

SOUTENANCE DE THESE

Lucie PRUSSEL



Mercredi 27 septembre 2017 à 14h00

Amphi BECQUEREL- Ecole polytechnique

Description ab-initio de propriétés optiques non-linéaires de matériaux semi-conducteurs soumis à un champ électrostatique

La connaissance des propriétés optiques est fondamentale pour l'amélioration des matériaux et des dispositifs non-linéaires. Elle offre la possibilité de chercher de nouveaux matériaux ayant des propriétés bien spécifiques. Une façon de moduler certaines de ces propriétés est d'appliquer un champ électrostatique sur les matériaux, donnant lieu à des effets électro-optiques. Ce champ statique peut être appliqué volontairement sur le système ou être déjà présent dû à la structure du matériau : par exemple à une interface une accumulation de charges se crée générant un champ électrostatique à l'intérieur du matériau. Un des effets électrostatiques les plus connus est l'effet Pockels ou effet électro-optique linéaire (LEO). Il s'agit d'une réponse du second ordre correspondant à une correction à la réponse optique linéaire en présence d'un champ statique.

Un important processus non-linéaire est la génération de seconde harmonique (SHG), où deux photons sont absorbés par le matériau et un photon est émis à une énergie deux fois plus grande que celle du photon incident. Ce processus est très sensible à la symétrie du matériau. En effet, si le système étudié présente une symétrie d'inversion alors la réponse de seconde harmonique sera nulle. Cependant ajouter un champ statique à l'intérieur du matériau permettrait de générer une réponse du second ordre dans n'importe quels matériaux, qu'ils soient ou non centrosymétriques. Ce phénomène est un processus de troisième ordre appelé EFISH (Electric Field Induced Second Harmonic).

Le but de ma thèse était de calculer théoriquement et numériquement les réponses optiques linéaires et non-linéaires (deuxième harmonique) de matériaux soumis à un champ électrostatique, soient les corrections au premier et second ordre LEO et EFISH.

J'ai calculé ces deux réponses dans le cadre d'un formalisme ab-initio, reposant sur la TDDFT (Time-Dependent Density Functional Theory), pour des matériaux semi-conducteurs ou isolants. Ces calculs ont, dans un premier temps, été appliqués à des matériaux massifs simples de type carbure de silicium (SiC), arséniure de gallium (GaAs), etc, pour valider notre formalisme. Ils ont ensuite été appliqués à des matériaux plus complexes d'intérêt technologiques comme Si/Ge et des matériaux sous contrainte.