RÉPUBLIQUE ALGERIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEURE ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE MEDEA

FACULTE DES SCIENCES



Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de **Master**

En Physique

Spécialité : Physique des Matériaux

Par :

Boudjema Aicha

Etude de l'effet de dopage sur les propriétés optiques d'une structure à puits quantiques à base de $Mg_xZn_{(1-x)}O$ /ZnO

Soutenue publiquement le : 18/06/2023., Devant le jury composé de :

D .Houatis	MCA	UYFM	Président
A .Boukaoud	MCA	UYFM	Examinateurs
D. Sebbar	MCB	UYFM	Encadreur

Année universitaire : 2022 / 2023

الملخص :

في العمل الحالي درسنا تأثيرات تركيز التطعيم وتكوين المغنيسيوم على الخواص البصرية لهيكل البئر الكمي على أساس$Mg_xZn_{(1-x)}$O /ZnO, تم حساب طاقات الحبس والوظائف الموجية المقابلة لها من خلال حل لمعادلة (Schrödinger)بطريقة Shooting).. حسبنا معامل الامتصاص البصري ، وإمكانات الحجز ، وأظهرت النتائج التي تم الحصول عليها أنه عند زيادة تركيز التطعيم ، فإن موضع ذروة معامل الامتصاص يتجه نحو قيم طاقة أعلى. أكثر ، عند تغيير تركيبة المغنيسيوم (الاستقطاب التلقائي والكهربائي الانضغاطي) يؤدي إلى تشوهات في إمكانات الحبس وبالتالي يؤدي إلى تباين في معامل الامتصاص ، ويتم استغلال الخصائص البصرية في العديد من التطبيقات ، لا سيما في الأجهزة الضوئية القائمة على التحولات الإلكترونية بين الـفـو هـات.

الكلمات المفتايحة:

البئر الكمي,الامتصاص الضوئي,الآبار الكمومية,الحقل الكهربائي,التطعيم.

Résumé :

Dans le présent travail, nous avons étudié l'effet de concentration du dopage et la composition de magnésium sur les propriétés optiques d'une structure à puits quantique à base de $Mg_xZn_{(1-x)}$O /ZnO. Les énergies de confinements et leurs fonctions d'onde correspondantes ont été calculées en résolvant numériquement l'équation de Schrödinger par la méthode de shooting. Nous avons calculé le coefficient d'absorption optique, le potentiel de confinement .Les résultats obtenus montrent que lorsqu'augmente la concentration de dopage, la position du pic de résonance de coefficient d'absorption se déplace vers des valeurs d'énergie plus élevées .En plus, lorsque en variant la composition de magnésium (polarisation spontanée et piézoélectrique)il conduit aux déformations sur le potentiel de confinement et par conséquence conduit à variation de coefficient d'absorption .Les propriétés optiques sont exploités dans plusieurs applications, notamment dans les dispositifs optiques basés sur les transitions électroniques inter sous-bandes.

Mots clés :

Puits quantique, absorption optique, potentiel de confinement, Champ électrique, Le dopage.

Abstract:

In the present work, we investigated the effect of doping concentration and magnesium composition on the optical properties of a quantum well structure based on $Mg_xZn_{(1-x)}O$ /ZnO. The confinement energies and their corresponding wave functions were calculated by numerically solving the Schrödinger equation by the shooting method. We calculated the optical absorption coefficient, the confinement potential. The results obtained show that when the doping concentration increases, the position of the absorption coefficient resonance peak moves towards higher energy values. In addition, when varying the composition of magnesium (spontaneous and piezoelectric polarization) it leads to deformations on the confinement potential and consequently leads to variation in the absorption coefficient. The optical properties are exploited in several applications, in particular in devices optics based on inter-sub band electronic transitions.

Key words:
Quantum well, Optical absorption, the containment potential, electric field, Doping.

Remerciement

Je suis reconnaissante à Allah pour la bonne santé et le bien-être qui ont été nécessaires pour réussir ce travail.

Je tiens à remercier sincèrement :

Mon encadreur ***« Dr .D.Sebbar »****, de m'avoir guidé tout au long de ce travail, vos Encouragements nous ont poussés à donner le meilleur de nous-mêmes.*

Merci pour sa patience, sa disponibilité et surtout ses judicieux conseils qui ont contribué à alimenter ma réflexion.

Je remercie ***« Dr. D.Houatis»****, de me faire l'honneur de présider le jury de ce travail.*

Je remercie ***« Dr. A.Boukaoud»****, de m'avoir fait l'honneur de juger ce travail.*

Je remercie toutes les personnes qui ont participé à la réalisation de cette étude, et tous ceux qui nous ont aidé et soutenu.

Dédicace

Je dédie le fruit de ce travail a ceux qui j'ai de plus cher sur terre

A

Celle qui m'a donnée l''amour et l''affection ***Ma mère***
Celui qui m'a donnée la confiance et l''assurance ***Mon Père***
A ma sœur ***Sarah*** *et leur marie* ***Amine*** *et leurs petits :* ***Abdelbarie***, ***Inssaf.***
A mon frère : Mohamed
Enfin, Je dédie ce travail à ceux qui m'ont de près ou de loin.

Table des Matières

Introduction générale : **10**
Chapitre 1: Introduction à la mécanique quantique **11**
Introduction : **11**
1.1Postulats de la mécanique quantique : 11
1.1.1 Postulat 1 : Vecteurs d'état 11
1.1.2 Postulat 2 : Equation de Schrödinger 11
1.1.3 Postulat3 : Règles de quantification 12
1.1.4 Postulat4 : Mesures 12
1.2 L'équation de Schrödinger : 12
1.2.1 L'équation de Schrödinger stationnaire : 13
1.2.2L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension : 13
1.2.2 Hamiltonien : 14
1.3 Les méthodes numériques de la résolution de l'équation de Schrödinger : 14
1.3.1 Méthode de shooting: 15
1.4 L'oscillateur harmonique quantique : 17
1.4.1 Oscillateur harmonique stationnaire unidimensionnel dans 18
La mécanique quantique : 18
1.4.2 Les fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique : 21
1.5Matrice densité : 23
1.5.1Définition de l'opérateur densité : 23
1.5.2Propriétés de la matrice-densité : 23
Chapitre 2 : Initiation sur les propriétés optiques des matériaux : **25**
2.1 Multi puits quantiques : 25
2.2 Puits quantiques couplés : 26
2.3 Super réseaux : 27
2.4 La matrice densité : 28
2.4.1 Les états quantiques purs : 28
2.4.2 Les états quantiques mixtes : 29
2.4.3 Équation de matrice de densité : 30
2.5 Introduction à l'optique non linéaire : 31
2.5.1Optique linéaire : 31

2.5.2 Optique non linéaire : 33
Chapitre 3 : Résultats et discussions. 35
3.1 Les théories 35
3.1 Calcul l'effet de dopage : 36
3.2 Coefficients de génération de troisième harmonique, coefficients d'absorption optique et changements d'indice de réfraction : 36
3.3 Calcul de l'absorption optique : 38
3.4 Analyse des Résultats : 38
Conclusion 44
Bibliographie 45

Liste des abréviations

QW : Quantum Well
TISB : transitions inter-sous-bandes
CAO : Coefficient d'Absorption Optique
NL : Non Linéaire
CAO : Coefficient d'Absorption Optique
H : Hamiltonien
SC : semi-conducteur
QCL : laser à cascade quantique
ONL : Optique Non Linaire
THG: Troisième Harmonique Génération
OA : Absorption Optique
Mg : magnésium
ZnO : oxyde de zinc

Liste des figures

Figure 2-1 :Structure à multi puits quantiques de type I 24

Figure 2-2 :Structure à multi puits quantiques couples 26

F**igure 2-3** :Super réseau de typeI 27

Figure 3-1 :représentation schématique de la structure 39

Figure3-2: La variation de potentiel de confinement et les énergies des trois premiers niveaux et leur correspondantes fonctions d'onde pour déférentes valeurs de $N_d$pour X=0.1. 39

Figure 3-3 :La variation de potentiel de confinement et les énergies des trois premiers niveaux et leur correspondantes fonctions d'onde pour déférentes valeurs de $N_d$pour X=0.2. 40

Figure 3-4 :variation de coefficient d'absorption linéaire, non linéaire et total en fonction d'énergies de photon incident pour déférentes valeurs de paramètre $N_d$pour la concentration de magnésium (x=0.1)..... 41

Figure 3-5 :variation de coefficient d'absorption linéaire, non linéaire et total en fonction d'énergies de photon incident pour déférentes valeurs de paramètre $N_d$pour la concentration de magnésium (x=0.2)..... 42

Figure 3-6 :Variation de le potentiel de l'échange- interaction de corrélation en fonction de la direction z pour déférentes valeurs de X (0.1 ,0.2) 43

Introduction générale

Au cours des dernières décennies, à mesure que la technologie moderne de croissance des cristaux s'est développée, elle permet de concevoir et étudier le système quantique de faible dimension, tel que le puits quantique (QW), quantique fil et boîte quantique avec une forme, une taille et d'autres propriétés bien contrôlées [1].
La taille quantique des matériaux semi-conducteurs est d'une grande importance dans les propriétés électroniques des porteurs. Lorsque la largeur du puits quantique ou la largeur de la barrière change, les niveaux d'énergie sont affectés et le coefficient d'absorption optique qui dépend de l'intervalle d'énergie change radicalement de forme et d'amplitude [2].

Les propriétés optiques des structures à puits quantique, sont étudiées de manière intensive en raison des potentiels d'application ces dispositifs dans la région infrarouge du spectre électromagnétique .Ces processus optiques dans les transitions inter susbande systèmes semi-conducteurs des faibles dimensions ont attiré l'attention en raison de la forte sensibilité d'effet de champ électromagnétique [3].

L'absorption optique dans un puits quantique Wurtzite $Mg_xZn_{(1-x)}$O /ZnO,
L'absorption linéaire et non linéaire basées sur les transitions inter-sous-bandes (TISB) dans le semi-conducteur quantique de systèmes à faible dimensions ont été étudiés par des nombreux chercheurs ces dernières années [4-7].
Dans ce travail, nous étudions les effets et la concentration de Mg, x, sur les énergies entre les couches supérieures et entre l'énergie fondamentale et les niveaux excités De plus, nous avons étudié ces effets sur le coefficient d'absorption optique (OAC). Notre calcul théorique est basé sur la solution des équations de Schrödinger
Ce mémoire est organisé comme suit :

Dans le chapitre1 on donne une entrée de la mécanique quantique, nous étudions l'équation de Schrödinger et ses solutions dans les puits quantique, Nous avons également utilisé la méthode significative pour calculer les énergies des puits quantiques (méthode shooting),Dans la deuxième chapitre, nous avons étudié la matrice densité et ses équations Nous nous concentrerons sur l'aspect théorique des propriétés optiques linéaires et non linéaires. Dans le chapitre3 les résultats numériques et quelques discussions sont présentés. A la fin, il y a conclusion.

Chapitre 1: **Introduction à la mécanique quantique**

Introduction :

La mécanique quantique est la science de la physique qui étudie les phénomènes fondamentaux dans les systèmes physiques et elle joue un rôle intéressant pour la description et la compréhension des phénomènes naturels à l'échelle atomique ou moléculaire. Historiquement on peut dire que la physique quantique voit ses premiers jours au début du vingtième siècle, lorsque Planck, proposa une formule simple en parfait accord avec les expériences sur le spectre du rayonnement du corps noir. Puis Einstein publie en 1905 son célèbre mémoire sur un point de vue heuristique concernant la production et la transformation de la lumière.

1.1Postulats de la mécanique quantique :

Chaque théorie est basée sur un certain nombre de postulats qui doivent obéir à quelques règles, telles que la causalité, la conservation de l'énergie-impulsion d'un système isolé. C'est la confrontation à l'expérience qui permet de validation des résultats obtenus.

1.1.1 **Postulat 1 :** Vecteurs d'état

L'état d'un système physique est complètement dé.ni à tout instant t par la connaissance de son vecteur d'état, noté |Ψ(t)>.
De plus on exige que le vecteur |Ψ(t)>.appartienne à un espace de Hilbert Hdont les Caractéristiques dépendent du problème physique considéré. Très souvent on utilise la représentation coordonnée pour le vecteur d'état, c'.est-à-dire que |Ψ(t)>,est une fonction dans l'espace L^2 (ℝ;ℂ) ×ℝ+. A ce moment là(x; t) est appelé la fonction d'onde du système.

1.1.2 **Postulat 2 :** Equation de Schrödinger

L'évolution au cours du temps du vecteur d'état |Ψ(t)>.i est gouvernée par l'équation de Schrödinger dépendant du temps:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(t)}{\partial t} = \widehat{H}\,(t)\Psi\,(t) \qquad \textbf{(1.1)}$$

Où $\widehat{H}$est l'opérateur hamiltonien associé au système.
C'est la loi d'évolution qui joue le rôle de l'équation de Newton en physique quantique. C'est la loi centrale de toute la mécanique quantique.

