الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République Algérienne Démocratique et Populaire

وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Mohamed Kheider de Biskra Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie Département : Sciences de la Matière Réf :



جامعة محد خيضر بسكرة كلية العلوم الدقيقة و علوم الطبيعة والحياة قسم علوم المادة المرجع:

Thèse présentée en vue de l'obtention du diplôme de Doctorat en Sciences en Physique

Option : Physique des semi-conducteurs

et matériaux métalliques

Intitulé de la thèse :

Etude des propriétés électroniques dans le point quantique sous l'effet du champ magnétique

Présentée par :

Boudib Ouahiba

Soutenue publiquement le 28 / 03 / 2021

Composition du Jury

Président :Mr. LAKEL SaïdRapporteur :Mr. MIMOUNE Souri MohamedExaminateur :Mr. BELKHIAT SaadExaminateur :Mr. IBRIR Miloud

Professeur à l'université de Biskra Professeur à l'université de Biskra Professeur à l'université Sétif 1 Professeur à l'université de M'sila

Remerciement

Je remercie, tout d'abord à **ALLAH** le tout puissant pour m'avoir donné la santé et la patience durant toutes ces longues années d'études.

Je remercie vivement mon directeur de thèse **Pr. MIMOUNE Souri Mohamed**, pour son aide et ses orientations fructueuses pour accomplir ce modeste travail.

De plus, j'exprime mes sincères remerciements à Monsieur : **LAKEL Said**, Professeur à l'Université Mohamed Khider Biskra, d'avoir accepté de présider mon Jury de thèse.

Je remercie, sincèrement Monsieur : **BELKHIAT Saad** Professeur à l'université Sétif 1 et Monsieur : **IBRIR Miloud** Professeur à l'université M'sila d'avoir accepté d'être examinateurs de ce travail.

Enfin, tous mes remerciements et ma gratitude vont à ma très chère mère, mes sœurs, mes frères et à ma précieuse familles pour leurs soutient indéfectibles, sans oublier mes amis (es).

Ι

Résumé

Le transistor à point quantique est un composant très important dans le domaine nanotechnologie, il est appelé aussi le transistor à un électron (Single Electron Transistor en anglais -SET-). Ce SET peut être utilisé comme électromètre, parce qu'il est très sensible aux charges électriques et a un potentiel de stockage pour lire les informations. De plus il est très utilisé dans l'informatique pour remplacer le système binaire 0 et 1 (bits quantiques) par spin-up ou spin-down des électrons. Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés électroniques dans ce dispositif (SET) sous l'effet du champ magnétique extérieur. On a résolu les équations de Poisson-Schrödinger dans le cas cartésien 1D-2D respectivement par la méthode des volumes finies. Nous avons calculé l'énergie potentielle et les états de spins du point quantique et on a déterminé la séparation de niveau d'énergie (l'effet de Zeeman) et calculé le facteur de Lande (g) dans plusieurs orientations du champ magnétique. Ensuite, on a étudié les paramètres qui influent sur ce facteur. De plus, à partir du modèle électrique équivalant du SET et le résultat expérimental du diagramme d'énergie de diamant de Coulomb, on a calculé les capacitances des jonctions tunnel entre le point quantique et les électrodes. Les résultats expérimentaux montrent que la capacitance du drain et de la source ne sont pas égales contrairement à ce que prévoit la théorie. Pour résoudre ce problème, on a supposé que le point quantique n'est pas localisé de façon symétrique et cela peut être expliqué par l'influence de voltage de la grille de contrôle qui peut créer d'autres points quantiques. Nous avons obtenu de bons résultats qui sont en bon accord avec l'expérience.

Table Des Matières

Remerciement	Ι
Résumé	II
Table des matières	III
Constantes physique et abréviations	
Liste des figures et des tableaux	
Introduction générale	01

Chapitre 1: Généralités sur les structures nanométriques

1.1	Introduction	04
1.2	Confinement des porteurs	04
1.3	Points quantiques et leurs applications (système 0D)	06
	1.3.1 Point quantique	06
	1.3.2 Atome artificiel	06
	1.3.3 Jonction tunnel	08
	1.3.4 Double jonction tunnel et blocage de Coulomb	08
	1.3.5 Effet du blocage de Coulomb	11
	1.3.6 Conditions nécessaires à l'observation du blocage de Coulomb	11
1.4	Applications des points quantiques	13
1.5	Avantages et désavantages des points quantiques	14
1.6	Transistor à un seul électron	
1.7	Nanofiles et leurs applications	17
	1.7.1 Historique	17
	1.7.2 Définition	17
	1.7.3 Méthodes des fabrications des nanofils	18
	1.7.4 Applications	22
	1.7.5 Avantages et désavantages des nanofils	25
1.8	Conclusion	25

Chapitre 2: Modèle analytique des interactions constantes

2.1 Introduction	28
------------------	----

2.2	Modèle électrique	28
	2.2.1 Calcul l'énergie totale	30
	2.2.2 Calcul le potentiel électrochimique	33
	2.2.3Etude des transitions possible	33
2.3	Diagramme de stabilité d'énergie	38
	2.3.1 Effet de la température	39
	2.3.2 Effet du champ magnétique	42
2.4	Conclusion	47

Chapitre 3 : Méthode des volumes finis dans le cas cartésien

3.1	Introduction	49
3.2	Méthodes de discrétisation	49
	3.2.1 Méthodes des différences finis (MDF)	49
	3.2.2 Méthodes des éléments finis (MEF)	50
	3.2.3 Méthodes des volumes finis (MVF)	50
3.3	Exemple illustratif de la MVF	51
	3.3.1 Formulation monodimensionnelle de l'équation de Poisson	51
	3.3.2 Formulation monodimensionnelle de l'équation de Schrödinger	53
3.4	Méthode des volumes finis dans le cas bidimensionnel	54
	3.4.1 Formulation de l'équation de Poisson	55
3.5	Formulation unidimensionnelle de l'équation de Schrödinger sous l'effet	
	du champ magnétique	57
3.6	Approximation de la masse effective	61
3.7	Energie potentielle des électrons	62
3.8	Méthode de résolution et Algorithme de couplage	63
	3.8.1 Méthode de résolution de l'équation de Poisson	63
	3.8.2 Méthode de résolution de l'équation de Schrödinger	63
	3.8.3 Algorithme de couplage	63
3.9	Conclusion	65

Chapitre 4: Résultats et discussions

4.1	Introduction	67
4.2	Modèle utilisé	67

4.3	Résultats du modèle d'interactions constants	69
	4.3.1 Détermination des capacités expérimentales	69
	4.3.2 Estimation des capacités	72
4.4	Etude électrostatique	77
	4.4.1Solution de l'équation de Poisson en 2D	77
	4.4.2 Effet de la polarisation Vg3 sur la profondeur du puits	77
4.5	Diagramme de stabilité de l'énergie	78
4.6	Effet du champ magnétique	79
	4.6.1 Effet du champ magnétique sur le diamant de Coulomb	80
	4.6.2 Influence de l'orientation du B sur l'énergie de Zeeman	81
	4.6.3 Influence de la longueur de point sur l'énergie de Zeeman	82
	4.6.4 Influence de l'orientation du B sur le coefficient de Landé g	84
	4.6.5 Influence de la longueur de point sur le coefficient de Landé g	85
	4.6.6 Influence de la constante d'interaction sur le coefficient de Landé g .	86
	4.6.7 Influence de la tension Vg3 sur le coefficient de Landé g	86
4.7	Conclusion	87
Con	clusion Générale	89
Bibl	Bibliographie	

Constantes physique et abréviations

Charge de l'électron	$e = 1,602189 \square 10^{-19} \text{C}$
Constante de Boltzmann	$k_B = 1.38.10^{-23} \text{ J/K}$
Constante de Planck	$h = 6.63.10^{-34} \text{ J.S}$
Masse de l'électron	$m_0 = 0.911 \times 10^{-30} Kg$
Permittivité du vide	$\epsilon_0 = 8.85.10^{-12} \text{F/m}$
	$1 \text{ eV} = 1.602.10^{-19} \text{ J}$

- SET Single Electron Transistor
- PQ Point Quantique
- LED Diode électroluminescence (luminescence electron diode)
- CVD dépôt chimique en phase vapeur (Chimical Vapor Depisition)
- VLS dépôt chimique en phase liquide (Vapor Liquid Solid)
- VSS dépôt chimique en phase solide (Vapor Solid Solid)
- EDX Microanalyse en Dispersion d'Energie X
- S : Surface du condensateur plan
- Eg : Largeur de la bande interdite
- Cg : Capacité de grille
- C₁: Capacité de la première jonction tunnel
- C₂: Capacité de la deuxième jonction tunnel
- C_G : Capacité de la grille
- \in_r : Permittivité relative
- E_p : Energie potentielle
- E_F : Energie de Fermi
- E: Energie totale
- Ec : Energie de charge
- B: Champ magnétique

Listes des figures et des tableaux

Figure 1.1:	Densité d'états et niveaux d'énergies dans : (a) systèmes 2D: puits quantiques, (b) 1D : fils quantiques, (c) 0D : points quantiques [18]	6
Figure 1.2:	Configuration électronique des éléments bidimensionnels [1]. (a) Le schéma des orbitales circulaires pour l'addition des électrons. (b) Table périodique des éléments dimensionnels	7
Figure 1.3:	Schéma électrique d'une jonction tunnel	8
Figure 1.4:	Double jonction tunnel, (a) Schéma de structure à double jonction et (b) Circuit électrique équivalant de la double jonction	9
Figure 1.5:	Variation du courant et diagramme de bande d'énergie en fonction de la tension aux bornes de la double jonction tunnel.(a) et (b) régime de blocage de Coulomb; (c) premier palier de Coulomb, les électrons passent un par un ; (d) deuxième palier de Coulomb, deux électrons peuvent passer dans le composant	10
Figure 1.6:	Caractéristique I-V avec double jonction symétrique	11
Figure 1.7:	Influence de la température sur la charge [24] (a) et sur le courant I_{ds} en fonction de Vg (b) [25]	12
Figure 1.8:	Schéma descriptif d'un SET	14
Figure 1.9:	Evolution du courant en fonction de la tension de grille dans un SET	15
Figure 1.10:	Caractéristique I (V _{GS}) idéale du SET [24]	16
Figure 1.11:	Images des nanofils par microscopie électronique à balayage (MEB). (a) croissance des nanofils de ZnO sur un substrat saphir par la méthode VLS [39]. (b) croissance de nanofils de Silicium sur Si <111> [40]	18
Figure 1.12 :	Digramme de phase binaire (Au-Si)	20

Figure 1.13 :	Schéma de croissance de nanofil (Si) par mécanisme de VLS	21
Figure 1.14 :	Vue schématique de la réalisation de nanofils hétérostructurés par VLS [55]	22
Figure 1.15:	Evolution du transistor à effet de champ. (a) MOSFET classique (b) FinFET (c) NwFET (d) NwFET vertical [56]	23
Figure 1.16:	(a) Image de transistor (SET) par microscope électronique à balayage (MEB).(b) coupe transversale d'un transistor à base de nanofil au dessus de cinq grilles plongé dans un diélectrique $Si_3N_4[57]$	23
Figure 1.17:	Image à gauche représente un schéma d'une DEL à nanofil InP. L'image de droite représente l'émission polarisée depuis la DEL selon l'axe du nanofil. Les pointillés représentent les bords de l'électrode. Barre d'échelle 3µm [61]	24
Figure 1.18:	Schéma d'un ensemble de trois nanofils présentant des récepteurs spécifiques à 3 marqueurs différents présents lors d'un cancer et conductance des trois nanofils en fonction du temps [62]	25
Figure 2.1:	Schéma du circuit électrique équivalant du transistor à point quantique (SET)	29
Figure 2.2:	Transitions possibles pour n = 0 [24]	35
Figure 2.3:	Transitions possibles pour n quelconque	35
Figure 2.4:	Diagramme de stabilité pour n quelconque et $C_1 = C_2$ [24]	37
Figure 2.5:	Diagramme de stabilité pour n = 0	38
Figure 2.6:	Blocage de Coulomb et l'effet de la température pour le cas classique [63]. Les paramètres pour le cas classique sont : $\Delta E = 0.01e^2/C$ et k _B T/ ΔE : 0.075(a); 0.15(b) ; 0.3(c) ; 0.4(d) ; 1(e) et 2(f) [63]	40
Figure 2.7:	Blocage de Coulomb et l'effet de la température pour le cas du point quantique Les paramètres pour le cas quantique sont : $\Delta E = 0.01e^2/C$ et k _B T/ ΔE : 0.5(a) ; 1(b) ; 7.5(c) et 15(d) [63]	41
Figure 2.8:	Pics de courant de transistor à point quantique	43

Figure 2.9:	Diagramme de stabilité de blocage de Coulomb sous l'effet du champ magnétique	44
Figure 2.10:	(a - d) mesure spectroscopique d'état excité en fonction du champ magnétique à deux dispositifs A et B. la transition d'électron de $n = 0$ à $n = 1$. (g) Variation d'énergie de Zeeman en fonction de B [65]	45
Figure 2.11:	(a) Magnéto spectroscopie pour une transition (0) \leftrightarrow (1) et (d - f) une transition (1) \leftrightarrow (2)	46
Figure 3.1 :	Volume fini unidimensionnel	51
Figure 3.2 :	Discrétisation en volumes finis du domaine d'étude dans le cas bidimensionnel	54
Figure 3.3:	Description bidimensionnel d'un volume fini	54
Figure 3.4:	Algorithme de couplage alterné MCA	64
Figure 4.1 :	a) Modèle expérimental du SET [57]. b) Schéma équivalant SET	68
Figure 4.2 :	Diagramme de stabilité; a) modèle électrique, b) mesure expérimentale [57]	69
Figure 4.3 :	Variation V_1 et V_2 en fonction de la tension V_{sd} et V_g pour n = 1-5	71
Figure 4.4 :	Distance d pour calcul estimé des capacitances C_1 et C_2	72
Figure 4.5 :	Distance d _G pour calcul estimé de la capacitance C _G	73
Figure 4.6 :	Variation de l'énergie potentielle en fonction Vg3 et pour $V_{ds} = 0.05 V$	74
Figure 4.7 :	Distance d ₁ et d ₂ pour calcul corrigé des capacitances C ₁ et C ₂ [69]	75
Figure 4.8 :	a) Calcul du courant abs (I) en fonctions de V_{sd} et Vg3.b) variation de la tension V_{sd} en fonction du voltage Vg3	76
Figure 4.9 :	a) Distribution de l'énergie potentielle dans le transistor à point quantique. b) Distribution d'énergie potentiel dans le plan (XY).	

	Pour $V_{ds} = 0.05$ (V) et Vg3 = 0 (V)	77
Figure 4.10 :	Variation de l'énergie potentielle dans un SET	78
Figure 4.11:	Diagramme de stabilité de l'énergie dans un SET	78
Figure 4.12:	Etat spintronique pour B = 0.2 T	79
Figure 4.13:	Variation de l'énergie d'un électron en fonction du champ magnétique	80
Figure 4.14:	Diagramme de stabilité de l'énergie sous l'effet du champ magnétique	80
Figure 4.15:	Ligne de transition $n = 1$ à $n = 2$	81
Figure 4.16:	a) Calcul de l'énergie Zeeman en fonction du champ magnétique dans le point b) E _z mesuré par S. Nadj-Perge et al [57]	82
Figure 4.17:	Effet de la longueur du point quantique sur l'énergie Zeeman	83
Figure 4.18:	Variation de l'énergie de Zeeman sous l'effet de la longueur du point	84
Figure 4.19:	Facteur- g en fonction de l'orientation du champ magnétique	85
Figure 4.20:	Influence de la longueur sur le facteur g	85
Figure 4.21:	Facteur <i>g</i> efficace obtenu pour nanofils à points quantiques avec la variation de la constante d'interaction	86
Figure 4.22:	Influence de la polarisation de la grille 3 sur le facteur $g[71]$	87
Les Tableaux	:	
Tableau I:	Paramètres et constantes employés dans la simulation	68
Tableau II:	Capacités expérimentales	69
Tableau III:	Capacitcés estimés et expérimentals	73
Tableau IV:	Capacités améliorées et expérimentales	76

Introduction generale

Introduction Générale

Les progrès des technologies et les recherches en physique du solide ont permis de fabriquer des dispositifs de l'ordre du nanomètre, où le mouvement possible des porteurs de charge est confiné dans certaines directions telles que les puits quantiques, avec des porteurs de charge qui peuvent se déplacer librement dans deux directions du plan perpendiculaire à l'axe de confinement (2D), ou dans une direction des fils quantiques (1D), ou bloqués soit les points quantiques appelés aussi quantum dots en anglais (0D)[1].

Dans les points quantiques, les porteurs de charge sont confinés dans les trois directions, ainsi les propriétés physiques à ce niveau de dimension changent d'aspect avec l'apparition des effets quantiques; effets de quantification des charges et niveaux d'énergies (niveaux discrets) aussi bien pour la densité d'états qui correspond à une série de fonctions de Dirac [2]. Les propriétés électroniques de ces points quantiques montrent une similitude avec celles des atomes et on appel ce système l'atome artificiel [3]. Alors, la compréhension de ces nouvelles propriétés électroniques est nécessaire et semble être très différentes de celles des dispositifs macroscopiques.

Le point quantique a fait l'objet de nombreux travaux aussi bien expérimentaux [4] que théoriques [5], en plusieurs domaines, par exemples ; des dispositifs optoélectroniques [6] et des dispositifs photovoltaïques [7], et encore plus récemment dans l'informatique (bits quantiques) remplaçant le système de 0 et 1 actuels [8-9]. Alors, dans le point quantique apparait des phénomènes de quantification de charge, d'énergie et l'effet de blocage de Coulomb.

En 1985, D. Averin et K. K. Likharev de l'université de Moscou [10] ont proposé l'idée d'un nouveau dispositif à trois électrodes appelé un transistor à un électron SET (Single Electron Transistor), après deux années, T. Fulton et G. Dolan aux laboratoires de Bell aux USA [11] ont fabriqué un tel dispositif et ils ont démontré comment il fonctionne. Généralement, la partie principale de ces transistors nanométriques consiste en un point quantique [12], dans lequel, les électrons en excès sont confinés dans les trois dimensions (blocage de Coulomb). Le potentiel de confinement peut être contrôlé par la variation de la tension appliquée aux électrodes externes. Alors, dans le point quantique apparaît des phénomènes de quantification de charge et l'effet de blocage de Coulomb. Les propriétés électroniques de ce transistor permet son utilisation comme électromètre, parce qu'il est très sensible pour des charges $(10^{-5} e/\sqrt{Hz})$ [13], en plus on peut utiliser le potentiel du transistor à point quantique (SET) pour le stockage d'information sur la surface d'un disque, le transistor à point quantique est intégré sur une sonde au-dessus du disque pour lire les informations, cette application conduit à une énorme densité de stockage. La température d'opération de transistor se fait aux températures très basses. On peut fabriquer ces transistors par l'utilisation de différents matériaux par exemple ; métaux [14], des semi-conducteurs [15] et nanotube de carbone [16].

Le but de cette thèse est d'explorer du point de vue théorique et numérique les propriétés électroniques des points quantiques sous l'influence de l'effet du champ magnétique et la variation de la tension appliquée sur des électrodes. Le modèle le plus simple pour décrire les niveaux énergétiques sous l'effet du champ magnétique est le modèle des interactions constant (CI) [17] lequel suppose que l'interaction coulombienne est constante. Le modèle utilisé dans ce travail, c'est un transistor à un électron, qui consiste en un point quantique (l'ilot, région isolante ou boites quantique). Nous nous intéressons précisément de comprendre et de calculer certaines constantes comme le coefficient de Landé (g) et les niveaux d'énergies discrets, la densité de la charge puis ensuite vérifier l'effet de confinement des porteurs de charge et l'effet Zeeman par l'utilisation de la méthode de volume finie. Ce manuscrit de thèse comporte quatre chapitres :

- Le premier chapitre fait une description phénoménologique du système (0D) et un préambule pour la compréhension des effets de quantification de la charge et de l'énergie ensuite du blocage de Coulomb. Dans ce chapitre, on présente le transistor à un électron (SET) contenant le point quantique et on explique son principe de fonctionnement. Enfin, nous introduisons les méthodes expérimentales pour la fabrication des dispositifs (1D, nanofils) et leurs applications.

