs de la concentration d'aluminium ($x = 0.15;\ 0.3$ & 0.45).

La figure révèle aussi que l'E_{ph} augmente lorsque la concentration en aluminium augmente jusqu'à $x = 0.45$ dans les QRs très étroits ($H \to 0$). On peut expliquer cette augmentation de E_{ph} par le fort confinement quantique de l'électron et du trou à l'intérieur du système QR en raison d'une augmentation de la hauteur de barrière de potentielle et l'énergie du gap. Nous

avons comparé nos résultats de l'E_{ph} en fonction de la hauteur H avec une étude expérimentale [42] focalisée sur les propriétés optiques de la structure QR de type $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ par l'utilisation de la photoluminescence. Cette étude expérimentale montre que l'énergie d'émission du PL diminue à mesure que la hauteur du QR augmente, ce qui est en bon accord avec nos résultats représentés dans la figure V.8.

La figure V.9 illustre la variation de l'énergie d'émission interbande en fonction de ΔR sous l'effet de la pression $(0;\ 2;\ 3\ \&\ 4\ GPa)$ et pour $T = 0\ K$. Les résultats des calculs indiquent que pour une valeur fixe de la pression, le même comportement de l'E_{ph} est obtenu que sur la figure V.8. Nous avons constaté que la diminution de l'E_{ph} est plus prononcé pour $\Delta R < R_c$, avec R_c est une valeur critique où laquelle E_{ph} commence à devenir presque constante et qui dépend de la pression hydrostatique, de plus, R_c se déplace légèrement vers les plus petites épaisseurs radiales à mesure que la pression augmente. La même figure indique qu'au fur et à mesure que la pression augmente l'énergie d'émission interbande croît en particulier dans les $(\Delta R > R_c)$, en raison de la faible énergie coulombienne entre l'électron et le trou dans cette région.

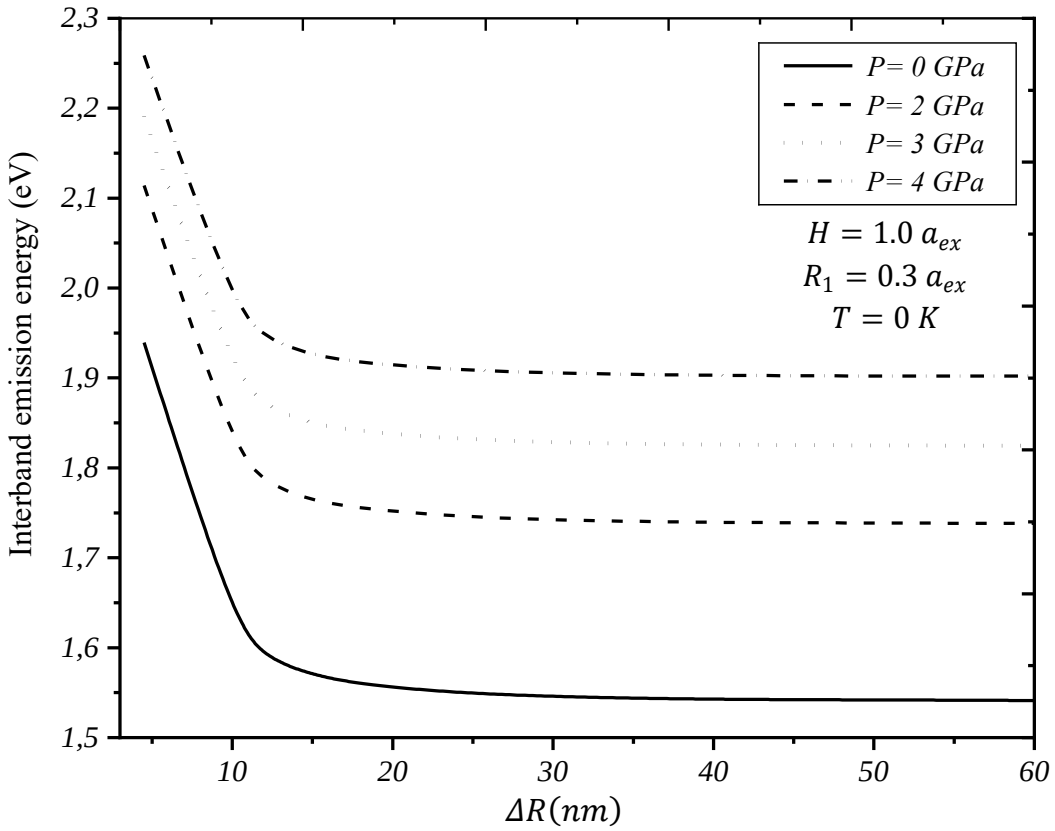


Figure V.9 : Energie d'émission interbande de l'exciton en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de QR, pour différentes valeurs du pression hydrostatique ($P = 0;\ 2;\ 3\ \&\ 4GPa$).