1.1.3 **Postulat3 :** Règles de quantification

Pour obtenir, dans la représentation, l'expression de l'opérateur $\hat{A}$ ($\hat{x}$,$\hat{p}$) associé à l'observable physique A(x; p), il sut de remplacer l'opérateur$\hat{x}$, par$x$, et l'opérateur $\hat{p}$ par- $i\,\hbar\overrightarrow{\nabla}$ dans l'expression de $\hat{A}$ convenablement symétrisée.
Ceci permet de trouver mathématiquement l'expression des opérateurs. Par exemple pour l'Hamiltonien, on a en mécanique classique l'expression.

$$H(q.p) = \frac{p^2}{2m} + V(t) \qquad \textbf{(1.2)}$$

Donc en représentation de configuration nous avons que l'opérateur Hamiltonien est de la forme.

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(x) \qquad \textbf{(1.3)}$$

L'équation de Schrödinger est alors.

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x.t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\Psi(x.t) + V(x)\Psi(x.t) \qquad \textbf{(1.4)}$$

1.1.4 **Postulat4 :** Mesures

On assigne à toute grandeur physique A un opérateur hermétique $\widehat{A}$appelé observable, qui agit sur le vecteur d'état $|\Psi(t)>$.du système.
Le résultat d.une mesure concernant A ne peut conduire qu'à une valeur propre de l'opérateur$\hat{A}$. Immédiatement après la mesure, le vecteur d'état du système est modifié, il est réduit à sa projection sur le sous-espace propre associé à la valeur propre mesurée. C'est le postulat de la mesure qui va nous intéresser tout au long de ce travail.
[8]

1.2 L'équation de Schrödinger :

L'équation de Schrödinger conçue parle physicien autrichien Erwin Schrödinger en 1925, est une équation fondamentale en physique quantique non-relativiste .Elle décrit l'évolution dans le temps d'une particule massive non-relativiste, et remplit ainsi le même rôle que la relation fondamentale de la dynamique en mécanique classique. Cette équation joue un rôle fondateur en mécanique quantique par analogue à l'équation de Newton en mécanique classique et les équations de Maxwell en électromagnétisme. Il y a deux types de l'équation de Schrödinger, l'équation de Schrödinger indépendante du temps (stationnaire) et l'équation de Schrödinger dépendante du temps (non stationnaire).nous allons

présenter, dans cette partie la solution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps.

1.2.1 L'équation de Schrödinger stationnaire :

En générale l'équation de Schrödinger d'un système quantique en générale donnée par:[9]

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}= H\ \Psi(\overrightarrow{r,t}) \qquad \textbf{(1.4)}$$

Les fonctions d'ondes qui porte le nom des fonctions propres qui Ψ sont les solutions de l'équation **(1.4)** sont données par :

$$\Psi=\Psi_0 \exp(-\frac{iEt}{\hbar}) \qquad \textbf{(1.5)}$$

Où$\Psi_0$est l'amplitudePour des états stationnaires (indépendant du temps)

$$H\ \Psi(\vec{r}\ ) = E\ \Psi(\vec{r}) \qquad \textbf{(1.6)}$$

Où E est l'énergie totale du système qui porte le nom des valeurs propres ou les spectres d'énergies.
L'opérateur H est un opérateur nommé Hamiltonien .L'Hamiltonien du système physique ne dépend pas explicitement du temps, l'énergie totale E est conservées

$$H = E_c + V(\rho) = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\rho) \qquad \textbf{(1.7)}$$

Où V est l'énergie potentielle, E_c est l'énergie cinétique et Δest le placier.

1.2.2L'équation de Schrödinger stationnaire à une dimension :

Cette équation décrit comment la fonction d'onde se transforme au cours du temps. Si l' Hamiltonien du système physique ne dépend pas d'explicitement du temps, L'énergie totale E est conservée, donc l'équation de Schrödinger admit des solutions particulières sous forme [10].

$$\varphi(\vec{r}.t)= e^{\frac{-iEt}{\hbar}}\ \Psi(\vec{r}) \qquad \textbf{(1.8)}$$

Où E l'énergie, et Ψ ($\vec{r}$) satisfait l'équation de Schrödinger stationnaire.

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2 + v(\overrightarrow{r})]\Psi(\overrightarrow{r})=E\ \Psi(\overrightarrow{r}) \qquad \textbf{(1.9)}$$

Avec $\hat{p}=-i\,\hbar\vec{\nabla}$,où$\vec{\nabla}$l'opérateur de dérivés partielles, on coordonnées cartésiennes est définit par : $\vec{\nabla}=\vec{\imath}\frac{\partial}{\partial x}+\vec{j}\frac{\partial}{\partial y}+\vec{k}\frac{\partial}{\partial z}$, r est le rayon-vecteur repérant la particule dans l'espace *V(r)*est l'énergie de potentielle de la particule *i* désigne le nombre imaginaire pur fondamental .*m* est la masse de la particule. Ceci étant admis, il apparait que la mécanique quantique n'est formulable que pour des forces dérivant d'un potentiel ; dés lors, admettre que cette théorie s'applique à toute la physique à l'échelle atomique ou subatomique, c'est admettre que toutes les interactions «fondamentales» dérivent d'un potentiel, au sens usuel ou en un sens généralisé.

1.2.2 Hamiltonien :

L'opérateur référentiel qui apparaît dans le membre de droite de l'équation de Schrödinger s'appelle l'Hamiltonien, opérateur Hamiltonien est de la forme.

$$\widehat{H}=\frac{-\hbar}{2m}\nabla^2+V(x) \qquad \textbf{(1.10)}$$

Soit H l'espace des fonctions d'onde du système (ici système = particule).L'opérateur $\widehat{H}$ est une application linéaire de H dans H² .

$$\widehat{H}:\mathrm{H}\rightarrow \mathrm{H}\ ;\widehat{H}(a\Psi_1+b\Psi_2)=a\widehat{H}\Psi_1+b\widehat{H}\Psi_2\forall a,b\in\mathbb{C} \qquad \textbf{(1.11)}$$

Comme nous le saurons plus tard, $\widehat{H}$représente physiquement l'énergie, cinétique plus potentielle, de la particule. En termes de l'opérateur$\widehat{H}$, l'équation de Schrödinger est alors [8].

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathrm{x.\,t})=\frac{-\hbar}{2m}\nabla^2\Psi\ (\mathrm{x.\,t})\ +V(x)\Psi(\mathrm{x.\,t}) \qquad \textbf{(1.12)}$$

1.3 Les méthodes numériques de la résolution de l'équation de Schrödinger :

Il y a plusieurs méthodes pour Trouve des solutions de l'équation de Schrödinger 1D Le choix d'une méthode particulière repose généralement sur la forme du potentiel et sur la fonction d'onde recherchée, notée x qui décrit le mouvement d'une particule de masse soumis à un potentiel V (Z).L'équation correspondante est donc :

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=-\frac{2m^*}{\hbar^2}[\mathrm{V\ (z)-\ E}]\ \Psi\ (\mathrm{z}) \qquad \textbf{(1.13)}$$

Pour résoudre l'équation de Schrödinger à une dimension, nous utiliserons la méthode des différences .nies explicitée dans l'énonce qui revient simplement à réécrire la dérivée partielle seconde de la Fonction d'onde. Nous utiliserons la méthode de shooting :

1.3.1 Méthode de shooting:

Le plus probable, on considère la forme générale et simple de l'équation de Schrödinger indépendante (stationnaire) [11] Donc, nous dérivons l'équation de Schrödinger unidimensionnelle (1D) dans la structure du puits quantique :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Psi_n(z) + V(z)\Psi_n(z) = E\Psi_n(z) \quad \textbf{(1.14)}$$

Méthode de prise de vue présente brièvement la méthode ST basée sur l'explication Détaillée dans .La méthode Shooting est une approche numérique de la solution de 1D Schrödinger équation représentée par éq:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\Psi_n(z) + V(z)\Psi_n(z) = E_n\Psi_n(z) \quad \textbf{(1.15)}$$

La méthode du tir est une méthode numérique pour une solution unidimensionnelle. La méthode est capable de trouver simultanément les énergies et les fonctions d'onde Appropriées pour tous les états de repos de la structure de bande QCL, étant donné unedistribution potentielle bien définie et une masse effective en fonction de z (le long de la direction de croissance). L'équation **(1:15)** peut être arrangée :

$$\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{m^*(z)}\frac{\partial}{\partial z}\Psi_n(z) = \frac{2}{2\hbar^2}[V(z) - E_n]\Psi_n(z) \quad \textbf{(1.16)}$$

Rappelant l'expansion des différences finies centrée pour la deuxième et la première Dérivées, c.-à-d.

$$A(z)\frac{\partial^2 g}{\partial z^2}\Big|_{z=z_i} \rightarrow \frac{\partial}{\partial z}\left(A(z)\frac{\partial g}{\partial z}\right)\Big|_{z=z_i} \quad \textbf{(1.17)}$$

$$\approx \frac{A(z_i+1)+A(z_i)}{2(\Delta z)^2}g(z_i+1) - \frac{A(z_i+1)+2A(z_i)+A(z_i-1)}{2(\Delta z)^2}g(z_i) + \frac{A(z_i)+A(z_i-1)}{2(\Delta z)^2}g(z_i-1) \quad \textbf{(1.18)}$$

$$B(z)\frac{\partial g}{\partial z}\Big|_{z=z_i} \rightarrow \frac{1}{2}\left(B(z)\frac{\partial g}{\partial z} + \frac{\partial Bg}{\partial z}\right)\Big|_{z=z_i} \quad \textbf{(1.19)}$$

$$\approx \frac{B(z_i+1)+B(z_i)}{4\Delta z}g(z_i+1) - \frac{B(z_i)+B(z_i-1)}{4\Delta z}g(z_i-1) \quad \textbf{(1.20)}$$

Après remplacement ces dernières équations **(1.19)** dans l'équation de Schrödinger (**1.14)** on obtient:

$$-\frac{\hbar^2}{2}\left[\left(\frac{\frac{1}{m(z_i+1)}+\frac{1}{m(z_i)}}{2(\Delta z)^2}\right)\Psi(z_i+1)-\left(\frac{\frac{1}{m(z_i+1)}+2\frac{1}{m(z_i)}+\frac{1}{m(z_i-1)}}{2(\Delta z)^2}\right)\Psi(z_i)+\left(\frac{\frac{1}{m(z_i)}+\frac{1}{m(z_i-1)}}{2(\Delta z)^2}\right)\Psi(z_i-1)\right]+\mathrm{V}(z)-E]\Psi(z_i)=0 \quad \textbf{(1.21)}$$

$$\left(\frac{\frac{1}{m(z_i+1)}+\frac{1}{m(z_i)}}{2(\Delta z)^2}\right)\Psi(z_i+1)-\left(\frac{\frac{1}{m(z_i+1)}+\frac{1}{m(z_i)}+\frac{1}{m(z_i)}+\frac{1}{m(z_i-1)}}{2(\Delta z)^2}\right)\Psi(z_i)+\left(\frac{\frac{1}{m(z_i)}+\frac{1}{m(z_i-1)}}{2(\Delta z)^2}\right)\Psi(z_i-1)\Big]-\frac{2}{\hbar^2}(\mathrm{V}(z)-E)\Psi(z_i)=0 \quad \textbf{(1.22)}$$

Équation **(1:22)** écrit comme :

$$\frac{1}{m(z_i+\frac{1}{2})}\Psi(z_i+1)-\left(\frac{1}{m\left(z_i+\frac{1}{2}\right)}+\frac{1}{m\left(z_i-\frac{1}{2}\right)}\right)\Psi(z_i)+\frac{1}{m(z_i-\frac{1}{2})}\Psi(z_i-1)$$

$$-\frac{2\Delta z^2}{\hbar^2}(\mathrm{V}(z)-E)\Psi(z_i)=0 \quad \textbf{(1.23)}$$

$$\frac{1}{m\left(z_i+\frac{1}{2}\right)}\Psi(z_i+1)-\left(\frac{1}{m\left(z_i+\frac{1}{2}\right)}+\frac{1}{m\left(z_i-\frac{1}{2}\right)}+\frac{2\Delta z^2}{\hbar^2}(\mathrm{V}(z)-E)\right)\Psi(z_i)+\frac{1}{m\left(z_i-\frac{1}{2}\right)}\Psi(z_i-1)=0 \quad \textbf{(1.24)}$$

En rassemblant les termes en (z) sur le côté droit, nous obtenons :

$$\frac{1}{m(z_i+\frac{1}{2})}\Psi(z_i+1)=\left(\frac{1}{m\left(z_i+\frac{1}{2}\right)}+\frac{1}{m\left(z_i-\frac{1}{2}\right)}+\frac{2\Delta z^2}{\hbar^2}(\mathrm{V}(z)-E)\right)\Psi(z_i)-\frac{1}{m(z_i-\frac{1}{2})}\Psi(z_i 1) \quad \textbf{(1.25)}$$

La fonction d'onde continue est discrétisée dans la direction z par une longueur unitaire de∂_z où $z_i = i\partial_z$Avec les valeurs de fonction d'onde des deux premiers points, toutes les valeurs de fonction d'onde restantes peuvent être utilisées dans l'équation précédente.

