



UNIVERSITE DE MONASTIR
FACULTE DES SCIENCES DE MONASTIR

CURRICULUM VITAE

et

DOSSIER PERSONNEL

de

Moncef Said

Professeur en Physique dans l'Enseignement Supérieur

TABLE DES MATIERES

I CURRICULUM VITAE

Cursus universitaire

Activités d'enseignement

Séjours scientifiques

Collaborations internationales

Collaborations nationales

Divers

Participations à des conférences internationales

Participations à des conférences nationales

Publications

II ACTIVITES PEDAGOGIQUES

III ACTIVITES DE RECHERCHES

Formation doctorale

Etudes post-doctorales

Activités de recherches actuelles

IV SUJET DE RECHERCHE ENVISAGE

I CURRICULUM VITAE

Nom: SAID
Prénom: Moncef
Né-le: 10 Janvier 1955 à Ghedabna (Mahdia, Tunisie)



Adresse professionnelle: Département de Physique, Faculté des Sciences de Monastir, Avenue de l'Environnement 5019, Monastir, Tunisie

Téléphones: + 216 73.500 276
Fax: + 216 73 500 278
E-mail: Moncef.said@fsm.rnu.tn
Moncef_said@yahoo.fr

Adresse personnelle: Route de la Plage, Ghedabna, 5136 Mahdia, Tunisie

Téléphones: +216 98 951 535
+216 73 532 807

Situation familiale: Marié, père de deux enfants.

Langues: Arabe, Français, Anglais, Allemand (Débutant).

Cursus universitaire:

- Faculté des Sciences de Tunis (FST).
 - . **1975-78:** DEUS Maths - Physique
 - . **1978-80:** Maîtrise de Physique

- Faculté des Sciences, Université Paul Sabatier de Toulouse, France.
 - . **1980-81:** Diplôme d'Etudes Approfondies (D.E.A), Physique des Solides
 - . **1981-83:** Doctorat de 3ème cycle, Physique des Solides, soutenu le 10 juin 1983

- Faculté des Sciences, Université de Paris 7, France.
 - . **1983-87:** Doctorat d'Etat soutenu le 30 juin 1987

Activités d'enseignement:

- . **1983-84**: Assistant Contractuel à l'Université Paris 7, France.
- . **1985-87**: Professeur Vacataire au CNAM de Paris, France.
- . **1986-87**: Assistant Associé (demi-service) à l'Université Paris 6, France.
- . **1994-96**: Maître-assistant à l'Institut Préparatoire aux Etudes d'Ingénieurs de Monastir.
- . **1996-98**: Maître de Conférences à l'Ecole Supérieure des Sciences et Techniques de Tunis.
- . **En 1998**: muté à la Faculté des Sciences de Monastir (FSM).
- . **En 2001**: nommé professeur à la FSM.

Séjours scientifiques:

*** *Au cours des études doctorales:***

- Laboratoire de Physique des Solides, Université Paul Sabatier, Toulouse, France,
(**1980-81**): Stage de DEA.
- Laboratoire de Physique Quantique, Université Paul Sabatier, Toulouse, France,
(**1981-83**): Thèse de 3ème cycle.
- Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris 6, France,
(**1983-87**): Thèse d'Etat.

*** *Post-doctoral:***

- Fritz Haber Institut der Max Planck Gesellschaft, Berlin, R.F.A (**1987-89**): Post doctoral
(Boursier de la Fondation Alexander von Humboldt).
- Commissariat à l'Energie Atomique, Saclay, France (**1989-91**): Collaborateur Scientifique.
- Institut de Physique, Université d'Aarhus, Danemark (**1991-93**): Visiteur Scientifique.
- Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord, Lille, France
(**01/11/93 au 31/03/94**): Chercheur Invité.
- Département de Physique, Université de Modena, Italie (**01/04/94 au 15/12/94**): Visiteur
Scientifique.
- Professeur Invité à l'Ecole Supérieure d'Ingénieurs de Luminy-Marseille (1mois juin 2003).
- Professeur Invité à l'université de Franche Comte, Besançon (2 mois: mars-avril 2004).
- Professeur Invité à l'université Paul Verlaine, Metz France (1mois: mars 2010).
- Professeur Invité à l'université Paul Sabatier, Toulouse France (2 mois: mars, mai 2011).
- Professeur Invité à l'université de Paris 11, Orsay, France (1 mois: mars 2012).

Collaborations Internationales:

- Département de Physique, Université de Modena, Italie.
- **CINAM**, Université Méditerranée, Marseille, France.
- Centre d'Elaborations de Matériaux et d'Etudes Structurales (CEMES), Toulouse.
- Institut de Physico-Chimie de Matériaux de Strasbourg (IPCMS), Strasbourg.
- Institut d'Electronique Fondamentale (IEF), université de Paris Sud, Orsay.
- IEMN, ISEN, Lille, France.
- Max Planck Institute of Microstructure Physics, Halle, Allemagne.

Collaborations nationales:

- Unité de Recherche de Physique Quantique, FSM.
- Unité de Recherche : Propriétés physiques des hétéro-structures, FST.
- Laboratoire des matériaux avancés et des phénomènes quantiques, FST

Divers:

- Membre associé au Centre International de Physique Théorique de Trieste de **1998-2005**.
- Directeur du Laboratoire de la Matière Condensée et des Nanosciences (LMCN).
- Membre du Conseil Scientifique de la Faculté des Sciences de Monastir durant **2002-2005**.
- Membre du Conseil Scientifique de l'Université de Monastir durant **2005-2008**.
- Membre du Conseil Scientifique de la Faculté des Sciences de Monastir durant 2008-2011.
- Membre de la commission nationale de recrutement ou de promotion au grade de Maitre assistant en physique au titre des années 2010 et 2011.
- Coordinateur du mastère "*Physique des Nanostructures et Applications*", FSM, Monastir.
- Membre de la commission nationale sectorielle de physique pour l'évaluation du projet LMD.

Participations à des conférences internationales:

- 1) Workshop on the Mono-electronic Methods of Calculation and Pseudopotentials, Toulouse (France), Sept. 1981.
- 2) Workshop on the Interaction of Configuration, Toulouse (France), Sept. 1982.
- 3) 2nd Int. Conf. on Shallow Impurity Centers, Trieste (Italy), July 1986.
- 4) 18th Int. Conf. Phys. Semicon. Stockholm (Sweden), August 1986.
- 5) 14th Int. Conf. on Defects in Semicon., Paris (France), August 1986.

- 6) 10th European Conf. on Surf. Sci. (ECOSS10), Bologna (Italy), Sept. 1988.
- 7) Int. Conf. on Applications of Density Functional Theory to Chemical and Physical Properties of Inorganic Systems, Arles (France), Sept. 1988.
- 8) 4th Int. Workshop on Computational Condensed Matter Physics “*Total Energy and Forces Methods*”, Trieste (Italy), January 1989.
- 9) Spring Conf. of the German, Phys. Soc., Munster (FRG), April 1989.
- 10) 4th Int. Conf. on II-VI Compounds, Berlin-West (FRG), Sept. 1989.
- 11) 11th Int. Vac. Congress (IVC-11) & 7th Int. Conf. on Solid Surfaces (ICSS-7), Cologne (FRG), Sept. 1989.
- 12) Int. Workshop on Total Energy and Force Methods, Paris (France), January 1990.
- 13) Int. Conf. Phys. of Trans. Metals, Darmstadt (Germany), July 1992.
- 14) Elec. Str. of Sol.: At the Comp. Leading Edge, Cambridge (UK), Sept. 1992.
- 15) Workshop on Quantum Theory of Solids, Aarhus (Denmark), Sept. 1992.
- 16) 19th Annual Meeting on Advances in Surface and Interface Physics, Modena (Italy), Dec. 1994.
- 17) European Meeting on Electronic Properties of Semiconductors and Insulators, Rome (Italy), Sept. 1995.
- 18) 5^{ème} Journées maghrébines sur les Sciences des Matériaux, Hammamet (Tunisie), 1996.
- 19) Mini Workshop on Quantum Wells, Dots, Wires and Self-Organized Nanostructures Trieste (Italy), August 1997.
- 20) Workshop on Computational Techniques for Strongly Correlated Systems, Trieste (Italy), July 1999.
- 21) The 1st Stig Lundqvist Res. Conf. on the Adv. Front. in Cond. Mat. Phys.: Quantum Phases in Electron Systems of Low Dimensions, Trieste (Italy), July 1999.
- 22) Workshop on Calculation of Material Properties using Total Energy and Force Methods and *ab initio* Molecular Dynamics, Trieste (Italy), August 1999.
- 23) 6th Int. Meeting on Materials Science, University of M'Sila (Algeria), April 2000.
- 24) Spring College on Electronic Structure Approaches to the Physics of Materials, Trieste (Italy), June 2000.
- 25) Workshop on Correlation Effects in Electronic Structure Calculations, Trieste (Italy), June 2000.
- 26) Summer School on Low Dimensional Quantum Systems: Theory and Experiment, Trieste (Italy), July 2001.
- 27) 7^{ème} Journées maghrébines sur les Sciences des Matériaux, Bizerte (Tunisie), March 2002
- 28) Workshop on Mesoscopic Physics and Electron Interaction, Trieste (Italy), June 2002.