L'effet de la température $(0;\ 200;\ 300\ \&\ 500\ K)$ sur l'énergie d'émission interbande a été exposé sur la figure V.10 pour $P = 0\ GPa$, avec des paramètres fixes similaires à ceux de la figure V .9. Contrairement à l'effet de la pression montrée dans la figure précédente, E_{ph} est une fonction décroissante avec la température. En effet, l'augmentation de la température entraîne à une grande asymétrie de la fonction d'onde dans le QR, par conséquent, le chevauchement entre les fonctions d'ondes de l'électron et le trou dans le QR augmente, ce qui entraîne une diminution de l'énergie d'émission interbande. Pour les ΔR du QR plus étroit, l'électron et le trou sont fortement liés, et donc l'effet de la température est plus faible sur les niveaux d'énergie de l'électron et le trou (le confinement spatial est plus prononcé par rapport à l'effet de la température), par conséquent, la réduction de la taille du QR permet de limiter l'effet de la température sur les propriétés optiques. Lorsque l'épaisseur radiale augmente, l'effet de la température est plus prononcé, parce que l'électron est faiblement lié au trou dans le QR (l'énergie de liaison est inférieure à l'énergie de confinement des porteurs de charge). De plus, l'énergie de gap de $GaAs$ a une forte dépendance de la température, elle a donc évidemment un effet direct sur l'E_{ph}.

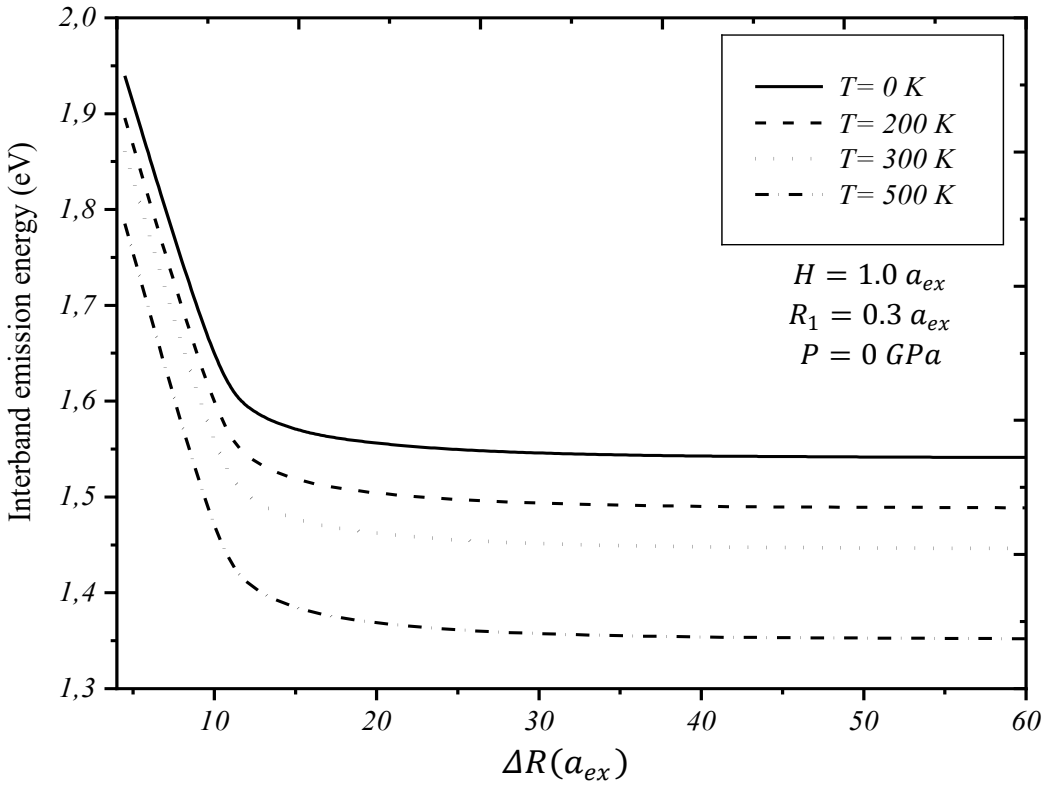


Figure V.10 : Energie d'émission interbande de l'exciton en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de système QR, pour différentes valeurs du températures $(T = 0;\ 200;\ 300\ \&\ 500\ K)$.