- Le deuxième chapitre présente une étude théorique des propriétés électroniques du point quantique dans le cas électrostatiques et dynamiques, pour simplifier l'étude, on suppose que le modèle d'interactions est constant et on considère le point quantique relié aux électrodes par l'effet capacitif. - Dans le troisième chapitre, on présente la méthode numérique utilisée dans ce travail. On a résolu les équations de Poisson-Schrödinger monodimensionnel sous l'effet du champ magnétique par la méthode des volumes finies et on dégage les niveaux d'énergies, la densité des électrons et l'énergie potentielle.

- Enfin, le quatrième chapitre présente le modèle utilisé dans cette thèse, des interprétations des résultats de la modélisation ; ces résultats seront comparés avec d'autres méthodes expérimentales, analytiques et numériques, enfin nous tirons une conclusion générale suivie de perspectives sur les points quantiques.



Généralités sur les structures nanométriques

1.1 Introduction

A la fin des années quatre-vingts, les efforts se sont portés sur le confinement des porteurs de charge dans plusieurs directions de l'espace pour réduire la dimensionnalité des structures étudiées. Les progrès de fabrication de structures nanométriques, par lithographie électronique en particulier, ont permis la fabrication de puits quantiques (système 2D), de fils quantiques (système 1D) et de points quantiques PQs (systèmes 0D).

L'objectif de ce chapitre est d'introduire les concepts généraux de ces structures nanométriques, liés au confinement des porteurs de charge dans l'espace et aux effets quantiques qui apparaissent dans les PQs, tels que l'effet de la quantification de la charge, de l'énergie et de l'effet du blocage de Coulomb et leurs conditions. Puis nous étudierons aussi les applications de ce système (0D), en particulier dans le domaine électronique, on prend par exemple le transistor à point quantique (SET) qui sera étudié plus tard comme un modèle utilisé dans le quatrième chapitre. La dernière partie de ce chapitre concerne l'étude de la structure à une dimension (système 1D) et ses applications.

1.2 Confinement des porteurs

Dans un solide, il est possible de discrétiser le mouvement des électrons en restreignant l'espace dans lequel ils se déplacent à une taille inférieure ou de l'ordre de la longueur d'onde de De Broglie définie par:

$$\lambda_B = \frac{2\pi h}{\sqrt{2m_e^* E}} \tag{1.1}$$

Où E est l'énergie de l'électron dans la bande de conduction et m_e^* est la masse effective de

l'électron. Le confinement des porteurs dans une direction de l'espace a déjà été largement étudié dans des structures comme les puits quantiques (systèmes 2D). Ces porteurs sont confinés suivant l'axe de croissance où le mouvement libre dans le plan des couches. L'énergie des électrons dans ces structures est alors du type:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_{\prime\prime}^2}{2m_e} + \varepsilon_n \tag{1.2}$$

Où $k_{//}$ est le vecteur d'onde de l'électron dans le plan et ε_n une énergie prenant des valeurs discrètes du fait du confinement. Cette énergie de confinement dépend des caractéristiques du puits quantique (largeur du puits et hauteur de la barrière). La densité d'états dans un système à 2D est alors sous forme de marche d'escalier (Figure 1.1.a). Les fils quantiques (systèmes 1D) permettent un confinement des porteurs de charge dans deux directions de l'espace. L'énergie des porteurs dans ces structures est donc sous la forme:

$$E_{c,n} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e} + \varepsilon_n \tag{1.3}$$

Ces structures présentent toujours des continuums d'états accessibles puisque l'énergie n'est pas discrétisée dans la direction du fil: il subsiste donc un continuum unidimensionnel. La densité d'états est cette fois en $1/\sqrt{E-E_n}$ (Figure 1.1.b). Enfin les points quantiques (systèmes 0D) permettent de confiner les porteurs dans les trois directions de l'espace. L'énergie des porteurs est discrétisée dans les trois directions, le spectre énergétique est donc totalement discret comme celui d'un atome. C'est cette propriété des points qui fait leur intérêt principal pour la réalisation de nombreuses applications car elles pourraient constituer des atomes artificiels. La densité d'états d'un tel système est en principe une fonction delta à l'énergie de chaque niveau discret (Figure 1.1.c). La situation est donc cette fois-ci très différente des systèmes 2D et 1D puisque, dans les points quantiques, il n'y a plus de continuums d'énergie [18].



Figure 1.1: Densité d'états et niveaux d'énergies dans : (a) système 2D:puits quantiques, (b) 1D : fils quantiques, (c) 0D : points quantiques [18].

1.3 Points quantiques et leurs applications (Système 0D)

1.3.1 Point quantique

Le point quantique (quantum dot en anglais) est une structure isolé entre deux jonctions tunnels ou barrières de potentiel, où les porteurs de charge sont confinés dans les trois directions. Il est appelé parfois une boite quantique, ilot ou soit atome artificiel [19-20]. Le vecteur d'onde de point est donc quantifié, ainsi il apparaît des niveaux d'énergies discrètes (niveaux à une particule). Expérimentalement l'ilot se compose d'environ de 10³-10⁹ atomes avec un nombre équivalent d'électrons [1].

1.3.2 Atome artificiel

En tridimensionnel, la symétrie sphérique (3D) du potentiel autour des atomes conduit aux dégénérescences connus sous le nom des orbitales: s, p, d, ...etc. On sait aussi que dans le cas stable ils sont complètement remplis d'électrons, produisant des nombres atomiques, 2-10-18-36...etc [21]. Mais dans le point quantique c'est un peu différent de la structure symétrique atomique (3D) parce qu'il est sous forme de disque, donc la symétrie du potentiel est bidimensionnel (2D) et les états électroniques sont complètement remplis d'électrons: 2-6-12-20...etc [1]. La figure (1.2.a) montre les états des orbites bidimensionnelles permis dans le point quantique. L'orbite avec le plus petit rayon correspond au plus bas d'état d'énergie. Cette état associé le moment angulaires $\ell = 0$ (état -s-) qui peut supporter deux électrons avec deux spins opposés. L'addition du deuxième électron coûte seulement une énergie de charge (e^2/C) (L'énergie de remplissage). Une grande énergie ΔE est nécessaire pour ajouter le troisième électron, cet électron doit remplir le suivant état d'énergie, alors l'énergie additionnelle totale est donnée par: $E = e^2/C + \Delta E$. Les électrons dans cette orbite possèdent des moments angulaires $\ell = \pm 1$ et deux spins pour chaque état, donc dans cette deuxième orbite, il y a quatre électrons (N = 4), alors le sixième électron remplis cette orbite et de la même manière, pour ajouter un septième électron.

Les propriétés électroniques des orbites suivant une structure bidimensionnelle peut être récapitulé dans une table périodique, voir la figure (1.2.b) (les éléments sont exprimés par les noms des membres d'équipe de NTT et Delft).



Figure 1.2: Configuration électronique des éléments bidimensionnels [1].

- (a) Le schéma des orbitales circulaires pour l'addition des électrons.
- (b) Table périodique des éléments bidimensionnels.

1.3.3 Jonction tunnel

Le schéma électrique équivalant de la jonction tunnel est présenté dans la figure (1.3). La jonction tunnel possède un double comportement parce qu'elle a une certaine probabilité de faire passer ou de réfléchir des électrons [22]. Lorsqu'elle est passante, il y a un courant qui passe, dans ce cas, on considère cette jonction comme une résistance. Au contraire, quand elle est bloquée, elle est considérée comme un condensateur. Alors il existe une dualité résistance /condensateur d'une jonction tunnel: ni vraiment totalement résistive, ni vraiment les deux en même temps.



Figure 1.3: Schéma électrique d'une jonction tunnel

1.3.4 Double jonction tunnel et blocage de Coulomb

Considérons maintenant le système constitué par la mise en série de deux jonctions tunnels (Figure 1.4.a), et le circuit équivalent de la double jonction tunnel présenté dans la figure (1.4.b) au quel on peut considérer que les jonctions correspondantes sont respectivement (C_1 , R_{t1}) et (C_2 , R_{t2}). Où n_1 et n_2 sont les nombres d'électrons ayant traversé les jonctions 1 et 2 dans le sens inverse du courant électrique de la polarisation V, c'est-à-dire de gauche à droite; $n = (n_1 - n_2)$ représente donc le nombre d'électrons excédentaires dans le point.

On passe maintenant au principe du fonctionnement de la double jonction tunnel. Lorsque, on applique une tension plus faible, l'électron n'a pas assez d'énergie pour traverser la barrière et charge le point quantique (l'énergie de charge e^2/C_{Σ} où $C_{\Sigma} = C_1 + C_2 = 2C$), donc il y a n = 0

électron en excès sur le point, dans ce cas, le courant est nul, alors nous sommes en régime de blocage du Coulomb comme on peut voir dans la figure (1.5. a).



Figure 1.4: Double jonction tunnel, (a) Schéma de structure à double jonction tunnel et (b) Circuit électrique équivalant de la double jonction.

Si la tension devient suffisante et égale à la tension de seuil ($V_{DS} = e/C_{\Sigma}$) le niveau μ_1 du point aligne avec le niveau de Fermi de la source, un électron peut rentrer par effet tunnel dans le point, et traverser la jonction drain parce que $\mu_I > E_{FD}$ alors il y'a création d'un courant par passage des électrons un par un dans le point quantique et apparition du premier palier de Coulomb (Figure 1.5.c). Quand on augmente la tension V_{DS} jusqu'à la valeur $3e / C_{\Sigma}$ (le deuxième seuil apparait) on voit le deuxième palier de Coulomb, les électrons ont suffisamment d'énergie pour passer deux à deux à travers le composant, la valeur du courant est doublée par rapport au cas précédent (Figure 1.5.d). Cette description n'est valable que dans la limite où la tension reste intérieure à une tension du seuil deuxième à partir de laquelle peuvent être stockés simultanément trois électrons dans le point et ainsi de suite...etc.



Figure 1.5: Variation du courant et diagramme de bande d'énergie en fonction de la tension aux bornes de la double jonction tunnel. (a) et (b) régime de blocage de Coulomb; (c) premier palier de Coulomb, les électrons passent un par un ; (d) deuxième palier de Coulomb, deux électrons peuvent passer dans le composant.

Quand on prend une structure à double jonction symétrique c'est-à-dire ($C_1 = C_2$ et $R_{t1} = R_{t2}$) et on applique une polarisation supérieure au seuil: $|V| > V_{seuil}$, l'électron aura été transféré dans le point quantique et il quittera donc le point immédiatement, la caractéristique *I-V* de la double jonction symétrique est présentée en figure (1.6). Par contre, une double jonction fortement asymétrique (par exemple $R_{t2} >> R_{t1}$) donnerait lieu à une caractéristique *I-V* en forme d'escalier et qu'on appelle l'escalier de Coulomb (voir figure précédente).



Figure 1.6: Caractéristique I-V avec double jonction symétrique.

1.3.5 Effet du blocage de Coulomb

Le blocage de Coulomb est basé sur l'énergie de charge, c'est-à-dire l'énergie nécessaire pour ajouter ou retirer un électron dans le point quantique [23]. Considérons un point quantique isolé du gaz d'électron par des barrières tunnel, de capacité propre C. L'énergie pour ajouter un électron est alors :

$$E_{C} = \int_{0}^{-e} U(q) dq = \int_{0}^{-e} \frac{q}{C} dq = \frac{e^{2}}{2C}$$
(1.4)

C'est cette énergie que l'on appelle « l'énergie de charge ou l'énergie électrostatique ».

1.3.6 Conditions nécessaires à l'observation du blocage de Coulomb

Pour voir le phénomène du blocage de Coulomb, il faut réaliser les conditions suivantes:

1. Premièrement, l'énergie thermique k_BT du système à température T doit être petite par rapport à l'énergie de charge.

$$e^2/2C \gg k_B T \tag{1.5}$$

Dans le cas contraire, où l'énergie de charge est inférieure à l'énergie thermique $(e^2/2C \le k_B T)$, la quantification de la charge disparaît (Figure 1.7 a).

L'excitation thermique permet le passage des électrons à travers les jonctions et par conséquent les oscillations de coulomb diminuent avec l'augmentation de la température (Figure 1.7.b).



Figure 1.7: Influence de la température sur la charge (a) [24] et sur le courant I_{ds} en fonction de Vg (b) [25].

2. Deuxièmement, Les jonctions tunnels doivent donc suffisamment confiner l'électron dans le point, ce qui se traduit par une valeur minimale de R_t , où R_t est une résistance tunnel. Une façon qualitative d'exprimer cette contrainte est d'utiliser la relation d'incertitude d'Heisenberg [26] :

$$\Delta E \Delta t \ge h \tag{1.6}$$

où l'incertitude sur le temps, Δt , correspond au temps de chargement du point c'est-àdire à la constante de temps liée au chargement d'un circuit RC.

$$\Delta t = R_{t}.C \tag{1.7}$$

Et où la variation de l'énergie correspond à l'énergie de chargement électrostatique

$$\Delta E = \frac{e^2}{C} \tag{1.8}$$

Après avoir introduit les équations ci-dessus dans la relation d'incertitude, on obtient la résistance tunnel R_t:

$$R_t >> \frac{h}{e} = R_Q \tag{1.9}$$

Où R_Q est le quantum de résistance qui vaut 25,9 k Ω . Nous l'obtenons ici comme valeur minimale de la résistance tunnel.

3. Troisièmement, la tension entre la source et le drain V_{SD} doit être inférieure à l'énergie de charge E_c :

$$e\left|V_{sd}\right| < E_c = e^2/2C \tag{1.10}$$

Par contre, lorsque on applique la tension du drain supérieure à l'énergie de charge, l'effet du blocage de Coulomb disparait, c'est à dire le courant est non nul.

1.4 Applications des points quantiques

Les points quantiques sont utilisés dans plusieurs domaines, on en présente les plus importants:

- ✓ Les lasers à boîtes quantiques, profitant directement des états discrets dans les boîtes pour délivrer des raies d'émission ultra-fines. Ils sont également très stables avec la température [27].
- ✓ En photovoltaïque, les diodes électroluminescentes quantiques (QD-LED)[28]qui permettent l'émission de différentes longueurs d'ondes comme exemple les écrans ou ampoules délivrant une lumière plus proche de la lumière naturelle. en plus les cellules à base de nanocristaux de silicium auraient des coûts de fabrication moindres par rapport aux cellules actuelles et offriraient des rendements plus importants, tout en profitant des propriétés optiques (gap modulable par la taille) des nanocristaux.
- ✓ Les points quantiques ont en plus une application dans l'informatique où des quantum bits (qubits) remplacent le système de 0 et 1 actuels [29].

 \checkmark

- En biomédical, les points quantiques présentent de nombreux avantages comparés aux marqueurs traditionnels, en raison de leur luminescence et de leur stabilité.
- ✓ En électronique, les points quantiques composent les dispositifs qu'on appelle maintenant les transistors à points quantiques ou SET (Single Electron Transistor en anglais) [30-31-32] qui nous intéressent dans notre étude.

1.5 Avantages et désavantages des points quantiques

Les avantages des points quantiques sont nombreux par rapport aux autres systèmes comme les puits quantiques et les nanofils.

- ✓ le gain optique est plus élevé parce que la densité d'état a la forme de pics de Dirac ce qui concentre les porteurs sur des gammes d'énergie plus étroites.
- ✓ le courant de seuil laser est abaissé car la discrétisation des niveaux électronique fait que le nombre de porteurs nécessaires à l'inversion de population est plus faible.
- ✓ tel que la différence entre les niveaux énergétiques est supérieure à l'excitation thermique, la densité des porteurs ne change pas par conséquent le gain du laser est stable par rapport à la température.

Mais leurs inconvénients sont lors de la fabrication, il est délicat de contrôler leur distribution des niveaux énergétiques en taille. On n'observe pas donc la fonction Delta souhaitée comme dans le cas théorique, mais une distribution Gaussienne.

1.6 Transistor à un seul électron

Un transistor à un seul électron (SET) est composé d'un point quantique et le schéma descriptif d'un SET est illustré à la figure (1.8).



Figure 1.8: Schéma descriptif d'un SET.

La source des électrons est séparée du drain par des jonctions tunnels et la grille par une jonction capacitive pour bien confiner les électrons dans le point quantique. Il est nécessaire que la résistance des jonctions tunnel soit suffisamment grande et la température ne soit pas trop élevée. C'est ce qu'on appelle le blocage de Coulomb et le fonctionnement du transistor est de voir l'îlot comme un piège dans lequel est contenu un (ou plusieurs) électrons.

• Principe de fonctionnement

La figure (1.9) présente la variation de diagramme d'énergie en fonction de la tension de grille V_{GS} .



Figure 1.9: Evolution du courant en fonction de la tension de grille dans un SET.

Le principe de fonctionnement du transistor SET, reste similaire à celui d'une double jonction tunnel, mais la troisième électrode, qu'on appelle la grille contrôle le nombre des électrons dans le point quantique. Le passage d'un électron à travers les barrières est conditionné par la différence de potentiel entre source et drain (Potentiel de Windows c'est-àdire V_{DS}) ainsi que par l'énergie de charge pour ajouter un électron au point. Pour une tension Source - drain V_{ds} donnée et inférieure au premier seuil de tension ($V_{DS} < V_{seuil}$) et la tension de grille insuffisante pour faire passer le premier électron (c'est-à-dire $E_{FS} < \mu_1$), où μ_1 présente le potentiel chimique dans le point dans ce cas l'électron ne peut pas passer, alors on a un régime de blocage de Coulomb (figure 1.9.a). Si on conserve la même polarisation source- drain, on augmente la tension de grille $V_{GS} = V_{GI}$, les niveaux d'énergies dans le point sont diminués (la profondeur du puits augmente) alors l'électron peut passer (Figure 1.9b), il apparaît un premier pic du courant. En augmentant la tension de grille supérieure à la tension V_{GI} , on retrouve le régime du blocage de Coulomb figure (1.9.c). Par contre pour une tension de grille V_G donnée (ou nulle) et la polarisation source -drain varie et on retrouve la caractérisation courant- tension V_{ds} de la forme d'escalier comme on auparavant (Figure 1.5).

La figure 1.10, présente la caractérisation courant / tension de la grille. On observe que le courant varie comme une série de pics de conduction et la largeur des pics dépend de la tension de source drain appliquée.



Figure 1.10: Caractéristique I (V_{GS}) idéale du SET [24].

Quand cette tension augmente, la largeur augmente aussi (tout en restant inférieure au premier seuil du passage des électrons), plus la largeur de la zone de résonance est importante. Dans le cas où la tension de drain est supérieure au premier palier de Coulomb, il y aura toujours existence d'un courant, quelle que soit la valeur de la tension grille.

1.7 Nanofils et leurs applications

1.7.1 Historique

Les fils sont découverts en 1964 par Wagner et Ellis [33], la méthode de croissance est le dépôt chimique en phase vapeur (Chemical Vapor Deposition : CVD) de Si à partir d'agrégats d'or. Les fils étaient alors de dimensions micrométriques et connus sous le nom de « whiskers ». Ce n'est qu'en 1998 que l'équipe de Charles Lieber [34] utilise le fait que le diamètre des colonnes est contrôlé par la taille de l'impureté métallique pour fabriquer volontairement des fils de silicium de diamètre nanométrique. Dès lors l'activité "nanofils" émergea, et à partir de 2000 [35] la croissance et l'étude de nanofils ont connu une extension exponentielle.

1.7.2 Définition

Un nanofil est une structure unidimensionnelle à l'échelle nanométrique [36], dont le diamètre est généralement très fin de d'ordre des nanomètres et la longueur n'est pas limitée à peu près de l'ordre des micromètres. A ces échelles les effets quantiques sont importants. De nombreux types de matériaux ont été élaborés dans les nanofiles tels que les matériaux semiconducteurs [37] par exemple: Si, InP, GaN,... etc.), ou métalliques [38] comme (Ni, Pt, Au) et dernièrement ont aperçoit les nanofils moléculaires qui constituent des unités moléculaires organiques (par exemple l'ADN) ou inorganiques. Ces systèmes nanométriques présentent des intérêts dans de nombreux champs technologiques (micro/nanoélectronique, énergie photovoltaïque) et scientifiques (biologie, physique). La figure (1.11) présente quelques images des nanofils.



Figure 1.11: Images des nanofils par microscopie électronique à balayage (MEB).
(a) croissance des nanofils de ZnO sur un substrat saphir par la méthode VLS
[39]. (b) croissance denanofils de Silicium sur Si<111> [40].

1.7.3 Méthodes de fabrications des nanofils

Pour fabriquer des nanofils, deux grandes approches sont possibles : l'approche descendante (top-down) et l'approche ascendante (bottom-up) [41].