- 29) Conference on the Science and Technology of Spin Transport in Nanostructures, Trieste (Italy), August 2002.
- 30) International Meeting of Materials Science-6, M'Sila (Algeria), March 2003.
- 31) E-MRS, Strasbourg (France), June 2003.
- 32) Targeted Training Activity: Course on Climate Dynamics for Climate Research Centers and University Lecturers, Trieste (Italy) August 2004.
- 33) Conference on Strongly Interacting Systems at the Nanoscale, Trieste, August 2005.
- 34) Psi-K 2005 conference Schwaech Gmuend (17) September 2005.
- 35) 2^d International Meeting on Materials for Electronic Applications, IMMEA2009, Hammamet Tunisie, mai 2009.
- 36) International Conference on Nano-Materials and Renewable Energies (ICNMRE) Safi, Morocco, juin 2010.
- 37) The First International Conference on "Research to Applications & Markets", RAM, Monastir, Tunisia, june 23-25, 2011
- 38) Humboldt-Kolleg, "New prospects and challenges for Science and Education in the MENA region", Marrakech (Morocco), march 9-11, 2012.
- 39) Humboldt-Kolleg'12, Nanoscale Science and Technology "NS&T'12", Hammamet (Tunisia), 17-19 march, 2012.
- 40) Second Euro-Mediterranean Conference on Materials and Renewable Energies (EMCMRE-2), Istres France, 10-14 June 2013 (advisory committee) and invited Speaker.
- 41) The Second International Conference on "Research to Applications & Markets", RAM, Humboldt-Kolleg 28-30 June 2013, co-organizer.

Participations à des conférences nationales:

- 1) 5^{ème} Colloque Nationale de Recherche en Physique, Hammamet (Tunisie), mars 1995.
- 2) 6^{ème} Colloque Nationale de Recherche en Physique, Hammamet (Tunisie), mars 1999.
- 3) 7^{ème} Colloque Nationale de Recherche en Physique, Hammamet (Tunisie), décembre 2003.
- 4) 9^{ème} Colloque Nationale de Recherche en Physique, Hammamet (Tunisie), mars 2008.

Publications:

- 1) *Looking at chemistry as spin ordering problem*, D. Maynau, M. Said, J.P Malrieu, J. Amer. Chem. Soc. 105,5244 (1983).
- 2) *Styrene cis-trans photoisomerisation treated through an Heisenberg non-empirical hamiltonian*, M. Said, J.P Malrieu, Chem. Phys. Letters, 102, 312 (1983).
- 3) *A non-empirical Heisenberg hamiltonian for the study of conjugated hydrocarbons: ground state configurational studies*, M. Said, D. Maynau, J.P Malrieu, M.A Garcia-Bach, J. Amer. Chem. Soc. 106, 571, (1984).
- 4) *Excited state properties of linear polyene studies through a non-empirical Heisenberg hamiltonian*, M. Said, D. Maynau, J.P. Malrieu, J. Amer. Chem. Soc. 106, 580 (1984).
- 5) *Higher excited states of acceptors in cubic semiconductors*, M. Said, M. A. Kanéhisa, M. Balkanski, Solid State Commun. 571, 417 (1986).
- 6) *Higher excited states of acceptors in ZnTe*, M. Said, M. A Kanehisa, M. Jouanne, Proc. 18th ICPS, edit. O. Engtrom, World Scientific 98, 3 (1987).
- 7) *Higher excited states of acceptors in cubic semiconductors*, M. Said, M.A. Kanehisa, M. Balkanski, Y. Saad, Phys. Rev. B 35, 687 (1987).
- 8) *Electronic Raman scattering from acceptors in ZnTe*, M. Said, M. Jouanne, M. A. Kanehisa, M. Balkanski, J. Phys. C 20, 2917 (1987).
- 9) *Excited states of acceptors in cubic semiconductors: Central-cell effect in ZnTe*, M. A Kanehisa, M. Said, Shallow Imp. Semicon. 1988, Inst. Phys. Conf. Ser. No 95, edit. B. Monemar, 383 (1989).
- 10) *The influence of central-cell potential on the higher excited acceptor states in ZnTe*, M. A. Kanehisa, M. Said, J. Phys. C 21, 4637 (1988).
- 11) *Excited states of acceptors in CdTe and ZnTe*, M. Said, M. A Kanehisa, J. Crystal Growth 101, 488 (1990).
- 12) *Excited acceptor states in II-VI and III-V semicon.*, M. Said, M. A. Kanehisa, Phys. Stat. Sol. (b) 15, 311 (1990).
- 13) *Electronic structure of fcc and bcc close-packed silver surfaces*, M. Said, F. Maca, K. Kambe, M. Scheffler, N. E. Christensen, Phys. Rev. B 38, 8505 (1989).
- 14) *Electronic structure and angular resolved photoemission calculations for fcc and bcc silver surfaces*, F. Maca, M. Said, K. Kambe, M. Scheffler, Vacuum, 41, 538 (1990).
- 15) *Surfaces core level shifts in bcc transition metals*, M. Said, M. C Désjonquères, D. Spanjaard, Phys. Rev. B 47, 4722 (1993).

- 16) Core level shifts at bcc transition metal surface deduced from the calculation of surface segregation energies, M. Said, M. C. Désjonquères, D. Spanjaard, *Surf. Sci.* **287**, 780 (1993).
- 17) Electronic structure of rare earth arsenide/gallium arsenide superlattices, M. Said, C. M. Bertoni, A. Fasolini, S. Ossicini, *Sol. State. Commun.* **100**, 477 (1996).
- 18) First-principles electronic structure of rare-earth arsenides, M. Said, F. Ben Zid, C. M. Bertoni, S. Ossicini, *Euro. J. Phys. B* **23**, 191 (2001).
- 19) Electronic band parameters for zinc-blende $Al_{1-x}Ga_xN$, A. Bhourri, F. Ben Zid, H. Mejri, A. Ben Fredj, N. Bouarissa and M. Said, *J. Phys.: Condens. Matter.* **14**, 7017 (2002).
- 20) Electronic structure and optical properties of $Si_{1-x}Ge_x$ alloys, F. Ben Zid, A. Bhourri, H. Mejri, M. Said, N. Bouarissa, J.-L. Lazzari, J. Derrien, *Physica B: Condens. Matter.* **322**, 225 (2002).
- 21) Stark effect modeling in strained n-type $Si/Si_{1-x}Ge_x$ resonant tunneling heterostructures, F. Ben Zid, A. Bhourri, H. Mejri, R. Tlili, M. Said, J.-L. Lazzari, F. Arnaud D'Avitaya, J. Derrien, *J. Appl. Phys.* **91**, 9170 (2002).
- 22) Electric-field-dependent intersubband transitions for a $Si_{1-x}Ge_x/Si$ resonant tunneling heterostructure, H. Mejri, F. Ben Zid, A. Bhourri, A. Ben Fredj, M. Said, J.-L. Lazzari, J. Derrien, *Physica B: Condens. Matter.* **322**, 37 (2002).
- 23) Electronic structure calculations for $Si/Si_{1-x}Ge_x$ multi quantum well devices, F. Ben Zid, A. Bhourri, H. Mejri, M. Said, N. Bouarissa J.-L. Lazzari, F. Arnaud d'Avitaya and J. Derrien, *Mat. Sci. & Eng. C* **23**, 959 (2003).
- 24) Modeling of visible and near infrared wavelength quantum well devices in zinc-blende $In_xGa_{1-x}N$. A. Bhourri, H. Mejri, F. Ben Zid, H. Belmabrouk, M. Said, N. Bouarissa and J.-L. Lazzari, *J. Phys: Condens. Matter.* **16**, 511 (2004).
- 25) Band offset calculations applied to III-V nitrides quantum well devices engineering, A. Bhourri, A. Ben Fredj, J.-L. Lazzari and M. Said, *Superlattices and Microstr.* **36**, 799 (2004).
- 26) Wave function engineering in W designed strained-compensated $Si/Si_{1-x}Ge_x/Si$ type II quantum wells for 1.55 μm optical properties, N. Sfina, J.-L. Lazzari, F. Ben Zid, A. Bhourri and M. Said, *Opt. Materials* **27**, 859 (2005).
- 27) Optoelectronic properties on zinc blende $ZnSSe$ and $ZnBeTe$ alloys, S. Abdi-Ben Nasrallah, S. Ben Afia, H. Belmabrouk and M. Said, *Euro. Phys. J. B* **43**, 3 (2005).
- 28) Electronic structures calculations for ZnS_xSe_{1-x} , S. Ben Afia, H. Belmabrouk, M. Said, S. Abdi-Ben Nasrallah and N. Bouarissa, *Mater. Sci. and Eng C* **25**, 691 (2005).
- 29) Electronic Properties of Intersubband Transition in $(CdS/ZnSe)/BeTe$ Quantum Wells, S. Abdi-Ben Nasrallah, N. Sfina, and M. Said, *Euro. Phys. J. B* **47**, 167 (2005).
- 30) Strain-balanced $Si_{1-x}Ge_x/Si$ Type II quantum wells for Designed with N, W and M-like