Dont le but de valoriser notre travail, nous avons comparé nos résultats du E_{ph} avec l'investigation théorique établie dans la réf. [17], liée à l'exciton confiné dans un disque quantique ultramince de type $GaAs$. La comparaison révèle que le comportement de l'énergie d'émission interbande en fonction de l'épaisseur radiale ΔR dans le système QR sous l'effet de la pression hydrostatique et de la température (figures V.9 et V .10) est similaire à celui trouvé dans un disque quantique [17].

Sur la figure V.11, nous avons tracé l'énergie de liaison de l'exciton à l'état fondamental (E_b^{1s}) et de la première état excité (E_b^{2s}) en fonction de l'épaisseur radiale ΔR et en fonction de la hauteur H (l'encart sur la figure) de QR à $T = 0\ K$ et $P = 0\ GPa$. Comme le montre la figure, nous avons obtenu les mêmes comportements de E_b^{1s} et E_b^{2s} en fonction du ΔR. Les deux énergies diminuent avec l'augmentation de l'épaisseur radiale.

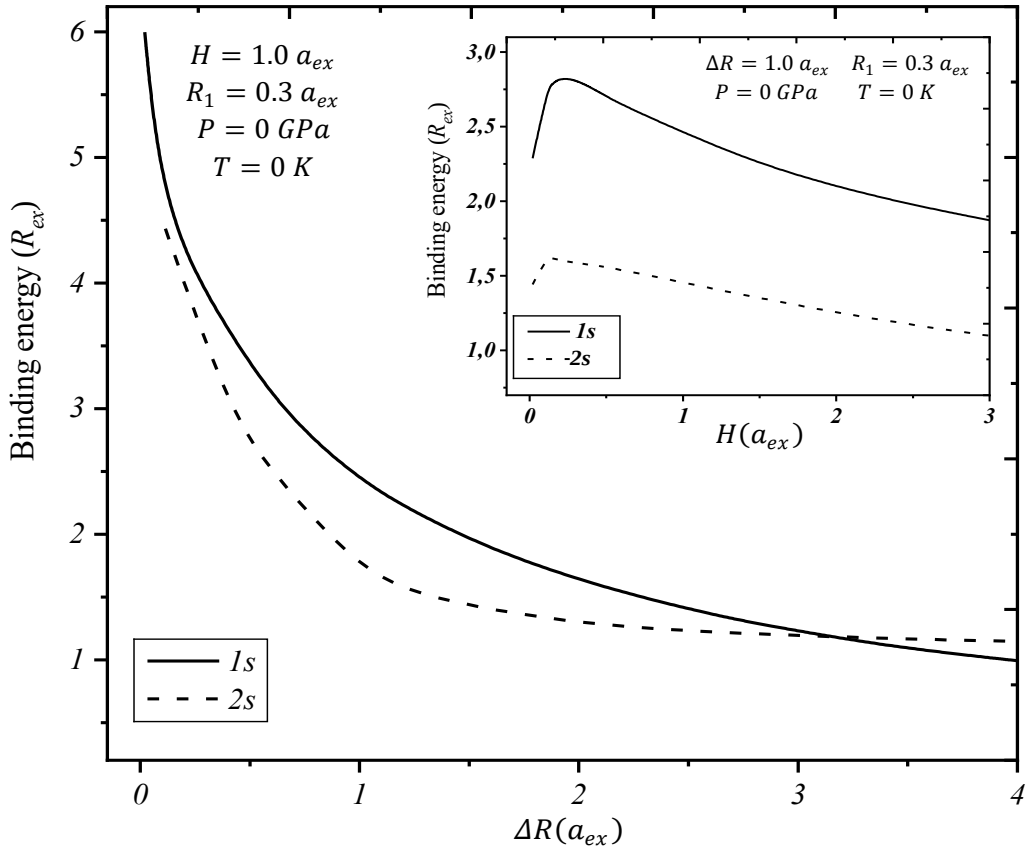


Figure V.11 : Energie de liaison de l'exciton à l'état fondamental $(1s)$ et premier état excité $(2s)$ en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de système QR. L'encart montre l'énergie de liaison de l'état $1s$ et $2s$ en fonction de la hauteur H de système QR pour $T = 0\ K$ et $P = 0\ GPa$.