Le fait qu'une telle fonction d'onde soit une solution appropriée dépend du choix d'En est jugé par les conditions aux limites. Si une fonction d'onde satisfait aux conditions aux limites, c'est une vraie fonction d'onde, et l'énergie correspondante est la vraie énergie de cette fonction d'onde .Les conditions aux limites sont :

$$\Psi(0)=\Psi(\infty)=0 \qquad \textbf{(1.26)}$$

Les conditions initiales sont données par les deux premières valeurs de fonction d'onde come suites :

$$\Psi(0)=0\ ,\quad \Psi(\partial_z)=1 \qquad \textbf{(1.27)}$$

Remarque :

Les fonctions d'onde obtenues à partir de cette méthode numérique ne sont pas normalisées, c'est-à-dire qu'elles ne satisfont pas [9].

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(z)|^2\, dz = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(z)\,\Psi(z) \qquad \textbf{(1.28)}$$

1.4 L'oscillateur harmonique quantique :

Un oscillateur est un système dont l'évolution dans le temps est périodique. Il est dit de plus harmonique si les oscillations effectuées sont sinusoïdales ,avec une amplitude et une fréquence qui ne dépendent que des caractéristiques intrinsèques du système et des conditions initiales ,Les oscillateurs harmoniques ont été reformulés dans un cadre quantique, clariantcertains résultats expérimentaux, notamment en physique de la matière condensée. Nous appelons l'équation de l'oscillateur harmonique [12]

$$\ddot{X}(t) + \omega_0 X(t) = 0 \qquad \textbf{(1.29)}$$

.Où.ω_0 Est la pulsation des oscillations sinusoïdales. Donc la solution générale écrit comme suit:

$$x(t) = C\cos\omega_0(t) + D\sin\omega_0(t) = A\cos\omega_0(t+\phi) \qquad \textbf{(1.30)}$$

C, D, A,ϕ sont des constantes arbitraires dont la valeur sera .fixée par les conditions propres au mouvement : limites, valeurs initiales, etc.

$$\overrightarrow{F} = -k\bar{X} = m\bar{a} = m\ddot{\bar{X}} \Rightarrow \ddot{X} + \sqrt{\frac{k}{m}}\,X = 0 \qquad \textbf{(1.31)}$$

Dans ce cas on retrouve l'équation de l'oscillateur harmonique avec:

$$\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

Remarque :

1) l'énergie de l'oscillateur harmonique est toujours positive ou nulle et prendre des valeurs continues.

2) La position de la particule est confinée : $-x_M \leq x \leq x_M$.

1.4.1 Oscillateur harmonique stationnaire unidimensionnel dans La mécanique quantique :

L'hamiltonien H du système:[13]

$$H= \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 \quad \textbf{(1.32)}$$

L'équation aux valeurs propres (L'équation de Schrödinger des états stationnaires d'un oscillateur harmonique à une dimension).

$$\left(\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2 + \frac{1}{2}\, m\omega^2 X^2\right) \Psi(x) = E\, \Psi(x) \quad \textbf{(1.33)}$$

En utilisant les opérateurs sans dimension (mais hermitiens) suivants :

$$\bar{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x \quad \textbf{(1.34)}$$

$$\bar{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\, p \quad \textbf{(1.35)}$$

La relation de commutation entre ces nouveaux opérateurs s'écrit : $[\bar{X},\bar{P}]=i$

En termes de ces opérateurs « réduits » le hamiltonien de l'oscillateur harmonique unidimensionnel s'écrit sous la forme :

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}\,(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad \textbf{(1.36)}$$

L'Hamiltonien s'écrit alors :

$$H= \hbar\omega\widehat{H} \quad \textbf{(1.37)}$$

Où l'opérateur sans dimension est donné par :

$$\widehat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \quad \textbf{(1. 38)}$$

On cherche donc maintenant à résoudre ce système :

$$\widehat{H}\,|\Psi_n> = E\,|\Psi_n> \quad \textbf{(1.39)}$$

$$\frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2)\,|\Psi_n> = E\,|\Psi_n> \quad \textbf{(1.40)}$$

Ceci suggère l'introduction des opérateurs non-hermétiques, appelés « opérateurs d'échelle », adjoints l'un de l'autre :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X + \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}P\right) \quad \textbf{(1.41)}$$

$$a^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X - \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}P\right) \quad \textbf{(1.42)}$$

De même, les opérateurs X et P s'expriment sous la forme :

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,(a + a^{+}) \quad \textbf{(1.43)}$$

$$P = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\,(a - a^{+}) \quad \textbf{(1.44)}$$

Ou a^{+}Est l'opérateur de création,a Est l'opérateur d'annihilationCalculons le produit $a^{+}a$:

$$a^{+}a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P})\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) = \frac{1}{2}(\hat{X}^{2} + \hat{P}^{2} + i(\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X})) \quad (1.45)$$

Avec

$$[\hat{X}, \hat{P}] = (\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X}) \quad \textbf{(1.46)}$$

.

Donc

$$a^{+}a = \frac{1}{2}(\hat{X}^{2} + \hat{P}^{2} + i[\hat{X}, \hat{P}]) \quad \textbf{(1.47)}$$

D'où

$$H = a^{+}a + \frac{1}{2} \quad \textbf{(1.48)}$$

Déterminer le commutateur entre ces deux opérateurs :

$$[a, a^{+}] = a\,a^{+} - a^{+}a = 1 \quad \textbf{(1.49)}$$

Le hamiltonien du système peut alors s'écrire sous la forme :

$$H = \hbar\omega\left(a^{+}a + \frac{1}{2}\right) \quad \textbf{(1.50)}$$

On introduit alors opérateurs nombre N définit par :

$$N = a^{+}a \quad \textbf{(1.51)}$$

L'hamiltonien de l'oscillateur harmonique et l'opérateur nombre sont donc reliés par :

$$H = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2}\right) \quad \textbf{(1.52)}$$

Nous allons maintenant démontrer que les valeurs de N sont les nombres entiers positifs ou nuls, pour cela on démontre trois théorèmes. Soit $|\nu\rangle$ un vecteur propre de N de valeur propre ν c'est-à-dire : $N|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$[13]

Théorème 1.

les valeurs propres d'opérateurs N sont positives ou nulles .

En effet

$$a^+a|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle \quad \textbf{(1.53)}$$

On projette cette équation sur $|\nu\rangle$, ce qui donne :

$$\langle\nu|a^+a|\nu\rangle = \nu\langle\nu|\nu\rangle = \nu \quad \textbf{(1.54)}$$

Ceci s'écrit aussi :

$$\langle\nu|a^+a|\nu\rangle = (a|\nu\rangle)^+(a|\nu\rangle) = |(a|\nu\rangle)|^2 \quad \textbf{(1.55)}$$

D'où :

$$\nu = |(a|\nu\rangle)|^2 \quad \textbf{(1.56)}$$

Théorème 2.

si $|\nu\rangle$ est vecteur propre de N de valeur propre ν,alors$a|\nu\rangle$ est aussi vecteur propre de N de valeur propre $\nu - 1$

En effet $$Na|\nu\rangle = a^+aa|\nu\rangle = (a^+a)a|\nu\rangle \quad \textbf{(1.57)}$$

Comme la relation d'anticommutation stipule que $a^+a - aa^+ = 1$, cette dernière relation s'écrit :

$$Na|\nu\rangle = a^+aa|\nu\rangle = (aa^+ - 1)a|\nu\rangle = a(a^+a - 1)|\nu\rangle = a(N-1)|\nu\rangle = (\nu - 1)a|\nu\rangle \quad \textbf{(1.58)}$$

Ce que l'on voulait démontrer

Théorème 3.

si $|\nu\rangle$ est vecteur propre de N de valeur propre ν,alors$a^+|\nu\rangle$ est aussi vecteur propre de N de valeur propre $\nu + 1$

De la même manière :

$$Na^+|v\rangle = (a^+a)a^+|v\rangle = a^+(aa^+)|v\rangle = a^+(a^+a+1)|v\rangle = a^+(N+1)|v\rangle = a^+(v-1)|v\rangle = (v+1)a^+|v\ \rangle \quad (1.59)$$

On voit donc que les énergies des états stationnaires de l'oscillateur harmonique sont quantifiées et données par :

$$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (1.60)$$

Cherchons maintenant comment agissant les opérateurs a et a^+ .d'âpres le théorème 2, que $a|n\rangle$ est vecteur propre de N de valeur propre $n-1$.Comme nous supposons que :

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle \qquad n = 1,2\ldots\ldots \quad (1.61)$$

Et

$$a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle \qquad n = 0,1,2\ldots\ldots \quad (1.62)$$

Les deux dernières équations permes de construire par récurrence que :

$$|n\rangle = \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}\Big|\,0\rangle (1.63)$$

La relation d'incertitude qui stipule que les incertitudes sur X et P sont reliées par :

$$\Delta X.\Delta P \approx \hbar \quad (1.64)$$

Pour cela, on écrit l'énergie totale de la particule est donnée par :

$$E = \frac{\Delta P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\Delta X^2 \quad (1.65)$$

On obtient alors :

$$E = \frac{\hbar^2}{2m\Delta X^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\Delta X^2 \quad (1.66)$$

1.4.2 Les fonctions d'ondes de l'oscillateur harmonique :

La fonction d'onde pour l'état fondamental $n = 0$, $|0\rangle$

$$a|0\rangle = 0 \quad (1.67)$$

Avec

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\tilde{X} + i\tilde{P}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X + i\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}P\right) \quad (1.68)$$

On projette cette équation sur ket x on obtient

$$\left\langle x\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X+i\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}P\right)\right|0\right\rangle=0 \qquad \textbf{(1.69)}$$

$$\langle x|0\rangle=\varphi_0(x) \qquad \textbf{(1.70)}$$

$$\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X\varphi_0(x)+\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\frac{d\varphi_0(x)}{\hbar dx}=0 \qquad \textbf{(1.71)}$$

Après la normalisation par utilise l'intégrale :

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha x^2}\,dx=\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \qquad \textbf{(1.72)}$$

On obtient finalement

$$\varphi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \qquad \textbf{(1.73)}$$

les fonctions d'ondes des états de plus hauts indices s'obtiennent par récurrence :

On a $|\varphi_n\rangle=\frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}}\Big|\varphi_0\rangle$ dans la représentation $\{|x\rangle\}$

$$\varphi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X-\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}\right)^n\Big|\varphi_0(x)\rangle \qquad \textbf{(1.74)}$$

Avec

$$\varphi_0(x)=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \qquad \textbf{(1.75)}$$

Calcul la valeur moyenne de la position x de la particule dans son état $\{|n\rangle\}$ est donnée par :

$$\overline{x}=\langle n|x|n\rangle=\left\langle n\left|\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a+a^+)\right|n\right\rangle \qquad \textbf{(1.76)}$$

$$\overline{x}=\langle n|x|n\rangle=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\langle n|a|n\rangle+\langle n|a^+|n\rangle]=0 \qquad \textbf{(1.77)}$$

1.5Matrice densité :

1.5.1Définition de l'opérateur densité :

En mécanique quantique, on sait qu'un système isolé, ou bien un système soumis à Contraintes extérieures .fixes, qui ne sont pas affectées par l'évolution du système. La matrice de densité ou opérateur de densité est une représentation alternative de l'état d'un système quantique pour lequel nous avons précédemment utilisé la fonction d'onde. Bien que décrire un système quantique, on obtient des avantages pratiques significatifs en utilisant la matrice de densité pour certains problèmes dépendant du temps en particulier la relaxation et la spectroscopie non linéaire dans la phase condensée.

La matrice de densité est formellement dé.nie comme le produit extérieur de la fonction d'onde et de son conjugué, en mécanique quantique, on considère un espace de Hilbert H.

Les états quantiques du système sont caractérisés par des fonctions d'ondes $\Psi \in H$ (des ket-vecteurs$|\Psi\rangle$).

Comme H est muni d'un produit scalaire$\langle \ | \ \rangle$, pour chaque ket-vecteur, il existe un Bra-vecteur, élément du dual de H qu'on note$<\Psi|$.Une observable $\hat{f}$ est un opérateur sur H et sa moyenne dans l'état $|\Psi\rangle$est donné par$< \hat{f} >=\langle\Psi|\hat{f}|\Psi\rangle$.

Si on veut introduire une description statistique ,on doit considérer un mélange statistique$\Psi_i$de déférents états Ψ_i

Notons par pila probabilité de l'état $\Psi_i$alors la moyenne (statistique et quantique de$\hat{f}$ Devient :

$$P(t) = |\Psi(t) >< \Psi(t)| \qquad \textbf{(1.78)}$$

Alors pourquoi aurions-nous besoin de la matrice de densité ? C'est un outil pratique lorsqu.il s'agit d'états mixtes. Les états purs sont ceux qui sont caractérisés par une seule fonction d'onde. Les états mixtes font référence à des mélanges statistiques dans lesquels nous avons des informations imparfaites sur le système, pour lesquels je dois effectuer des moyennes statistiques afin de décrire des observables quantiques. Un état mixte désigne tout cas dans lequel on subdivise un système microscopique ou macroscopique en un ensemble, pour lequel il n'y a initialement aucune relation de phase entre les éléments du mélange. Les exemples incluent un ensemble à l'équilibre thermique et des états préparés indépendamment. [9].