L'approche descendante « top-down » : c'est la méthode la plus utilisée en microélectronique pour fabriquer des dispositifs fonctionnels intégrables en des systèmes complexes. Elle permet d'obtenir des nanostructures à l'aide des techniques de lithographie, de gravure et de dépôt où la matière est sculptée.

- ✓ L'avantage de cette méthode est d'obtenir des nanostructures dont les propriétés sont celles du cristal utilisé au départ.
- ✓ Les inconvénients sont : mauvaise qualité morphologique due à la rugosité de surface après gravure, aussi bien que c'est difficile d'atteindre des dimensions de plus en plus petites avec les techniques de lithographie, pourtant ce domaine ne cesse de se développer pour réduire les dimensions des nanostructures.

L'approche ascendante est une méthode qui présente l'avantage d'obtenir des structures organisées avec une haute qualité cristalline à l'échelle nanométrique par synthèse ou par auto-organisation. De nombreuses méthodes existent pour former des nanofils par cette approche, elles peuvent être classées en des méthodes de croissance en solution et d'autres en phase vapeur. Les méthodes dites en solution incluent le dépôt électrochimique combiné à des

templates. L'avantage de ces méthodes est la production à grande échelle et à bas coût. Les méthodes en phase vapeur ont été largement utilisées pour l'élaboration des nanofils. Elles incluent les méthodes physiques 'ablation laser' [42] et l'évaporation thermique et chimiques 'dépôt chimique en phase vapeur' CVD (Chemical-Vapor-Deposition) [43-44]. Ces méthodes permettent un meilleur contrôle de la morphologie des nanofils par rapport à celles en solution. Aujourd'hui, ce sont ces méthodes qui dominent la croissance des nanofils et sont utilisées pour produire des composants semiconducteurs intégrables dans des composants électroniques. Cependant de telles méthodes coûtent cheres. Mais elles sont très avantageuses dans le sens où la gamme de précurseurs gazeux permettant de faire croître différents types de matériaux est vaste et offre un contrôle de la croissance fournissant la possibilité de réaliser des structures complexes avec les nanofils.

Les méthodes de fabrication de nanofils sont multiples ainsi que les types de matériaux produisant des nanofils. Citons les nanofils demétaux [45], les nanofils de carbures [46], les nanofils d'oxydes et les nanofils de semiconducteurs [47- 48]. La technique générique décrite ici et en détaille est le dépôt chimique en phase vapeur (CVD), et le mode de mécanisme de croissance peut être : VLS (vapour-liquid-solid) ou VSS (vapour-solid-solid) en fonction de la phase liquide ou solide mais la plus utilisée étant la méthode VLS (Vapeur-Liquide-Solide) [49-50] que nous décrivons par la suite.

Le point essentiel dans le mécanisme de croissance VLS est le fait que la goutte forme un alliage liquide à la température de croissance généralement supérieure à celle de l'eutectique. Tandis que les températures de fusion des matériaux massifs de Au, de Si sont de 1064°C, 1414°C respectivement (Figure 1.12), la température d'eutectique d'alliage Au-Si est de 363°C. La composition atomique en Si est de 18.6%. L'avantage de travailler dans de telles conditions est que le système est lié à la composition de l'eutectique et y revient dès qu'on le force à s'en écarter.

Chapitre 1



Figure 1.12: Diagramme de phase binaire (Au-Si).

La figure (1.13) présente la méthode de croissance de nanofiles de Silicium par VLS. Les gouttes catalytiques (Au, Ag...) peuvent être formées par démouillage (traitement thermique) d'un film mince ou déposées par une solution de colloïdes. Il est important de bien contrôler cette étape puisque les nanofils croissent à partir de ces gouttelettes, leur position et leur diamètre en dépendent donc. La croissance s'amorce lors de l'introduction d'un flux de Silane (SiH₄) dans l'enceinte de croissance. Les atomes de silicium ainsi libérés sont alors incorporés dans la goutte liquide de l'alliage Au-Si tandis que l'hydrogène restant est en phase gazeuse puis est évacué de la chambre. Cet ajout de silicium provoque une augmentation de la concentration en silicium au sein de la goutte, au-delà du seuil d'équilibre thermodynamique. L'unique moyen pour rétablir l'équilibre est de précipiter de la matière solide riche en silicium. Ce phénomène qui consiste à faire apparaître les premiers germes cristallins d'une phase solide est plus connu sous le terme de nucléation. En conséquence, la précipitation de silicium solide sous la goutte engendre par accumulation la croissance d'un nanofil.



Figure1.13: Schéma de croissance de nanofils (Si) par mécanisme de VLS.

L'Or permet une bonne croissance des nanofils de silicium. Cependant, lors des études EDX (Microanalyse en Dispersion d'Energie X) des échantillons obtenus, une pollution des nanofils par l'or est constatée jusqu'au cœur de la structure et ceci même après rinçage. Il existe une diffusion de l'or au sein même des nanofils qui ne peut être évitée [51].Il est possible d'utiliser d'autres matériaux pour la réaction, tels que le Gallium [52] qui permett d'élaborer des nanofils de diamètres très petits, le cuivre [53]ou le titane [54] qui permettent d'obtenir des nanofils de forme conique. Il apparaît que ces matériaux qui ont une faible affinité avec le silicium et permettant l'apparition de moins d'impuretés dans le fil. Cependant, la croissance VLS utilisant d'autres métaux doit parfois être réalisée dans des solvants organiques car la température à imposer pour atteindre l'eutectique est trop élevée et un alliage se forme entre la couche métallique et le substrat de silicium.

Par changement du gaz réactif dans la chambre de croissance au cours de la synthèse, on peut réaliser des nanofils hétérostructures avec deux types de croissance; soit sur le long de son axe qui donne une hétérojonction axiale ou des hétérostructures axiales (Figure 1.14 b-c), et soit dans la direction perpendiculaire (radiale) qui correspond à des structures cœur/coquille oucœur / multi-coquilles (Figure 1.14 d-e). Il est aussi possible de réaliser des hétérostructures plus complexes qui contiennent ces deux types d'hétérostructures.



Figure 1.14: Vue schématique de la réalisation de nanofils hétérostructurés par VLS [55].

1.7.4 Applications

Après la présentation des techniques de fabrication des nanofils, la dernière partie de ce chapitre concernant leurs applications, les nanofils peuvent être utilisés dans plusieurs domaines par exemple : la nano-microélectronique, l'optoélectronique et le capteur biologique.

• Nano-Microélectronique : FET - SET

Dans la technologie planaire du transistor à effet de champ (Field Efect Transistor, FET), la grille servant à la déplétion (ou l'enrichissement) et le canal n'agit que d'un seul côté, et dans une seule direction (Figure 1.15a). En revanche, en utilisant des nano-fils comme un canal de conduction dans le transistor à effet de champ, la grille peut enrober le fil soit par trois côtés dans le cas du transistor FinFET (Figure 1.15b), soit tout autour du fil et de façon homogène dans le cas des transistors verticaux (Figure 1.15d).

Ainsi, l'effet de champ est beaucoup plus prononcé, et conduit à un meilleur contrôle électrostatique de la conductivité dans le canal du transistor. C'est pourquoi de nombreuses études sont menées sur les transistors à effet de champ à base de nanofils.



Figure 1.15: Evolution du transistor à effet de champ. (a) MOSFET classique (b) FinFET(c) NwFET (d) NwFET vertical [56].

Les nanofils peuvent être utilisés pour fabriquer les transistors à un électron (SETs) où les effets quantiques peuvent apparaître tels que; la quantification des porteurs de charge, des énergies et l'effet de blocage de coulomb. On peut obtenir le point quantique à partir de la croissance de nanofil à hétérostructures ou par application des grilles au-dessous du nanofil (InAs), comme on peut le voir sur la figure (1.16).

а



Figure 1.16: (a) Image de transistor (SET) par microscope électronique à balayage (MEB).
(b) coupe transversale d'un transistor à base de nanofil au-dessus de cinq grilles plongé dans un diélectrique Si₃N₄ [57].
Le nanofil de transistor est fabriqué par le mode de mécanisme VLS [57], avec un diamètre de 55 nm et forme un angle $65C^{\circ}$ avec les grilles. Le point quantique est formé par l'utilisation de l'effet des trois grilles du milieu.

• En optoélectronique-photonique

Des hétérostructures 1D peuvent être intégrées dans un nanofil de façon à former des boîtes quantiques. De telles structures peuvent fonctionner comme une source de photons uniques [58]. Les nanofils peuvent aussi fonctionner comme des cavités laser [59]. En plus, des matériaux intéressants pour des applications optiques et dont la croissance en volume révèle des défauts s'avèrent de cristaux parfaits sous la forme de nanofils, par exemple les nanofils de GaN et de AlGaN[60].

Des nanofils semiconducteurs à superréseaux III-V et IV ont été synthétisés avec une composition de couches multiples de GaAs et GaP afin d'obtenir des nanofils à modulation de gap. Les mesures de photoluminescence, de transport électrique et les mesures d'électroluminescence (Figure 1.17) sur des nanofils uniques types n-Si/p-Si et n-InP/p-InP montrent les propriétés uniques de ces nanofils à superréseaux et proposent des applications potentielles allant des codes-barres nanométriques jusqu'à des diodes électroluminescentes polarisées à l'échelle nanométrique.



Figure 1.17: L'image de gauche représente un schéma d'une DEL à nanofil InP. L'image de droite représente l'émission polarisée depuis la DEL selon l'axe du nanofil. Les pointillés représentent les bords de l'électrode. Barre d'échelle 3µm [61].

• En détection biologique et chimique

Les transistors à base de nanofils sont très importants dans le domaine biologique et chimique. Les diamètres nanométriques des nanofils de taille comparable à celles des espèces chimiques et biologiques à détecter font d'eux un excellent transducteur primaire produisant un signal pouvant interférer avec des instruments macroscopiques. La figure 1.18 présente un exemple des capteurs.



Figure1.18: Schéma d'un ensemble de trois nanofils présentant des récepteurs spécifiques à 3marqueurs différents présents lors d'un cancer et conductance des troisnanofils en fonction du temps [62].

La conversion d'un transistor à base de nanofil en un capteur pour la détection de marqueurs présents lors d'un cancer consiste à fonctionnaliser la surface des nanofils (de silicium dans ce cas) avec des groupements terminaux permettant de greffer par la suite des récepteurs spécifiques sur le nanofil. Ensuite, le marqueur réagira uniquement avec le récepteur qui lui est spécifique, ce qui changera la conductance du nanofil [62].

1.8 Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre que lorsque les dimensions du système étudié deviennent nanométriques ou inférieures aux grandeurs caractéristiques qui sont la longueur d'onde de Fermi, le libre parcours moyen et la longueur de cohérence de phase, des effets quantiques apparaissent. Ainsi, une quantification de la charge et de l'énergie ou d'effet de blocage de Coulomb sont observés dans de tels systèmes (points quantiques). Allant toujours vers la miniaturisation des composants, une nouvelle voie de recherche concerne les transistors à point quantiques (SET). Encore, nous avons vu les méthodes de fabrication des systèmes 1D (nanofils) et leurs applications. Dans la suite, nous étudierons en détails la théorie pour la compréhension des phénomènes physiques dans le cadre de blocage de Coulomb qui apparaissent dans ce dispositif (SET).





Modèle analytique des interactions constantes

2.1 Introduction

Dans ce chapitre, on présente une étude théorique sur les dispositifs mono électroniques tels que le transistor à point quantique. On explique tout d'abord l'effet du blocage de Coulomb dans le contexte du modèle d'interaction constante [17], qui suppose que cette interaction ne dépend pas de la charge du point, cette hypothèse permet de modéliser cette interaction par un réseau de capacités, alors l'interaction coulombienne est constante. On peut dire encore que ce modèle constitue une description qualitative. Ensuite, nous calculons les transitions possibles dans le point quantique par diminution d'énergie total de système. Finalement, on explique le transport électronique dans le régime linéaire et non linéaire, ensuite l'effet du champ magnétique sur le diagramme de stabilité d'énergie.

2.2 Modèle électrique du SET:

Le modèle utilisé ici est un modèle d'interaction constante, il est très simple et général [57] et permet de résoudre les problèmes liés au blocage de Coulomb. Nous calculons l'énergie potentielle globale dans ce transistor (SET) et nous étudierons l'adjonction ou le retrait d'un électron du point quantique par les jonctions tunnel favorisant une diminution de l'énergie.

Le modèle électrique de transistor à point quantique (SET) est illustré sur la figure (2.1). Le point quantique ou l'ilot est relié à trois électrodes : la source et le drain connectant le point quantique à une source de potentiel V_{sd} et la troisième électrode grille couple d'une manière capacitive le point à la source de potentiel V_G . Cette grille permet de changer le potentiel électrostatique du point. Les électrons du point ne sont pas des particules indépendantes, car ils se repoussent mutuellement par la force de répulsion de Coulomb.

Ces interactions modifient en général les propriétés électroniques du point quantique en induisant des corrélations entre les charges. Pour simplifier la discussion, nous supposons d'une part que le spectre à une particule n'est pas affecté par les interactions (entre les électrons du point quantique et entre le point quantique et les réservoirs) et d'autre part, que les interactions sont paramétrisées par des capacités couplant électrostatiquement les différentes régions du circuit.



Figure 2.1: Schéma du circuit électrique équivalant du transistor à point quantique (SET).

L'énergie électrostatique $\boldsymbol{\xi}$ dans un condensateur est défini par :

$$\xi = \int_{0}^{+\infty} V(t) I(t) dt = \int_{0}^{+\infty} \frac{q}{C} dq = \left[\frac{Q^2}{2C}\right]$$
(2.1)

So it si q = 0 à t = 0 et q = Q à $t = +\infty$

Dans le point quantique, nous pouvons écrire la conservation globale de la charge

$$Q = Q_2 - Q_1 - Q_G \tag{2.2}$$

Par effet tunnel, les électrons transitent un à un et que la charge dans le point est par conséquent quantifiée ; de plus, nous tenons compte des charges parasites pouvant exister au sein du transistor par l'intermédiaire du paramètre q_0 :

$$Q = -ne + q_0 \operatorname{avec} n \in Z \tag{2.3}$$

La relation fondamentale des condensateurs donne :

$$\begin{cases}
Q_1 = C_1 V_1 \\
Q_2 = C_2 V_2 \\
Q_G = C_G (V_G - V_2)
\end{cases}$$
(2.4)

Avec :

$$V_{ds} = V_1 + V_2 \tag{2.5}$$

2.2.1 Calcul de l'énergie totale

L'énergie totale du système nous est toujours donnée comme la somme des énergies potentielles (E_p) du système à laquelle on soustrait l'ensemble des travaux effectués (w) par les sources de tension.

$$E = E_p - w \tag{2.6}$$

L'énergie potentielle, d'origine électrostatique, correspond à l'énergie emmagasinée dans les trois condensateurs.

$$E_p = \frac{1}{2C_{eq}} \left[C_1 C_2 V_{ds}^2 + C_1 C_G (V_{ds} - V_G)^2 + C_2 C_G^2 V_G^2 + (ne - q_0)^2 \right]$$
(2.7)

Où $C_{eq} = C_1 + C_2 + C_G$ et *n* représente le nombre d'électrons dans le point quantique et représente la variation entre des nombres des électrons qui passent par la jonction 1 et 2, ç' est à dire ($n = n_1 - n_2$).

Le travail fourni par les sources se décomposé toujours en deux travaux élémentaires, l'un pour injecter n_1 électrons par la jonction1 (w_1), l'autre pour injecter n_2 électrons par la jonction 2 (w_2).

$$w = w_1 + w_2 \tag{2.8}$$

Si un électron est rentré par la jonction 2, cette jonction peut être considérée comme passante. Ce faisant, la jonction1 exhibe son caractère capacitif (c'est l'hypothèse de passage séquentiel des électrons) de même que le condensateur de grille C_G . Les charges Q_G et Q_1 doivent donc se rééquilibrer. Le travail fourni par les sources de tension V_{sd} et V_G nécessaire à un tel rééquilibrage de charges s'écrit (Figure 2.1) :

$$\delta w_2 = \int V_{sd} I(t) dt + \int V_G I(t) dt = V_{sd} \Delta Q_1 + V_G \Delta Q_G$$
(2.9)

Soit en fonction des tensions :

$$\delta w_2 = V_{sd} C_1 \Delta V_1 + V_G C_G \Delta (V_G - V_2) = V_{sd} C_1 \Delta V_1 - V_{sd} C_G \Delta V_2$$
(2.10)

Où, lorsqu'un électron est extrait par la jonction $2:n_2 \rightarrow n_2 + 1$ et $n \rightarrow n - 1$ induisant une variation des tensions V_1 et V_2 :

$$\begin{cases} V_1 \to V_1 - \frac{e}{C_{eq}} \\ V_2 \to V_2 + \frac{e}{C_{eq}} \end{cases}$$
(2.11)

Où $E_C = \frac{e}{C_{eq}}$ est l'énergie de charge. Au final, nous trouvons donc que si n_2 électron ont été extraits de la jonction 2, les sources ont dû fournir le travail

$$w_2 = -n_2 \left(\frac{e_{C_1 V_{sd}}}{c_{eq}} + \frac{e_{C_G V_G}}{c_{eq}}\right)$$
(2.12)

Si maintenant nous considérons qu'un électron a été injecté par la jonction1, cette jonction peut être considérée comme passante.

Ce faisant, la jonction 2 exhibe son caractère capacitif, de même que le condensateur de grille C_G . Les charges Q_G et Q_2 se rééquilibrent imposant aux sources de tension V_{sd} et V_G de fournir le travail.

$$\delta w_1 = \int V_{sd} I_d dt + \int V_G I_G dt \tag{2.13}$$

Etant donné que $I_d = I_S - I_G$, en remplaçant I_d par cette expression dans celle de δw_1 , nous trouvons :

$$\delta w_1 = \int V_{sd} \, I_S \, dt + \int (V_G - V_{sd}) \, I_G dt \tag{2.14}$$

Sachant que $I_s = \frac{dQ_2}{dt}$ et $I_G = \frac{dQ_G}{dt}$ et après l'intégration on trouve:

$$\delta w_1 = V_{sd} \Delta Q_2 + (V_G - V_{sd}) \Delta Q_G \tag{2.15}$$

Soit en fonction des tensions :

$$\delta w_1 = V_{sd} C_2 \Delta V_2 + (V_G - V_{sd}) C_G (V_G - V_{sd})$$

= $V_{sd} C_2 \Delta V_2 - (V_G - V_{sd}) C_G \Delta V_2$ (2.16)

Où, lorsqu'un électron est injecté par la jonction 1, nous avons $n_1 \rightarrow n_1 + 1$ et $n \rightarrow n + 1$

$$\begin{cases} V_2 \to V_2 - \frac{e}{C_{eq}} \\ V_1 \to V_1 + \frac{e}{C_{eq}} \end{cases}$$
(2.17)

De sorte que, finalement, nous trouvons que si n_1 électrons ont été extraits de la jonction1, les sources ont dû fournir le travail

$$w_1 = -n_1 \left(\frac{eC_2 V_{sd}}{C_{eq}} + \frac{eC_G (V_{sd} - V_G)}{C_{eq}}\right)$$
(2.18)

Le travail total du système s'écrit alors

$$w = -\frac{e}{C_{eq}} \left[n_2 (C_1 V_{ds} + C_G V_G) + n_1 (C_2 V_{ds} + C_G (V_{ds} - V_G)) \right]$$
(2.19)

Alors l'énergie totale du système s'écrit (avec $n = n_1 - n_2$)

$$E = \frac{1}{2C_{eq}} \left[C_1 C_2 V_{ds}^2 + C_1 C_G (V_{ds} - V_G)^2 + C_2 C_G^2 V_G^2 + (ne - q_0)^2 \right] + \frac{e}{C_{eq}} \left[(n_1 (C_2 + C_G) + n_2 C_1) V_{ds} - n C_G V_G \right]$$
(2.20)

2.2.2 Calcul du potentiel électrochimique

Par définition, le potentiel électrochimique représente la variation de l'énergie du système quand une particule supplémentaire est introduite, l'entropie et le volume restant constants ou le potentiel électrochimique du point quantique est défini comme l'énergie nécessaire pour ajouter un électron dans le point et on calcule à partir des relations suivantes:

$$\mu_{dot}(n) = \frac{\partial E(n)}{\partial n} \approx \frac{\Delta E}{n - (n - 1)} = E(n) - E(n - 1)$$
$$= \frac{e}{C_{eq}} \left[\frac{e}{2} + (ne - q_0) + (C_2 + C_G)V_{ds} - C_G V_G \right]$$
(2.21)

2.2.3 Etude des transitions possibles

A température nulle, l'évolution du système ne peut s'effectuer que dans le sens d'une diminution de l'énergie totale. En calculant l'ensemble des transitions possibles du système, la condition de décroissance de l'énergie nous permet de connaitre les plages de tension sur lesquelles les transitions envisagées peuvent effectivement avoir lieu.