La même figure illustre que la différence entre l'E_b^{1s} et l'E_b^{2s} est clairement observé pour un confinement intermédiaire ($0.5a_{ex} \leq \Delta R \leq 1.5a_{ex}$). Il convient de noter qu'il existe une épaisseur radiale critique ΔR_c pour les grandes ΔR, à partir de laquelle l'E_b^{2s} devient supérieur

à l'E_b^{1s} $(\Delta R > \Delta R_c)$. Cette épaisseur radiale critique est dû au fort confinement de la fonction d'onde $2s$ pour les grandes valeurs de ΔR et aussi à la grande liberté d'expansion de la fonction d'onde$1s$. Aussi, d'après l'encart de la figure, il apparaît clairement que l'influence de la variation de H sur l'E_b^{2s} est plus faible que celle du cas du E_b^{1s}. Nous signalons aussi que le maximum du E_b^{2s} est légèrement décalé vers les valeurs les plus petites de la hauteur comparée au E_b^{1s}, ce qui indique que pour le premier état excité, l'effet tunnel peut se produire pour des valeurs très faibles de H.

L'énergie de liaison de l'exciton dans son état fondamental et du premier état excité pour différentes valeurs de la pression hydrostatique $(P = 0;\ 2;\ 3\ \&\ 4\ GPa)$ sont représentés dans la figure V.12 (a), (b), (c) et (d) en fonction de ΔR. L'effet de la pression sur l'énergie de liaison de l'exciton à l'état $2s$ est similaire à celui sur l'état fondamental $1s$.