1.5.2Propriétés de la matrice-densité :

Les propriétés suivent caractérisent la matrice densité :

1-$\hat{p}$est hermétique : $\hat{p}=\hat{p}$

Preuve

$$\hat{p}=(\sum_i p_i\,|\Psi i >< \Psi i|)=\sum_i p^*\,\Psi i >< \Psi i| = \hat{p} \qquad \textbf{(1.79)}$$

Car $p_i$est réel.

2-$Tr\hat{p}$=1

Preuve :

$$Tr\hat{p}=(\sum_i Tr\, p_i|\Psi i >< \Psi i|) =\sum_i p_i = \widehat{p} \quad \textbf{(1. 80)}$$

3-Toutes les valeurs propres de $\hat{p}$ se trouvent dans [0.1].

Preuve :

$\hat{p}$ est hermitienne donc elle peut être diagonalisée dans une base orthonormée (car H est muni d'un produit scalaire)

$$\hat{p}==\sum_k \lambda k\,|\Phi k >< \Phi k| \quad \textbf{(1.81)}$$

$$\lambda\, k = \langle \Phi k|\hat{p}|\Phi k\rangle =\langle \Phi k|\sum_i p_i\,|\Phi k\rangle =\sum_i p_i \quad \textbf{(1.82)}$$

$|\langle \Psi i|\Phi k\rangle|^2 >_ 0$

Et

$Tr\hat{p} =\sum_k \lambda k$

$\Rightarrow \quad \lambda_{\,k} \in [0; 1]$

Les propriétés 1,2 et 3 forment des conditions nécessaires et suffisantes pour dé.nir L'espace de toutes les matrices-densité.

Dans ce chapitre nous avons traité les postulats et les lois des mécaniques quantiques Nécessaire pour étudier les propriétés optiques des matériaux. [14]

Chapitre 2 : Initiation sur les propriétés optiques des matériaux :

Les formes analytiques des coefficients d'absorption optique inter-sous-bandes linéaire (premier ordre) et non-linéaire (troisième ordre) sont obtenus pour des systèmes de puits quantique symétriques et asymétriques, en tenant compte de la relaxation intra-sous-bande. Sur la base de ce modèle, dans ce chapitre nous utiliserons le formalisme de matrice de densité pour calculer le coefficient d'absorption optique lié à une transition inter- sous-bande.

2.1 Multi puits quantiques :

Considérons une structure résultant de la juxtaposition d'une série de couches Alternées d'un semi-conducteur SC1 et d'un semi-conducteur SC 2. Il existe une Succession de puits dont le diagramme énergétique est représenté sur la figure (2.1) Si les couches de semi-conducteur SC1 sont de faible épaisseur (L1 $\sim 100\hat{A}$) les états électroniques dans chacun des puits sont quantifiés et présentent une structure de sous-bandes d'énergie. Si en outre les couches de semi-conducteur SC2 sont relativement épaisses (L2>200$\hat{A}$) la probabilité pour qu'un électron passe d'un puits dans l'autre par effet tunnel à travers la barrière est faible, les puits sont in Dépendants les uns des autres. Dans chacun des puits la structure de sous-bandes d'énergie est analogue à celle du puits unique, le mouvement des électrons dans la structure est bidimensionnel. Cette série de puits quantiques indépendants porte le nom de structure à multi puits quantiques [15].

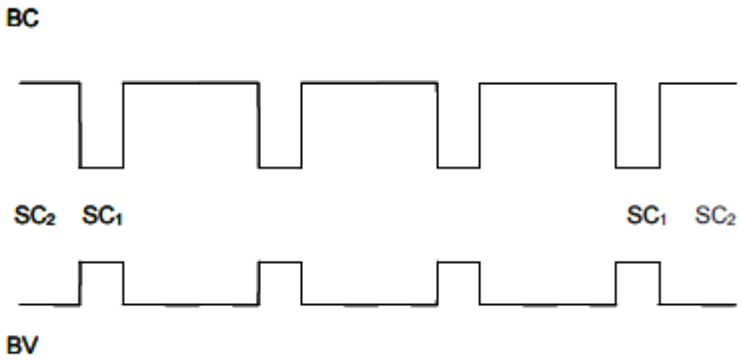


Figure (2-1) : Structure à multi puits quantiques de type I

2.2 Puits quantiques couplés :

Considérons la structure du type SC2-SC1-SC2-SC1-SC2, représentée sur la figure (2-2-a). Les bandes de conduction des couches SC1constituent des puits de potentiel de profondeur ΔE c et de largeur L1. Considérons, pour simplifier l'étude, la première sous-bande de conduction. La figure (2-2-b) représente, pour chacun des puits, l'énergie du bas de la première sous-bande et la fonction d'onde des électrons dans leur mouvement suivant z.

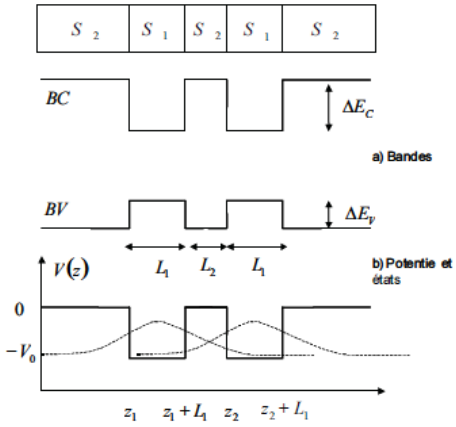


Figure (2-2): Structure à multi puits quantiques couplés

Si l'épaisseur L_2 du semi-conducteur SC2 est grande, les fonctions d'onde associées à N Chacun des puits, qui décroissent exponentiellement à l'extérieur du puits, sont nulles dans la région de l'espace occupée par l'autre puits. Les deux puits sont alors indépendants, leurs états propres, ces états sont doublement dégénérés.
Si l'épaisseur L2diminue, ξ1 (z) est alors différent de zéro en z>z_2, la probabilitéde présence de l'électron associé au puits 1, en z>z_2 est non nulle ; cet électron voit le puits2. La réciproque est vraie pour l'électron associé au puits2.Les états électroniques du puits 1 et du puits 2 sont couplés par effet tunnel. Ces états ne sont plus états propres du système constitué par les deux puits.
L'Hamiltonien des électrons s'écrit :[16]

$$H=\frac{\hbar^2}{2me}\frac{d^2}{dz^2}+V^1(z)+V^2(z) \qquad \textbf{(2.1)}$$

Avec

V^j (z)=0 pour z< z_j et pour z< $z_j + L_1$
V^j (z)= -V_0pourz$_j$ < z< $z_j + L_1$ (j=1.2)

2.3 Super réseaux :

Un Super-réseau est une structure composée de couches alternées de différents matériaux. Ces couches sont généralement mesurées en nanomètres et les super-réseaux typiques sont très petits.

Un super-réseau est un assemblage périodique de puits quantiques accoles [16]

Les états résultant du couplage de deux puits quantiques sont des combinaisons symétriques et antisymétriques des états associes a chacun des puits, isole. Ce système de deux puits couples est a rapprocher de la molécule diatomique, dans laquelle les orbitales moléculaires associées aux combinaisons liantes et anti liantes.

Des orbitales atomiques, résultent du couplage entre les deux atomes. La séquence orbitales atomiques → orbitales moléculaire → états cristallins, résultant des couplages d'un grand nombre d'atomes peut donc être reproduite ici sous la forme analogue : puits quantique isolé → double-puits quantiques couplés → multi puits quantiques couplés. On obtient ainsi un réseau à une dimension de puits quantiques couplés, analogue au réseau d'atomes dans le Cristal. Ce réseau de puits quantiques a évidemment une maille plus importante que Celle du réseau atomique et se superpose à ce dernier dans une direction déterminée. Ce système de multi puits quantiques couplés porte le nom de super réseau.

La figure **(2-3)** représente une succession de puits quantiques couplés, de largeur L1, distants de L2, résultant de la juxtaposition de multicouches alternées de semi-conducteurs SC1 et SC2, d'épaisseurs respectives L1et L2. La maille du super réseau est L=L1+L2 [15]

.

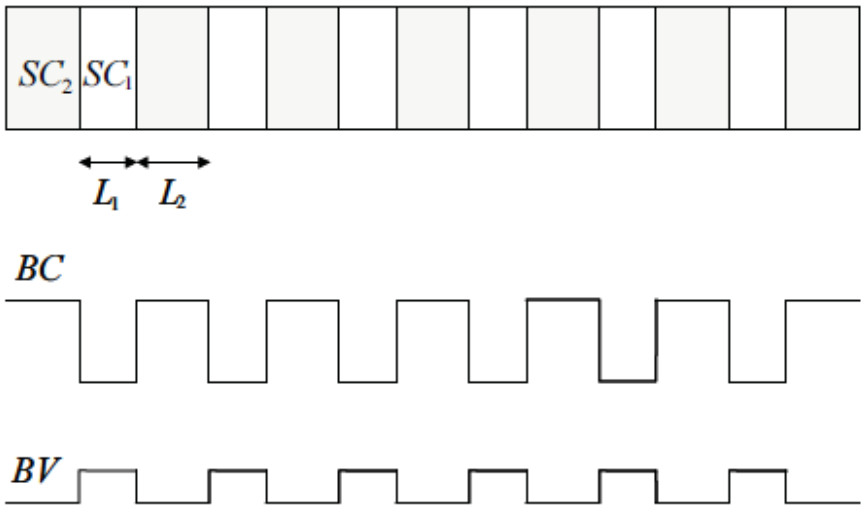


Figure (2-3): Super réseau de type I

2.4 La matrice densité :

Le formalisme de la matrice densité se présente comme un cadre très puissant et élégant qui intégré ces deux notions dans une description mathématique unique.

2.4.1 Les états quantiques purs :

Un ′état pur peut ˆêtre représente′e par une fonction d'onde $\Psi \in$H Considérons un système quantique dans un état $|\Psi(t)>$décrit par:

$$|\Psi(t)> = \sum_n c_n |\Psi_n> \qquad \textbf{(2.2)}$$

Nous tensions à connaitre la valeur moyenne d'un opérateur A. Suite à l'équation :

$$\hbar\omega = E_f - E_i = \hbar\omega_{fi} \qquad \textbf{(2.3)}$$

Cette valeur moyenne $< A >$peut être écrite :

$$< A > = \sum_{ij} c_i c_j^* < \Psi_j|\hat{A}|\Psi_i > \qquad \textbf{(2.4)}$$

Les nombres complexes *ci* sont les composantes de |Ψ>dans la base des$|\Psi_i >$
On peut aussi les interpréter comme un produit scalaire de sorte que :

$$c_i =< \Psi_i |\Psi > \quad , \quad c_j^* =< \Psi|\Psi_j > \qquad \textbf{(2.5)}$$

qui rentre dans l'expression de la moyenne de la façon suivante :

$$< A >= \sum_{ij} < \Psi_i |\Psi > < \Psi|\Psi_j >< \Psi_j|\hat{A}|\Psi_i > \qquad \textbf{(2.6)}$$

On voit ainsi apparaître une quantité, $|\Psi >< \Psi|$(l'ordre est important), qui ne dépend que de l'état quantique du système qui est tensorielle ment une matrice.
La matrice densité définie par [17] :

$$\widehat{P} = |\Psi >< \Psi| \qquad \textbf{(2.7)}$$

La matrice densité d'un état pur vérifie quelques propriétés essentielles pour caractériser l'état d'un système quantique. Elle est hermitienne, ce qui assure qu'elle a des valeurs propres réelles. Un vecteur propre trivial est |Ψ>lui même puisque.

$$\widehat{P}|\Psi >= (|\Psi >< \Psi|)\, |\Psi > =(< \Psi||\Psi >)|\Psi > =|\Psi > \qquad \textbf{(2.8)}$$

La valeur propre associée est 1. On a aussi ˆ$\hat{P}\hat{P}$=$\hat{P}$, donc $\hat{P}$est un opérateur de projection dans le cas d'un état pur et la seule autre valeur propre possible est donc 0. Ainsi, dansbase faite de$|\Psi >$et d'autres vecteur de l'espace de Hilbert (non

colinéaires à$|\Psi>$) quicomplètent la base, la matrice densité pour un état pur est une matrice très simple avec un 1 sur la diagonale est des 0 partout ailleurs. Ainsi

$$\det(\hat{P})=0,\ \mathrm{Tr}(\hat{P})=0,\ \hat{P}^2=\hat{P} \qquad \textbf{(2.9)}$$

2.4.2 Les états quantiques mixtes :

Nous considérons maintenant le résultat de la mesure d'un état quantique mixte. Supposons que nous avons un mélange des états quantiques purs $|\Psi>$[18]
Avec une probabilité thermodynamique pi, et chaque $|\Psi>$
En négligeant les interférences quantiques entre les états thermodynamique, donc on dé.nie la valeur moyenne de l'observable A comme :

$$<\bar{A}>=\sum_i p_i <A> \qquad \textbf{(2 .10)}$$

un $<A>_{\phi i}$est la valeur moyenne de l'observable A lorsque le système est dans l'état $<A>$Après Eq :

$$<A>=\ Tr\ (\rho \mathrm{A}) \qquad \textbf{(2.11)}$$

Cela peut s'écrire :

$$<\bar{A}>=\sum_i p_i\, Tr\ (\rho_i \mathrm{A}) \qquad \textbf{(2.12)}$$

La matrice densité qui décrit le système global est donnée par :[18]

$$\rho=\sum p_i\,\rho_i=\sum p_i > (|\Psi><\Psi| \qquad \textbf{(2.13)}$$

Dans cette dernière nous voyons l'avantage obtenu lors de l'introduction d'une matrice de densité, il est la dépendance linéaire de $<A>$ sur la matrice de densité ρ, ce qui permet d'introduire un opérateur de densité ou de moyenne$\bar{\rho}$, en utilisant la relation générale de l'évolution temporelle de l'opérateur densité, nous obtenons [19]

$$i\hbar\frac{\partial p}{\partial x} = [\mathrm{H(t)}\ ,\ \rho(\mathrm{t})] \qquad \textbf{(2.14)}$$

Les équations fondamentales de la matrice de densité sont **(2:12)**et **(2:14)**Dans la matrice de densité elle -même, nous pouvons distingué deux conception elle ment constituants.