potential profiles for 1.55 μm detection and emission, N. Sfina, J.-L. Lazzari, J. Derrien, F. Arnaud D'Avitaya and M. Said, *Eur. Phys. J. B* 48, 151 (2005).

31) Field effect on optical recombination in Si/SiGe quantum heterostructures having U, W and M type II potential designs N. Sfina, J.-L. Lazzari and M. Said, *Mater. Sci. and Eng B.* 124, 470 (2005).

32) Modelisation of optoelectronic device based on Si/SiO₂ emitting red light, S. Abdi-Ben Nasrallah, N. Sfina, A. Bouazra, and M. Said, *Materials Sci and Eng B.* 124, 479 (2005).

33) Modeling of ZnS_xSe_{1-x}/ZnS_ySe_{1-y} band offsets and QW for green-yellow applications, S. Abdi-Ben Nasrallah, N. Sfina, N. Bouarrissa, and M. Said, *J. Phys. Condens. Matter.* 18 3005 (2006).

34) Effect of nitrogen concentration on the electronic and vibrational properties of zinc-blende InN_xP_{1-x} ($x < 0.01$), M. Debbichi, A. Ben Fredj, A. Bhourri, N. Bouarissa and M. Said, *Eur. Phys. J. B* 51, 17 (2006).

35) Field effect on electron-hole recombination in Si/Si_{1-x}Ge_x/Si quantum wells having a W-like type II potential profile, N. Sfina, J.-L. Lazzari and M. Said, *Materials Sci and Eng C.*, 26, 214 (2006).

36) Electronic properties of zinc-blende Sc_xGa_{1-x}N, A. Ben Fredj, Y. Oussaifi, N. Bouarissa and M. Said, *Phys. Stat. Sol (b)* 243, 2780 (2006).

37) Induced electrostatic confinement of electron gas in W designed strain-compensated Si/Si_{1-x}Ge_x/Si type II quantum wells, N. Sfina, J.-L. Lazzari, P. Christol, Y. Cuminal, M. Said, *J. Lumin.* 121, 421 (2006).

38) Modeling of the Stark effect in strained Ge_{0.6}Si_{0.4}/Si/Ge_{0.6}Si_{0.4} resonant tunneling diodes with graded Ge_xSi_{1-x} ($0.3 < x < 0$) spacer emitter and collector, N. Sfina, S. Abdi-Ben Nasrallah, J.-L. Lazzari and M. Said, *Mat. Sci. Semicond. Proc.* 9, 737 (2006).

39) Carrier transport and related phenomena in MOS devices A. Bouazra, S. Abdi-Ben Nasrallah, A. Poncet and M. Said, *Mat. Sci. Semicond. Proc.* 9, 989 (2006).

40) Nitride-based quantum-well lasers on InAs substrate for midwave-infrared emission, M. Debbichi, A. Ben Fredj, A. Bhourri, M. Saïd, J.-L. Lazzari, P. Christol, Y. Cuminal, A. Joullié and V. Kononenko; *14th Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology"*, St Petersburg, Russia, June 26-30, (2006).

41) Elastic properties and optical phonon frequencies of zinc-blende Sc_xGa_{1-x}N, Y. Oussaifi, A. Ben Fredj, M. Debbichi, N. Bouarissa and M. Said, *Semicond. Sci. Technol.* 22, 641 (2007).

42) A novel quantum laser structure based on InAsN/GaSb system M. Debbichi, A. Ben

Fredj, A. Bhourri, M. Saïd, J.-L. Lazzari, Y. Cuminal, A. Joullié and P. Christol, *Phys. Stat. Solidi (c)* **4**, 592 (2007).

43) Influence of the composition fluctuation and the disorder on the bowing band gap in semiconductor materials, A. Ben Fredj, M. Debbichi and M. Said, *Microelectronics J.* **38**, 860-870 (2007).

44) Nitrogen effect on optical gain and radiative current density for mid-infrared InAs(N)/GaSb/InAs(N) quantum-well laser, M. Debbichi, A. Ben Fredj, M. Saïd, J.-L. Lazzari, Y. Cuminal, and P. Christol, *Physica E* **40**; 489-493 (2008).

45) Optical gain calculation of mid-infrared InAsN/GaSb quantum-well laser for tunable absorption spectroscopy applications, M. Debbichi, A. Ben Fredj, A. Bhourri, M. Saïd, J.-L. Lazzari, Y. Cuminal, A. Joullié, and P. Christol. *Mat. Sci. and Eng. C* **28**, 751 (2008).

46) Coulomb interaction of electron gas in MQWs Si/Si_{1-x}Ge_x/Si, N. Sfina, J.-L. Lazzari, Y. Cuminal, P. Christol and M. Said, *Materials Sci and Eng. C*, **28**, 939 (2008).

47) Simulation of p-i-n heterojunctions built on strain-compensated Si/Si_{0.40}Ge_{0.60}/Si multiple quantum wells for photodetection near 1.55 μm, N. Sfina, J.-L. Lazzari, Y. Cuminal, P. Christol, M. Said *Thin Solid Films* **517** 388, (2008).

48) Current tunneling through MOS devices A. Bouazra, S. Abdi-Ben Nasrallah, A. Poncet and M. Said, *Materials Sci. and Eng. C* **28**, 662 (2008).

49) Current tunneling in MOS devices with Al₂O₃/SiO₂ gate dielectric, A. Bouazra, S. Abdi-Ben Nasrallah, A. Poncet and M. Said, *Research Letter in Physics* volume 2008 (2008).

50) Gate leakage properties in (Al₂O₃/HfO₂/Al₂O₃) dielectric of MOS devices S. Abdi-Ben Nasrallah, A. Bouazra, A. Poncet and M. Said, *Thin Solid Films* **517**, 456 (2008).

51) Elastic Properties and optical phonon frequencies of Zinc-Blende Y_xGa_{1-x}N and band offsets of Y_xGa_{1-x}N/ Sc_yGa_{1-y}N heterointerfaces, Y. Oussaifi A. Ben Fredj, M. Debbichi, N. Bouarissa and M. Said, *Semicond. Sci. Technol.* **23**, 095019 (2008).

52) Energy-band structure and optical gain in strained InAs(N)/GaSb/InAs(N) quantum well lasers, S. Ridene, M. Debbichi, A. Ben Fredj, M. Said and H. Bouchriha, *J. Appl. Phys.* **104**, 063706 (2008).