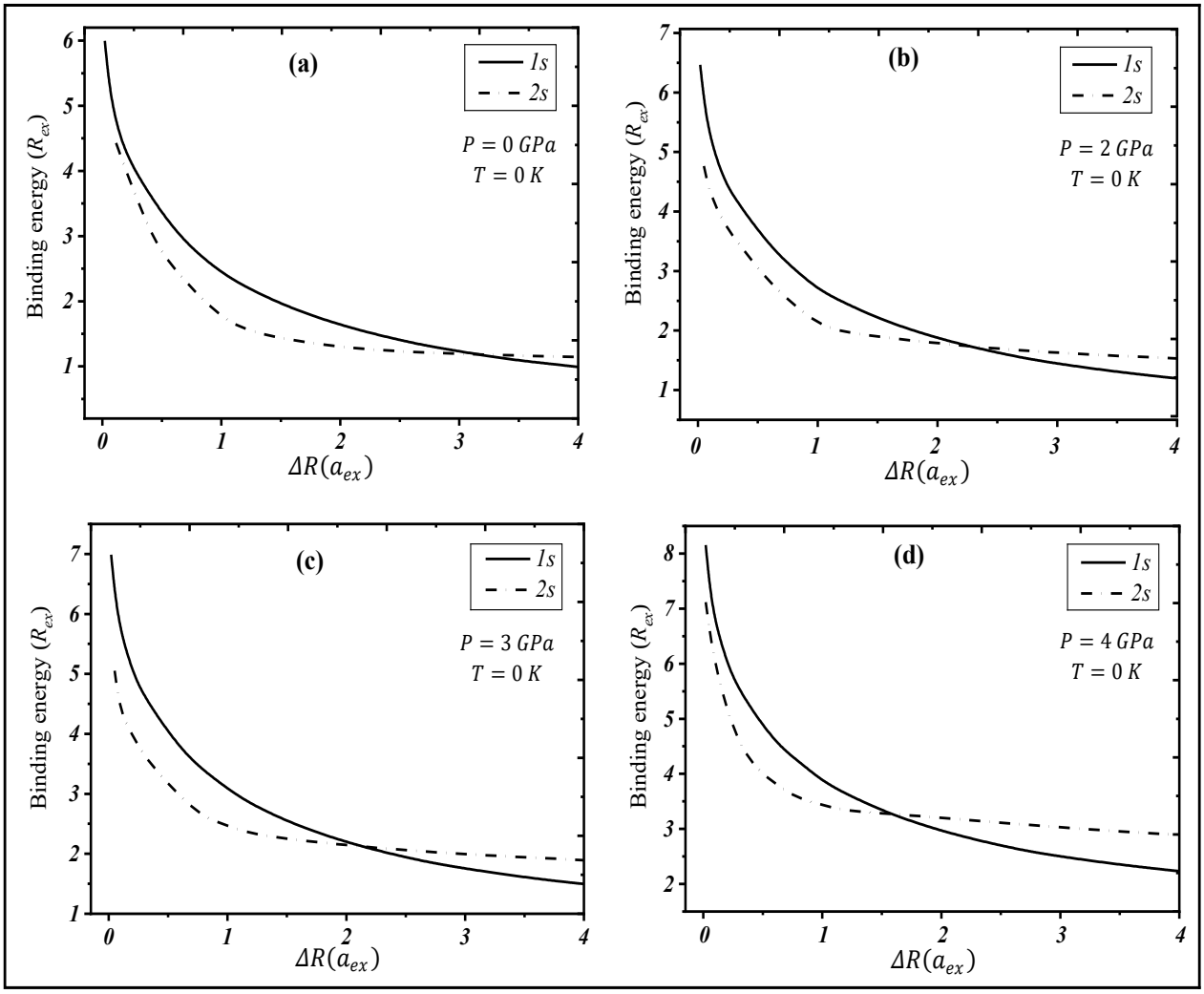


Figure V.12 : Energie de liaison de l'exciton à l'état fondamental $(1s)$ et premier état excité $(2s)$ en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de système QR, pour $P = 0\ GPa$ (a), $P = 2\ GPa$ (b), $P = 3\ GPa$ (c) et $P = 5\ GPa$ (d) à $T = 0\ K$ et pour les paramètres fixes suivantes $R_1 = 0.3\ a_{ex}$, et $H = 1.0\ a_{ex}$.

Il est intéressant de noter que l'épaisseur radiale critique ΔR_c se déplace vers une épaisseur radiale ΔR plus petite lorsque la pression augmente, cela est dû au fait que pour une grande épaisseur radiale, la compression de la fonction d'onde $2s$ dans le plan $x-y$ (direction radiale) est plus prononcée que l'état fondamental $1s$.

Nous avons illustré sur la figure V.13 l'effet de la température $\left(0\ (a);\ 200\ (b);\ 300\ (c) \text{ et } 500\ K(d)\right)$ sur l'énergie de liaison de l'exciton à l'état $1s$ et $2s$ en fonction de l'épaisseur radiale et pour $P = 0GP$.