Eléments diagonaux:

Les termes diagonaux peuvent être exprimes dans le base d'état stationnaire comme:

$$\overline{\rho}_{kk} = \sum \rho_i \, |c_k^i| \qquad \textbf{(2.15)}$$

Oùc_k^iest le composant $|\varphi_i >$dans le base$|\Psi_k >$.Une interprétation physique immédiate des termes diagonaux dans qu.ils représentent la probabilité de trouver le système, à l'état stationnaire$|\Psi_k >$ Par conséquent ρ_{kk}représente la population de l'état$|\Psi_k >$.

On en déduit que les éléments diagonaux de la matrice-densité sont invariants au cours du temps, si la matrice densité est diagonale dans cette base, elle reste invariante au cours du temps.

Eléments non diagonaux :

La signification de ces termes est un peu plus difficile à comprendre. Elles sont parfois appelés les éléments de cohérence ils décrivent le comportement quantique de système.

2.4.3 Équation de matrice de densité :

On considère un puits quantique asymétrique en présence d'un rayonnement optique de fréquence angulaire ωavec la polarisation selon la direction du puits Z. Les cas de polarisation arbitraire introduiront un facteur supplémentaire $\cos\theta$dans l'élément de matrice ou θ estl'angle entre l'axe Zet la direction de polarisation. [20]

Pour les transitions inter-sous- bandes, la matrice de densité électronique unique

Pour ce système, H_0l.hamiltonien non perturbé pour ce système avec une énergie potentielle asymétrique, M un opérateur dipolaire et E (t) l'intensité du champ électrique du rayonnement optique de fréquence ω Puisque nous considérons un système de puits quantique asymétrique, l'opérateur dipolaire peut avoir des éléments diagonaux non galvanisants, ce qui est différent. Système symétrique qui n'a que des éléments hors diagonale. L'équation du matrice de densité à un électron avec relaxation intra bande devient [21]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[H_0 - ME(t), \rho] - \frac{1}{2}[\Gamma(\rho - \rho^0) + (\rho - \rho^0)\Gamma] \qquad \textbf{(2.16)}$$

Où$[H_0 - ME(t), \rho]$est le commutateur mécanique quantique, h est la constante de Planck divisée par2π, ρ^0est la matrice de densité non perturbée, et $r$est l'opérateur phénoménologique responsable de l'endommagement dû à l'interaction électron-phonon, à la collision entre électrons. On suppose que Γest une matrice diagonale et que son élément γ_{mm}est l'inverse du temps de relaxation pour l'état$|m >$, Pour

simpli.er, nous limiterons notre attention aux systèmes à deux niveaux uniquement. Nous avons introduit deux notations abrégées$|a>$et $|b>$, telles que

$$|a>=|1,\overrightarrow{K_t}> \text{ et } |b>=2,\overrightarrow{K_{t'}}> \quad \textbf{(2.17)}$$

Où $\overrightarrow{K_t}$et $\overrightarrow{K_{t'}}$sont les vecteurs d'onde de l'électron dans le planxy, et 1 et 2 désignent les composants Zquantifiées en taille de l'impulsion pour les états initial et final, respectivement. H_0est diagonale en $|a>$et $|b>$avec les énergies $E_a$et E_b, respectivement [22] Les éléments diagonaux de l'opérateur Γsont :

$$\langle b|\Gamma|b\rangle = \frac{1}{\tau_b}\text{et}\langle a|\Gamma|a\rangle = \frac{1}{\tau_a} \quad \textbf{(2.18)}$$

Avec $\tau_a$et$\tau_b$sont les temps de relaxation pour les états$|a>$et$|a>$, respectivement. Nous résolvons 1 de manière perturba ive en développant ρ en puissance de n comme :

$$\rho = \sum_n \rho^n \quad \textbf{(2.19)}$$

2.5 Introduction à l'optique non linéaire :

Les propriétés optiques d'un matériau sont liées à la structure électronique de celui-ci dans la mesure où elles mettent en jeu des transitions entre différents états électroniques [14].

2.5.1Optique linéaire :

Considérons un porteur de charge dans un milieu matériel soumises à un champ électrique oscillant de type $\vec{E}(\vec{r},t)=\vec{E}_0\exp(i\omega t)$, ces charges subissent des collisions aléatoires avec d'autres particules avec une probabilité par unité de temps appelée taux de collision Γhomogène à l'inverse du temps.
Avec Γ : est une constante d'amortissement caractéristique l'ensemble des processus de collision, est donnée par $\Gamma = \frac{e}{m^*\mu}$
Où μ : la mobilité des charges ($V = \mu$ E).
L'oscillation du champ provoque l'oscillation des électrons autour d'une position moyenne.
Soit $\vec{r}$: leur déplacement par rapport à cette position.
L'équation du mouvement pour chaque électron libre de charge e est obtenue à partir du principe fondamental de la dynamique.
On écrit le principe fondamental de la dynamique :

$$m^* = \frac{d^2r}{dt^2} + m^*\,\Gamma\frac{d\vec{r}}{dt} = -eE \quad \textbf{(2.20)}$$

La solution de cette équation différentielle est :

$$\vec{r} = \frac{\mathrm{eE}}{m^* (\omega^2 + i\omega\Gamma)} \quad \textbf{(2.21)}$$

Le déplacement de la charge induit un moment dipolaire $\vec{p}$ =-e$\vec{r}$
Par conséquent, le déplacement du gaz d'électrons de concentration ν correspond à la Polarisation macroscopique:

$$\vec{p}(\omega) = n\,\vec{p} = -ne\vec{r} = \frac{-ne^2\mathrm{E}}{m^*\ \omega(\omega + i\omega\Gamma)} \quad \textbf{(2.22)}$$

Où est le nombre d'électrons libres par unité de volume.
La fonction d'électrique prend donc la forme, d'après les équations $P = \varepsilon_0\ x\ E\ et\varepsilon = 1 + x$ qui donne :

$$x = \frac{-ne^2}{m^*\ \varepsilon_0\ \omega(\omega + i\omega\Gamma)} \quad \textbf{(2.23)}$$

$$\varepsilon(\omega) = 1 + x = 1 - \frac{{\omega_p}^2}{\omega(\omega + i\Gamma)} \quad \textbf{(2.24)}$$

Où $\omega_p = \sqrt{\frac{ne^2}{m^*\ \varepsilon_0}}$ est la pulsation de plasma du solide massif.

Les parties réelle et imaginaire de $\varepsilon(\omega)$ s'écrivent alors

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{{\omega_p}^2}{\omega^2 + \Gamma} \quad \textbf{(2.25)}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 1 - \frac{{\omega_p}^2\Gamma}{\omega(\omega^2 + \Gamma^2)} \quad \textbf{(2.26)}$$

Dans le cas où$\omega \gg \Gamma$, ce qui est vrai dans la gamme des fréquences optiques (domaine proche Ultra-violet jusqu.au proche Infrarouge), ces expressions se réduisent à :

$$\varepsilon_1(\omega) \approx 1 - \frac{{\omega_p}^2}{\omega^2} \quad \textbf{(2.27)}$$

$$\varepsilon_2(\omega) \approx \frac{{\omega_p}^2}{\omega^3}\Gamma \quad \textbf{(2.28)}$$

La partie imaginaire ε_2 traduisant les pertes (l'absorption) dans le matériau [23].

2.5.2 Optique non linéaire :

L'optique non linéaire (ONL) est l'ensemble des phénomènes qui résultent de la non-linéarité de la réponse d'un milieu matériel à l'action d'une onde électromagnétique du domaine optique. Elle est une conséquence de l'invention du laser : le premier exemplaire a été construit en 1960 ; la première expérience d'optique non linéaire fut faite en 1961 (génération de second harmonique) ; dès 1962, la plupart des effets de l'optique non linéaire étaient expliqués théoriquement [24].
Le champ électrique d'une onde électromagnétique polarise tout système matériel .Les principales différences avec l'optique linéaire sont les possibilités de modifier la fréquence de l'onde ou de faire interagir entre elles deux ondes par l'intermédiaire du matériau.

Réponse non linéaire de matériaux soumis à une onde plane:

Sous l'action d'un champ électrique, un moment dipolaire électrique est généré.
La réponse linéaire d'un milieu diélectrique isotrope sous l'action d'un champ électrique
Faible $\vec{p}$ s'écrit :

$$P=\varepsilon_0 \, x \, E \qquad \textbf{(2.29)}$$

Si le champ incident est fort, le dipôle ne croît plus linéairement avec le champ application.
La réponse du système à un champ lumineux appliqué dépend de la non-linéarité intensité du champ électrique.
Par exemple, l'intensité de la lumière produite à la fréquence double le carré de l'intensité du laser incident.

$$P=\varepsilon_0 \, x^{(1)} \, E+\varepsilon_0 \, x^{(2)} \, E^2+\varepsilon_0 \, x^{(3)} \, E^3 + \varepsilon_0 \, x^{(4)} \, E^4=P_L + P_{NL} \qquad \textbf{(2.30)}$$

Où $\varepsilon_0 \, x^{(1)} \, E$ est la polarisation linéaire classique de la susceptibilité magnétique Linéaire$x^{(1)}$.est une polarisationP_{NL} non linéaire impliquant une susceptibilité optique non linéaire $x^{(n)}$ d'ordre *n*.

Soit $\varepsilon_0 \, x^{(2)} \, E^2$la polarisation non linéaire du second ordre et la polarisation non Linéaire $\varepsilon_0 \, x^{(3)} \, E^3$ du troisième ordre, que nous verrons après le processus physique Par P^2 et P^3 sont de nature distinctes ε et on écrit le vecteur déplacement électrique Δ sous la forme D=$\varepsilon_0 E + P$
$x^{(1)}$ est une grandeur sans dimension, l'électricité est représentée par $x^{(2)}$, on prouve aussi que $x^{(3)}$ est l'inverse du carré du champ électrique.
On introduit le constant diélectrique du milieu :

$$D=\varepsilon_0 E + P = \varepsilon_0 E + P_L + P_{NL} = \varepsilon_0(1 + x^{(1)})E + P_{NL} = \varepsilon_0 \varepsilon E + P_{NL} \quad \textbf{(2.31)}$$

On va passer de citer brièvement les principales interactions non linéaires [23]

Equation d'onde dans un milieu non linéaire :

Peut-être écrit de telle sorte que la polarisation non linéaire se produise explicitement dans deuxième membre [23].

$$\nabla^2 E - \mu_0 \varepsilon \frac{\partial^2 E}{\partial t^2} = \mu_0 = \frac{\partial^2 P_{NL}}{\partial t^2} \quad \textbf{(2.32)}$$

Chapitre 3 : **Résultats et discussions.**

3.1 Les théories

Dans ce chapitre, nous avons étudié l'effet de concentration du dopage sur les propriétés optiques d'une une structure a puits quantique Wurtzite a base de $Mg_xZn_{(1-x)}O$ /ZnO Nous avons utilisé la méthode de shooting pour calculer les niveaux énergétiques et leur fonction d'onde dans le système.

En utilisant l'approximation de la masse effective, la dimension unidimensionnelle L'équation de Schrödinger, qui décrit le mouvement de l'électron le long de l'axe de croissance, est donnée par la formule suivante expression [25].