53) InAsN/GaSb/InAsN "W" quantum well laser for mid-infrared emission: from electronic structure to threshold current density calculations, M. Debbichi, A. Ben Fredj, Y. Cuminal, J.-L. Lazzari, S. Ridene, H. Bouchriha, M. Saïd and P. Christol, *J. Phys D, Appl. Phys* **41** 215106, (2008).

54) Theoretical study of laser structures based on the dilute nitride InAsN for mid-infrared

- operation, M. Debbichi , S. Ridene , H. Bouchriha , A . Ben Fredj , M .Saïd J.-L.Lazzari , Y. Cuminal and P. Christol, *Semicond Sci & Tech*, 24, 085010, (2009).
- 55) *Theoretical comparison of dilute-nitride “W” and “M” InAsN/GaSb Mid-infrared laser diodes*, M. Debbichi , A . Ben Fredj, M. Said, S. Ridene, H. Bouchriha, Y. Cuminal and P. Christol, *Phys, Chem. and Appl. Nano*, pp 597-600 (2009).
- 56) *Numerical simulation of a coupling effect on electronic states in quantum wires*, A. Bouazra, S. Abdi-Ben Nasrallah, A. Poncet, Y. Bouazra and M. Said, *Eur. Phys. J. B* 67,245, (2009).
- 57) *Modelling of strained ZnSSe on relaxed ZnSSe-based structures for blue light emission*, S. Abdi-Ben Nasrallah, N. Sfina, M. Said, *Physica E* 41, 564, (2009).
- 58) *Absorption coefficient of Intersubband transition at 1.55 μ m in (CdS/ZnSe)/BeTe quantum wells*, N. Sfina, S. Abdi-Ben Nasrallah, S. Mnasri and M. Said, *J. Phys D, Appl. Phys* 42, 045101 (2009).
- 59) *Electronic, lattice vibration and mechanical properties of CdTe, ZnTe, MnTe, MgTe, HgTe and their ternary alloys*, S Mnasri, S Abdi-Ben Nasrallah, N Sfina, N Bouarissa and M Said, *Semicond Sci & Tech*, 24, 095008, (2009)
- 60) *Growth of perfect and smooth Ag and Co monatomic wires on Pt vicinal surfaces: A kinetic Monte Carlo study*, H. Garbouj, Moncef Said, Fabien Picaud, Christophe Ramseyer, Daniel Spanjaard and Marie-Catherine Desjonquères *Surf. Sci.* 603, 22 (2009).
- 61) *Probing defect species on real surfaces from the analysis of the spectral profile of admolecules*, Hanen Zorgati, Moncef Said, Christophe Ramseyer and Claude Girardet, *Surf. Sci.* 603, 886 (2009).
- 62) *Theoretical study of the Ni growth on Pt stepped surfaces*, Essolaani Wafa, Garbouj Hedi, Said Moncef, Picaud Fabien, Ramseyer Christophe, Spanjaard Daniel and Desjonquères Marie-Catherine, *Surf. Sci.* 603, 2879(2009).
- 63) *Numerical simulation of a coupling effect on electronic states in quantum dots*, A. Bouazra, S. Abdi-Ben Nasrallah, A. Poncet and M. Said, *Superlattices and Microstructures* 48, 1, (2010).
- 64) *Theoretical investigation of intersubband transition energies and oscillator strength in CdS/SiO₂ quantum dots* S. Abdi-Ben Nasrallah, A. Bouazra, A. Poncet, M. Said, *Physica E*,43,146, (2010).
- 65) *Modelling of InAs/GaSb/InSb short-period superlattice laser diode for mid-infrared emission by the k.p method*, S Ben Rejeb, M Debbichi, M Said, A Gassenq, E Tournié and P Christol, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 43, 325102 (2010).
- 66) *Optical performances of InAs/GaSb/InSb short-period superlattice laser diode for mid-*

infrared emission, S Ben Rejeb , M Debbichi , M Said , A Gassenq , E Tournié and P Christol, J. Appl. Phys. 108, 093107 (2010).

67) Modelling the Cu mono-atomic wire formation on Pt vicinal surfaces using kinetic Monte Carlo simulations, H Garbouj, M Said, Christophe Ramseyer and Fabien Picaud, Mod. and Simul. in Mat. Sci and Eng.,18, 085009 (2010).

68) Spin polarization and spin-dependent transmittance in II–VI diluted magnetic semiconductor heterostructure, S. Mnasri, N. Sfina, S. Abdi-Ben Nasrallah, J.-L. Lazzari and M. Said, J. Mag. Mag Mat., 323, 334 (2011).

69) Formation of one-dimensional ordered alloy at step edges: An atomistic study of the the (2×1) Ni/Pt alloy on the Pt(997) surface, Wafa Essolaani, Fabien Picaud, Christophe Ramseyer, Pietro Gambardella, Moncef Saïd, Daniel Spanjaard and Marie-Catherine Desjonquères Surf. Sci. 605, 917 (2011).

70) Electrical field and temperature effects in 2D-2D resonant tunnelling diodes based on cubic InGaN/AlGaN, A. Bhourri, N. Yahyaoui, M. Debbichi, H. Mejri, J.-L. Lazzari, and M. Said, P hys. Status Solidi C 8, 1544 (2011).

71) Interfaces as design tools for the InAs/GaSb/InSb short-period superlattice for mid-infrared emission M Debbichi, S Ben Rejeb, L Debbichi, and M Said Semicond. Sci. Technol. 26, 095010, (2011).

72) A theoretical study of band structure properties for III–V nitrides quantum wells, S. Ben Rejeb, A. Bhourri, M. Debbichi, J.-L. Lazzari, M. Said, Superlattices and Microstructures 50, 277 (2011).

73) A multi-color quantum well photodetector for mid- and long-wavelength infrared detection, A Jdidi, N Sfina, S Abdi-Ben Nassrallah, M Saïd and J L Lazzari, Semicond. Sci. Technol. 26, 125019, (2011).

74) Spin-dependent transport in II-VI magnetic semiconductor resonant tunneling diode, S. Mnasri, S. Abdi-Ben Nasrallah, A. Bouazra, N. Sfina, and M. Said J. Appl. Phys. 110, 034303 (2011).

74) Calculation of band offsets in $Cd_{1-x}X_xTe$ alloys, $X = Zn, Mg, Hg$ and Mn and magnetic effects in $CdMnTe$, S. Abdi-Ben Nasrallah, S. Mnasri, N. Sfina, N. Bouarissa, M. Said, J. Alloys and Comp, 509, 7677 (2011).

75) Band Offset Calculation of $Cd_{1-x}X_xTe/Cd_{1-y}Y_yTe$ Interfaces, $X = Zn, Mg, Hg$ and Mn and Magnetic Effects in $CdMnTe$, S. Abdi-Ben Nasrallah, S. Mnasri, N. Sfina, N. Bouarissa, M. Said, Sensor Letters. 9,2343 (2011).