Jonction 1 :

$$\begin{cases} si \ n_{1} \to n_{1} + 1 \ alors \ n \to n + 1 \\ \Delta E_{n_{1}+1} = \frac{e}{2C_{eq}} [+(2n+1)e - 2(q_{0} + C_{G}V_{GS}) + 2V_{ds}(C_{2} + C_{G}] \\ si \ n_{1} \to n_{1} - 1 \ alors \ n \to n - 1 \\ \Delta E_{n_{1}-1} = \frac{e}{2C_{eq}} [-(2n-1)e + 2(q_{0} + C_{G}V_{GS}) - 2V_{ds}(C_{2} + C_{G})] \end{cases}$$
(2.22)

Jonction 2 :

$$\begin{cases} si \ n_{2} \to n_{2} + 1 \ alors \ n \to n - 1 \\ \Delta E_{n_{2}+1} = \frac{e}{2C_{eq}} \left[-(2n-1)e + 2(q_{0} + C_{G}V_{GS}) + 2V_{ds}C_{1} \right] \\ si \ n_{2} \to n_{2} - 1 \ alors \ n \to n + 1 \\ \Delta E_{n_{2}-1} = \frac{e}{2C_{eq}} \left[+(2n+1)e - 2(q_{0} + C_{G}V_{GS}) - 2V_{ds}C_{1} \right] \end{cases}$$
(2.23)

Les seules transitions viables sont celles pour lesquelles il y a abaissement de l'énergie, i.e. les transitions pour lesquelles $\Delta E < 0$ Nous trouvons:

$$\begin{cases} \Delta E_{n_{2}+1} < 0 \Longrightarrow V_{ds} < \frac{(2n-1) e - 2 (q_{0} + C_{G} V_{GS})}{2C_{1}} \\ \Delta E_{n_{2}-1} < 0 \Longrightarrow V_{ds} > \frac{(2n+1) e - 2 (q_{0} + C_{G} V_{GS})}{2C_{1}} \\ \Delta E_{n_{1}+1} < 0 \Longrightarrow V_{ds} < \frac{-(2n+1) e + 2 (q_{0} + C_{G} V_{GS})}{2(C_{2} + C_{G})} \\ \Delta E_{n_{1}-1} < 0 \Longrightarrow V_{ds} > \frac{-(2n-1) e + 2 (q_{0} + C_{G} V_{GS})}{2(C_{2} + C_{G})} \end{cases}$$

$$(2.24)$$

A partir des transitions possibles, on observe que la charge parasite inconnue et pour éviter ce problème, on peut alors définir une tension effective de grille $V'_G = \frac{q_0}{c_G} + V_{GS}$. On retrouve les transitions possibles:

$$\begin{cases} \Delta E_{n_{2}+1} < 0 \implies V_{ds} < \frac{(2n-1)e-2C_{G}V_{G}'}{2C_{1}} \\ \Delta E_{n_{2}-1} < 0 \implies V_{ds} > \frac{(2n+1)e-2C_{G}V_{G}'}{2C_{1}} \\ \Delta E_{n_{1}+1} < 0 \implies V_{ds} < \frac{-(2n+1)e+2C_{G}V_{G}'}{2(C_{2}+C_{G})} \\ \Delta E_{n_{1}-1} < 0 \implies V_{ds} > \frac{-(2n-1)e+2C_{G}V_{G}'}{2(C_{2}+C_{G})} \end{cases}$$

$$(2.25)$$

Pour simplifier le problème et obtenir un modèle très simple, on suppose que $C_1 = C_2 = C$ et la tension de la grille est nulle, alors on retrouve les transitions possibles qu'ils sont en fonctions du nombre d'électrons présents dans le point.

$$\begin{cases} \Delta E_{n_2+1} < 0 \Longrightarrow V_{ds} < \frac{(2n-1)e}{2C} \\ \Delta E_{n_2-1} < 0 \Longrightarrow V_{ds} > \frac{(2n+1)e}{2C} \\ \Delta E_{n_1+1} < 0 \Longrightarrow V_{ds} < \frac{-(2n+1)e}{2C} \\ \Delta E_{n_1-1} < 0 \Longrightarrow V_{ds} > \frac{-(2n-1)e}{2C} \end{cases}$$

$$(2.26)$$

Pour n = 0, on observe dans la figure (2.2), qu'il y a une zone de blocage des électrons, où aucun courant ne peut circuler alors, I_{ds} = 0.



Figure 2.2: transitions possibles pour n = 0 [24].

pour les transitions possibles, on peut déterminer la tension de seuil $V_{d,seuil}$:

$$\left|V_{d,seuil}\right| < \frac{e}{2C} \tag{2.27}$$

pour le cas n est différent de zéro, la figure (2.3) présente les transitions possibles des électrons, on observe qu'il y a une zone non stable parce que quand la valeur de tension appliquée dans l'intervalle [(2n-1)/2C : (2n+1)/2C] seule un électron sorte par la jonction 1 ou 2, donc le courant est nul mais pour que les deux jonctions soient passante on doit appliquer une tension égale ou supérieure à la valeur du seuil (inférieur pour la tension V_{ds} négative).



Figure 2.3: Transitions possibles pour n quelconque.

La tension de seuil des transitions possibles pour n quelconque devient:

$$V_{d,seuil} = \frac{(2n+1)e}{2C} n \in \mathbb{Z}$$
(2.28)

Les valeurs des différentes tensions de seuil, correspondant au passage possible d'un électron supplémentaire dans l'îlot, prennent la forme très simple suivante :

$$V_{d,seuil} = \dots, \frac{-3e}{2C}, \frac{-e}{2C}, \frac{e}{2C}, \frac{3e}{2C}, \dots = \frac{(2n+1)e}{2C}n \in \mathbb{Z}$$
 (2.29)

Si $C_1 \neq C_2$, la tension de seuil à partir de laquelle le premier électron peut effectivement passer dans l'îlot est définie par la plus grande des 2 capacités

$$V_{d,seuil_{\pm 1}} = \pm \min\left[\frac{e}{2C_1}, \frac{e}{2C_2}\right]$$
 (2.30)

maintenant on retrouve les transitions possibles précédentes (Equations 2.25) pour les zones de blocage d'électrons en fonction des variables (V_{ds} , V'_{G} , n). La figure (2.4) présente les différentes droites de limite représentant les transitions viables données par le système de l'équation (2.25), en fonction du nombre *n* d'électrons présents dans le point quantique à température 0 K. Pour une tension de drain donnée, inférieure au premier seuil, l'action de la

tension grille effective permet alternativement le passage puis le blocage des électrons. Ainsi, nous constatons que pour des valeurs demi-entières de (e/C_G) de la tension de grille V'_G :

$$V_{G}^{'} = \dots, \frac{-3e}{2C_{G}}, \frac{-e}{2C_{G}}, \frac{2e}{2C_{G}}, \frac{3e}{2C_{G}}, \dots = \frac{(2k+e)}{2C_{G}} \ \forall \ k \in \mathbb{Z}$$
(2.31)

On observe bien que les zones colorées correspondent aux différentes zones de blocage des électrons et leur nombre est fixé dans chaque zone, donc le courant est nul, la forme de ce diagramme qu'on appelle « diamant de Coulomb». Autour de cette zone, le blocage des électrons disparaît et les électrons passent à travers la barrière de potentiel quand on applique la tension V_{sd} .



Figure 2.4: diagramme de stabilité pour n quelconque et $C_1 = C_2$ [24].

Les dimensions des diamants, ainsi que leurs pentes dépendent de couplage capacitif entre le point et les électrodes. A une tension de drain de 0V, la diagonale de diamants est: $\Delta V_G = e / C_G$.La mi-hauteur des diamants est $\Delta V_{ds} = e / C_{eq}$ (voir la figure 2.5).



Figure2.5: Diagramme de stabilité pour n=0.

Cette étude nous a donc permis, grâce à un modèle très simple, de connaître les différents seuils de tension à partir desquels un nouvel électron peut rentrer dans l'îlot ; reste maintenant à décrire le comportement dynamique des électrons c'est-à-dire à déterminer la caractéristique courant / tension du dispositif.

2.3 Diagramme de stabilité de l'énergie:

La théorie du blocage de coulomb a été construite par plusieurs groupes [64], dans différents régimes; linéaire ($V_{ds} \approx 0$) et non linéaire ($V_{ds} \neq 0$).La quantification des niveaux énergétiques dans le point quantique est non négligeable et les niveaux électroniques sont équidistants de ΔE , sauf pour le premier niveau vide qui est séparé du dernier niveau occupé par $\Delta E + \frac{e^2}{c_{\Sigma}}$. Cette séparation représente l'énergie qu'il faut fournir pour rajouter un électron dans le point. Par l'effet de la polarisation des électrodes (source - drain), le transport électronique se fait par un ou plusieurs niveaux énergétiques du point et la polarisation de grille permet de translater le potentiel électrostatique du point, ainsi défiler les différents niveaux du point dans la fenêtre énergétique $e \cdot V_{ds}$ ouverte entre la source et le drain considérant le cas $e \cdot V_{ds} \ll \Delta E$. Cela veut dire qu'il ne peut y avoir au maximum qu'un seul niveau énergétique du point qui se trouve entre la fenêtre énergétique $\mu_d - \mu_s = e \cdot V_{ds}$.

Le passage électronique dans ce cas est la réponse linéaire d'un point quantique à des niveaux non dégénéré. Quand le premier niveau énergétique vide va dans la fenêtre entre les niveaux de Fermi de la source et du drain, le passage d'un électron est possible de la source vers du point par effet tunnel. Le remplissage de ce niveau apporte une énergie supplémentaire de $\frac{e^2}{C_{\Sigma}}$. Les niveaux du point sont donc augmentés par cette même énergie. Le dernier niveau occupé se trouve à une énergie supérieure au niveau de potentiel chimique du drain, donc le passage est possible. Ensuite, le système retrouve son état initial. Chaque fois que ce mécanisme de conduction se produit que la tension de grille fait rentrer un niveau énergétique entre les niveaux de Fermi de la source et du drain. La variation de la tension de grille s'écrit:

$$\Delta V_G = \frac{e^2}{c_{\Sigma}} + \frac{\Delta E \cdot C_G}{e \cdot c_{\Sigma}}$$
(2.32)

Considérant maintenant le cas $e. V_{ds} > \Delta E$, plusieurs niveaux énergétiques peuvent participer au transport électronique et les niveaux du point sont remplis un par un comme les orbitales d'un atome.

2.3.1 Effet de la température:

- Cas: ΔE , $\frac{e^2}{c_{\Sigma}} \ll K_B T$

Quand la distance entre niveaux à une particule du point quantique est inférieure à l'énergie thermique $\Delta E \ll K_B T$. Dans ce cas, le spectre n'est pas résolu et on peut considérer que les électrons occupent un continuum d'états et sa densité d'électrons est élevée dans le point donc dans ce cas, il n'y a pas de blocage de coulomb dû à l'excitation thermique.

- Cas:
$$\Delta E \ll K_B T \ll \frac{e^2}{c_{\Sigma}}$$

Le transport est correctement décrit en prenant en compte seulement deux états de charge du point (n et n+1 par exemple), dans ce cas, le blocage de Coulomb s'appelle classique et séquentiel, puisque la charge du point ne peut pas varier de plus d'une unité, la conductance s'écrit par:

$$G = \frac{1}{2} \frac{G_s G_d}{G_s + G_d} \frac{\frac{e\alpha V_g}{K_B T}}{\sinh\left(\frac{e\alpha V_g}{K_B T}\right)}$$
(2.33)

Où $\alpha = \frac{C_G}{C_{\Sigma}}$. G_s et G_D sont les conductances tunnel de la source et du drain respectivement. On définie la conductance tunnel de la source pour transport des électrons de la source vers du point quantique à travers la barrière de potentiel par la relation suivante:

$$G_{s \to point} = \frac{e^2}{M} 4\pi^2 \rho_s \rho_{point}$$
(2.34)

où ρ_s et ρ_{point} sont la densité d'état de la source et du point respectivement et Mest l'élément de matrice de l'Hamiltonien tunnel qui couple les états dans le réservoir et dans le point.

La figure (2.6) présente la variation de la conductance en fonction de la température. Pour des basses températures (courbes a, b), le pic s'élargit, ce qui se traduit par le fait qu'il y'a de plus en plus d'états autour du niveau de Fermi participent au transport. Son amplitude reste constante, à $\frac{1}{2} \frac{G_s G_d}{G_s + G_d}$, mais quand la température augmente, la conductance augmente et les

pics sont de plus en plus aplatis, jusqu'à leur disparition totale.



Figure 2.6: Blocage de Coulomb et l'effet de la température pour le cas classique. Les paramètres pour le cas classique sont : $\Delta E=0.01e^2/C$ et $k_BT/\Delta E$: 0.075(a); 0.15(b); 0.3(c); 0.4(d); 1(e) et 2(f)[63].

Cas: $K_BT \ll \Delta E \ll E_C$ -

Dans ce cas, l'écart entre niveaux est grand, un seul de ces niveaux est à considérer dans le régime linéaire. À la différence du transport classique qu'on a traité dans la partie précédente, le transport est maintenant résonant. La quantification du spectre de l'îlot impose l'énergie de l'électron qui peut y être transférée. Ce couplage du niveau à l'extérieur provoque en fait un

élargissement intrinsèque de celui-ci. Son énergie caractéristique est liée à son temps de vie, qui dépend du taux Γ du transfert d'électrons par effet tunnel sur ce niveau.

$$\Gamma = \hbar \Gamma \tag{2.35}$$

Dans un premier temps, on peut supposer que cet élargissement est inférieur à l'énergie thermique $\Gamma \ll K_B T$. Cela implique qu'on peut modéliser l'état du système par un nombre (entier) qui indique l'occupation de chaque niveau. Le transport se fait par effet tunnel résonant thermiquement élargi. Si le niveau est non dégénéré, la conductance est donné par:

$$G = \frac{1}{4} \frac{e^2}{K_B T} \frac{\Gamma_s \Gamma_d}{\Gamma_s + \Gamma_d} \frac{1}{\cosh\left(\frac{e\alpha \ Vg}{2K_B T}\right)}$$
(2.36)

Dans ce cas, le maximum du pic de la conductance diminue rapidement avec l'augmentation de la température, alors qu'elle est constante dans le cas classique. Ceci différentie un pic classique d'un pic quantique. Dans la figure (2.7), un pic de conductance quantique est suivi pendant l'augmentation de la température.



Figure 2.7: Blocage de Coulomb et l'effet de la température pour le cas du point quantique. $(\Delta E=0.01e^2/C \text{ etk}_BT/\Delta E : 0.5(a) ; 1(b) ; 7.5(c) \text{ et } 15(d)) [63].$

Le pic devient de plus en plus large et sa valeur maximale diminue avec l'augmentation de la température. Pour le blocage de Coulomb dans un point quantique, l'amplitude des pics diminue avec l'augmentation de la température et ils deviennent de plus en plus larges. Dans le cas, $\Delta E \gg \Gamma \gg K_B T$, la forme du pic reflète l'élargissement intrinsèque du niveau, la conductance s'écrit:

$$G = g \frac{e^2}{h} \frac{\Gamma_s \Gamma_d}{\Gamma_s + \Gamma_d} \frac{\Gamma}{\left(\frac{e\alpha V g}{h}\right)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}$$
(2.37)

Avec $\Gamma = \Gamma_s + \Gamma_d$ et g est la dégénérescence du niveau. La hauteur du pic sature donc au maximum à e^2/h . Cette valeur limite diminue en cas de couplage asymétrique aux barrières.

2.3.2 Effet du champ magnétique:

L'Hamiltonien d'un spin d'électron soumis à un champ magnétique externe \vec{B} est donné par:

$$H = \frac{1}{2} g \mu_B \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$$
(2.38)

Où *g* est le facteur de Landé du spin, μ_B est le magnéton de Bohr, $\vec{\sigma}$ est le vecteur de matrice de Pauli. On définit $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ avec de composant suivant:

$$\begin{cases} \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{bmatrix} \\ \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i\\ i & 0 \end{bmatrix} \\ \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$
(2.39)

Dans cette section, nous expliquons l'effet du champ magnétique sur le diagramme de stabilité d'énergie. Quand, on applique un champ magnétique B sur un dispositif à double barrière. L'énergie totale dans le point quantique s'écrit:

$$E = \frac{1}{2C_{eq}} \left[C_1 C_2 V_{ds}^2 + C_1 C_G (V_{ds} - V_G)^2 + C_2 C_G^2 V_G^2 + (ne - q_0)^2 \right] + \frac{e}{C_{eq}} \left[(n_1 (C_2 + C_G) + n_2 C_1) V_{ds} - n C_G V_G \right] + \sum_{i=1}^n \varepsilon_i(B)$$
(2.40)

Le dernier terme de l'équation représente la somme des états énergétiques occupés par des électrons et qui dépend du potentiel de confinement. Le potentiel électrochimique dans le point quantique en fonction de champ magnétique B est donné par:

$$\mu_{dot}(n) = \frac{e}{C_{eq}} \left[\frac{e}{2} + (ne - q_0) + (C_2 + C_G)V_{ds} - C_G V_G \right] + \varepsilon_n$$
(2.41)

Où ε_n représente le niveau haut de l'orbite occupé pour (n) électrons, dans cette équation, on observe que le potentiel électrochimique contient une partie électrostatique et une partie chimique. L'énergie nécessaire pour ajouter un électron est donnée par:

$$\Delta \mu(n) = \mu_{dot}(n) - \mu_{dot}(n-1) = \frac{e^2}{2C_{eq}} + \varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}$$
(2.42)

Pour un petit voltage de V_{ds}, nous avons donc un pic de conductance à chaque fois que $\mu_N \approx \mu_S \approx \mu_D$ et par résolution de (2.41), nous trouvons que les positions des pics sont données parla relation suivante:

$$V_g^n = \frac{1}{e\alpha_g} \left[\varepsilon_n + \frac{e^2}{C_{eq}} \left(n - \frac{1}{2} \right) - e \left(\alpha_s V_s + \alpha_d V_d + \alpha_g V_g \right) - \mu_s \right]$$
(2.43)

Où $\alpha_g = \frac{C_g}{C_{eq}}$ appelée paramètre de levier. C'est un paramètre indispensable à l'expérimentateur. En effet, c'est avec le potentiel de grille qu'on va contrôler le potentiel du point quantique et ce facteur indique l'efficacité de ce contrôle. La séparation entre deux pics est donnée par:

$$\Delta V_g^n = \frac{1}{e\alpha_g} \left(\mu_{dot} \left(n \right) - \mu_{dot} \left(n - 1 \right) \right) = \frac{1}{e\alpha_g} \left(\frac{e^2}{C_{eq}} + \varepsilon_n - \varepsilon_{n-1} \right)$$
(2.44)



Figure2.8: Pics de courant du transistor à point quantique.

Quand on applique un champ magnétique extérieur B, le spin d'électron du point quantique est influencé directement par l'énergie de Zeeman $E_Z = S_z g \mu_B B$ où S_z représente la composante en z du spin [64]. De plus, le principe d'exclusion de Pauli, interdit que deux électrons ayant des orientations de spin égale d'occuper la même orbite.

La figure (2.9) représente le schéma de diagramme de stabilité d'énergie dans le transistor SET, les transitions possibles des électrons, selon le principe d'exclusion de Pauli de la structure du point quantique est similaire à un atome artificiel.



Figure2.9: Diagramme de stabilité du blocage de Coulomb sous l'effet du champ magnétique.

Par conséquent, chaque orbite n'occupe que deux électrons. Considérons maintenant la transition d'électron sans l'effet d'excitation entre les états fondamentaux GS (n) \leftrightarrow GS (n +1) représentés par les lignes solides en figure (2.9.a) mais les lignes en pontier (vert - rouge) montrent les transitions des électrons par l'états excités sous l'effet du champ magnétique B, les niveaux d'énergies sont séparés par $\Delta E_z = \pm g\mu_B B$.