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2\Psi_i}{dz^2} + (\Delta V_C(x) + V_{xc}(x) + eFz)\Psi_i(x) = E_i\Psi_i \quad \textbf{(3.1)}$$

cette équation, z désigne la direction de l'axe de croissance, m^* est le masse effective de l'électron, et ΔV_Creprésente la conductiondécalage de bande qui dépend de la composition en magnésium et peut s'écrire comme suit [26].

$$\Delta V_C(x) = 0.75[E_g\ (Mg_xZn_{(1-x)}O) - E_g\ (ZnO)]\ (eV) \quad \textbf{(3.2)}$$

Champ électrique intégré Fk dans éq. (3.1) dépend de la couche en raison de polarisations spontanées et piézoélectriques et peut être écrit comme suite.

$$F_K = \frac{\sum_j L_j(P_j^{tot} - P_k^{tot})/\varepsilon_j^s}{\varepsilon_j^s \sum_j L_j/\varepsilon_j^s}\ \text{(k,j=1,2,3)} \quad \textbf{(3.3)}$$

*L*k est l'épaisseur du de la couche d'ordre k., P_{tot}représente la polarisation totale et est donnée par l'expression suivante :

$$P_{tot} = P_{PE} + P_{SP} = -0.034x + 0.066x = 0.032x \quad \textbf{(3.4)}$$

Avec x est la contraction de magnésium dans les régions à puits quantique

3.1 Calcul l'effet de dopage :

Le terme V_{xc}dans Eq **(1.3)** décrit l'échange interaction de corrélation et peut s'écrire comme suit.

$$V_{xc}(z) = -0.985 \times \frac{e^2}{4\pi\varepsilon\varepsilon_0} n^{\frac{1}{3}}(z)\left\{1 + \frac{0.034}{a_B^* n^{\frac{1}{3}}(z)} \ln[1 + 1.376 a_B^* n^{\frac{1}{3}}(z)]\right\} \quad \textbf{(3.5)}$$

A dernière expression, $a_B^* = \frac{4\pi\varepsilon_0\ \varepsilon_r \hbar^2}{m^*\ e^2}$représente le rayon de Bohr. Éq. (3-1) ci-dessus sont couplés et sont résolus numériquement en utilisant le technique des différences finies [27].

Où $n(z)$La densité électronique des électrons libres qui peut s'écrire comme suit :

$$n(z) = \sum_i \frac{m^* K_{BT}}{\pi\hbar^2} ln\left[1 + exp\left(\frac{E_F - E_i}{K_{BT}}\right)\right] \Psi_i(z) \quad \textbf{(3.6)}$$

et E_F est l'énergie de Fermi obtenue en résolvant l'équation de neutralité sous la condition d'équilibre comme coulant,$K_b$la constante de Boltzmann et m^* la masse effective

$$N_d = \frac{m^* K_B T}{\pi\hbar^2} \sum_i Ln\left(1 + exp\left(\frac{E_F - E_i}{K_B T}\right)\right) \quad \textbf{(3.7)}$$

Ici, l'indice i désigne la sous-bande correspondant au niveau d'énergie E_i T est la température absolue et $N_d$est la densité de charge totale de la feuille d'électrons libres de la structure.

3.2 Coefficients de génération de troisième harmonique, coefficients d'absorption optique et changements d'indice de réfraction :

Changements Dans cette section, avec le cadre de l'approche compacte-densité-matrice, nous pouvons obtenir les coefficients THG, OA coefficients et RIC. Supposons que le système soit excité par un champ électromagnétique de fréquence ω, tel que .

$$E(t) = E_0 \cos(\omega t) = \tilde{E} \exp(i\omega t) + \tilde{E} \exp(-i\omega t). \quad \textbf{(3.8)}$$

L'équation de Schrödinger dépendante du temps que rencontre l'évolution de l'opérateur de matrice de densité est la suivante.

$$\frac{\partial \rho_{ij}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[H_0 - e\ z\ E(t), \rho]_{ij} - \Gamma_{ij}(\rho - \rho^0)_{ij} \quad \textbf{(3.9)}$$

Où H_0 désigne l'hamiltonien du système excluant l'effet de E(t), ρ^0 est l'opérateur de la matrice de densité non perturbée, e exprime la charge électronique et Γ_{ij} représente le taux de relaxation phénoménologique. Dans le présent travail, on fait $\Gamma_{ij}=\Gamma_0=\frac{1}{\Gamma_0}T_0$pour i ≠ j.

Éq (3.9) peut être résolu en utilisant la méthode itérative.

$$\rho\,(t) = \sum_n \rho^n\,(t) \qquad \textbf{(3.10)}$$

Avec

$$\frac{\partial \rho_{ij}^{(n+1)}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\{\,[H_0 - \rho^{(n+1)}\text{-}\Gamma_{ij}\rho\,]_{ij}\text{-}\Gamma_{ij}\rho_{ij}^{(n+1)}\}\text{-}\frac{1}{i\hbar}\,[ez,\rho^n]_{ij}E(t) \qquad \textbf{(3.11)}$$

La polarisation électrique du système peut être décrite comme.

$$P(t) = \varepsilon_0 X(\omega)\widetilde{E}\,e^{-i\omega t} + \varepsilon_0 X(-\omega)\widetilde{E}\,e^{-i\omega t} \qquad \textbf{(3.12)}$$

La polarisation électrique d'ordre n s'écrit.

$$p^n\,(t) = \frac{1}{V}T_r(\rho^n\,ez) \qquad \textbf{(3.13)}$$

Oùε_0 représente la permittivité du vide,x (ω) est la susceptibilité, V est le volume du système et T_r désigne le symbole trace de la matrice $\rho^n\,ez$. Au moyen de l'approche de la matrice de densité compacte et de la méthode itérative, les coefficients THG, la susceptibilité linéaire et la susceptibilité non linéaire du troisième ordre sont respectivement exprimées par :

$$x_{3\omega}^{(3)} = \frac{e^4\,\sigma_v}{\varepsilon_0\hbar^3}\,\frac{M_{01}M_{12}M_{23}M_{30}}{(\omega-\omega_{10}+i\Gamma_{10})(2\omega-\omega_{20}+i\Gamma_{20})(3\omega-\omega_{30}+i\Gamma_{30})}, \qquad \textbf{(3.14)}$$

$$\varepsilon_0\,X^{(1)}\,(\omega) = \frac{\sigma_v\,|M_{10}|^2}{E_{21}-\hbar\omega-i\hbar\Gamma_{10}}, \qquad \textbf{(3.15)}$$

Et

$$\varepsilon_0\,X^{(1)}\,(\omega) = \frac{\sigma_v\,|M_{10}|^2}{E_{10}-\hbar\omega-i\hbar\Gamma_0}\,[\frac{4\,|M_{10}|^2}{(E_{10}-\hbar\omega)^2+(\hbar\Gamma_0)^2}\,\text{-}\frac{(M_{11}-M_{10})^2}{(E_{10}-i\hbar\Gamma_0)(E_{10}-\hbar\omega-i\hbar\Gamma_0)}] \qquad \textbf{(3.16)}$$

En utilisant le même processus, les coefficients OA linéaire et non linéaire sont respectivement donnés par.

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega\sqrt{\frac{u}{\epsilon_R}}\frac{|M_{10}|^2\sigma_V\hbar\Gamma_0}{(E_{10}-\hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_0)^2} \quad \textbf{(3.17)}$$

Et

$$\alpha^{(3)}(\omega, I) = -\omega\sqrt{\frac{u}{\epsilon_R}}\left(\frac{1}{2\varepsilon_0 n_r c}\right)\frac{|M^2{}_{10}|^2\ \sigma_V\hbar\Gamma_0}{[(E_{10}-\hbar\omega)^2+(\hbar\Gamma_0)^2]^2} \times \{4|M_{10}|^2 - \frac{|M_{11}-M_{00}|^2[3E_{10}^2 - 4E_{10}\hbar\omega+\hbar^2(\omega^2-\Gamma_0{}^2)]}{E^2{}_{10}+(\hbar\Gamma_0)^2}\} \quad \textbf{(3.18)}$$

Les coefficients d'absorption optique totaux peuvent être exprimés comme.

$$\alpha(\omega.I) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I) \quad \textbf{(3.19)}$$

Dans cette section,$\sigma_V$désigne la densitéélectronique est donnée par :

$$\sigma_v = \frac{m^* k_B T}{L_{eff}\pi\hbar^2} Ln\left\{\frac{1+exp[(E_F-E_1)/k_BT]}{1+exp[(E_F-E_2)/k_BT]}\right\} \quad \textbf{(3.20)}$$

L_{eff}Est la longueur effective des électrons dans la structure, T temperatérature μ la perméabilité, C la vitesse de la lumière, $\hbar$ constante de balancé

, u est la perméabilité, $n_r$exprime l'indice de réfraction, $\varepsilon_R$est la partie réelle de la permittivité, ω représente la fréquence des photons incidents, et I = $2\varepsilon_0 n_r C|\tilde{E}|^2$est l'intensité optique incidente. M_{01}= $\langle\Psi_0|ez|\Psi_1\rangle$, M_{12}= $\langle\Psi_1|ez|\Psi_2\rangle$, M_{23}= $\langle\Psi_2|ez|\Psi_3\rangle$, M_{30}= $\langle\Psi_3|ez|\Psi_0\rangle$, M_{00}= $\langle\Psi_0|ez|\Psi_0\rangle$et M_{11}= $\langle\Psi_1|ez|\Psi_1\rangle$sont des éléments dipolaires, E_{10}=ħω_{10} =$E_1 - E_0$,E_{20}=ħω_{20} =$E_2 - E_0$,E_{30}=ħω_{30} =$E_3 - E_0$.

3.3 Calcul de l'absorption optique :

Dans cette section, on considère une structure quantique d'un puits Carré à base de $Mg_xZn_{(1-x)}$O /ZnO est caractérisée par les paramètres Physiques suivant :

3.4 Analyse des Résultats :

Dans cette section, nous présentons nos résultats numériques pour les effets de dopage sur les propriétés optiques d'une structure carrée à double puits quantique a base de $Mg_xZn_{(1-x)}$O /ZnO (voir fig3.1).

Les paramètres numériques utilisés dans cette étude sont : Les dimensions de la structure :$L_{\omega 1}$= 50Å,$Lb1$= 70Å,$L_{\omega 2}$= 50Å,L_{b2}= 40$\AA$, etL_{b3}= 70Å. Les paramètres physique : ε(x) = 8.1+1.5x, m^*= (0.23+0.05x)m_0 avec ($m_0$est la masse d'électron libre), μ =$4\pi \times 10^{-7}$Hm^{-1}et T=300K. Où ces paramètres sont couramment utilisés pour les matériaux $Mg_xZn_{(1-x)}$O /Zn