- 76) *Electronic Properties of GaSb Based Heterostructure for 3 μm Emission*, A. Jdidi, S. Abdi-Ben Nassrallah, N. Sfina, M. Saïd, and J.-L. Lazzari, *Sensor Letters*. **9**, 2257(2011).
- 77) *Intersubband Absorption and Optical Non Linearity in Asymmetric (CdS/ZnSe/BeTe) (ZnSe/BeTe) Quantum Wells* N. Zeiri, N. Sfina, S. Abdi-Ben Nasrallah, and M. Said, *Sensor Letters*. **9**, 2299 (2011).
- 78) *Si/Si_{1-x}Ge_x/Si-based quantum wells infrared photodetector operating at 1.55 μm* . N. Sfina, J.-L. Lazzari and M. Said. *Superlattices and Microstructures* **52**, 901(2012).
- 79) *Dependence of hole effective mass on nitrogen concentration in W-type strained InAs(N)/GaSb/InAs(N) quantum well lasers*, S. Ridene, M. Debbichi, M. Said and H. Bouchriha, *EPJB*, **85**,1,39 (2012).
- 80) *Effect of pressure on the energy band gaps of wurtzite GaN and AlN and electronic properties of their ternary alloys Al_xGa_{1-x}N*, Y. Oussaifi, A. Said, A. Ben Fredj, L. Debbichi, D. Ceresoli, M. Said, *Physica B* **407**, 3604 (2012).
- 81) *Intersubband resonant enhancement of the nonlinear optical properties in asymmetric (CdS/ZnSe) based quantum wells*, N. Zeiri, N. Sfina, S. Abdi-Ben Nasrallah and M. Said, *Superlattices and Microstructures* **51**, 587, (2012).
- 82) *Mn concentration and quantum size effects on spin-polarized transport through CdMnTe based magnetic resonant tunneling diode* S. Mnasri, S. Abdi-Ben Nasrallah, N. Sfina, J.-L. Lazzari and M. Saïd, *J. Nanoscience and Nanotechnology*, **12**, 8791 (2012).
- 83) *Intersubband resonant enhancement of the nonlinear optical properties in asymmetric (CdS/ZnSe)/X-BeTe based quantum wells*, N. Zeiri, N. Sfina, S. Abdi-Ben Nasrallah, M. Said, *Optical Materials*, **35**, 875 (2013).
- 84) *Computation of the electronic structure and direct-gap absorption spectra in Ge-rich Si_{1-x}Ge_x/Ge/Si_{1-x}Ge_x type-I quantum wells*. N. Yahyaoui, N. Sfina, J.-L. Lazzari, A. Bournel and M. Said. *E. J. Phys B* **86**, No 2, (2013).
- 85) *[hkl] orientation dependence of optoelectronic properties in InAsN/GaSb quantum well laser diodes with Wand M design*, A. Ben Ahmed, S. Ridene, M. Debbichi, M. Said and H. Bouchriha, *Semicond. Sci Technol* **28**, 065006 (2013).
- 86) *Intersubband transitions in quantum well mid-infrared photodetectors*, N. Zeiri, N. Sfina, S. Abdi-Ben Nasrallah, J.-L. Lazzari and M. Said, *Infrared Phys. Technol*, **60**,137 (2013).
- 87) *Hybrid Functional Study of Structural, Electronic and Magnetic Properties of S-doped ZnO With and Without Neutral Vacancy*, M. Debbichi, T.Sakhraoui, L. Debbichi and M. Said, *J. Alloys and Compounds* (accepted June 2013).

II ACTIVITES PEDAGOGIQUES

. **1983-84** Assistant contractuel à l'Université Paris 7, France.

| Matière | Niveau | Nature |
|--------------|--------------------------|-----------------|
| Electronique | 2ème année du DEUG (MPI) | Cours, TD et TP |

. **1985-87** Professeur vacataire au CNAM de Paris, France.

| Matière | Niveau | Nature |
|--------------|--------------------|-------------|
| Electronique | Formation continue | Cours et TD |

. **1986-87** Assistant associé (demi-service). - Université Paris 6, France.

| Matière | Niveau | Nature |
|-----------------|------------------------|--------|
| Thermodynamique | 1ère année de Maîtrise | TP |

. **1994-96** Maître-assistant à l'Institut Préparatoire aux Etudes d'Ingénieur de Monastir.

| Matière | Niveau | Nature |
|-------------|-----------------------|-------------|
| Mécanique | 1ère année (MPI) | Cours et TD |
| Electricité | 1ère année (MPI, PCI) | TD |

. **1996-98** Maître de conférences à l'Ecole Supérieure des Sciences et Techniques de Tunis.

| Matière | Niveau | Nature |
|--|------------|-------------|
| Electromagnétisme Relativité, Optique | 2ème année | Cours et TD |

. **Depuis 1998** muté à la Faculté des Sciences de Monastir (FSM).

| Matière | Niveau | Nature |
|---|---|--------|
| Electrostatique, Magnétostatique, Electrocinétiq ue, Mécanique, Electromagnétisme, Thermodynamique, Relativité, Optique, Mécanique Quantique | Premier Cycle (MPI, PCI, SM, MI) LFP1, LFP2, LFP3 | Cours |
| Physique des Solides, Etats électroniques et propriétés des Systèmes à dimensionnalité réduite, Physique des Semi-conducteurs | Mastère 1 & 2 | Cours |

III ACTIVITES DE RECHERCHES

Mes activités de recherches se sont déroulées en trois étapes : doctorale, post-doctorale et actuelle.

Formation doctorale:

Après mon stage de DEA effectué en 1981 au Laboratoire de Physique des Solides de l'Université Paul Sabatier de Toulouse (France), portant sur le sujet : «*Etude des propriétés optiques d'isolants à structures en feuillets*», j'ai préparé de 1981 à 1983 une thèse de 3^{ème} cycle à Toulouse puis de 1983 à 87 une thèse de doctorat d'état à Paris.

.1981-83: Laboratoire de Physique Quantique, Université de Toulouse, France.

Dans le cadre de la préparation de la thèse de 3^{ème} cycle et sous la direction de Monsieur J.P Malrieu, j'ai développé un modèle pour l'étude des états fondamentaux et excités des molécules conjuguées. Ce modèle consiste à écrire l'hamiltonien total de la molécule en fonction de l'intégrale d'échange effective et de la probabilité de trouver un arrangement singulier entre les atomes i et j liés. Ces travaux ont été présentés dans le contenu de ma thèse de 3^{ème} cycle portant sur le: «*Traitement des états fondamentaux et excités des molécules conjuguées à l'aide d'un hamiltonien de Heisenberg*». Ces travaux ont abouti aux publications [1-4].

.1983-87: Laboratoire de Physique des solides, Université de Paris 6, France.

Thèse de Doctorat d'Etat: Le sujet de ma thèse est: «*Etude des états excités accepteurs dans les semi-conducteurs II-VI et III-V*» [5-12]. Le calcul des états accepteurs peu profonds dans les semi-conducteurs de structure de type diamant ou blende, nécessite la résolution d'un système d'équations différentielles couplées. Les méthodes variationnelles habituellement utilisées à l'époque pour résoudre ce type de problème ne permettent pas de calculer que les tous premiers états excités de l'accepteur. Nous avons proposé une technique différente qui donne à la fois l'état fondamental et les états excités. Cette méthode consiste à convertir l'équation différentielle en équation de différence. On obtient ainsi une matrice d'environ 7000x7000 à diagonaliser. Nous avons développé et utilisé un algorithme, qui permet de simplifier le calcul de ces quelques états propres en diagonalisant une matrice de dimension considérablement réduite (50x50). Par cette méthode, nous avons pu déterminer les coefficients de Lüttinger de la bande de valence et en déduire, pour la première fois avec précision, les états $3S_{3/2}$, et d'ordre supérieur de l'accepteur. Ce travail, confronté aux

résultats expérimentaux dans le cas de ZnTe dopé au Li, P et As, a fait l'objet de publications [5,6,8]. Une étude systématique des impuretés dans les semi-conducteurs II-VI et III-V a été publiée dans la référence [7]. Dans un premier temps nous avons supposé que les états accepteurs peu profonds dans les semi-conducteurs soient décrits par l'approximation de la masse effective; cette approximation prévoit que dans un semi-conducteur donné, les niveaux d'impureté sont indépendants de l'espèce de celle ci. Nous avons amélioré cette approximation en tenant compte de l'effet de la taille de l'impureté (l'effet du déplacement chimique). L'accord avec l'expérience est excellent. Ce travail est publié dans les références [9-12].

Etudes post-doctorales:

Mes séjours effectués dans plusieurs institutions ont porté sur différents thèmes :

.1987-89 Institut Fritz-Haber der Max-planck Gesellschaft, Berlin, R.F.A.

«Calcul des structures électroniques des surfaces et des interfaces des métaux»[13,14]

Des résultats expérimentaux indiquent que l'argent (Ag) croît dans la structure cubique centrée (cc) jusqu'à plusieurs couches en épaisseur. Puisque l'argent cc n'était pas connu, nous avons accompli des calculs de l'énergie totale et de la structure électronique pour l'argent cfc et cc. A l'aide de la méthode de la fonction de Green, nous avons calculé les structures électroniques des surfaces des bas indices. Nous avons également fait des calculs de photo émission. Les premiers résultats de ce projet sont publiés dans [13,14]. Des études similaires pour les surfaces de fer et de cuivre ont été effectuées.

Nous avons commencé par généraliser la méthode citée ci-dessus et développer la méthode de la fonction de Green auto-consistante. Cette méthode permet d'étudier des problèmes des perturbations isolées ou étendues périodiquement. Cette méthode est conçue pour les métaux de transition et tous les autres matériaux pour lesquels l'approximation dite "Tin Muffin" en volume est bonne. Dans notre approche, nous commençons par calculer la fonction de Green de type KKR pour un cristal semi-infini avec des potentiels à symétrie sphérique "Tin Muffin". Après, nous déterminons de façon auto-consistante les corrections non "Tin Muffin" et autres en résolvant l'équation de Dyson. Cette méthode est très efficace pour l'étude de la spectroscopie tunnel à balayage.