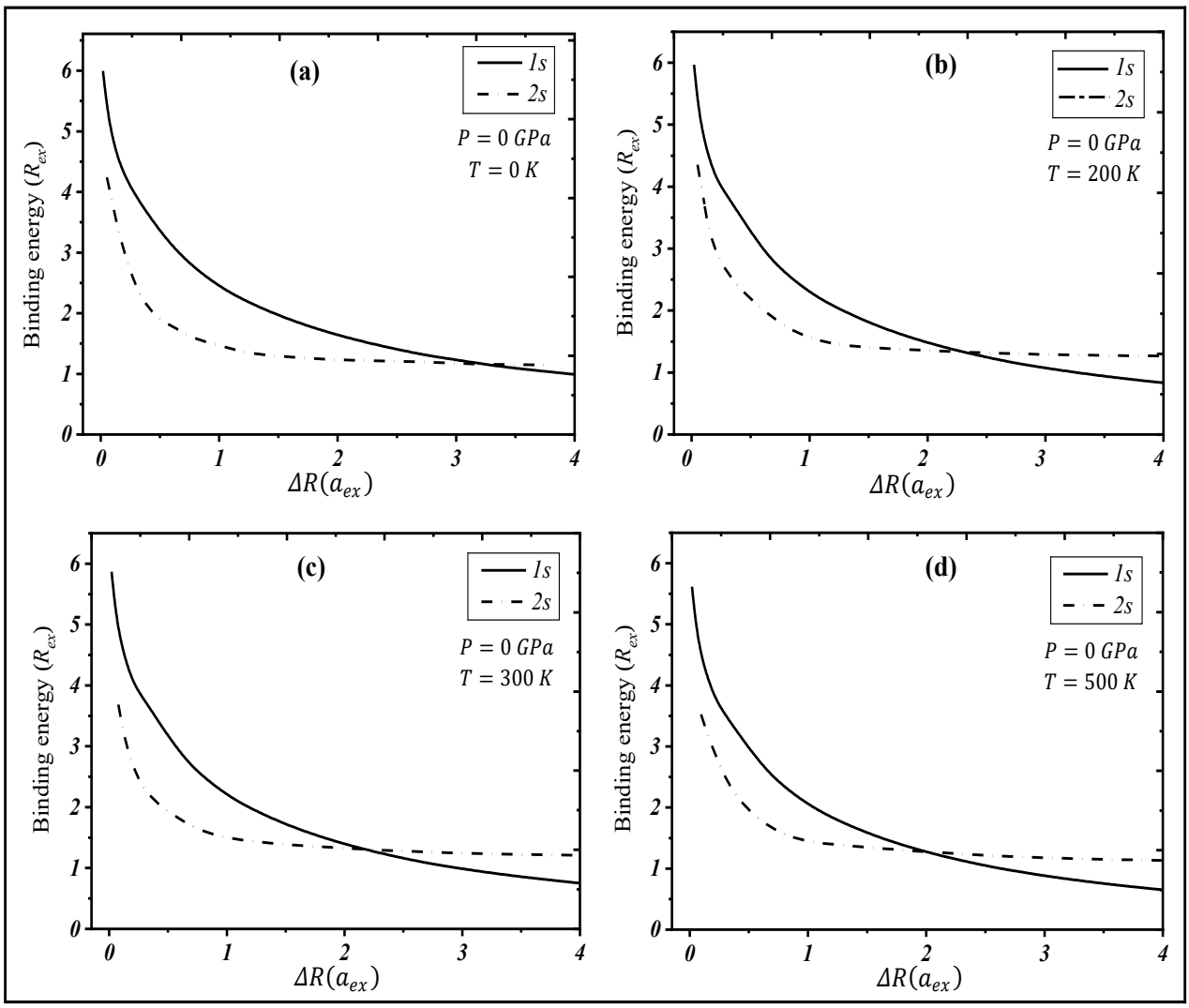


Figure V.13 : Energie de liaison de l'exciton à l'état fondamental $(1s)$ et première état excité $(2s)$ en fonction de l'épaisseur radiale ΔR de système QR, pour $T = 0\ K$ (a), $T = 200\ K$ (b), $T = 300\ K$ (c) et $T = 500\ K$ (d) à $P = 0\ GPa$ et pour les paramètres fixes suivantes $R_1 = 0.3\ a_{ex}$, et $H = 1.0\ a_{ex}$.

Nous constatons d'après la figure que pour une valeur fixe de l'épaisseur radiale ΔR, l'E_b^{2s} diminue avec la température, cela est dû au fait que la fonction d'onde Ψ_{ex}^{2s} s'étend avec l'augmentation de la température, ce qui entraîne une énergie cinétique plus faible de porteurs de charges. Pour des épaisseurs radiales plus importantes, la force de l'interaction

Coulombienne entre l'électron et le trou à l'état 1s se réduit par rapport à celle de l'état $2s$ de telle sorte que l'E_b^{2s} devient plus élevée que l'E_b^{1s}. Ce comportement ne peut s'observer pour le cas des petites épaisseurs radiales où il existe un confinement plus fort. De plus, le ΔR_c se décale vers des épaisseurs radiales plus petites quand la température augmente.

V.4. Conclusion

Pour conclure, nous avons calculé l'énergie de liaison à l'état fondamental E_b^{1s} , premier état excité E_b^{2s} et l'énergie d'émission interbande E_{ph} d'un exciton confiné dans le système QR à base de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ en fonction des paramètres internes (l'épaisseur radiale ΔR et la hauteur H) en tenant compte des effets de la pression hydrostatique et la température, dans l'approximation de la masse effective, en utilisant une approche variationnelle. Les résultats numériques montrent que l'augmentation des paramètres internes du QR, entraîne une diminution de E_b^{1s}, E_b^{2s} et E_{ph}, et ces dernières quantités augmentent avec la pression, tandis que la température a un effet opposé à l'effet de la pression. Nous avons montré également que les effets des perturbations extérieurs sur E_b^{1s}, E_b^{2s} et E_{ph} sont significatifs dans les ΔR plus grandes. Une autre constatation est que pour un confinement fort (les QRs étroits), E_{ph} augmente avec la concentration de l'aluminium, et pour un faible confinement, il devient indépendant de la hauteur de la barrière de potentiel de confinement.

Références

[1] J. Wu, Z.M. Wang, K. Holmes, E. Marega and Z. Zhou, Appl. Phys. Lett. **100**, 203117 (2012).

[2] P.M. Petrff, A. Lorke and A. Imamoglu, Physics today **54**, 46 (2001).

[3] D. Cricchio and E. Fiordilino, Nanoscale **8**, 1968 (2015).

[4] T. Mano, T. Kurod, K. Kuroda and K. Sakoda, Journal of Nanophotonics **3**, 031605 (2009).

[5] H.S. Ling and C.P. Lee, J. Appl. Phys. **102**, 024314 (2007).

[6] C. Somaschini, S. Bietti, S. Sanguinetti, N. Koguchi and A. Fedorov, Nanotechnology **21**, 125601 (2010).

[7] T. Mano, T. Kuroda, S. Sanguinetti, T. Ochiai, T. Tateno, J. Kim, T. Noda, M. Kawabe, K. Sakoda, G. Kido and N. Koguchi, Nano. Lett. **5**, 425 (2005).