La figure (2.10. a-d) présente la mesure spectroscopique de diagramme de stabilité d'énergie sous l'effet du champ magnétique B de deux dispositifs avec deux diamètres différents A 90 nm et B 60 nm.



Figure 2.10: (a-d) Mesure spectroscopique de l'état excité en fonction du champ magnétique à deux dispositifs. La transition d'électron de n = 0à n = 1.
(g) Variation d'énergie Zeeman en fonction de B [65].

Pour la transition n = 0 à n = 1, on observe que la distance entre l'état énergétique fondamental et le premier état excité augmente avec l'augmentation du champ magnétique suivant la variation d'énergie de Zeeman $\Delta E_z = \pm g\mu_B B$, de plus, quand le diamètre des dispositifs est augmenté, la variation d'énergie d'état augmente aussi.

La méthode magnéto-spectroscopique est la plus efficace pour vérifier le remplissage de spin et mesurer l'énergie d'échange [66 - 67]. La figure (2.11.a) montre la transition $0 \leftrightarrow 1$, la ligne bleue représente la variation de l'énergie en fonction du champ magnétique avec une pente de $\left(-\frac{1}{2}g\mu_B\right)$, pour ajouter le premier électron dans le point quantique à l'état fondamental (Figure 2.11.b-c) nécessite une énergie $E_z = +\frac{1}{2}g\mu_B B$ avec un changement total de spin par $\Delta Sz = 1/2 - 0$. Pour transition $1\leftrightarrow 2$ ici, le second électron se paire avec le premier pour former un singlet dont la projection du spin est m = 0, ainsi $\Delta Sz = 0 - 1/2$ (Figure 2.11.d-f).



Figure 2.11: (a) Magnéto-spectroscopie pour une transition $(0) \leftrightarrow (1)$

et (d-f) une transition (1) \leftrightarrow (2).

La magnéto-spectroscopie est la méthode la plus efficace pour vérifier le remplissage de spin et mesurer l'énergie d'échange et elle peut être utilisée pour estimer le bras de levier d'une transition via la pente $\frac{1}{2}g\mu_B$, bien que le résultat soit souvent imprécis. Un phénomène qui peut affecter les pentes (ou les rendre courbées) est la contraction des orbitales. L'effet est plus prononcé pour les champs magnétiques perpendiculaires à l'interface [68].

2.4 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre une étude théorique sur les phénomènes physiques qui apparaît dans ce dispositif (SET) dans le cas statique et dynamique tels que le blocage du Coulomb, l'oscillation de Coulomb. De plus on a étudié l'effet du champ magnétique sur le blocage de Coulomb. Dans la suite, nous nous intéressons aux méthodes numériques utilisées dans ce travail.

Méthode des volumes finis dans le cas cartésien

3.1 Introduction

Les phénomènes physiques sont souvent décrits par des équations aux dérivées partielles (EDP) parfois non linéaires, complexes à résoudre par des méthodes analytiques (conditions aux limites, géométries complexes et des hypothèses moins fortes). On emploi alors des méthodes d'approximations numériques pour transformer ces (EDP) en système d'équations algébriques qui peuvent être alors résolus numériquement. On peut citer comme méthodes connues : la méthode des différences finies, la méthode des éléments finis (MEF) et la méthode des volumes finis (MVF).

La méthode des volumes finis (MVF) est facile à concevoir contrairement à la MEF et elle peut être appliquée à des géométries complexes contrairement à la MDF. Pour cela nous avons opté pour cette méthode.

On va présenter dans ce chapitre la méthode des volumes finis de chacune des équations étudiées dans le cas cartésien unidimensionnel et bidimensionnel.

3.2Méthodes de discrétisation

L'utilisation des méthodes numériques de discrétisation consiste à ramener la résolution du système d'équations différentielles dans le domaine d'étude, comptes tenu des conditions aux limites, à celle d'un système d'équations algébriques dont la solution conduit à la détermination de l'énergie potentielle et de la densité des électrons, etc.

3.2.1 Méthode des différences finis (MDF)

La méthode des différences finies MDF consiste à subdiviser le domaine d'étude en un nombre déterminé des nœuds et à représenter la fonction étudiée en chacun des nœuds du domaine par une série de Taylor. Ainsi, l'équation différentielle est transformée en équation algébrique pour chaque nœud. L'écriture de cette transformation pour tous les nœuds du maillage conduit à un système algébrique dont la solution permet d'obtenir la distribution de l'inconnue dans le domaine d'étude. De mise en œuvre simple, cette méthode s'adapte mal aux objets de géométrie complexe à cause de la rigidité du maillage. D'autre part elle ne permet pas la prise en compte des conditions de passage d'un milieu physique à un autre et de non linéarités (saturation ...etc.), cela nécessite un traitement spécifique.

3.2.2 Méthodes des éléments finis (MEF)

Le principe fondamental de la méthode des éléments finis consiste à :

- Définir une partition du domaine d'étude, c'est-à-dire subdiviser le domaine d'étude en régions élémentaires (Eléments finis).
- Représenter la fonction inconnue sur chacun de ces éléments par une approximation polynomiale.
- Construire les formes intégrales.
- Minimiser l'intégrale.
- Une organisation matricielle des calculs.
- Une résolution du système algébrique.

La MEF est une méthode très puissante pour la résolution des équations différentielles surtout dans les géométries complexes. Sa mise en œuvre par contre, est assez compliquée et nécessite une place mémoire assez importante.

3.2.3 Méthode des volumes finis (MVF)

La méthode des volumes finis est une version spéciale de la méthode des résidus pondérés où la fonction de projection est égale à l'unité [35].Cette méthode consiste à subdiviser le domaine d'étude en volumes élémentaires de telle manière que chaque volume entoure un nœud. L'équation différentielle est projetée sur une fonction de projection bien déterminée et ensuite est intégrée dans chacun des volumes élémentaires. Pour calculer l'intégrale dans ce volume élémentaire, la fonction inconnue est représentée à l'aide d'une fonction d'approximation (linéaire, parabolique, puissance, exponentielle etc.), entre deux nœuds consécutifs. Ensuite, la forme intégrale est discrétisée dans le domaine d'étude. Le résultat de discrétisation donne une équation algébrique qui est constituée par les valeurs

nodales. Pour bien comprendre la principale de la MVF, on va donner des exemples illustratifs

3.3 Exemples illustratifs de la MVF

3.3.1 Formulation monodimensionnelle de l'équation de Poisson

La figure (3.1) présente le domaine d'étude qui est subdivisé en un nombre fini de nœuds. Chaque volume fini entoure un nœud principal "P". Les nœuds voisins sont "E" côté Est et "W" côté Ouest. Les linges en tirés représentent les faces du volume fini côté Est et côté Ouest



Figure 3.1: Volume fini unidimensionnel.

Considérons l'équation de poisson dans le cas monodimensionnel.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial x} \right) + \rho = 0 \tag{3.1}$$

Pour le problème à une dimension, le volume fini à une dimension.

$$\Delta V = \Delta x. 1.1 \tag{3.2}$$

Dans cet exemple la fonction de projection est prise égale à l'unité. L'équation (3-1) est intégrée sur le volume correspondant au point « P », on obtient :

$$\int_{w}^{e} \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial x} \right) dx + \int_{w}^{e} \rho \, dx = 0$$
(3.3)

Après intégration on aura :

$$\left(\varepsilon\frac{\partial V}{\partial x}\right)_{e} - \left(\varepsilon\frac{\partial V}{\partial x}\right)_{w} + (\rho x)_{e} - (\rho x)_{w} = 0$$
(3.4)

Un profil linéaire est choisi afin d'exprimer la variation du potentiel entre les nœuds voisins et on suppose que φ est homogène sur le volume fini, ainsi on a :

$$\left[\left(\varepsilon_{\rm e} \frac{V_{\rm E} - V_{\rm P}}{\Delta x_{\rm e}}\right) - \left(\varepsilon_{\rm w} \frac{V_{\rm P} - V_{\rm w}}{\Delta x_{\rm w}}\right)\right] + \rho_{\rm P} \Delta x = 0$$
(3.5)

Tels que :

 V_P : Potentiel électrique au nœud P

 V_E : Potentiel électrique au nœud E

- V_{W} : Potentiel électrique au nœud W
- $(\Delta x)_e$: Distance entre les nœuds P et E
- $(\Delta x)_{w}$: Distance entre les nœuds W et P

Δx : Longueur de volume fini

Ainsi l'équation algébrique finale s'écrit sous la forme :

$$a_{p}V_{p} = a_{e}V_{e} + a_{w}V_{w} + S_{p}$$
 (3.6)

Avec :

$$a_{e} = \frac{\varepsilon_{e}}{(\delta x)_{e}}$$
$$a_{w} = \frac{\varepsilon_{w}}{(\delta x)_{w}}$$
$$a_{p} = a_{a} + a_{w}$$
$$S_{p} = \rho_{p} \Delta x$$

Finalement, on obtient une équation algébrique qui lie chaque nœud principal « P » avec les nœuds voisins « E » et « W ». Si la discrétisation du domaine comporte N nœuds. On est

amené à résoudre un système de N équations à N inconnus. Le système obtenu sera résolu par des méthodes numériques de résolution (directes ou itératives).

3.3.2 Formulation monodimensionnelle de l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger dans le cas monodimensionnel s'écrit:

$$\frac{-\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right) \right) + V \psi = E \psi$$
(3.7)

Intégrons cette équation sur le volume fini limité par les interfaces (e, w)

$$\frac{-\hbar^2}{2} \left[\int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right) \right) \right] dx + \int_w^e V \psi \ dx = \int_w^e E \psi \ dx \tag{3.8}$$

De la même manière que l'équation de Poisson, on choisit un profil linéaire. L'intégration de l'équation (3.9) donne

$$\frac{-\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m_e^*} \left(\frac{\psi_{\rm E} - \psi_{\rm P}}{\Delta x_{\rm e}} \right) - \frac{1}{m_w^*} \left(\frac{\psi_{\rm P} - \psi_{\rm W}}{\Delta x_{\rm w}} \right) \right] + V_{\rm P} \psi_{\rm P} \Delta x = E \psi_{\rm P} \Delta x$$
(3.9)

Ainsi l'équation finale s'écrit sous la forme

$$a_p \psi_P - a_e \psi_E - a_w \psi_w = E \psi_P \tag{3.10}$$

Avec:

$$a_{e} = \frac{\hbar^{2}}{2 m_{e}^{*} \Delta x_{e} \Delta x}$$
$$a_{w} = \frac{\hbar^{2}}{2 m_{w}^{*} \Delta x_{w} \Delta x}$$

$$a_p = a_e + a_w + Vp$$

Le résultat obtenu représente une équation algébrique liant l'inconnue au nœud principal "p" aux inconnus aux nœuds voisins "W", "E". On remarque que cette équation algébrique ne contient pas le terme source S_p.

3.4 Méthode des volumes finis dans le cas bidimensionnel

La formulation monodimensionnelle de la méthode des volumes finis illustrée dans l'exemple précédent peut être étendue au cas bidimensionnel [14]. La formulation bidimensionnelle consiste à subdiviser le domaine d'étude (Ω) en un nombre d'éléments finis. Chaque élément contient quatre nœuds. Un volume fini entoure chaque nœud figure (3.2).



Figure 3.2:Discrétisation en volumes finis du domaine d'étude dans le cas bidimensionnel.

La figure (3.3) présente la description d'un volume fini, chaque nœud principale « P » est entouré par quatre nœuds voisins celui du Nord « N », du Sud « S » (sur l'axe vertical z), de l'Ouest « W », et de l'Est « E » (sur l'axe horizontal r).Les lignes en tirés représentent les faces du volume fini limité par les points (e : est, w : ouest, n : nord, s : sud)



Figure 3.3: Description bidimensionnel d'un volume fini.

3.4.1 Formulation de l'équation de Poisson

L'équation de Poisson dans le cas des coordonnées cartésiens est :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial y} \right) = -\rho \tag{3.11}$$

Pour résoudre cette équation, nous appliquons la méthode des volumes finis. On intègre cette équation dans le plan (sur la surface) sur le volume fini correspondant au nœud P, et délimité dans ce cas par les frontières(e, w, n, s) on obtient :

$$\iint_{w s}^{e n} \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial x} \right) dx dy + \iint_{w s}^{e n} \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial y} \right) dx dy = \iint_{w s}^{e n} -\rho dx dy$$
(3.12)

On nomme :

$$(1) = \iint_{w s}^{e n} \frac{\partial}{\partial x} \left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial x} \right) dx dy + \iint_{w s}^{e n} \frac{\partial}{\partial y} \left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial y} \right) dx dy = \iint_{w s}^{e n} -\rho \, dx dy$$
(3.13)

$$(2) = \iint_{\rm ws}^{\rm en} -\rho \, \mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{3.14}$$

L'intégration de la partie (1) est :

$$(1) = \left[\left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial x} \right)_{e} - \left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial x} \right)_{w} \right] \Delta y + \left[\left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial y} \right)_{n} - \left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial y} \right)_{s} \right] \Delta x$$
(3.15)

Un profil linéaire a été choisi pour exprimer la variation de potentiel V entre les nœuds voisins. Le résultat obtenu est constitué uniquement par les valeurs nodales.

$$\left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial x}\right)_{e} = \varepsilon_{e} \frac{V_{E} - V_{p}}{(\delta x)_{e}}$$
$$\left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial x}\right)_{w} = \varepsilon_{w} \frac{V_{p} - V_{w}}{(\delta x)_{w}}$$
$$\left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial y}\right)_{n} = \varepsilon_{n} \frac{V_{N} - V_{p}}{(\delta y)_{n}}$$
$$\left(\varepsilon \frac{\partial V}{\partial y}\right)_{s} = \varepsilon_{n} \frac{V_{p} - V_{s}}{(\delta y)_{s}}$$

L'intégral de la partie (2) est :

$$(2) = -\rho_P \Delta x \Delta y \tag{3.16}$$

Avec :

 ρ est supposée homogène dans le volume fini.

Ainsi l'équation algébrique finale s'écrit sous la forme :

$$a_p V_p = a_E V_E + a_W V_W + a_S V_S + a_N V_N + S_p$$
(3.17)

Avec :

 $a_E = \varepsilon_e \frac{\Delta x}{\Delta x_e}$

 $a_N = \varepsilon_n \frac{\Delta x}{\Delta x_n}$

 $a_W = \varepsilon_w \frac{\Delta x}{\Delta y_w}$

$$a_S = \varepsilon_s \frac{\Delta x}{\Delta y_s}$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S$$

$$S_P = \rho_P \Delta x \Delta y$$

Le résultat obtenu représente une équation algébrique reliant l'inconnue au nœud principal « P » aux inconnues aux nœuds voisins « W », « E », « S » et « N ».

La résolution de cette équation passe par la connaissance des conditions aux limites. Il existe deux types de conditions :

• conditions de type Dirichlet :

Les conditions de type Dirichlet non homogène sont imposées aux contacts tel que la fonction potentielle doit être spécifiée sur les contacts :

$$V = V_1 \tag{3.18}$$

• Les conditions de Newman

Les conditions de type Neumann sont imposées aux autres limites de la structure, c'est-àdire la dérivée normale sur ces limites est nulle :

$$\left. \frac{\partial V}{\partial n} \right| = 0 \tag{3.19}$$

Pour trouver la densité de charge des donneurs ionisés, on a négligé l'ionisation thermique des donneurs, cette propriété est justifiée puisque dans l'expérimentation, le transistor à point quantique fonctionne à basse température. On a appliqué une tension très faible sur le drain V_{ds} , pour ionisation, alors la densité de charge des donneurs ionisés est donné par :

$$\rho = \begin{cases} e(N_D^+ - n), & U(x, y) \ge eV_{ds} \\ e(n), & U(x, y) < eV_{ds} \end{cases}$$
(3.20)

3.5 Formulation unidimensionnelle de l'équation de Schrödinger sous l'effet du champ magnétique

Nous considérons un point quantique défini dans un nanofil décrit par un Hamiltonien tridimensionnel:

$$h = \frac{P^2}{2m^*} + V(r) + H_{SO} + \frac{1}{2}g\mu_B B.\sigma$$
(3.21)

Où m^* est la masse effective d'électron, et P présent la potentiel vectoriel et donné par :

$$P = -i\hbar\nabla + eA \tag{3.22}$$

Considérant la jauge symétrique, nous avons obtenu ce qui suit:

$$A = B(z\sin\Phi, -z\cos\Phi, y\cos\Phi - x\sin\Phi)$$
(3.23)

Où σ détermine la matrice de Pauli, le potentiel de confinement que nous prenons sous une forme séparable:

$$U(r) = V_L(x) + V(y,z) + |e|.E.r$$
(3.24)

Avec E est le champ électrique externe. Nous supposons que le champ électrique est appliqué sur la direction (oz). Dans ce travail, nous avons appliqué le champ magnétique B aligné dans le plan (xoy) avec un angle entre et l'axe x, le terme Zeeman signifie l'expression suivante:

$$\frac{1}{2}g\mu_B B.\sigma = \frac{1}{2}g\mu_B B(\sigma_z \cos\Phi + \sigma_y \sin\Phi)$$
(3.25)

On décrit l'interaction Spin-orbite (SO) qui résulte de l'asymétrie d'inversion de structure par l'interaction de Rashba SO et nous tenons compte du couplage par:

$$H_{SO} = \alpha_0 \frac{\partial V}{\partial r} (\sigma \times k) = \alpha (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x)$$
(3.26)

Où $\alpha = \alpha_0 E_z$.