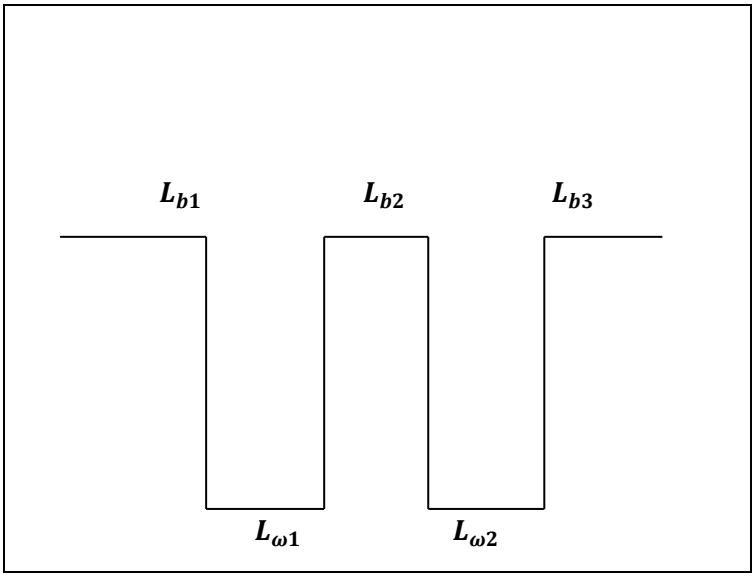


Figure (3-1) : représentation schématique de la structure

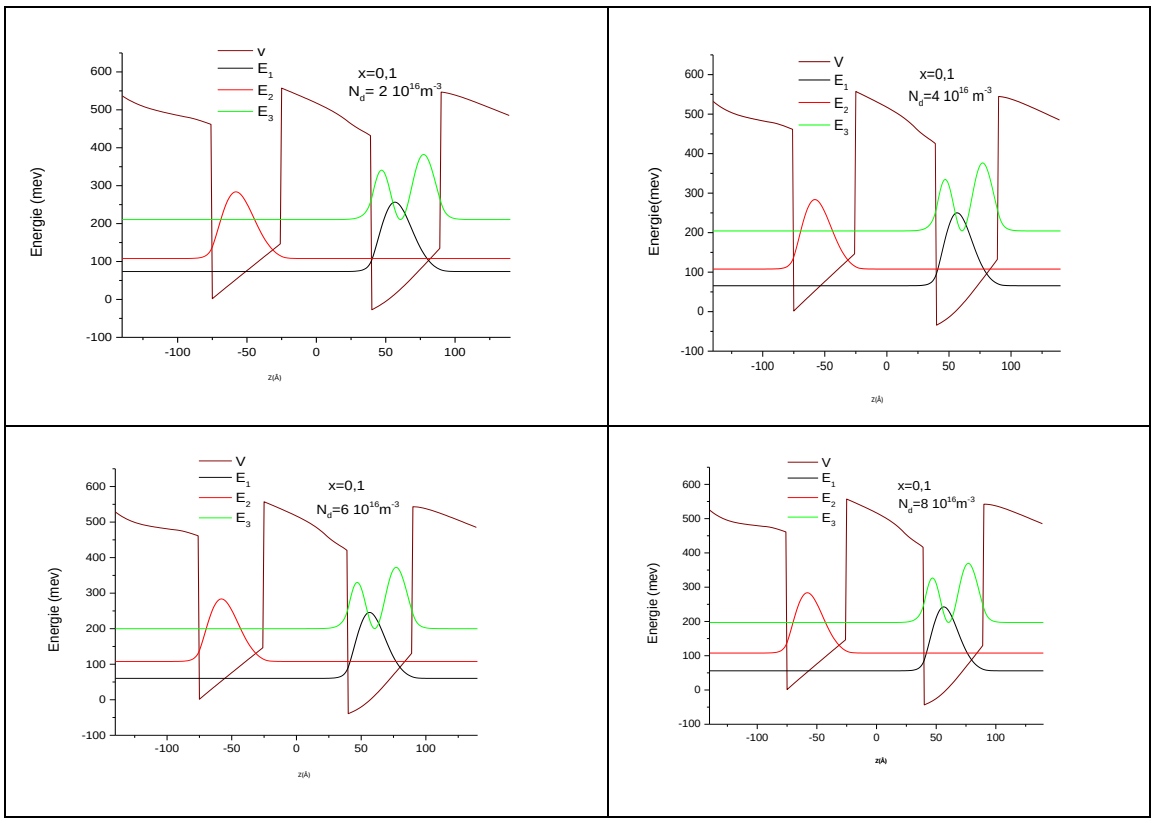


Figure (3-2): La variation de potentiel de confinement et les énergies des trois premiers niveaux et leur correspondantes fonctions d'onde pour déférentes valeurs de $N_d$pour X=0.1.

Dans la figure(3-2), on représente la variation du potentiel de confinement de la structure, les énergies de confinements des trois premiers états de confinement (état fondamental, premier et deuxième états excités) et leurs correspondants fonction

d'onde en fonction de la direction z pour déférentes valeurs de concentration de dopage N_d= ($2\,10^{16}, 4\,10^{16}, 6\,10^{16}\ et\ 8\,10^{16}(m^{-3})$). Et la valeur x de concentration de magnésium égale 0.1.

A partir de ces figures, on observe clairement que pour chaque valeur de concentration de dopage $N_d$la distribution de la probabilité de l'état fondamental a un seul maximum localisé dans le deuxième puits, par contre le seul maximum de premier état excités est localisé dans le premier puits pour différente valeurs de concentration de dopage, le deuxième états excités a deux maximums localisés dans le deuxième puits dans chaque. Ces maximums des fonctions d'onde expliqués physiquement par la densité de probabilité d'existence d'électron dans chaque état énergétique.

Et aussi nous remarquons une inclinaison de potentiel de confinement de la structure, cette inclinaison est en raison de champ électrique interne produit par l'effet de polarisations piézoélectrique et spontanée.

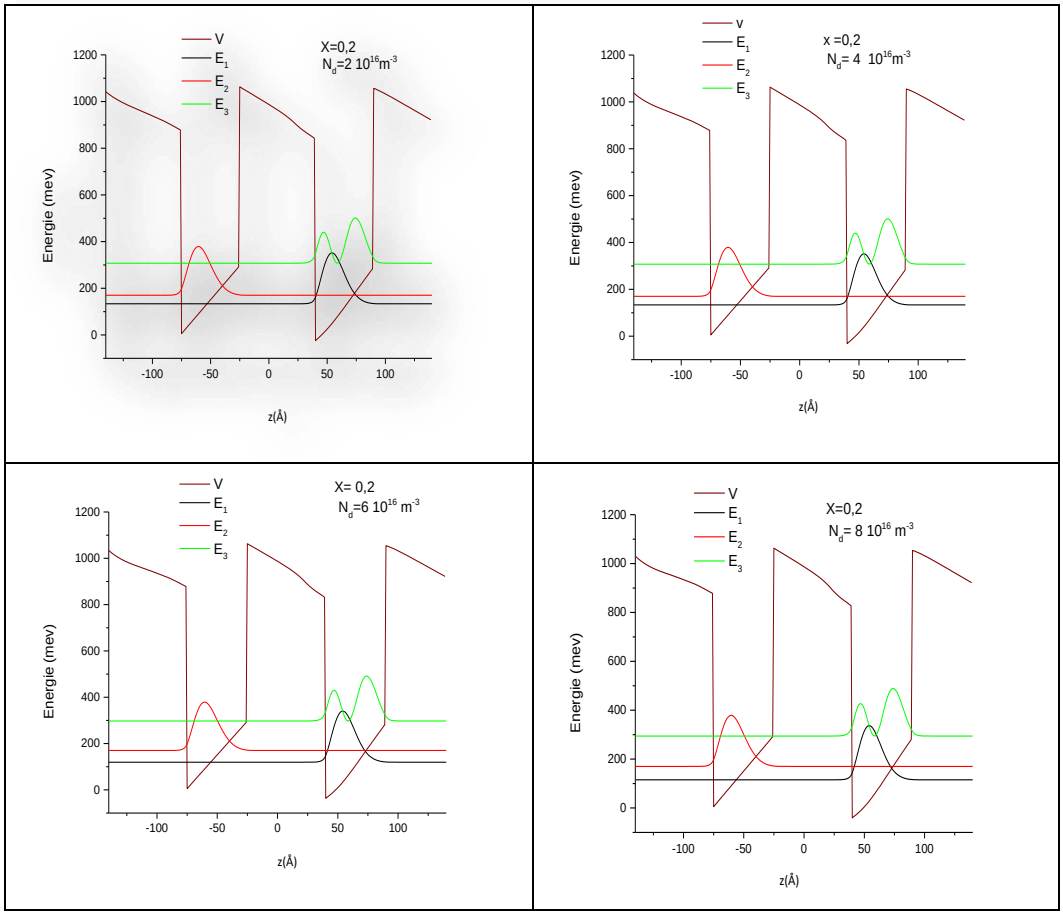


Figure 3-3 : La variation de potentiel de confinement et les énergies des trois premiers niveaux et leur correspondantes fonctions d'onde pour déférentes valeurs de N_d avec X=0.2

Pour les graphes de la figure (3-3) correspondants de la concentration du magnésium égale 0.2 ont les mêmes caractéristiques des graphes de figure 3-2 avec des considérables changements dans les énergies de confinement des états , le potentiel de confinement et les profondeurs des puits.

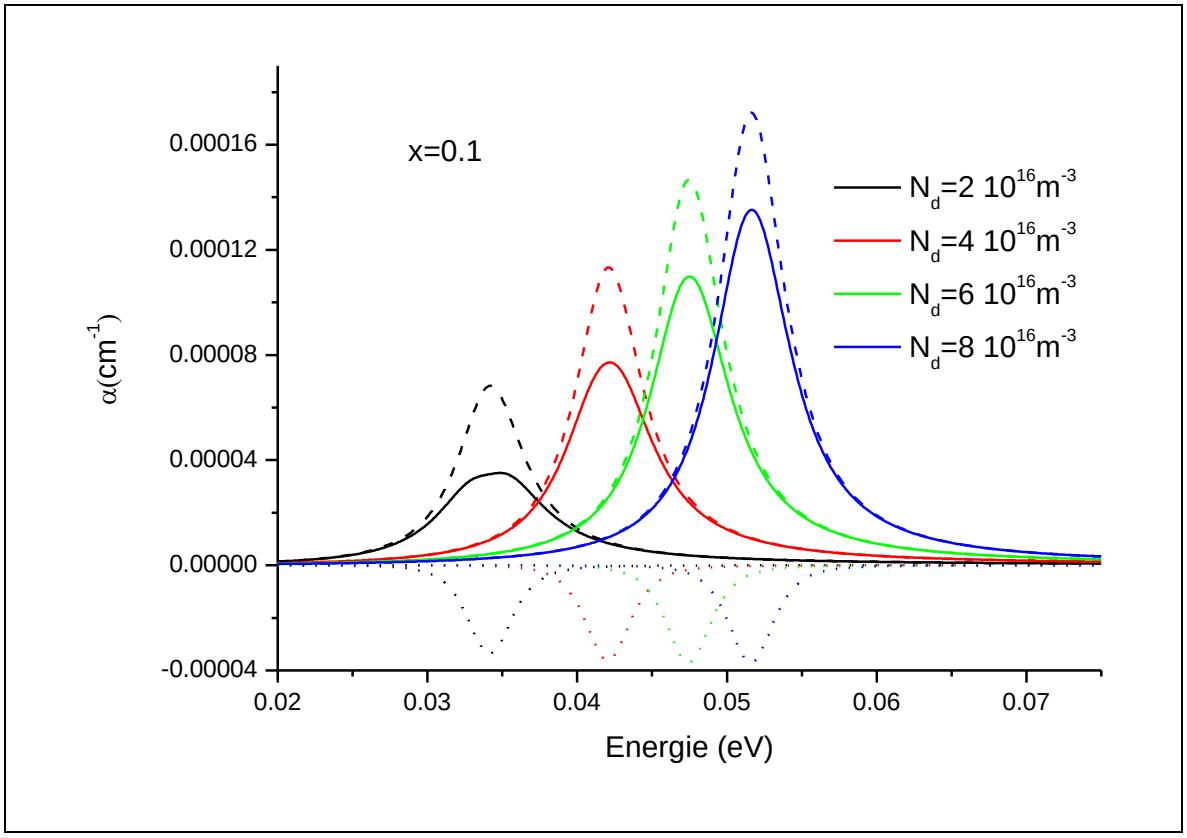


Figure (3-4) : variation de coefficient d'absorption linéaire, non linéaire et total en fonction d'énergies de photon incident pour déférentes valeurs de paramètre $N_d$pour la concentration de magnésium (x=0.1), cas en trait pointillé –linéaire, cas en line plein - total

La Figure (3-4) représente le coefficient d'absorption linéaire, non linéaire et total on fonction de l'énergie photonique incidente pour des quatre valeurs différentes de concentration de dopage N_d= 2 10^{16}, 4 10^{16}, 6 10^{16} et 8 $10^{16}m^{-3}$ respectivement. A partir de cette figure, on observe que lorsque en augmentant la concentration de dopage$N_d$la position du pic de résonance de coefficient d'absorption optique inter sous-bande linéaires, non linéaire et total augmentent et ont un comportement uniforme avec déplacement vers l'énergie de photon incident plus élevées. Ce comportement delà position du pic de résonance est fortement lié à la différence d'énergie E_2-E_1.D'autre parton observe clairement que l'amplitude des pics de résonance d'absorption linéaires et total augmente progressivement, par contre

pour le pic de résonance d'absorption non linéaire son augmentation est lent lorsqu'on augmente la valeur de la concentration de dopageN_d.