[8] S.-Shen Li and J.-Bai Xia, J. Appl. Phys. **89**, 3434 (2001).

[9] G.-Xin Wang and P. Zhang, Int. J. Mod. Phys. **25**, 4687 (2011).

[10] G. Wang and P. Zhang, J. Appl. Phys. **103**, 063713 (2008).

[11] G. Wang, X. Duan and R. Zhou, Advances in Condensed Matter Physics **2015**, 1 (2015).

[12] M.G. Barseghyan, A. Hakimyfard, M. Zuhair, C.A. Duque and A.A. Kirakosyan, Physica E **44**, 419 (2011).

[13] M.G. Barseghyan, A. Hakimyfard, A.A. Kirakosyan, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque, Superlattices Microstruct. **51**, 119 (2012).

[14] H.M. Baghramyan, M.G. Barseghyan, C.A. Duque and A.A. Kirakosyan, Physica E **48**, 164 (2012).

[15] H.M. Baghramyan, M.G. Barseghyan, A.A. Kirakosyan, D. Laroze and C.A. Duque, Physica B **449**, 193 (2014).

[16] A.Kh. Manaselyan, M.G. Barseghyan, A.A. Kirakosyan, D. Laroze and C.A. Duque, Physica E **60**, 95 (2014).

[17] M. El-Yadri, N. Aghoutane, E. Feddi and F. Dujardin, Superlattices Microstruct. **102**, 382 (2017).

[18] M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque, Physica B **407**, 2351 (2012).

[19] M.E. Mora-Ramos, M.G. Barseghyan and C.A. Duque, Physica E **43**, 338 (2010).

[20] A. El Moussaouy, N. Ouchani, Y. El Hassouani and D. Abouelaoualim, Superlattices Microstruct.**73**, 22 (2014).

[21] C. Xia, Z. Zeng, Z.S. Liu and S.Y. Wei, Physica B **405**, 2706 (2010).

[22] S.Y. López, N. Porras-Monténégro and C.A. Duque, Phys. Statut Solidi B **246**, 630 (2009).

[23] C.M. Duque, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque, Superlattices Microstruct. **49**, 264 (2011).

[24] A. Vanitha, A.J. Peter and C.W. Lee, Optics Communications **284**, 4936 (2011).

[25] A.J. Peter and C.W. Lee, Current Applied Physics **13**, 390 (2013).

[26] J. Song and S.E. Ulloa, Revue Physique B **63**, 125302 (2001).

[27] W.P. Hong, S.H. Park and Y.D. Jung, Journal japonais de physique appliquée **52**, 035205 (2013).

[28] X.W.-Fang, Commun. Théor. Phys. **50**, 529 (2008).

[29] J. Sierra-Ortega, J.M. García-Díaz, J. de La Hoz-Villar and G.E. Escorcia-Salas, Revista Colombiana de Física **42**, 181 (2010).

[30] A. Sali and H. Satori, Superlattices Microstruct. **69**, 38 (2014).

[31] A. Rejo Jeice and K.S. Joseph Wilson, J. Le surf. Sci. Nanotech. **12**, 358 (2014).

[32] S. Ortakaya and M. Kirak, Chin. Phys. B **25**, 127302 (2016).

[33] T.S. Koh, Y.P. Feng, X. Xu and H.N. Spector, J. Phys.: Condens. Affaire **13**, 1485 (2001).

[34] P. Baser, H.D. Karki, I. Demir and S. Elagoz, Superlattices Microstruct. **63**, 100 (2013).

[35] C.M. Duque, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque, J. Nanopart. Res. **13**, 6103 (2011).

[36] R.L. Restrepo, M.G. Barseghyan, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque, Physica E **51**, 48 (2013).

[37] M.G. Barseghyan, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque, Eur. Phys. JB **84**, 265 (2011).

[38] P.Y. Yu and M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors, Springer, Berlin (1998).

[39] S. Le Goff and B. Stébé, Phys. Rev. B **47**, 1383 (1993).

[40] R.L. Greene, K.K. Bajaj and D. Phelps, Revue Physique B **29**, 1808 (1984).

[41] H.M. Baghramyan, M.G. Barseghyan, A.A. Kirakosyan, R.L. Restrepo, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque, Journal of Luminescence **145**, 678 (2014).

[42] Z.Y. AbuWaar, Y.I. Mazur, J.H. Lee, Z.M. Wang and G.J. Salamo, journal of applied physics **101**, 024311 (2007).