Dans ce travail, on a résolu l'équation Schrödinger unidimensionnel suivant l'axe x. Un tel système est décrit par le Hamiltonien:

$$h_{1D} = \frac{\hbar^2 K_x^2}{2m^*} + V_L(x) - \alpha \sigma_y K_x + \frac{1}{2} y \mu_\beta B (\sigma_x \cos \phi + \sigma_y \sin \phi)$$
(3.27)

 $\operatorname{Ou} K_x = -i \frac{\partial}{\partial x}$

Quand on applique le champ magnétique B, le niveau d'énergie est séparé, alors il apparaît l'effet de spin et la fonction d'onde est décrite par le spineur $\psi = \begin{pmatrix} \psi_+ \\ \psi_- \end{pmatrix}$ dans ce cas l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\frac{-\hbar^{2}}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^{*}} \left(\frac{\partial \psi_{+}}{\partial x} \right) \right) \right) + V_{L}(x) \psi_{+} + \alpha \frac{\partial \psi_{-}}{\partial x} + \frac{1}{2} g \mu_{B} B \cos \phi \psi_{-}$$

$$- \frac{i}{2} g \mu_{B} B \sin \phi \psi_{-} = E \psi_{+} \qquad (3.28)$$

$$\frac{-\hbar^{2}}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^{*}} \left(\frac{\partial \psi_{-}}{\partial x} \right) \right) \right) + V_{L}(x) \psi_{-} - \alpha \frac{\partial \psi_{+}}{\partial x} + \frac{1}{2} g \mu_{B} B \cos \phi \psi_{+}$$

$$+ \frac{i}{2} g \mu_{B} B \sin \phi \psi_{+} = E \psi_{-} \qquad (3.29)$$

Après des simplifications, on se trouve :

$$\frac{-\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \left(\frac{\partial \psi_+}{\partial x} \right) \right) \right) + V_L(x) \psi_+ + \alpha \frac{\partial \psi_-}{\partial x} + \frac{1}{2} g \,\mu_B B \,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\emptyset} \,\psi_- = E_+ \psi_+ \quad (3.30)$$

$$\frac{-\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \left(\frac{\partial \psi_-}{\partial x} \right) \right) \right) + V_L(x) \psi_- - \alpha \frac{\partial \psi_+}{\partial x} + \frac{1}{2} g \,\mu_B B \,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\emptyset} \,\psi_+ = E_- \psi_- \quad (3.31)$$

On suppose que : $\lambda = \frac{1}{2}g \ \mu_B B$

$$\frac{-\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \left(\frac{\partial \psi_+}{\partial x} \right) \right) \right) + V_L(x) \psi_+ + \alpha \frac{\partial \psi_-}{\partial x} + \lambda e^{-i\emptyset} \psi_- = E_+ \psi_+$$
(3.32)

$$\frac{-\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^*} \left(\frac{\partial \psi_-}{\partial x} \right) \right) \right) + V_L(x) \psi_- - \alpha \frac{\partial \psi_+}{\partial x} + \lambda e^{i\emptyset} \psi_+ = E_- \psi_-$$
(3.33)

On intégre ces équations :

$$\int_{w}^{e} \frac{-\hbar^{2}}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^{*}} \left(\frac{\partial \psi_{+}}{\partial x} \right) \right) \right) dx + \int_{w}^{e} V_{L}(x) \psi_{+} dx + \int_{w}^{e} \alpha \frac{\partial \psi_{-}}{\partial x} dx + \lambda e^{-i\phi} \int_{w}^{e} \psi_{-} dx = \int_{w}^{e} E_{+} \psi_{+} dx$$

$$(3.34)$$

$$\int_{w}^{e} \frac{-\hbar^{2}}{2} \left(\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m^{*}} \left(\frac{\partial \psi_{-}}{\partial x} \right) \right) \right) dx + \int_{w}^{e} V_{L}(x) \psi_{-} dx - \int_{w}^{e} \alpha \frac{\partial \psi_{+}}{\partial x} dx + \lambda e^{i\phi} \int_{w}^{e} \psi_{+} dx = \int_{w}^{e} E_{-} \psi_{-} dx$$
(3.35)

Après intégration, on se trouve :

$$\frac{-\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m^*} \left(\frac{\partial \psi_+}{\partial x} \right) \right]_w^e + V_L(x) \psi_+ \Delta x + \alpha \left[\psi_- \right]_w^e + \lambda e^{-i\emptyset} \psi_- \Delta x = E_+ \psi_+ \Delta x$$
(3.36)

$$\frac{-\hbar^2}{2} \left[\frac{1}{m^*} \left(\frac{\partial \psi_-}{\partial x} \right) \right]_w^e + V_L(x) \psi_- \Delta x - \alpha [\psi_+]_w^e + \lambda e^{i\phi} \psi_+ \Delta x = E_- \psi_- \Delta x$$
(3.37)

Un profil linéaire a été choisi pour exprimer la variation de fonction d'état ψ_+ entre les nœuds voisins. Le résultat obtenu est constitué uniquement par les valeurs nodales.

$$\frac{-\hbar^{2}}{2} \left[\frac{1}{m_{e}^{*}} \left(\frac{(\psi_{E^{+}}) - (\psi_{P^{+}})}{\Delta x \Delta x_{e}} \right) - \frac{1}{m_{w}^{*}} \left(\frac{(\psi_{P^{+}}) - (\psi_{W^{+}})}{\Delta x \Delta x_{w}} \right) \right] + V_{L}(x)(\psi_{P^{+}}) + \frac{\alpha}{2 \Delta x}(\psi_{E^{-}}) - \frac{\alpha}{2 \Delta x}(\psi_{W^{-}}) + \lambda e^{-i\emptyset}(\psi_{P^{-}}) = E_{+}(\psi_{P^{+}})$$
(3.38)

Ainsi l'équation algébrique finale s'écrit sous la forme:

$$a_{E^{+}}(\psi_{E^{+}}) + a_{W^{+}}(\psi_{W^{+}}) + a_{P^{+}}(\psi_{P^{+}}) + a_{E^{-}}(\psi_{E^{-}}) + a_{W^{-}}(\psi_{W^{-}}) + a_{P^{-}}(\psi_{P^{-}}) = E_{+}(\psi_{P^{+}})$$
(3.39)

Avec :

$$a_{E^{+}} = \frac{-\hbar^{2}}{2 m_{e}^{*} \Delta x_{e} \Delta x}$$

$$a_{E^{-}} = \frac{\alpha}{2\Delta x}$$

$$a_{w^{+}} = \frac{-\hbar^{2}}{2 m_{w}^{*} \Delta x_{w} \Delta x}$$

$$a_{w^{-}} = -\frac{\alpha}{2\Delta x}$$

$$a_{p^{+}} = -(a_{E^{+}} + a_{w^{+}}) + V_{L}(x)$$

$$a_{p^{-}} = \lambda e^{-i\emptyset}$$

Le résultat obtenu représente une équation algébrique reliant l'inconnue au nœud principal « P » aux inconnues aux nœuds voisins « W », « E », « S » et « N ». De la même manière, on trouve l'équation algébrique suivante:
$$\frac{-\hbar^{2}}{2} \left[\frac{1}{m_{e}^{*}} \left(\frac{(\psi_{E^{-}}) - (\psi_{P^{-}})}{\Delta x \, \Delta x_{e}} \right) - \frac{1}{m_{w}^{*}} \left(\frac{(\psi_{P^{-}}) - (\psi_{W^{-}})}{\Delta x \, \Delta x_{w}} \right) \right] + V_{L}(x)(\psi_{P^{-}}) - \frac{\alpha}{2 \, \Delta x}(\psi_{E^{+}}) + \frac{\alpha}{2 \, \Delta x}(\psi_{W^{+}}) + \lambda e^{i\emptyset}(\psi_{P^{+}}) = E_{-}(\psi_{P^{-}})$$
(3.40)

L'équation algébrique finale s'écrit sous la forme :

$$a_{E^{-}}(\psi_{E^{-}}) + a_{W^{-}}(\psi_{W^{-}}) + a_{P^{-}}(\psi_{P^{-}}) + a_{E^{+}}(\psi_{E^{+}}) + a_{W^{+}}(\psi_{W^{+}}) + a_{P^{+}}(\psi_{P^{+}}) = E_{-}(\psi_{P^{-}})$$
(3.41)

Avec :

 $a_{E^{-}} = \frac{-\hbar^{2}}{2 m_{e}^{*} \Delta x_{e} \Delta x}$ $a_{E^{+}} = -\frac{\alpha}{2 \Delta x}$ $a_{w^{-}} = \frac{-\hbar^{2}}{2 m_{w}^{*} \Delta x_{w} \Delta x}$ $a_{w^{+}} = \frac{\alpha}{2 \Delta x}$ $a_{p^{-}} = -(a_{E^{+}} + a_{w^{+}}) + V_{L}(x)$ $a_{p^{+}} = \lambda e^{i\emptyset}$

La résolution de cette équation passe par la connaissance des conditions aux limites de type Dirichlet homogène sur les limites de la structure (la fonction d'onde est nulle aux limites de la structure).

Avant de résoudre l'équation de poisson et l'équation de Schrödinger, on doit passer par des hypothèses simplificatrices.

3.6 Approximation de la masse effective

Parmi les différentes contributions au potentiel que voient les électrons, le potentiel périodique associé aux ions du cristal, c'est-à-dire le potentiel cristallin, joue évidemment un

rôle important. Les états propres et les fonctions propres correspondants sont évidemment connus, il s'agit pour les premiers de la bande de conduction et pour les secondes des fonctions de Bloch. On peut alors s'affranchir aisément de ce terme en utilisant l'approximation de la masse effective. L'électron de masse m_0 dans le potentiel cristallin, se comporte comme un électron de masse effective m^* et dont la fonction d'onde de Bloch, cet électron se déplace dans un réseau périodique supposé vide d'ions. En d'autres termes, le potentiel cristallin est représenté par le fait que l'électron a une masse effective m^* différente de la masse m_0 de l'électron libre. La périodicité de structure cristalline entraîne une périodicité de la fonction d'onde associée à l'électron qui doit satisfaire au théorème de Bloch. L'approximation de la masse effective est utilisée avec succès dans l'étude de tous les composants, cependant elle atteint ici une limite de validité dans la mesure où les électrons sont confinés dans une épaisseur de l'ordre de quelques couches atomiques [2].

La version la plus simple de l'approximation de la masse effective consiste à affecter la masse effective de la bande de conduction correspondante, supposée isotrope et parabolique. L'opérateur énergie cinétique s'écrit alors

$$T(r) = -\frac{\hbar}{2} div \left(\frac{1}{m^*} \overrightarrow{grad}\right)$$
(3.42)

3.7 Energie potentielle des électrons

Dans l'approximation de la masse effective, les fonctions de base étant les fonctions de Bloch, le potentiel cristallin disparaît. Néanmoins la résolution de l'équation de Schrödinger nécessite la connaissance du terme d'énergie potentielle U(r).

L'énergie potentielle U(r) résulte de la contribution de quelque terme et peut s'écrire sous la forme:

$$U(r) = -eV(r) + U_{im} + U_{xc} + \Delta E_c$$
(3.43)

Avec :

$$\begin{cases} U_{im} = -eV_{im} \\ U_{xc} = -eV_{xc} \end{cases}$$
(3.44)

Tels que :

V(r): Potentiel électrostatique existant dans l'équation de Poisson.

- V_{im} : Potentiel image.
- V_{xc} : Potentiel d'échange et corrélation.
- ΔE_{c} : Discontinuité de la bande de conduction de l'hétérojonction.

L'énergie potentielle image résulte de la discontinuité de la structure de la constante diélectrique à l'interface entre deux matériaux. Le potentiel d'échange de corrélation décrit les interactions entre les électrons et leurs charges images. Pour simplifier l'étude, nous avons négligé l'effet de ces deux termes, alors :

$$U(r) = -eV(r) + \Delta E_c \tag{3.45}$$

3.8 Méthode de résolution et Algorithme de couplage

3.8.1 Méthode de résolution de l'équation de poisson

L'équation algébrique résultant de la discrétisation de l'équation de poisson par la MVF est résolue par des méthodes itératives. Les conditions de type Dirichlet non homogène sont imposées sur les contacts et les conditions de type Newman sont imposées sur les autres limites.

3.8.2 Méthode de résolution d'équation de Schrödinger

L'équation algébrique résultant de la discrétisation de l'équation de Schrödinger par la MVF ne contient pas le terme source ce qui donne une solution triviale. Ce type de problème est dit problème à valeurs et à vecteurs propres. Les conditions aux limites du type Dirichlet de valeur nulle sont imposées sur les contacts et les conditions de type Newman sont imposées sur les autres limites. Cette méthode aboutie à un système symétrique $A \Psi = \lambda \Psi$, où A est une matrice symétrique. Le problème est résolu par une méthode itérative

3.8.3 Algorithme

Deux modèles de couplage existent pour la résolution des équations algébriques résultantes de la discrétisation des équations de semi-conducteurs: le modèle de couplage direct MCD (couplage fort) et le modèle de couplage alterné MCA (couplage faible).

Dans notre cas le premier modèle n'est pas utilisé à cause de la différence qui existe entre les deux types des systèmes d'équations algébriques puisque l'équation de Schrödinger est de type des problèmes de valeurs et de vecteurs propres. Pour cela on utilise le modèle de

couplage alterné MCA. Dans ce modèle les équations sont résolues d'une manière autocohérente et le couplage se fait par la substitution des donnés d'un problème à l'autre. Les termes de couplage sont: l'énergie potentielle et la densité des charges, figure (3.4).



Figure 3.4: Algorithme de Couplage Alterné MCA.

3.9 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté la méthode des volumes finis dans le cas cartésien pour résoudre les équations Schrödinger -Poisson monodimensionnel et bidimensionnel. On a utilisé le modèle de couplage alterné MCA parce que les équations sont résolues d'une manière auto-cohérente c'est-à-dire séparément et le couplage se fait par la substitution des donnés d'un problème à l'autre.



Résultats et discussions

Résultats et discussions

4.1 Introduction

Ce chapitre, est destiné à l'étude d'un transistor nanométrique à point quantique. Ce transistor a été réalisé par l'équipe de S. Nadj Perge et al [57]. Le point quantique est localisé au milieu d'un nanofil entre deux barrières tunnels. Il est déposé sur cinq grilles de potentiel. Pour l'étude de ce transistor, on a utilisé le modèle électrique capacitif en s'appuyant sur le résultat expérimental pour déterminer l'effet du blocage de Coulomb et extraire les capacitances qui sont connectées entre le point quantique et les électrodes. De plus, on a résolu les équations de Schrödinger-Poisson sous l'effet du champ magnétique pour aboutir aux propriétés électroniques du transistor à point quantique tel que : l'énergie potentielle, la densité des électrons, les fonctions d'onde...etc. Par la suite, on a déterminé l'effet Zeeman et calculé le coefficient de Landé (g), en tenant compte des conditions aux limites et des hypothèses énoncées dans les chapitres 2 et 3. On présente les résultats obtenus de la résolution des équations de Schrödinger et de poisson en (1D) et (2D) respectivement par la méthode de volume finie.

4.2 Modèle utilisé:

Le SET qu'on a étudié est un transistor à point quantique localisé au milieu d'un nanofil déposé sur cinq grilles numérotées de 1 à 5, de largeur 30 nm chacune avec un espacement de 25 à 30 nm entre elles (Figure 4.1). Le nanofil est isolé par une couche de Si₃N₄ avec une épaisseur de 20 nm. L'ensemble est déposé sur un substrat en Silicium de type p et couvert par une couche de 285 nm d'oxyde de siliciumSiO₂. Typiquement, le diamètre du nanofil est $D = 55 \pm 5$ nm et les voltages $V_2 = V_4 = -1$ V sont suffisants pour la déplétion dans le nanofil et pour former les barrières de potentiel.

Le nombre d'électrons dans le point quantique est contrôlé par la grille 3. Les deux grilles 1 et 5 ($V_1 = V_5 \simeq +500 \text{ mV}$) sont réalisées avec une haute densité d'électrons dans les électrodes (source et drain). La structure obtenue forme ainsi le SET.



b



Figure 4.1: a) Modèle expérimental du SET [57].b) Schéma équivalant SET.

Les paramètres et les constantes employés dans la simulation de ce modèle sont groupés dans le tableau ci-dessous :

Paramètres et constantes	Symboles	Valeurs
Rayon de nanofil	R	$55 \pm 5 \ nm$
Tension de polarisation de la grille	Vg3	[-500 0] mV
Tension de polarisation de la source-drain	V_{sd}	[-50 50] mV
Permittivité du vide	\mathcal{E}_0	$8.854 \times 10^{-12} \mathrm{Fm^{-1}}$
Permittivité d'InAs	\mathcal{E}_{l}	$12,5\times\varepsilon_0$
Masse relative d'InAs	m _r	0.023 Kg
Permittivité de Si ₃ N ₄	ε2	$7,5 imes arepsilon_0$
Constante de Boltzmann	K _b	$1.38066 \times 10^{-23} J/k$
Constante de Planck	h	6.62618×10 ⁻³⁴ J.S
Masse de l'électron	<i>m</i> ₀	$0.911 \times 10^{-30} Kg$

Tableau I. Paramètres et constantes employés dans la simulation

4.3 Résultats du modèle d'interactions constantes:

4.3.1 Détermination des capacités expérimentales:

En utilisant le système des équations (2.24) du model électrique dans le chapitre 2 et le résultat expérimental des diamants de Coulomb (Figure 4.2), on peut obtenir les valeurs des capacités C_1, C_2, C_G et q_0 évaluées pour n=1. Ces valeurs sont présentées dans le tableau II:

Tableau II:	Capacités	Experimen	tals
-------------	-----------	-----------	------

Capacité	Experimental
C ₁ (eF)	20.5
C ₂ (eF)	37
C _G (eF)	9
q ₀ (C)	2e

On définit l'unité électron-Farad par: $(1 eF = 1.6 \ 10^{-19} F)$.

La figure (4.2.a) présente la variation des transitions possibles en fonction du voltage de la grille 3. Les zones en gris déterminent le blocage de Coulomb, par exemple pour N = 0: aucun électron n'est confiné dans le point quantique et pour n = 1: un électron seulement est confiné ou bloqué dans le point quantique.



Figure 4.2:Diagramme de stabilité; (a) modèle électrique (b) mesure expérimentale [57].

La figure (4.2.b) illustre le diamant de Coulomb qui est mesurée expérimentalement par la variation de la tension V_{sd} en fonction du voltage de la grille 3 (V_g3). Variation de la tension de polarisation source-drain et le voltage de la grille 3, les diamants de Coulomb apparaissent dans la figure (4.2). Quand on applique une petite tension source-drain (V_{sd}), nous constatons que l'oscillation de Coulomb peut être annulée puisque le potentiel électrochimique dans le point quantique change par la variation de la tension de la grille 3. Les électrons peuvent traverser les barrières de potentiel, ils se déplacent à partir de la source au point quantique et peuvent finalement laisser le point au contact du drain, alors le courant est non nul, quand le potentiel chimique (μ_{dot}) est aligné avec le potentiel chimique de (μ_{source}) et (μ_{drain}), c'est-à-dire $\mu_{source} \ge \mu_{dot} \ge \mu_{drain}$. De cette manière, le nombre d'électrons sur le point fluctuera entre (n) et (n -1). Le transport à travers le point dans cette configuration est généralement appelé résonnance tunnel ou séquentiel tunnel.

Pour la tension source-drain V_{sd} ayant les valeurs négatives [-50, -15] meV, le courant est nul avant la ligne d'énergie de transition (4) du fait du blocage de Coulomb les deux jonctions de tunnel 1 et 2 (n = 0). Le courant provient de la ligne de transition énergétique (4) jusqu'à la ligne de transition énergétique (3) (n = 1). Dans la ligne d'énergie (4), le potentiel V₂a une valeur constante de 7,5 meV provenant de l'expression suivante:

$$V_2 = e/(2C_{eq})$$

Où: $C_{eq} = C_1 + C_2 + C_G$ et dans cette ligne, le potentiel V₁varie de -57,5 meV à -22,5 meV parce que V₁ est égal à V-V₂. Dans la ligne d'énergie (3), le potentiel V₂ a une valeur constante de -7,5 meV provenant de l'expression suivante :

$$V_2 = -e/(2C_{eq})$$

Et dans cette ligne le potentiel V_1 varie de - 42.5 meV à 7,5 meV. Dans cette zone, la jonction 1 est conductrice et l'électron est bloqué entre le troisième et quatrième grille et la jonction 2 a un comportement capacitif conduisant au passage des électrons, un par un.

Pour la tension source-drain V_{sd} entre [-15, 15] meV, les transitions potentielles de la grille 3sont égales à:

$$V_{GS1} = (e-2q_0) / (2C_G) = -166.67 \text{ mV}$$

 $V_{GS2} = (3e-2q_0) / (2C_G) = -55.56 \text{ mV}$

Et

$$\Delta V_{GS} = e/C_G = 111.11 \text{ mV}$$

Nous pouvons extraire l'énergie de premier état excité par : $E_{orb} = e / C_{eq} = 15,04$ meV. Pour la tension Source-Drain ayant les valeurs positives [15,50] meV, et en suivant la même procédure mais en utilisant cette fois V₂ varie de:

$$V_1 = -e / (2C_{eq})$$
 à $V_1 = e / (2C_{eq})$

Dans cette zone, la jonction tunnel 2 est conductrice et l'électron est bloqué entre la troisième et quatrième grille et la jonction tunnel 1 a un comportement capacitif conduisant à un passage des électrons un par un. On a tracé la variation du potentiel des jonctions 1 et 2 en fonction de la tension V_{sd} et Vg à partir du modèle électrique pour n = 1–5 (Figure 4.3), les potentiels V_1 et V_2 sont très importants pour calculer le courant, on observe aussi quand la tension de la grille Vg3 augmente, le potentiel V_2 aussi augmente mais le potentiel V_1 décroit pour équilibrer les charges électriques.

Par exemple, un électron a été extrait par la jonction 2, cette jonction peut être considérée comme passante. Ce faisant, la jonction 1 exhibe son caractère capacitif (c'est l'hypothèse de passage séquentiel des électrons), de même que le condensateur de grille C_G . Les charges Q_G et Q_1 doivent donc se rééquilibrer, induisant une variation des tensions V_1 et V_2 .



Figure 4.3: Variation de V₁et V₂en fonction de la tension V_{sd} et V_g pour n = 1-5.

4.3.2 Estimation des Capacités:

Nous pouvons estimer les capacités C_1 , C_2 et C_G à partir des propriétés physiques et géométriques du SET. Toutes les capacités C_1 , C_2 et C_G sont évaluées à partir de l'émission standard suivante du condensateur plan-plan:

$$C = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r S}{d}$$

Où: ε_0 est la permittivité du vide, ε_r est la permittivité relative et S est la section et d est la distance entre les charges localisées.

• Modèle Simplifié:

Dans ce modèle simplifié, nous utilisons une approche classique et comme nous l'avons vu dans la référence [57], nous supposons que le point est localisé dans le milieu de nanofil (Figure 4. 4) En raison de la symétrie des barrières 2 et 4, les capacités C_1 , C_2 sont égaux et évalués par l'expression suivante:

$$C_1 = C_2 = \frac{\varepsilon_0 \quad \varepsilon_r(InAs) S}{d}$$

Pour C₁ et C₂, la permittivité relative du nanofil InAs est égale à 12.5, S est la section transversale du nanofil InAs et est égale à $\pi / 4 * 55 \text{ nm}^2$ et d désigne la distance entre des charges de nanofil InAs. La distance entre les charges localisées d est la même pour C₁ et C₂ (Figure 4.4). Les charges localisées du condensateur C₁ sont pour le côté gauche entre la grille 1 et la barrière 2 et pour le côté droit au milieu de la grille 3. La distance d est égale à 82,5 nm.