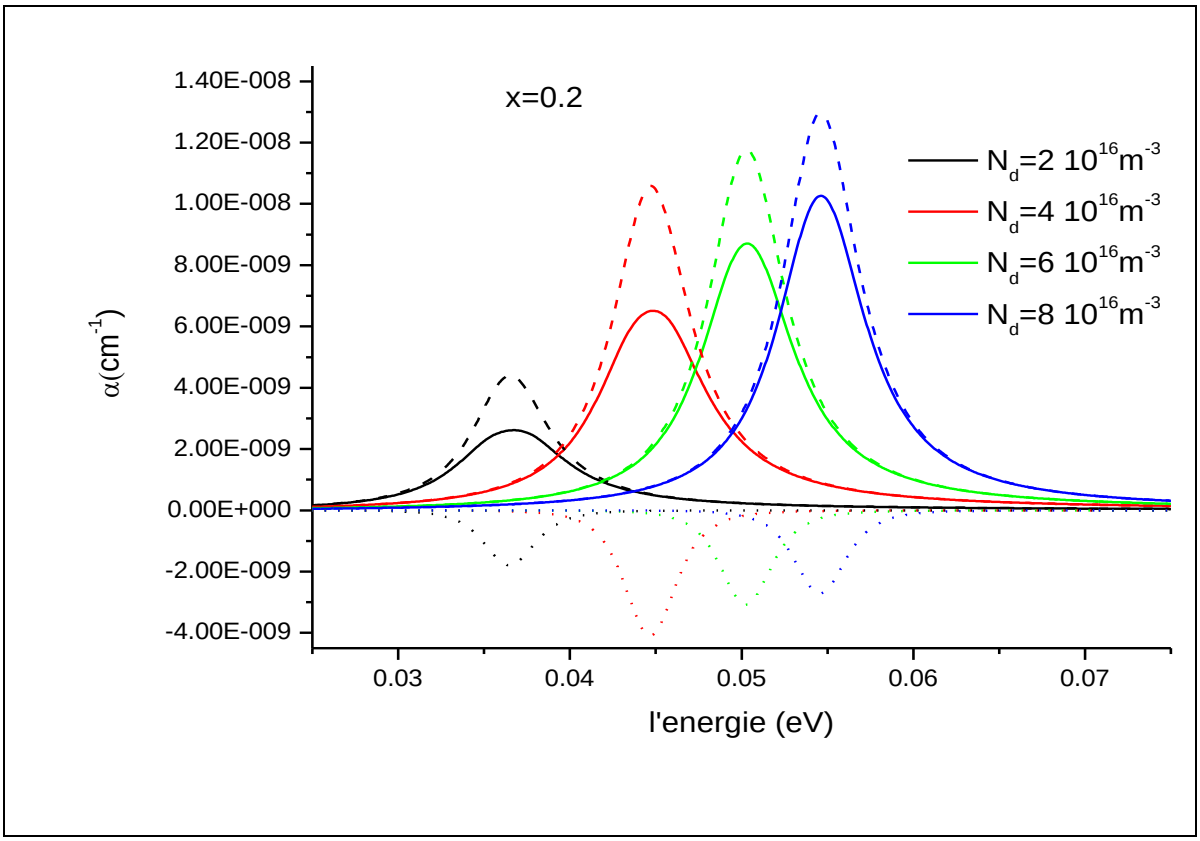


Figure (3-5) :variation de coefficient d'absorption linéaire, non linéaire et total en fonction d'énergies de photon incident pour déférentes valeurs de paramètre $N_d$pour la concentration de magnésium (x=0.2), cas en trait pointillé –linéaire, cas en line plein –total

Dans la Figure 3-5 Nous calculons le coefficient d'absorption optique inter sous-bande linéaire, non linéaire et total on fonction de l'énergie photonique incidente pour différentes valeurs de concentration de dopage N_d= (2 10^{16}, 44 10^{16}, 6 10^{16} et 8 $10^{16}(m^{-3})$) correspond de la concentration de magnésium égale à 0.2.

On observe que la position des pics de résonance d'absorption optique inter sous-bande linéaires, non linéaire et total augmentent et ont un comportement un Informe, et également ces pics se déplacent vers les valeurs élevées d'énergies de photon incident lorsque on augmente la concentration de dopageN_d.Ce comportement delà position du pic de résonance est fortement lié à la différence d'énergie E_2-E_1.

D'autre parton observe que l'amplitude des pics de résonance d'absorption optique inter sous-bande linéaires et total, tandis que on observe exclusivement que l'amplitude des pics de résonance d'absorption optique inter sous-bande non linéaire son comportement non uniforme lorsqu'on augmente les valeurs de la concentration de dopageN_d.A partir des équations mentionnées dans la section précédente, que

l'amplitude de coefficient d'absorption optique inter sous-bande linéaires, non linéaire est fortement dépond du moment dipolaire M_{21}correspond de transition 1-2.

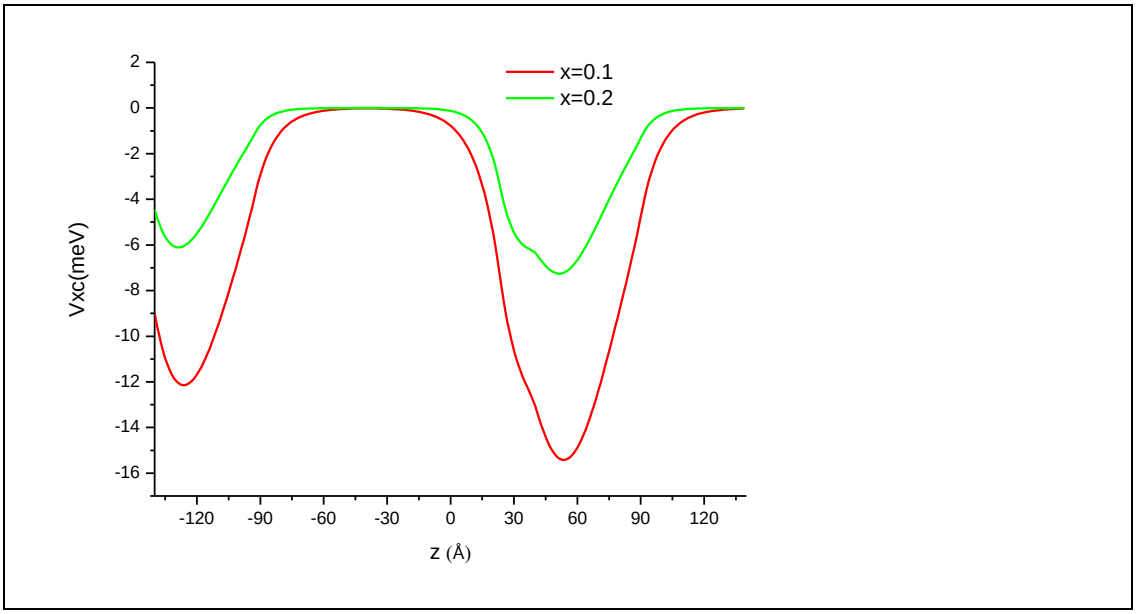


Figure (3-6): Variation de le potentiel de l'échange- interaction de corrélation en fonction de la direction z pour déférentes valeurs de X (0.1 ,0.2)

Dans la figure 3-6, on représente la variation du potentiel d'échange- interaction de corrélation en fonction de la direction z pour déférentes valeurs de concentration x (0.1, 0.2)

À partir de ces graphes, On note une fluctuation de la valeur du potentiel d'échange- interaction de corrélation, où lorsque z varie entre [-142.5.-30] et [30.-142.5] les valeurs de potentiel d'échange- interaction de corrélation est négative et prend une forme presque parabolique, par contre dans l'intervalle [-30 ,30] les valeurs sont presque nulles. En plus, quand la concentration de magnésium change, on remarque clairement que le potentiel d'échange- interaction de corrélation est contrastes, ces contrastes sont dus à de forte dépendance de potentiel d'échange-interaction de corrélation par la concentration de magnésium, où on voit clairement que lorsque la concentration x est diminuée le potentiel d'échange- interaction de corrélation est important.

Conclusion

Comme principale conclusion de ce travail, nous avons basé sur l'étude théorique et numérique de coefficients d'absorption optique linéaire non-linéaire inter-sous-bandes correspond de tranansition électronique entre les niveaux 1 et 2 dans un double puits quantiques carrée à base de $Mg_xZn_{(1-x)}$O /ZnO.Les calculs numériques sont effectués pour résoudre l'équation de Schrödinger en utilisant la méthode de shooting.

La structure wurtzite est la structure cristalline de nombreux composés binaires. Elle fait partie du système cristallin hexagonal. Chacun des deux types d'atome forme une sous-structure de type h_c hexagonal compacte (de l'anglais hexagonal close-packed). Chaque atome a une coordinence tétraédrique. est non-centrosymétrique (c'est-à-dire sans symétrie centrale). À cause de cela, les cristaux de type wurtzite peuvent posséder (et possèdent souvent) des propriétés telles que la piézoélectricité.

La découverte des matériaux à base de $Mg_xZn_{(1-x)}$O /ZnO permet de développer des puits quantique et héterostructure à base de ZnO qui sont très importants pour améliorer de dispositifs optoélectroniques à base de ZnO.

Les résultats obtenus dans cette étude montrent la dépendance de coefficients d'absorption optique linéaires et non linéaire seaux paramètres physiques structural comme le dopage et la composition de magnésium. Comme les résultats obtenus montrent d'existence une relation de proportionnalité entre la concentration de dopage et le coefficient d'absorption où lorsque 'augmente la concentration de dopage, la position du pic de résonance de coefficient d'absorption se déplace vers des valeurs d'énergie plus élevées.

.

Bibliographie

[1] Dakhlaoui, H., & Nefzi, M. (2018). Enhancement of the optical absorption in MgZnO/ZnO quantum well under external electric field. . *Optik,157,1342-1349* .

[2]Liu, Y., Wang, P., Guo, L., chen, H., & Yang, H. (2019). Investigation of intersubband transition optical absorption in Zn1− xMgxO/MgO/ZnO heterostructures. *Superlattices and Microstructures,125,26-33* .

[3] Li, K., Guo, K., Jiang, X., & Hu, M. (2017). Effect of position-dependent effective mass on nonlinear optical properties in a quantum well. *Optik,132,37-381* .

[4] Baskoutas, S., Paspalakis, E., & Terzis, A. F. (2007). Electronic structure and nonlinear optical rectification in a quantum dot: effects of impurities and external electric field. *Journal of physics:condesed Matter,19(39),395024* .

[5] Karabulut, I., Atav, U., Safak, H., & Tomak, M. (2007). Linear and nonlinear intersubband optical absorptions in an asymmetric rectangular quantum well. *The European Physical Journal B,55,283-288l* .

[6] Song, L., Han, Z., Zan, Y., & Ban, S. (2019). Influence of size and ternary mixed crystals on optical absorption of excitons in Zn1− xMgxO/ZnO/Zn1− yMgyO quantum wells. *Optics Communications,444,142-146* .

[7] Dakhlaou, H. (2018). Tunability of the optical absorption and refractive index changes in step-like and parabolic quantum wells under external electric field. *Optik,168,416-423* .

[8] Leyrat, J., & Vuffray, M. (2007). *La problématique de la mesure en mécanique quantique.* Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne.

[9] Kara, F., & Belhout, L. (2021). Etude de l'absorption linéaire et non linéaire dans une structurea puits quantique à base de AlGa As/GaAs. *Mémoire de Master2,Université de Médéa yahia farés*.

[10] Deffaf, A. (2016). Solution de l'équation de Schrödinger dans l'espace non commutative avec plusieurs types d'interactions. *Mémoire de Master2,Université Mohamed Boudiaf-M'sila* .

[11] Giroire, B. (2016). Élaboration en continu de nitrures d'éléments III en conditions supercritiques et caractérisation de leurs propriétés optiques. *Doctoral dissertation, Université de Bordeaux* .

[12] Hladik, J., Chrysos, M., Hladik, P., & Ancarani, L. (1997). *Mécanique quantique.* Paris: Dunod.

[13] Sebbar, D« osillateur harmonique» *cours en ligne,Université Yahia Farès de Médéa* .

[14] Yahiaoui, S. (2022). Etude de l'effet du laser intense sur les propriétés optiques d.une structure à puits quantiques à base de AlGaAs/GaAs. *Mémoire de Mastre2,Université de Médéa yahia faress* .

[15] Mathieu, H., & Fanet, H. *(2009). Physique des semiconducteurs et des composants électroniques-6ème édition: Cours et exercices corrigés*. Récupéré sur Dunod.

[16] Huppert, S. (2014). Transport non-linéaire et génération Terahertz dans des systèmes bidimensionnels sous forte irradiation optique. *Thése de doctorat, l'université Pierre et Marie Curie* .

[17] Gu´ery-Odelin, D., & Fabre, C. (s.d.) « Matrice densité» *Photons et atomes (2005-2006)*

[18] PIERRE, S. (2014). MINESP,Estimation d'état et de paramètres pourlessystèmesquantiquesouverts. *Thése de doctorat,l'université Pierre et Marie Curie* .

[19] SLAOUI, A. (2021). Les relations intrinsèques des théories des ressources quantiques et leurs rôles dans la métrologie quantique. *Thése de doctorat,Université Mohammed V de Rabt* .

[20] Ahn, D., & Chuang, S. (1987). Intersubband optical absorption in a quantum well with an applied electric field. *Physical Review B, 35(8), 4149* .

[21] Bloembergen, N. (s.d.). Nonlinear Optics. *Benjamin, New York 1965. Google Scholar There is no corresponding record for this reference.*

[22] Hubbard, P. (1961). Quantum-mechanical and semiclassical forms of the density operator theory of relaxation. *Reviews of Modern Physics, 33(2), 249* .

[23] Sebbar, D« Propriétés optiques de solide» *cours en ligne,Université Yahia Farès de Médéa*

[24] Chniti, M. (2016). Propriétés optiques non linéaires des composés porphyriniques à base de cobalt et de zinc de type push-pull. *Thése de doctorat , Université d'Angers* .

[25] ben Bechir Dakhlaoui, H., & Mouna, N. (2018). uantum size and magnesium composition effects on the optical absorption in the MgxZn (1− x) O/ZnO quantum well. *Chemical Physics Letters, 693, 40-45.*

[26] Zhao, F., Guo, Z. Z., & Zhu, J. (2016). he influence of built-in electric field on binding energy of bound polaron and polaron effects in wurtzite ZnO/MgxZn1− xO quantum well. *Superlattices and Microstructures, 98, 129-139.*

[27] Dakhlaoui, H. (2015). inear and nonlinear optical absorption coefficients and refractive index changes in GaN/AlxGa (1− x) N double quantum wells operating at 1.55 μ m. *Journal of Applied Physics, 117(13), 135705.*

.