



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que

Mr **FAKKAHI Abdelghani**

Soutiendra : le **Jeudi 27/07/2023 à 15H00**

Lieu : **Centre des Etudes Doctorales - USMBA - Amphi 2**

Une thèse intitulée :

Shallow donor impurity related optical and electronic properties of a multilayered spherical quantum dot using the finite element method

En vue d'obtenir le Doctorat

FD : Sciences des Matériaux et Procédés Industriels

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

Devant le jury composé comme suit :

Nom et prénom	Etablissement	Grade	Qualité
Pr JORIO Anouar	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Président
Pr REZZOUK Abdellah	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Rapporteur & Examineur
Pr MANSSOURI Imad	Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Meknès	PH	Rapporteur & Examineur
Pr RAHMANI Khalid	Ecole Normale Supérieure, Rabat	PH	Rapporteur & Examineur
Pr ZORKANI Izeddine	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Examineur
Pr EL-GHAZI Haddou	Ecole Nationale Supérieure d'Arts et Métiers, Casablanca	PH	Examineur
Pr LIMAME Karoum	Centre Régional Des Métiers De L'Éducation Et De La Formation, Fès	PH	Examineur
Pr SALI Ahmed	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PH	Directeur de thèse



Résumé :

Ce travail, divisé en cinq chapitres, est consacré à l'étude des propriétés électroniques et optiques d'une boîte quantique sphérique à multicouches. Les calculs numériques ont été effectués en utilisant un potentiel de confinement de hauteur finie dans le cadre de l'approximation de la masse effective. En outre, en utilisant la méthode des éléments finis, nous avons résolu numériquement l'équation de Schrodinger indépendante du temps et nous avons obtenu les fonctions d'ondes et leurs valeurs propres correspondantes, qui sont utilisées pour calculer les propriétés électroniques telles que l'énergie de liaison d'une impureté donneur et les propriétés optiques telles que la section efficace de photoionisation, la rectification optique, les coefficients d'absorption optique linéaires et non linéaires, et la génération d'harmoniques du second ordre. En outre, les effets des perturbations externes telles que le champ électrique, la pression et la température sur les états électroniques et les propriétés optiques sont examinés, en tenant compte des dépendances de la pression hydrostatique et de la température de la masse effective, de la constante diélectrique et de l'énergie de la bande interdite. Dans un premier temps, nous avons étudié l'énergie de liaison d'une impureté donneur peu profonde confinée dans une boîte quantique sphérique à multicouches de type GaAs/GaAlAs. Nous avons étudié les effets des tailles géométriques et des perturbations externes (pression hydrostatique, température et champ électrique) sur l'énergie de liaison de l'impureté donneur hydrogénoïde. Nous avons constaté que l'énergie de liaison augmente avec l'augmentation de la pression hydrostatique et diminue avec l'augmentation de la température et du champ électrique externe. La section efficace de photoionisation des boîtes quantiques sphériques à multicouches de type GaAs/GaAlAs soumise à la même perturbation externe que dans le chapitre 2 a été examinée dans le troisième chapitre.

En outre, nous avons étudié l'influence de la masse effective dépendante de la position, de la non-parabolicité de la bande de conduction, de la masse polaronique et la fonction diélectrique sur l'énergie de liaison et la section efficace de photoionisation en fonction de l'énergie de photon. Dans le quatrième chapitre, nous avons étudié le coefficient de rectification optique non linéaire pour une transition intrabande de l'état fondamental et le premier état excité sous l'effet des perturbations externes en utilisant un potentiel de confinement rectangulaire. En outre, nous avons étudié le coefficient de rectification optique non linéaire pour diverses transitions entre différents niveaux quantiques et la génération d'harmoniques du second ordre dans un boîte quantique sphérique à multicouches de type GaAs/AlGaAs en présence d'un potentiel de confinement de type Kratzer. Dans le dernier et cinquième chapitre, nous avons étudié les coefficients d'absorption optique linéaire, non linéaire de troisième ordre et total dans une boîte quantique sphérique à multicouches de type GaAs/GaAlAs, en modélisant le potentiel de confinement par une forme de potentiel de Kratzer. En outre, nous avons étudié l'effet de la position de l'impureté et du champ électrique sur le coefficient d'absorption. Nous avons également examiné la variation de la force de l'oscillateur en fonction de l'épaisseur des couches de structure, du champ électrique et de la position de l'impureté. Nous espérons que nos résultats motiveront davantage de recherches expérimentales dans ce domaine et qu'ils apporteront des connaissances importantes pour les applications des dispositifs basés sur les boîtes quantiques multicouches.

Mots clés :

Boîte quantique ; Boîte quantique sphérique à multicouche ; Impureté donneur peu profonde ; Énergie de liaison ; Section efficace de photoionisation ; Génération d'harmoniques du second ordre ; Force de l'oscillateur ; Coefficient d'absorption ; Pression hydrostatique ; Champ électrique.



SHALLOW DONOR IMPURITY RELATED OPTICAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF A MULTILAYERED SPHERICAL QUANTUM DOT USING THE FINITE ELEMENT METHOD

Abstract:

This work, divided into five chapters, investigates the electrical and optical properties of a multilayered spherical quantum dot. The numerical calculations are performed under the finite potential barrier in the framework of the effective-mass approximation. Furthermore, using the finite element method, we numerically solved the independent time Schrodinger equation and we have obtained the wave functions and their corresponding eigenvalues, which are used to calculate the electronic properties such as the donor binding energy and some optical properties like: photoionization cross section, optical rectification, linear and nonlinear optical absorption coefficients, and second harmonic generation. In addition, the effects of external perturbations such as electric field, hydrostatic pressure, and temperature on electronic states and optical properties are examined, taking into consideration the pressure and temperature dependencies of effective mass, dielectric constant, and band gap energy. In a first step, we studied the binding energy of a shallow donor impurity in a multilayer spherical quantum dot based on $GaAs/GaAlAs$. We investigated the effects of the geometrical sizes and the external perturbations (hydrostatic pressure, temperature, and electric field) on the donor impurity binding energy. We found that the binding energy increases with increasing hydrostatic pressure and decreases with increasing temperature and external electric field. The photoionization cross section of $GaAs/GaAlAs$ multilayered spherical quantum dots under the same external perturbation as in chapter 2 was investigated in the third chapter. Furthermore, we investigated the influence of position dependent effective mass, dielectric function conduction band nonparabolicity, and polaronic mass on the binding energy and photoionization cross section. In the fourth chapter, we studied the nonlinear optical rectification coefficient under the external perturbations. Furthermore, we have investigated the nonlinear optical rectification coefficient (NOR) for various transitions between different quantum levels and second-harmonic generation (SHG) coefficients in a $GaAs/AlGaAs$ multilayerd spherical quantum dot under Kratzer potential confinement. In the fifth and last chapter, we investigated the linear, third-order nonlinear, and total optical absorption coefficients in a $GaAs/GaAlAs$ multilayered spherical quantum dot, by modeling the confinement potential by a Kratzer potential form. Furthermore, we have studied the effect of the impurity position and the electric field on the absorption coefficients, as well as the variation of the oscillator strength as a function of the structure layer thickness, the electric field, and the impurity position. We hope that our findings will motivate more experimental research in this field and give important knowledge for device applications based on multilayer quantum dots.

Key Words: Quantum dot; Multilayered spherical quantum dots; Shallow donor impurity; Binding energy; Photoionization cross section; Second harmonic generation; Oscillator strength; Absorption coefficient; Hydrostatic pressure; Electric field