Figure 4.4: La distance d pour calcul estimé des capacitances C₁ et C₂.

Nous avons obtenu pour C₁ et C₂ les valeurs suivantes:

$$C_1 = C_2 = 31.87 \ 10^{-19} \ F = 19.92 \ eF$$

L'évaluation de la capacité C_G est plus compliquée en raison de la difficulté d'estimer la distance des charges localisées d_G . En utilisant la même procédure, on peut évaluer la capacité C_G par l'expression suivante:

$$C_G = \frac{\varepsilon_0 \quad \varepsilon_r (Si_3 N_4) S_G}{d_G}$$

 $\varepsilon_r(Si_3N_4)$ est la permittivité relative, elle est égal à 7.5, S_G est la section de la grille 3 devant le nanofil, il est égal au produit de la largeur de la grille 3 (30 nm) et la profondeur représentant le diamètre de le nanofil (55 nm) et d_G désigne la distance entre les charges localisées. Nous supposons que les charges localisées du condensateur C_G sont à l'interface entre le nanofil et le côté supérieur et au niveau de la grille 3 pour le côté inférieur (Figure 4.5). On prend la section S_G égale à 30*55 nm² et d_G désigne la largeur 20 nm.



Figure 4.5: Distance d_G pour estimer la capacitance C_G.

Finalement nous avons obtenu $C_G = 34.24$ eF et ces valeurs sont représentées dans le tableau III:

Tableau III: Capacitcés estimés et expérimentales

Capacité	Estimé (eF)	Expérim ental (eF)	Erreur Abs (%)
C1	19.92	20.5	2.82
C_2	19.92	37	46.16
CG	34.24	9	73.71

Dans l'approche classique, les capacités estimées sont très différentes des capacités expérimentales. De plus, les capacités C_1 et C_2 ont été considérées égales et ceci n'est pas vrai en ce qui concerne les résultats expérimentaux.

• Modèle Amélioré:

Dans le modèle classique, nous avons supposé que le point quantique est localisé dans le milieu de la grille 3. Les résultats expérimentaux donnent que les capacités C_1 et C_2 ne sont pas égales. Ce résultat est ambigu et la question principale consiste à expliquer pourquoi ces deux capacités sont différentes malgré que le nanofil n'est pas hétérogène et on applique la même tension des barrières ($V_2 = V_4 = -1$ V) et les électrodes ($V_1 = V_5 \simeq +500$ mV).

La première explication logique est de supposer que le point n'est pas localisé dans le milieu de la grille 3 et qu'il y a donc deux distances d_1 pour le calcul de C_1 et d_2 pour C_2 . L'approche améliorée peut expliquer cette hypothèse. Tout d'abord, parce que la grille 3 a une tension négative (-0.5: 0 V), elle forme une petite barrière dans le nanofil InAs (Figure 4.6).



Figure 4.6: Variation de l'énergie potentielle en fonction Vg3 et pour $V_{ds} = 0.05 V$.

Deuxièmement, la tension appliquée au substrat (+500mV) change la forme du potentiel de confinement, les niveaux d'énergie des points et la modification de l'occupation des électrons du point. Troisièmement, la tension appliquée V_{sd} crée un champ électrique et une force électrique qui applique sur les électrons agissant sur le point et dérive le point du centre. Le point ne peut pas être localisé entre deux barrières de potentiel et par conséquent au milieu de la grille 3 mais entre la petite barrière de la grille 3 et la barrière de la grille 4.

Pour le calcul de la capacité C_1 et C_2 , on considère deux valeurs de d, d_1 est égal à 80 nm et d_2 est égal à 44 nm (Figure 4.7) [69].



Figure 4.7: Distance d₁ et d₂ pour calcul corrigé des capacitances C₁ et C₂ [69].

Les valeurs de C₁ et C₂ en utilisant les distances d₁ et d₂ respectivement, sont les suivantes:

$$C_1 = 32.87 \ 10^{-19} \ F = 20.54 \ eF$$
 $C_2 = 59.76 \ 10^{-19} \ F = 37.35 \ eF$

La tension de la grille 3 contribue à la création des électrons localisés dans le point. Pour le calcul de la capacité C_G , la première estimation n'est pas correcte car la surface utilisée est très élevée parce que nous avons considéré la surface du point est égale à celle de la grille. En raison de la courbure du nanofil, la surface réelle peut être évaluée comme le quart de la surface de la grille est calculé donc à partie de la relation suivante:

$$S_G = w_q \times D / 4$$

Où w_g désigne la largeur de la grille 3. La valeur de la capacité C_G est :

$$C_G = 13.69 \ 10^{-19} \ F = 08.56 \ eF$$

à partir du modèle amélioré, les valeurs des capacités calculés sont presque égales aux valeurs expérimentales, voir le tableau III.

Capacité	Améliorées (eF)	Expérimentales (eF)	Erreur Abs (%)
C ₁	20.54	20.5	0.195
C ₂	37.35	37	0.945
CG	08.56	9	4.888

Tableau IV: Capacités améliorées et expérimentales

✓ Calcul du courant dans le régime non linéaire :

La figure (4.8) présente le diagramme de stabilité d'énergie de Coulomb dans le transistor à point quantique. Pour appliquer la tension V_{ds} inférieure à la tension de seuil (e / C_{eq}), on observe qu'il y a des zones de blocage de Coulomb (les zones bleus) le courant est presque nul. On peut débloquer et bloquer des électrons alternativement par variation de la tension de la grille 3, à ce phénomène correspond des pics de courant ou d'oscillations de Coulomb et les électrons ayant traversés les barrières quand ils ont l'énergies suffisante. Lorsque, on augmente la tension V_{ds} à une valeur supérieure à la tension de seuil, le courant n'est pas nul et les électrons sont passantes.



Figure 4.8: a) Calcul du courant abs (I) en fonctions de V_{sd} et Vg3.
b) variation de la tension V_{sd} en fonction du voltage Vg3.

4.4 Etude électrostatique:

4.4.1 Solution de l'équation de Poisson en 2D:

La figure (4.9) présente la distribution d'énergie potentielle dans le transistor à point quantique.



Figure 4.9: a) Distribution de l'énergie potentielle dans le transistor à point quantique. b) Distribution de l'énergie potentielle dans le plan (X,Y).Pour $V_{ds} = 0.05$ (V) et Vg3 = 0 (V).

pour $V_{ds} = 0.05$ V et Vg3 = 0 V, on remarque que les énergie diminue du côté de la source et du drain où se trouve l'accumulation des électrons, comme on peut le voir dans la figure (4.8.a), et la distribution de l'énergie potentielle dans le plan (X, Y) est présentée à la figure (4.8.b)

4.4.2 Effet de la polarisation Vg3 sur la profondeur du puits:

La figure (4.10) présente la variation de l'énergie potentielle en fonction de la tension de grille 3 dans le point quantique. Quand on fait varier la tension de la grille 3 (Vg3 = -0.4, - 0.2, - 0.1, 0, V), la profondeur du point quantique diminuée parce que l'énergie augmente et les électrons sont accumulés, où se trouvent les niveaux d'énergie minimums c'est à dire du côté de la source et du drain, alors les électrons dans ce cas, peuvent traverser la barrière de potentiel par effet tunnel sous la condition de diminution de l'énergie.



Figure 4.10: Variation de l'énergie potentielle dans un SET.

4.5 Diagramme de stabilité de l'énergie:

A partir du modèle électrique du transistor à point quantique, la figure (4.11) présente la diagramme de stabilité de l'énergie de blocage de Coulomb V_{ds} en fonction Vg3.



Figure 4.11: Diagramme de stabilité de l'énergie dans un SET.

On voit bien les zones colorés dans la figure ci-dessus qui montrent la différence du nombre des électrons bloqués dans le point. Pour V_{sd} inférieur à la tension de seuil ($|V_{sd}| < 15$ mV), où se trouve les électrons qui passent d'une manière alternée entre débloqué et bloqué à travers les jonctions, c'est l'état appelé oscillation de Coulomb ou les pic de Coulomb. Lorsqu'on applique une tension V_{sd} supérieure à la première tension du seuil ($|V_{sd}| > 15$ mV), il n'y a pas de blocage et les électrons possèdent une énergie suffisante pour traverser les barrières de potentielles.

4.6 Effet du champ magnétique:

Quand on applique un champ magnétique extérieur B, dans ce cas les propriétés électroniques varient et chaque électron possède un spin (il tourne sur lui-même, s = ± 1/2) de plus il apparaît des états spintroniques (ψ_+ et ψ_-). A partir de la solution de l'équation de Schrödinger, on obtient le premier état spintronique pour B = 0,2 T, constante d'interaction spin-orbite $\alpha = 25 \text{ meV nm}$ et sans polarisation comme on peut le voir dans la figure 4.12, mais quand on fait varier le champ magnétique, on observe que le niveau d'énergie d'un électron est doublé et la distance entre eux varie proportionnellement avec le champ magnétique selon l'effet de Zeeman (Figure 4.13).



Figure 4.12: Etat spintronique pour B = 0.2 T.



Figure 4.13: Variation de l'énergie d'un électron en fonction du champ magnétique.

4.6.1 Effet du champ magnétique sur le diamant de Coulomb:

Pour montrer l'effet du champ magnétique sur le diamant de Coulomb, on applique un champ magnétique B = 0.3T et suivant les équations du modèle électrique de transistor à point quantique, on calcule la tension V_{ds} en fonction de la tension Vg3 (Figure 4.14).



Figure 4.14: Diagramme de stabilité de l'énergie sous l'effet du champ magnétique.

On observe que lorsque le champ magnétique B augmente les quatre lignes de transitions tunnel de l'électron n = 0 à n = 1 sont décalées (lignes pointés) par rapport à l'état fondamentale (lignes solides, pour B = 0 T). Ces lignes sont appelées les niveaux d'énergies excitées, alors les électrons se déplacent par de l'état fondamental aux états excités selon ses énergies.

La figure (4.15) présente le diagramme de stabilité de l'énergie de la transition d'un électron de l'état n = 1 à l'état n = 2 par l'effet tunnel sous l'effet du champ magnétique (B = 0.3 T). Le calcul de l'énergie de l'état excité est donné par la méthode suivante, lorsque une ligne d'état excité touche la région de blocage de Coulomb en point, on détermine la projection de ce point sur l'axe Vg3, cette distance entre l'état excité et l'état fondamental ou entre les niveaux d'énergies peuvent être lus directement sur l'axe (- eV_{sd}).



Figure 4.15: Ligne de transition n = 1 à n = 2.

4.6.2 Influence de l'orientation du B sur l'énergie de Zeeman:

Les systèmes à faible dimension sont intéressants pour étudier le facteur g en raison de la forte interaction spin-orbite, modèle étudié du nanofil (InAs) par S. Nadj-Perge et al avec mesure des propriétés électroniques [57]. La figure (4.16. a) présente l'énergie de Zeeman en fonction de B (B ϵ [- 4, 4]) dans le point quantique et sa longueur L = 42 nm. Le vecteur B tourne avec un angle $\varphi \epsilon$ [0, 360 °], on observe que l'énergie de Zeeman varie linéairement avec B et il prend deux positions maximum et minimum selon la direction du champ B comme on peut le voir dans la figure (4.16.a). Le résultat expérimental de S. Nadj-Perge et al[57] montre que le facteur g de nanofil InAs varie entre deux valeurs maximum (g = -9) et minimum (g = -7), pour $\varphi = 171^{\circ}$ et $\varphi = 81^{\circ}$ respectivement (Figure 4.16.b),c'est à dire quand le champ B est perpendiculaire à l'axe du nanofil, le coefficient de Landé g est minimum, par contre, il est maximum si B est en parallèle au nanofil. Les résultats obtenus sont en accord avec les résultats expérimentaux et la relation théorique de l'énergie des états de spin ($E_{N\pm} = E_{1D} \pm \sqrt{1 - (1 - \lambda_N^2 + k_N^2)\cos^2\varphi}$) [70], où λ_N et k_N sont les paramètres qui contrôlent la force anisotropique du facteur g.



Figure 4.16: a) Calcul de l'énergie Zeeman en fonction du champ magnétiqueb) E_z mesuré par S. Nadj-Perge et al [57].

4.6.3 Influence de la longueur du point quantique sur l'énergie de Zeeman:

Maintenent on varie la longueur du point quantique (L), on observe que l'énergie de Zeeman varie linèairement avec le champ magnétique si la largeur du point est faible ($L \leq$

Chapitre 4

42 *nm*), par contre quand L augmente (si $L \ge 42$ nm) l'énergie de Zeeman diminue et la variation de l'energie diminue jusqu'a la disparition totale avec l'augmentation de la taille du point quantique (Figure 4.17).



Figure 4.17: Effet de la longueur du point quantique sur l'énergie de Zeeman.

La figure (4.18) présente la variation l'énergie (ΔE_z) en fonction de B sous l'effet de la taille. On observe que la courbe de l'energie se compose de deux partie: une région liniaire et l'autre constante. Dans la région linèaire la différence d'énergie de Zeeman augmente avec l'augmentation du champ magnétique B, c'est-à-dire elle varie directement proportionnelle avec le champ B et l'autre régien est constante parceque la variation d'énergie de Zeeman $\Delta E_z = cte$ quelque soit le champ magnétique B et cette variation d'énergie diminue jusqu'a être nulle avec l'augmentation de la longueur du point quantique (L) à cause de l'effet quantique qui est faible dans la structure plus grande.

Chapitre 4



Figure 4.18: Variation de l'énergie de Zeeman sous l'effet de la longueur du point.

4.6.4 Influence de l'orientation du B sur le coefficient de Landé g :

Lorsque la direction du champ magnétique est modifiée $\varphi \in [0, 360^\circ]$, et son module est constant, on remarque que le coefficient de Landé g dépend de l'angle φ et sa courbe varie d'une manière sinusoïdale (Figure 4.19). De plus, il est maximum, quand la direction du B est perpendiculaire à l'axe de nanofil, c'est-à-dire $\varphi = 90^\circ$ où 270°, où dans ce cas l'interaction spin-orbite est forte cela conduit à l'augmentation de l'énergie de Zeeman. Par contre pour B parallèle au nanofil ($\varphi = 180^\circ$ ou 0°), le coefficient de Landé *g* diminue c'est-à-dire le couplage spin-orbite est faible. Dans ce cas, on peut expliquer ce phénomène par le fait que le spin d'électron est plus polarisé lorsque le champ magnétique B est perpendiculaire à l'axe de nanofil puis il diminue jusqu'au minimum quand B est parallèle au nanofil.



Figure 4.19: facteur- g en fonction de l'orientation du champ magnétique.

4.6.5 Influence de la longueur du point sur le coefficient de Landé g :

La figure 4.20 présente l'effet de la longueur du point quantique sur le coefficient de Landé g. Quand la largeur du point augmente le coefficient de Landé g diminué, en raison de l'effet quantique faible dans les structures qui possèdent des dimensions grandes.



Figure 4.20: Influence de la longueur du point sur le facteurg.

4.6.6 Influence de la constante d'interaction sur le coefficient de Landé g :

Pour une longueur du point quantique égale à 100 nm et on applique un champ magnétique B = 3.5 T avec une orientation différente, l'influence de la constante d'interaction spin-orbite (α) sur le facteur-g est présentée en figure 4.21.On observe que le facteur g est constant lorsque B est verticale à l'axe de nanofil et il prend une valeur maximum, par contre lorsque B est parallèle au nanofil le facteur g diminue avec l'augmentation de la constante d'interaction de la constante d'interaction mais son amplitude d'oscillation est différente et augmente avec l'augmentation de la constante [70].



Figure 4.21:Facteur g efficace obtenu pour nanofils à points quantiques avec la variation de la constante d'interaction

4.6.7 Influence de la tension Vg3 sur le coefficient de Landé g:

Pour déterminer les coefficients qui influent sur le facteur g, nous avons également étudié l'effet de la polarisation de la grille 3, on prend L = 55 nm, B = 3.5 T et la constante d'interaction est égale à 25 meV nm. On a trouvé que l'amplitude des oscillations varie, elle augmente avec une diminution de la tension Vg3 [71].De plus, la largeur de chaque pic d'oscillation augmente avec la tension de la grille 3 et son amplitude diminue.



Figure 4.22: Influence de la polarisation de la grille 3 sur le facteur g [71].

4.7 Conlusion

Le résumé des résultats obtenus dans ce travail de thèse sont :

- ✓ Les capacitances du SET C1 ≠ C2 parce que la régien du point n'est pas centré dans le puit quantique.
- ✓ Lorsque la taille du point estpetite ($L \le 42$ nm), l'énergie Zemen (E_z) varie proportiennellement avec le champ B et implique que la variation de l'énergie ΔE_z augmente.
- ✓ Si L > 42 nm, l'énergie E_z est séparée en deux région, une région linéaire et l'autre constante et par conséquent la variation de l'énergie est constante puis elle diminue jusqu'à la disparition totale avec l'augmentation de la taille.
- ✓ pour l'orientation du champ magnétique B, le facteur g est maximum quand le champ B est perpendiculaire au nanofil. Par contre si B est parallèle, le facteur g est minimum parce que l'effet d'interaction spin-orbite est faible.
- ✓ Lorsque le champ B varie (en direction et en module), le facteur g du nanofil InAs varie entre deux valeurs maximum et minimum, pour $\phi = 171^\circ$ et $\phi = 81^\circ$ respectivement.
- ✓ le facteur de Landé (g) est très fort dans une structure petite et son l'amplitude des oscillations augmente avec la diminution de la tension Vg3.

Conclusion générale

Conclusion générale

Pour étudier les propriétés électroniques et comprendre les phénomènes physiques dans les transistors à point quantiques (SET) qui forment les nanofils, on a utilisé le modèle d'interactions constantes qui explique ces phénomènes particulièrement dans le cas statique et dynamique. Nous avons présenté une étude détaillée du point quantique à savoir ; la notion de l'atome artificiel qu'il présente, caractérisant la jonction tunnel, l'effet du blocage de Coulomb et les paramètres influents. On a aussi exposé le diagramme de stabilité d'énergie avec et sans effet du champ magnétique et le principe de fonctionnement du transistor à point quantique ainsi que ses applications.

A partir des résultats expérimentaux des diamants de Coulomb et le modèle électrique de circuit équivalent du transistor à point quantique SET, nous avons déterminé les capacités couplées du point quantique dans le nanofil InAs et des électrodes. Le résultat expérimental montre que les capacités des jonctions tunnel du drain et de la source ne sont pas égales, mais le calcul estimé montre un effet contraire. Pour résoudre ce problème, on a émis l'hypothèse que le point quantique n'est pas localisé de façon symétrique et cela peut s'expliquer par l'influence des grilles et la présence d'autres points quantiques. Le modèle énergétique peut s'expliquer facilement par cette hypothèse. Après correction, nous avons trouvé un bon accord avec les résultats expérimentaux.

De plus, on a utilisé la méthode des volumes finis pour résoudre les équations de Poisson-Schrödinger dans les coordonnés cartésiennes bidimensionnelles et unidimensionnelle respectivement. Dans un modèle réel, nous avons calculé alors la distribution de l'énergie potentielle et les premiers états de spin dans le point quantique. Par application d'un champ magnétique extérieur, on a pu déterminer la séparation du niveau d'énergie (l'effet Zeeman) et calculer le facteur de Lande (g) dans plusieurs orientations du champ magnétique. On a observé aussi que l'amplitude du facteur de Lande (g) est liée à de nombreux paramètres ; la taille du point quantique, la tension de la polarisation du grille 3, la variation du champ magnétique et la constante d'interaction de couplage SO. L'effet est efficace et très fort dans la structure à point quantique de taille très petite.