.1990-91:Service de Physique des Atomes et des Surfaces, C.E.N., Saclay, France.

«Déplacement des niveaux de cœur à la surface des métaux de transition» [15,16].

Des nombreuses expériences ont montré que les spectres de photo émission des niveaux $4f_{5/2}$ et $4f_{7/2}$ des métaux de transition de la série 5d présentent au moins deux composantes dont l'une provient des atomes de surface et l'autre de volume. Ce déplacement de niveau de cœur entre surface et volume a été expliqué à l'aide de deux types d'approche. La première approche, microscopique, ne tient compte que des effets initiaux et donc néglige toute contribution à ce déplacement de la relaxation qui suit la création du trou de cœur. Ce modèle explique bien l'inversion du signe du déplacement entre Ta et W mais l'accord quantitatif entre théorie et expérience est nettement moins bon pour le Ta que le W et ceci d'autant plus que la surface est ouverte. La deuxième approche, thermodynamique, repose uniquement sur l'approximation de cœur équivalent et en absence de toute autre hypothèse, relie le déplacement de niveau de cœur entre surface et volume d'un métal de numéro atomique Z à l'énergie de ségrégation superficielle d'une impureté de numéro atomique $Z + 1$ dans ce métal. A l'aide de la méthode des liaisons fortes, nous avons calculé cette énergie de ségrégation en tenant compte non seulement de l'énergie de bande mais aussi de l'énergie de répulsion entre cœurs et en permettant à l'impureté de subir une relaxation atomique du moins en surface. L'accord entre l'expérience et la théorie est considérablement amélioré, mais reste non satisfaisant [15, 16]. Pour cela nous voulons obtenir ces énergies de ségrégation par des méthodes plus précises telle que la méthode LMTO et étendre ce travail à d'autres matériaux.

.1991-94: Institut de Physique Université d'Aarhus, Danemark.

Je me suis intéressé principalement au couplage magnétique entre couches métalliques séparées par des couches non magnétiques et au déplacement de niveau de cœur.

a) *«Couplage magnétique entre couches métalliques»*

Des résultats expérimentaux ont montré l'existence d'un couplage anti-ferromagnétique entre couches métalliques (Co, Cr, Fe, Ni) séparées par des couches non magnétiques (Ag, Cu, Mo, Mn). Ces systèmes présentent des oscillations entre couplage ferro et antiferro avec une période d'oscillations entre 10 à 15 Å pour des structures super réseaux et une période de 2 à 3 mono couches pour des structures "sandwich". L'interaction entre couches magnétiques séparées par des couches non magnétiques prend un grand intérêt théorique. Il est souvent supposé que l'interaction de type RKKY soit responsable de ces oscillations. Mais la période de ces oscillations est souvent très différente de celle prédite par la théorie conventionnelle de type RKKY. A notre connaissance, excepté des modèles simplifiés ou des cas particuliers, jusqu'à la période où nous avons entamé l'étude de ce

thème, il n'y a pas des vrais calculs *ab initio* pour l'étude de ce problème.

Nous avons calculé les énergies totales pour les cas ferromagnétiques (FM) et anti-ferromagnétiques (AFM) des super réseaux Ni/Cu, Fe/Mo, et "'sandwich" Fe/Mo/Fe jusqu'à huit couches en épaisseur de non magnétique (ex. Mo). Contrairement aux résultats expérimentaux, nous n'avons pas obtenu d'oscillations. La différence des énergies entre FM et AFM ne change pas de signe, excepté le cas où on passe d'une couche à deux mono couches de non magnétique.

Nous avons également étudié les cas de Fe/Cu, Fe/Mn, Fe/Nb et Fe/V dans une structure cubique centrée et nous avons eu des oscillations. Dans quelques cas, nos résultats sont quantitativement en accord avec ceux publiés, mais il y a des différences qui restent à comprendre. Nos résultats contredisent des hypothèses faites avec d'autres modèles de calcul.

b) «Déplacement des niveaux de cœur»

Afin d'améliorer l'accord entre expérience et théorie et à l'aide de la méthode LMTO, j'ai essayé de continuer les calculs de déplacement de niveau de cœur, comme étant l'énergie de ségrégation d'une impureté de $Z + 1$ dans un métal Z . J'ai envisagé également de calculer ce déplacement en excitant un électron de cœur.

.1994-95: Département de Physique. Université de Modena, Italie.

«Structures électroniques des hétérostructures Terre Rares / Semi-conducteurs»[17,18]

Depuis qu'il a été démontré expérimentalement qu'on peut faire croître des couches très minces des mono arséniures des Terres Rares (AsTR) sur l'Arséniure de Gallium (GaAs), par exemple (GaAs/ErAs/GaAs), les propriétés électroniques de ces hétérostructures sont de plus en plus étudiées. En effet, il a été suggéré que l'effet de confinement puisse permettre une transition semi-metal / semi-conducteur et ouvre la voie au développement de nouveaux composants électroniques tels que les transistors à base de métal. Cette suggestion est confirmée par une étude théorique basée sur un modèle simple de masse effective, mais contredite par une autre basée sur des calculs en liaisons fortes. Une étude théorique de ces systèmes est donc nécessaire. Nous avons commencé par calculer les structures de bandes et les densités d'états électroniques pour ErAs, YbAs, puis nous nous sommes intéressés à l'étude théorique des propriétés électroniques des hétérostructures (GaAs/ErAs/GaAs) et (GaAs/YbAs/GaAs) réalisées expérimentalement. Nous avons calculé les structures de bandes et les densités d'états partielles et totales d'une hétérostructure d'une ou de trois mono

couches de AsTR intercalées entre plusieurs couches de GaAs. Notre étude a montré l'existence d'une bande interdite, mais au-dessus du niveau de Fermi. Cela veut dire que l'effet de confinement n'est pas suffisant pour rendre GaAs/AsTR/GaAs semi-conducteur. Nous avons montré que cela est dû principalement à l'existence d'un état d'interface qui peut être sensible à la structure de l'interface. Nous avons étudié quelques hypothèses (introduction de l'Hydrogène à l'interface, changement de l'ordre d'empilement des mono couches,...) qui peuvent déplacer cet état d'interface, et éventuellement conduire à la transition semi-métal / semi-conducteur pour ces hétérostructures mais cela sans succès [17]. D'autres effets restent à étudier comme la relaxation de l'interface et il faut envisager d'autres Terres Rares.

Ceci nous a conduit à une étude systématique des propriétés électroniques des arséniures des Terres Rares et ce pour différentes configurations atomiques. En effet, l'une des questions à laquelle il faut répondre est: quelle est la configuration atomique la plus appropriée à utiliser pour construire le potentiel ? Ce travail a été commencé à Modena et a été poursuivi en Tunisie [18].

Activités de recherches actuelles:

L'activité de recherche de notre groupe s'articule autour de l'étude des propriétés électroniques, optiques et structurales d'un ensemble varié de matériaux et de dispositifs opérant dans un domaine de longueur d'onde allant de l'infrarouge jusqu'au bleu-ultraviolet. Elle consiste essentiellement aux thèmes suivants:

- (1) Propriétés optoélectroniques des dispositifs à base de SiGe
 - i) *Etude des propriétés électroniques et optiques des alliages SiGe et des hétérostructure à des puits quantiques Si/SiGe pour des applications micro et optoélectroniques*
 - ii) *Simulation des courants tunnel dans une hétéro structure à base de Si*
- (2) Structures électroniques des composés II-VI et III-V à base de Nitrures, massifs et bidimensionnels.
 - i) *Propriétés structurales et électroniques des composés II-VI*
 - ii) *Propriétés structurales et électroniques des composés III-V à base de nitrures*
 - iii) *Semiconducteurs magnétiques dilués*
- (3) Conception et modélisation de diodes lasers pour moyen infrarouge (3-5 μ m)
- (4) Nanostructuration d'adsorbats sur des surfaces vicinales et contrôle des morphologies

de surface à l'aide d'une théorie spectrale

i) Nanostructuration d'adsorbats sur des faces vicinales métalliques

ii) Théorie du contrôle spectral de la qualité d'une surface.