Conclusion générale

Nous avons étudié les effets des perturbations extérieurs sur les propriétés électroniques et optiques des impuretés et des excitons dans les anneaux quantiques (QRs) à base des semi-conducteurs pour les modèles de potentiels de confinement fini et infini.

Dans le premier chapitre, nous avons rappelé les propriétés générales des semi-conducteurs III-V massifs, puis nous avons exposé les modèles théoriques permettant de déterminer les propriétés électroniques et optiques des impuretés et des excitons dans les structures de faibles dimensions.

Dans le second chapitre, nous avons discuté les diverses méthodes de croissance des anneaux quantiques et quelques exemples de leurs applications. Nous avons aussi présenté les états électroniques d'un porteur de charge (électron ou trou) confiné dans les anneaux quantiques en fonction des paramètres géométriques (la hauteur H, les rayons internes R_1 et externes R_2 et la hauteur de la barrière) en absence et en présence d'un champ électrique par la méthode variationnelle dans le cadre de l'approximation de la masse effective.

Dans le troisième chapitre de ce mémoire, nous avons étudié l'influence d'un champ électrique externe, la variation des paramètres géométriques du système QR (hauteur, épaisseur radiale et position de l'impureté), la non parabolicité de la bande de conduction et de l'interaction électron-phonons optiques longitudinaux (LO) sur l'énergie de liaison d'une impureté donneur hydrogénoïde peu profonde confinée dans un anneau quantique de type $GaN/Ga_{1-x}Al_xN$. Nos résultats ont montré que l'effet de la NP de la bande de conduction est très significatif dans le régime de fort confinement et conduit à une augmentation de l'énergie de liaison des impuretés donneurs. Nous avons également examiné l'effet combiné de la non parabolicité (NP) de la bande de conduction et du polaron sur l'énergie de liaison dans le cas de potentiel de confinement infini. Nous avons montré que l'effet de la non parabolicité de la bande de conduction et la correction polaronique entraînent une augmentation de l'énergie de liaison de l'impureté, en particulier lorsque l'impureté est localisée au centre de QR. Nous avons également conclu que l'énergie de liaison diminue avec le champ électrique, en particulier pour les grandes dimensions (hauteur et épaisseur radiale) de QR.

En utilisant les résultats trouvés dans le troisième chapitre, nous avons calculé dans le quatrième chapitre la susceptibilité diamagnétique (χ_{dia}) et de la polarisabilité (α_p) d'une impureté donneur hydrogénoïde peu profonde confinée dans la structure QR en fonction des

paramètres géométriques du QR, en tenant compte l'effet de la NP de la bande de conduction et de l'interaction électron-LO phonon volumique. Nous avons prouvé que la susceptibilité diamagnétique χ_{dia} est très sensible à l'effet de la NP de la bande de conduction et de la correction polaronique, en particulier lorsque l'impureté est localisée au centre du système QR (augmentation de la χ_{dia}). Nos résultats ont également montré que la polarisabilité augmente avec les paramètres géométriques du QR et se réduit lorsque l'intensité du champ électrique augmente. D'autre part, nous avons constaté que pour un fort confinement, la α_p est insensible à l'effet du polaron, alors que pour le régime de confinement intermédiaire et faible (QRs épais), l'effet du polaron tend à diminuer la α_p.

Dans le dernier chapitre, nous nous sommes focalisés sur l'études des propriétés optoélectroniques d'un exciton confiné dans le système QR à base de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, en tenant compte des effets de la pression hydrostatique et de la température. Nous avons trouvé qu'une augmentation des paramètres internes du système QR, engendre une diminution de l'énergie de liaison de l'état fondamental E_b^{1s}, du premier état excité E_b^{2s} et de l'énergie d'émission interbande E_{ph}. Ces dernières quantités augmentent avec la pression, tandis qu'elles diminuent avec la température ayant un effet opposé à celui de la pression. Les résultats ont montré aussi que les effets des perturbations extérieures sur E_b^{1s}, E_b^{2s} et E_{ph} sont significatifs dans les ΔR plus grandes. Nous avons également constaté que pour un confinement fort (les QRs étroits), E_{ph} augmente avec la concentration de l'aluminium, et pour un faible confinement, elle devient indépendante de la hauteur de la barrière de potentiel de confinement.

Nous envisageons de poursuivre ce travail par l'étude des propriétés électroniques et optiques des excitons confinés dans un double anneau quantique à base de semi-conducteur III-V. En parallèle nous envisageons de faire une étude sur les propriétés optoélectronique des excitons chargés (ou trions excitoniques) dans un QR.