Bibliographie:

- L. P Kouwenhoven, D. G Austing and S. Tarucha, «Few-electron quantum dots», Rep. Prog. Phys. 64, pp 701–736, (2001).
- [2] A. Enderlin, «Contrôle cohérent des états électroniques d'une boite quantique unique », Thèse de doctorat, université Pierre et Marie Curie - Paris VI, pp 1-194, (2010).
- [3] S. Tarucha, T. Honda, D.G. Austing, Y. Tokura, K. Muraki, T.H. Oosterkamp, J.W. Janssen, L.P. Kouwenhoven, «Electronic states in quantum dot atoms and molecules », Phys E 3, pp 112-120, (1998).
- S. Nadj-perge, V.S. Pribiag, J.W.G van ben Berg, K. Zuo, S. R. Plissard, E. P. A. M. Bakkers, S. M. Frolov, and L. P. Kouwenhoven, «Spectroscpy of Spin-Orbit Quantum Bits in Indium Antimonide Nanowires» Phys. Rev. Lett. 108, 166801, pp 1-5, (2012).
- [5] S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, « Theoretical description of electronic properties of vertical gated quantum dots», Phys. Rev. B Vol 64, 195303, pp 1-13, (2001).
- [6] M. Zouaoui, «Etude des propriétés électroniques des boites quantiques InAs/InP par spectroscopie de défauts profonds (DLTS) pour des applications optoélectroniques », Thèse de doctorat, université de Lyon, pp1-120, (2013).
- [7] X.-J. Shang, J.-F. He, H.-L. Wang, M.-F. Li, Y. Zhu, Z.-C. Niu, and Y.Fu, «Effect of built-in electric field on photovoltaic effect of InAs quantum dots in GaAs solar cells », Appl. Phys. A. 103, pp 335-341, (2011).
- [8] J. C. C. Hwang, C. H. Yang, M. Veldhorst, N. Hendrickx, M. A. Fogarty, W. Huang, F. E. Hudson, A. Morello, and A. S. Dzurak, «Impact of g-factors and valleys on spin qubits in a silicon double quantum dot », Phys. Rev. B 96, 045302, pp 1-7, (2017).
- [9] P. Szumniak, S. Bednarek, J. Pawłowski, and B. Partoens «All-electrical control of quantum gates for single heavy-hole spin qubits », Phys. Rev. B 87, 195307, pp 1-12, (2013).
- [10] D. V. Avrin and K. K. Likharev, « Coulomb blockade of single-electron tunneling, and Coherent oscillation in small tunnel Junctions», J. Low. Temp. Phys. 62, pp 345-373, (1986).
- [11] T. Fulton, G. Dolan, «Observation of single-electron charging effects in small tunnel junctions», Phys. Rev. Lett. 59, pp 109–112 (1987).
- [12] S.M. Reimann, M. Manninen, «Electronic structure of quantum dots », Rev. Mod. Phys. vol 74, pp 1-60, (2002).
- [13] S. Kakade « Supersensitive Electrometer and Electrostatic Data Storage Using Single Electron Transistor », J. Elec. Engi. Vol 5, ISSN 0974-2166, 5, pp 591-596, (2012).
- [14] V. Lindberg and B. Hellsing «Metallic quantum dots », J. Phys. Cond. Mat. 17, pp S1075 -S1094, (2005).

- [15] K. D. Osdorn, M. W. Keller, R. P. Mirin, « Single-electron transistor spectroscopy of InGaAs self-assembled quantum dots», Phys E 21, pp 501-505, (2004).
- [16] S. Sapmaz, P. Jarillo-Herrero, L. P. Kouwenhoven and H. S. J. van der Zant «Quantum dots in carbon nanotubes » Semicond. Sci. Technol. 21, pp S52–S63, (2006).
- [17] M. Harsson, «Electron Transport in Quantum Dots Defined in Low-Dimensional Semiconductor Structures », Thèse de doctorat, université de Lund, Sweden, pp 1-108, (2011).
- [18] Jihene. Zribi, « croissance et caractérisation des Boites quantiques InAs/GaAs pour des applications photovoltaique », Thèse de doctorat, Sherbrooke, Québec, Canada, pp 1-188, (2014).
- [19] R. C. Ashoori, « Electrons in artificial atoms », Rev. Nature.Vol 379, pp 413-419, (1996).
- [20] U. Banin, Y. Cao, D. Katz, O. Millo, «Identification of atomic-like electronic states in indium arsenide nanocrystal quantum dots», Rev.Nature, Vol 400, pp 542-544, (1999).
- [21] C. Cohen Tannoudji, B. Dui, F. Laloé, «Mécanique Quantique», livre, Herman, Paris, pp 1-980, (1973).
- [22] V. P. Singh, A. Agrawal, S. B. Singh « Analytical Discussion of Single Electron Transistor (SET) », Int. J. Soft. Computing and Eng (IJSCE). Vol 2, ISSN: 2231-2307 Issue-3, pp 502-507, (2012).
- [23] S. Bednarek, B. Szafran, J.Adamowski, « Quantum Coulomb blockade in gatecontrolled quantum », microelectronic Engineering 51-52, pp 99-109, (2000).
- [24] J. Sée, « Théorie du blocage de Coulomb appliqué aux nanostructures semi-conductrices modélisation des dispositifs à nanocrictaux de Silicium » Thèse de doctorat, université paris-Sud 11, pp 1-364, (2003).
- [25] H. Ishikuroa, T. Hiramotob, « Quantum mechanical effects in the silicon quantum dot in a single-electron transistor » Appl. Phys. Lett. 71, 25, pp 3691-3693, (1997).
- [26] B. Christophe, « Etude optiques et électriques des propriétés électroniques de nanocristaux de Silicium», thèse de doctorat, université Lyon, pp 1-137 (2001).
- [27] N. A. Kuruoğlu, O. Özdemir, K. Bozkurt, «Investigation of Carrier Conduction Mechanism over InAs/InP Quantum Dashes and InAs/GaAs Quantum Dots Based p-i-n Laser Heterostructures», J. Mat. Sci and Chem. Engi. Vol 5, pp 1-9, (2017).
- [28] A. M.Bagher, «Quantum Dots Applications », Sensors & Transducers, Vol 198, Issue 3, pp 37- 43, (2016).
- [29] R, Roloff, W, Pötz, « Bell-state preparation for electron spins in a semiconductor double quantum dot» Phys. Rev. B 76, 075333, pp 1- 8, (2007).

- [30] A. Boubaker, «Modelisation des composants mono-électroniques: Single-Electron Transistor et Single-Electron Memory», Thèse de doctorat, université Lyon, pp 1-141 (2010).
- [31] M. A. Bounouar, «Transistors Mono-Électroniques Double-Grille: Modélisation, Conception & Évaluation d'Architectures Logiques», Thèse de doctorat en cotutelle France-Canada, pp 1-229 (2013).
- [32] L. J. Yen, A. R. Mat Isa, K. A. Dasuki, «Modeling and simulation of single-electron transistors», J. Fundamental Sciences, Vol1, pp 1-6, ((2005).
- [33] R. S. Wagner, W. C. Ellis «Vapor-Liquid-Solid Mechanism of single crystal growth», Appl, Phys, Lett. Vol 4, 5, pp 89 - 90, (1964).
- [34] S. S. Wong, A.T. Woolley, T. W. Odom, J. L. Huang, P. K. Dimitri, V. Vezenov, and C.
 M. Lieber, «Single-walled carbon nanotube probes for high-resolution nanostructure imaging», Appl, Phys, lett. Vol 73, number 23, pp 3465 3467, (1998).
- [35] S. W. Chung, J.Y. Yu, J. R. Heathb, « Silicon nanowire devices», Appl. Phys. Lett, Vol 76, 15, pp 2068 - 2070, (2000).
- [36] M. Scheffler, S. Nadj-Perge, L. P. Kouwenhoven, M. T. Borgström and Erik P. A. M. Bakkers, «Diameter-dependent conductance of InAs nanowires ». J. Appl. Phys. 106, 124303 pp 1- 4, (2009).
- [37] M. J. L. Sourribes, I. Isakv, M. Panfilova, H. Liu, and P. A. Warburton, « Mobility enhancement by Sb-mediated Minimisation of Stacking Fault Density in InAs Nanowires Grown on Silicon », Nano. Lett. 14, pp 1643-1650, (2014).
- [38] V. Rodrigues, T. Fuhrer, D. Ugarte « Signature of Atomic Structure in the Quantum Conductance of Gold Nanowires» Phys. Rev. Lett. Vol 85, 19, pp 1424 1427, (2000).
- [39] P. Yang «The Chemistry and Physics of Semiconductor Nanowires», Mrs, Bulletin, Vol 30, pp 85-91 (2005).
- [40] R. Boukhicha «Croissance et caractérisation des nanofils de silicium et de germanium obtenus par dépôt chimique en phase vapeur sous ultravide», thèse de doctorat, Université Paris - Sud 11, pp 1-164, (2011).
- [41] O. Demichel «Propriétés Électroniques de Nanofils de Silicium obtenus par Croissance Catalysée », thèse de doctorat, Université Grenoble, pp 1–122, (2010).
- [42] O.Fellahi «Élaboration de nanofils de silicium par gravure chimique assistée par un métal : caractérisation et application en photocatalyse hétérogène de l'oxyde de graphène, du chrome (VI) et de la rhodamine B », Thèse de doctorat, Université Sétif 1, pp 1-200 (2014).

- [43] M. M. Diarra, «Etude théorique de nanofils semiconducteur», Thèse de doctorat, Université Lille, pp 1-138, (2009).
- [44] Y. Wu, P. Yang, « Direct Observation of Vapor-Liquid-Solid Nanowire Growth », J. Am. Chem. Soc, 123, pp 3165-3166, (2001).
- [45] H. Pan, W. Chen, Y. P. Feng, W. Jia « Optical limiting properties of metal nanowires » Appl. Phys. Lett, 88, 223106 pp 1 - 3 (2006).
- [46] A. Kumar, D. K. Avasthi, A. Tripathi, « Formation and characterization of carbon nanowires » Appl. Phys. 102, 044305 pp 1- 4 (2007).
- [47] S. M. Frolov, S. R. Plissard, S. N. Perge, L. P. Kouwenhoven, E. P. Bakkers, « Quantum computing based on semiconductor nanowires», Mrs. Bulletin. Vol 38, pp 810-815 (2013).
- [48] R. G. Hobbs, N. Petkov, J. D. Holmes, « Semiconductor Nanowire Fabrication by Bottom-Up and Top-Down Paradigms » Rev. Chem. Mater, 24, pp 1975 - 1991, (2012).
- [49] J. Westwater, D. P. Gosain, S. Tomiya, S. Usui, H. Ruda, « Growth of silicon nanowires via gold/silane vapor–liquid–solid reaction » J. Vac. Sci, B 15, pp 554 - 557 (1997).
- [50] S. Yi Li, P. Lin, C. Y. Lee, T. Y. Tseng, « Field emission and photofluorescent characteristics of zinc oxide nanowires synthesized by a metal catalyzed vapor-liquidsolid process » J. App. Phys. Vol 95, 7, pp 3711 - 3716, (2004).
- [51] Y. C. Lincoln, J. Lauhon, M.S. Gudiksen, J. Wang, C. M. Lieber, « Diametercontrolled synthesis of single-crystal silicon nanowires » Appl. Phys. Lett. 78, 15, pp 2214 - 2216, (2001).
- [52] I. Zardo, L. Yu, S. Conesa, S. Estradé, P. Jean, J. Rossler1, M. Frimmer, P. R. Cabarrocas, F Peiro, J. Arbiol, J. R. Morante, A. F. Morral, « Gallium assisted plasma enhanced chemical vapor deposition of silicon nanowires », J. IOP. Nanotechnology, 20, 155602, pp 1- 9, (2009).
- [53] J. Arbiol, B. Kalache, P. Cabarrocas, J. R. Morante, A. F. Morral, « Influence of Cu as a catalyst on the properties of silicon nanowires synthesized by the vapour–solid–solid mechanism », J. Iop. Nanotechnology, 18, 305606, pp 1- 8, (2007).
- [54] S. Sharma, T.I. Kamins, R. Stanley Williams, «Diameter control of Ti-catalyzed silicon nanowires», J. Cry. Gro, pp 613-618, (2004).
- [55] O. Haydena, R. Agarwalb, W. Luc, « Semiconductor nanowire devices », Rev. Nanotody, Vol 3, 5-6, pp 12 - 22, (2008).

- [56] F. Vaurette, « Fabrication top-down, caractérisation et applications de nanofils silicium », Thèse doctorat, université Lille, pp 1 211, (2008).
- [57] S. Nadj-perge, «Single spins in semiconductor nanowires », These doctorat, Université Delft, pp 1 - 161, (2010).
- [58] E. D. Minot, F. Kelkensberg, M. van Kouwen, J. A. van Dam, L. P. Kouwenhoven, V. Zwiller, M. T. Borgstro, O. Wunnicke, M. A. Verheijen, P. A. M. Bakkers, «Single Quantum Dot Nanowire LEDs », Nano. Lett, Vol 7, 2, pp 367-371, (2007).
- [59] M. A. Zimmler, J. Bao, F. Capasso, S. Müller, C. Ronning, «Laser action in nanowires: Observation of the transition from amplified spontaneous emission to laser oscillation », App. Phys. Lett, Vol 93, 051101 pp 1 - 3, (2008)
- [60] J. Ristic´, E. Calleja, A. Trampert, S. F. Garrido, C. Rivera, U. Jahn, K. H. Ploog, « Columnar AlGaN/GaN Nanocavities with AlN/ GaN Bragg Reflectors Grown by Molecular Beam Epitaxy on Si(111) », Phys. Rev. Lett, Vol 95, 146102 pp 1-4 (2005).
- [61] M.S. Gudiksen, L. J. Lauhon, J. Wang, D. C. Smith, C. M. Lieber, «Growth of nanowire superlattice structures for nanoscale photonics and electronics», Nature, Vol 415, pp 617 - 620, (2002).
- [62] G. Zheng, F. Patolsky, Y. Cui, W.U. Wang, and C. M. Lieber., «Multiplexed electrical detection of cancer markers with nanowire sensor arrays », Nature Biotechnology, Vol 23, 10, pp 1294-1301, (2005).
- [63] I. Ionica Effet de champ et blocage de Coulomb dans des nanostructures de silicium élaborées par microscopie à force atomique», Thèse doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, pp 1 - 243,(2006).
- [64] M. P. Nowak, B. Szafran, « Spin-polarization anisotropy in a narrow spin-orbit-coupled nanowire quantum dot », Phys. Rev B, Vol 87, 205436 pp 1 7, (2013).
- [65] R. Hanson, J. R. Petta, S. Tarucha, L. M. K. Vandersypen, «Spins in few-electron quantum dots », arXiv:cond-mat. Vol 2. 0610433, pp 1 - 52, (2007).
- [66] S. Tarucha, D. G. Austing, T. Honda, Shell Filling and Spin Effects in a Few Electron Quantum Dot», Phys. Rev. Lett, Vol 77, 17, pp 3613 3616, (1996).
- [67] M. Xiao, M. G. House, H. W. Jiang, « Parallel spin filling and energy spectroscopy in few-electron Si metal-on-semiconductor-based quantum dots », App. Phys. Lett, Vol 97, 032103 pp 1 - 3 (2010).
- [68] P. H. Collard, «Qubits de spin composés de boîtes quantiques et de donneurs dans le silicium», Thèse de doctorat, Université Sherbrooke, Québec, Canada, pp 1 - 159, (2018).

- [69] O. Boudib, S. M. Mimoune, L. Alloui « Capacitances determination of single electron transistor InAs nanowire by parametric model», J. Nanoelectro. Optoelectro, Vol 13, 3, pp 335-339, (2018).
- [70] M. P. Nowak, B. Szafran «Spin-polarization anisotropy in a narrow spin-orbit-coupled nanowire quantum dot », Phys. Rev. B 87. 205436, pp 1- 7, (2013).
- [71] O. Boudib, S. M. Mimoune, « Numerical calculation of Zeeman effect and Landefactor in nanowire gated quantum dots», Courrier du Savoir, 26, pp75-78, (2018).

Résumé

Le transistor à un électron est un composant très important dans le domaine nanostructure, il appelé aussi le SET (Single Electron Transistor en anglais). Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés électroniques dans ce dispositif (SET) sous l'effet du champ magnétique extérieur. On a résolu les équations de Poisson-Schrödinger par la méthode des volumes finies. Nous avons calculé les niveaux d'énergies et les états des spins dans le point quantique et on a déterminé la séparation de niveau d'énergie (l'effet de Zeeman) et calculé le facteur de Lande (g) dans plusieurs orientations du champ magnétique. Ensuite, on a étudié les coefficients qui leurs influences. De plus, à partir du modèle électrique équivalant du SET et le résultat expérimental du diagramme d'énergie de diamant de Coulomb, on a calculé les capacitances des jonctions tunnel entre le point quantique et des électrodes. Le résultat expérimental montre que les capacitances des jonctions tunnel du drain et de la source ne sont pas égales par contre la théorique. Pour résoudre ce problème, on a supposé que le point quantique n'est pas localisé de façon symétrique et cela peut s'expliquer par l'influence de voltage de la grille 3 qu'il peut créer d'autres points quantiques. Nous avons obtenu de bons résultats qui sont en accord avec l'expérience.

Mots clés: transistor à point quantique, SET, blocage de Coulomb, point quantique,

Abstract

The single electron transistor (SET) or transistor a quantum dot is component which is very important in nanostructure. In this work, we have studied the electronics properties in transistor (SET) with applied the external magnetic field. Numerical calculation, we have solved the Poisson-Schrödinger equations by the finite volume method, we have obtained the various properties in the dot like to the energy levels, the states waves functions, moreover we have calculated the Lande factor (g) in several orientations of the magnetic field, and we studied also the coefficients that influence on it. Then we have determined the division energy levels (the Zeeman effect). In addition, from the electrical model equivalent the SET and the experimental result of the energy levels diagram of the Coulomb diamond, the tunnel junction capacitances between the dot and the electrodes were calculated, but the experimental result shows that the capacitances of the drain and the source are not equal as such to theoretical result. To solve this problem, it has been assumed that the quantum dot is not middle and this can be explained by the influence the voltage of the gates 3 which create the other quantum dots. We have obtained the good results that are accord with the experiment.

Key words: Single electron transistor, quantum dot, Coulomb blockade

منخص

يعتبر الترانزستور احادي الاكترون مركب فعال في مجال البنية النانومترية، و يدعى كذلك SET (بالانجليزية

Single Electon Transistor). في هذا العمل ، درسنا الخصائص الإلكترونية للترانزستور (SET) تحت تأثير المغناطيسي الخارجي بحيث قمنا بحل المعاد لتين Poisson-Schrödinger بطريقة عددية، فحسبنا محطات الطاقة ودالة الحالات السبينية في النقطة الكمونية و وتحققنا من مفعول زيمان، تضاعف مستويات الطاقة وكذالك حسبنا معامل -g- back في عدة اتجاهات للحقل المغناطيسي ثم درسنا المعاملات التي تؤثر عليه بالإضافة إلى ذلك، حسبنا معامل -g- لمال النظرية للترانزستور (Ser) و منطول زيمان، تضاعف مستويات الطاقة وكذالك حسبنا معامل -g- back في عدة اتجاهات للحقل المغناطيسي ثم درسنا المعاملات التي تؤثر عليه بالإضافة إلى ذلك، من خلال الدراسة النظرية للترانزستور (Ser) و مخطط الطاقة المقاس تجريبيا لكولوم الماس (Coulomb diamant de) من خلال الدراسة النظرية المرانية المتشكلة بين النقطة الكمونية و الأقطاب فوجدنا اختلاف بين الدراسة النظرية والتحريبية و لحل هذه المشكلة ، افترضنا أن النقطة الكمونية ليست متمركزة في البئر الكموني بشكل متناظر ويمكن والتجريبية و لحل هذه المشكلة ، افترضنا أن النقطة الكمونية ليست متمركزة في البئر الكموني بشكل متناظر ويمكن والتجريبية و لحل هذه المشكلة ، المتران النقطة الكمونية ليست متمركزة في البئر الكموني بشكل متناظر ويمكن والتجريبية تقريبا على يتور الموجودة تحت السلك (Ser) مما يؤدي الى ووجود نقاط كمونية الموري النقطة الكمونية و الأقطاب فوجنا اختلاف بين الدر اسة النظرية والتجريبية و لحل هذه المشكلة ، افترضنا أن النقطة الكمونية ليست متمركزة في البئر الكموني بشكل متناظر ويمكن والتجريبية يوري الى ووجود تحت السلك (Ser) مما يؤدي الى ووجود نقاط كمونية أورى ويمكن مناير من يؤرى الكموني بشكل متناظر ويمكن منوبي يألمون يؤدى الى ووجود نقاط كمونية المورى ويمكن مالا علي نتائج موافقة للنتائج التجريبية تقريبا.