(I) Propriétés optoélectroniques des dispositifs à base de SiGe

I-a) Etude des propriétés électroniques et optiques des alliages SiGe et des hétérostructures à des puits quantiques Si/SiGe pour des applications micro et optoélectroniques» [20-23, 26, 30, 31, 35, 37, 38 ,46,47]

Le silicium est le matériau semi-conducteur le plus utilisé dans la technologie des circuits intégrés ULSI en microélectronique. De part sa maturité et son coût de production, cette technologie apparaît pérenne pour encore de nombreuses années. Conjointement, les semi-conducteurs III/V ont largement été développés pour les applications en optoélectronique de part la nature à gap direct de leur structure de bande et pour les applications en microélectronique ultra rapide suite à leurs grandes mobilités électroniques. Plus généralement, ceci est dû à une grande richesse dans l'ingénierie quantique avec les différentes filières III/V. Nonobstant, la recherche de composants de nanoélectronique toujours plus rapide et intégrable en technologie CMOS silicium d'une part, et la complexité toujours croissante des interconnexions métalliques d'autre part, amène cycliquement à envisager des technologies pour résoudre cette double dualité à moindre coût. Il est d'ailleurs probable qu'un recourt partiel à une connectique optique verra le jour dans le futur si tant est qu'un émetteur de rendement suffisant puisse être intégré sur silicium. Parmi ces technologies, on peut citer les techniques de report par collage de composants ou de couches et l'épitaxie avancée. Par épitaxie avancée, nous entendons l'épitaxie à l'échelle locale, sélective, latérale, sur couche adaptative ou substrat compliant. Ces mêmes progrès des méthodes de croissance épitaxiale se sont aussi appliqués à la filière IV/IV (Si, SiGe, SiGeC) sur silicium. Ils ont donné lieu à de récents succès avec les composants d'analogique et de logique hyperfréquence tels que le transistor bipolaire à hétéro jonction à base SiGe(C) (HBT, en production) ou les transistors à effet de champ à hétérostructure (HFET), à modulation de dopage (MODFET) et CMOSFET. Ces composants reposent sur des prémices d'ingénierie quantique : confinement quantique, levée de dégénérescence, réduction de la relaxation inter-vallées et mobilité accrue dans un canal Si (Ge) contraint. Il reste beaucoup à faire dans ce domaine tant sur le plan théorique qu'expérimental. C'est dans cet esprit et avec une approche conventionnelle que nous avons abordé cette thématique dans le cadre d'un contrat CMCU (1998-2000) entre la Faculté des Sciences de Monastir et le Laboratoire

CRMC2 (actuel CINAM) du CNRS associé à l'Université de la Méditerranée à Marseille. Ce travail entre dans le cadre des thèses de Faiez Ben Zid et Noureddine Sfina.

Dans un premier temps, nous avons commencé par calculer la structure de bande de l'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ métamorphique en utilisant deux méthodes: une, *ab initio* (LMTO) et une semi-empirique basée sur la technique du pseudo potentiel (EPM) hors ou dans l'approximation du cristal virtuel (VCA). Dans ce travail, nous avons étudié l'effet du désordre d'alliage et de structure sur les propriétés électroniques et optiques. Nous nous sommes en particulier intéressés aux paramètres de courbure "bowing" sur le gap, l'indice de réfraction et la constante diélectrique [20].

Dans une deuxième étape, nous avons déterminé, pour le système $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ contraint / $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ relaxé, le gap contraint, les discontinuités des bandes de conduction et de valence, les levées de dégénérescence et les masses effectives. De tels paramètres sont cruciaux dans la modélisation par ingénierie quantique des dispositifs et c'est pourquoi nous avons extrait des lois semi-empiriques utiles en fonction des compositions x et y . Ceci nous a conduit à confirmer que ce système présente un alignement de type II des bandes de conduction et de valence dans toute la gamme des compositions x et y [21]. Ce travail se poursuit par l'étude des lois de dispersion en énergie au voisinage des points critiques (masses effectives, non parabolicités).

Comme hétérostructure de dispositif potentiellement rapide, nous avons modélisé, à champ nul et en présence d'une polarisation, une diode tunnel résonnante à triple puits Si et double barrière 10nm-Si / 3nm- $\text{Si}_{0.40}\text{Ge}_{0.60}$ / 2nm-Si / 3nm- $\text{Si}_{0.40}\text{Ge}_{0.60}$ / 10nm-Si contraints entre deux barrières de $\text{Si}_{0.80}\text{Ge}_{0.20}$ relaxé de type n. En résolvant de façon auto-consistante les équations de Schrödinger et de Poisson, nous sommes intéressés à l'effet d'un champ électrique externe sur la population électronique et les niveaux d'énergie confinés dans les puits (effet Stark généralisé) et les fonctions d'onde. Des résultats essentiels ont été obtenus [22]: (i) un transfert de charge se produit entre les puits extrêmes via le puits central et il est dû à des résonances tunnel successives entre les niveaux quantiques (tunnel 2D-2D). (ii) Ce transfert de charge sature dans le domaine des faibles champs par suite du dé-confinement des niveaux du puits extrême. (iii) Nous avons en outre étudié l'effet de la température. Pour les mêmes raisons, à savoir l'effet Stark généralisé sur les niveaux et l'émission thermoionique des porteurs, le dé-confinement limite l'effet tunnel résonant 2D-2D à des températures modestes (150K). Cette étude devrait se poursuivre par un calcul du courant tunnel incluant les contributions des charges sur les états localisés dans les puits et les états

étendus de la bande de conduction de l'émetteur n- $\text{Si}_{0.80}\text{Ge}_{0.20}$. Ces porteurs 3D donnent lieu à un effet tunnel résonant conventionnel (3D-2D) mais celui ci est limité par une hauteur de barrière effective plus faible. D'autre part, le quasi-alignement de la bande de conduction Δ_6 de l'émetteur avec la vallée splittée Δ_4 de haute énergie des puits de Si contraints permet aux porteurs de traverser la structure sans effet tunnel (porteurs chauds). Une optimisation du dessin de la structure, hors des limites autorisées par l'épitaxie (épaisseur critique), est envisageable avec des puits externes de Si plus larges ou graduels et un puits central plus fin, mais cette étude reste en suspend. Une autre voie à étudier serait l'effet tunnel résonnant 3D-2D avec une double barrière de quelques plans atomiques de SiC (structures n-Si/SiC/Si/SiC/ n-Si).

Pour la structure à base de SiGe, nous avons aussi étudié l'influence de l'effet Stark et du transfert de charge sur les propriétés optiques bande à bande. Nous avons montré que l'application d'un champ électrique peut augmenter la force d'oscillateur de certaines transitions optiques, résultat qui peut être mis à profit pour des dispositifs optoélectroniques. Toutefois, pour ce système de type II, ce sont les transitions de plus hautes énergies qui voient leurs forces d'oscillateurs accrues [23]. En outre, il s'agit d'une homo-jonction.

Ceci (entre autres) nous a amenés à proposer et optimiser une hétérostructure à base de SiGe appropriée pour l'émission (et la détection) optique à 1.55 μm . Elle présente de nombreux avantages. Elle est réaliste du point de vue de la croissance épitaxiale. Il s'agit d'un empilement à contrainte compensée sur pseudo-substrats $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ de composition raisonnable ($0.20 < y < 0.30$). Cet empilement (**W**) est formé de deux puits de Si contraints en tension couplés par une barrière (puits pour les trous) de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ contraint(e) en compression. Leurs épaisseurs (~2-3 nm) sont inférieures aux diverses épaisseurs critiques de relaxation et au-delà des limites imposées par la longueur de ségrégation du germanium. La structure **W** a été conçue en optimisant simultanément le confinement quantique (~50 meV) d'un unique niveau couplé et lié d'électrons et d'un unique niveau de trous lourds (~200 meV), le recouvrement de leurs fonctions d'ondes respectives, la force d'oscillateur de la transition, et ce pour une émission fondamentale à 1.55 μm [26, 30, 31, 35, 37, 38].

Par ailleurs, l'énergie d'émission (0.8 eV) est inférieure à l'énergie gap des matériaux constituants et des défauts radiatifs (dislocations), ce qui limite l'absorption globale. De même, dans cette structure de type II (quasi-type I), les recombinaisons Auger sont limitées. Le gain optique peut être obtenu en multipliant plusieurs zones **W** entre des barrières $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$. Cet empilement MWQWs inséré dans une jonction p-n pourrait alors servir à la fois

pour fabriquer un émetteur (DEL) ou un photo-détecteur p-i-n [46,47].

I-b) Simulation des courants tunnel dans une hétéro structure à base de Si [32, 39,48-50,56,63].

Dans l'objectif d'étudier le phénomène de transport des électrons par effet tunnel à travers des boîtes quantiques de taille nanométrique permettant de contrôler de façon précise le courant circulant dans le dispositif, nous avons commencé par le cas simple: l'étude du problème de la simulation du courant tunnel et du stockage dans une structure 2D à base de silicium[32].

Après avoir modélisé une structure à une seule barrière de type MOS, l'oxyde étant le SiO_2 , le métal étant remplacé par le poly silicium, pour laquelle nous avons calculé la transparence, nous avons simulé les caractéristiques courant-tension et capacité-tension pour une capacité MOS n-poly-Si/ SiO_2 /p-Si. L'effet du dopage du substrat ainsi que du poly-Si sur $C(V)$ ont été étudiés. Afin de s'approcher au maximum d'une structure réaliste, nous avons tenu compte de la présence de piège dans la matrice SiO_2 , le piège a été modélisé par un puits. La caractéristique $I(V)$ a montré un changement radical dû à une transparence de la barrière plus importante suite à la présence d'un piège jouant le rôle de relais pour les porteurs [39].

Cependant, la course vers la miniaturisation des dispositifs nous confronte à un obstacle avec le SiO_2 qui atteint sa limite avec des épaisseurs de l'ordre du nanomètre. Pour pallier à ce problème, avoir un courant de fuite minimum et une tension maximale, il y a eu recourt au diélectrique à haute fréquence communément appelé high-k. La haute constante diélectrique permet d'avoir des épaisseurs des diélectriques plus importantes. Dans ce cadre, nous avons modélisé une structure MOS avec un empilement ($\text{HfO}_2/\text{SiO}_2$). Le courant tunnel a été simulé et étudié sans et en présence de pièges à l'interface $\text{HfO}_2/\text{SiO}_2$. L'effet des paramètres du piège sur $I(V)$ tels que l'épaisseur, la profondeur ainsi que la masse du matériau qui le constitue a été étudié [48].

Le travail continue dans ce cadre dans le but d'essayer de modéliser des structures minimisant les courants de fuite [49,50].

En parallèle, et afin de modéliser une structure 3D, un code de résolution des équations de Schrödinger et de Poisson à 3D a été mis en place [56, 63], leur couplage est en cours.

Ce thème a fait l'objet de la thèse de Monsieur A. Bouazra.

(II) Structures électroniques des composés II-VI et III-V à base de Nitrures, massifs et bidimensionnels.

II-a) Propriétés structurales et électroniques des composés II-VI [27-29,33,57-59,64,68]

Les semiconducteurs II-VI à large gap offrent une large potentialité d'applications mais ont montré des problèmes, en particulier, dus au dopage faible pour ZnSe et la toxicité pour BeTe. Récemment et grâce aux progrès des techniques de croissance qui ont résolu beaucoup de problèmes, les II-VI ont connu un renouveau et attirent de plus en plus l'attention des chercheurs. Dans ce cadre, nous avons étudié les propriétés des composés $\text{ZnS}_x\text{Se}_{1-x}$ et $\text{Zn}_{1-x}\text{Be}_x\text{Te}$. Nous avons déterminé la structure de bande des ternaires par la méthode EPM (Empirical Pseudopotential Method) dans le cadre de l'approximation du cristal virtuel (VCA). L'alliage $\text{Zn}_{1-x}\text{Be}_x\text{Te}$ présente un cross-over $\Gamma \rightarrow X$ pour une concentration en Béryllium de 28% alors que le ternaire $\text{ZnS}_x\text{Se}_{1-x}$ est à gap direct $\Gamma \rightarrow \Gamma$ pour toute la gamme $0 \leq x \leq 1$. Cependant, cet alliage a montré une réduction du gap pour des concentrations en soufre inférieures à 20%, puis de nouveau une augmentation jusqu'au gap de ZnS [27,28,57]. Une telle propriété est très importante pour les dispositifs à base de ZnSSe du fait de l'élargissement de la gamme du spectre de longueurs d'onde que couvre ce composé. Ce comportement inhabituel nous a incité à calculer les discontinuités de bandes de valence et de conduction à l'interface $\text{ZnS}_x\text{Se}_{1-x}$ contraint/ $\text{ZnS}_y\text{Se}_{1-y}$ relaxé pour $0 \leq x, y \leq 1$ avec ce nouveau gap [33]. Ces offsets sont très utiles pour la modélisation de dispositifs à base de cette hétérostructure.

De plus, et afin de tirer profit de la large discontinuité de bandes de conduction de l'interface ZnSe/BeTe, nous avons pensé à l'utiliser pour simuler une transition inter sous bande ISBT ultrarapide entre le premier niveau excité E_2 et le niveau fondamental E_1 avec la longueur d'onde $\lambda = 1.55 \mu\text{m}$ utile pour les modulateurs et les switchings. Cependant, obtenir la longueur d'onde désirée et réaliser l'ISBT sont deux processus compétitifs. Le niveau E'_1 de BeTe (état X) se situe en dessous de E_2 et empêche la relaxation directe $E_1 \rightarrow E_2$ d'avoir lieu. Elle se réalise plutôt en deux étapes $E_1 \rightarrow E'_1$ et $E'_1 \rightarrow E_2$ ce qui affecte négativement le temps de relaxation. Pour pallier ce problème, nous avons inséré quelques monocouches de CdS dans le puits de ZnSe. L'ISBT réalisant la relaxation avec $\lambda = 1.55 \mu\text{m}$ a été optimisée [29,58,64]. En outre nous avons étendu notre étude aux propriétés électroniques et structurales des composés II-VI tellure et leurs alliages dans la structure zinc de blende et c'est pour de différentes applications à base de ces matériaux [59,68].

II-b) Propriétés structurales et électroniques des composés III-V à base de nitrures [19, 24, 25, 34, 36, 41, 51]

Il y a un intérêt croissant, ces dernières années, pour les nitrures d'éléments III GaN, AlN, InN et leurs alliages. Cela est dû principalement aux applications potentielles de cette famille de semi-conducteurs à large bande interdite directe, qui permet d'étendre les applications dans la gamme du bleu à l'UV. L'étendue des bandes interdites des nitrures d'éléments III, de 0.7 eV pour InN à 6.3 eV pour AlN, permet en effet de parcourir une très large gamme de longueur d'onde du visible à l'UV. Une des applications en optoélectronique est la diode électroluminescente (DEL) qui peut être utilisée dans le domaine de l'affichage ou des feux de circulations. La diode laser (DL) bleue est recherchée depuis longtemps pour ses applications dans le domaine de stockage. En effet réduire la longueur d'onde du laser permet d'augmenter la densité de stockage sur un disque compact. Les autres applications des nitrures sont par exemple les détecteurs ultraviolets ou l'éclairage (DEL blanche). Sur le plan théorique et expérimental, il reste beaucoup à faire sur l'étude des nitrures III-V et de leurs alliages. En effet, AlN, GaN et InN sont connus pour cristalliser en structure wurtzite, mais récemment des expériences ont montré qu'on peut aussi les faire croître dans la structure blende de zinc. Notre travail porte essentiellement sur le calcul des paramètres de structure de bande de ces trois composés dans les deux structures, blende de zinc et wurtzite. De tels résultats sont nécessaires pour l'étude des structures électroniques et les propriétés physiques des alliages pour différentes compositions et l'ingénierie des hétérostructures à puits quantiques.

En utilisant les deux méthodes (LMTO) et (EPM), nous avons calculé la structure de bande ainsi que les masses effectives aux points Γ et X de l'alliage $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}$ ($0 \leq x \leq 1$). Les composés binaires AlN et GaN sont supposés de symétrie zinc de blende. Cette étude a permis d'établir des expressions analytiques qui représentent la variation de la bande interdite et des masses effectives en Γ et X en fonction de la teneur en gallium. En particulier, nous nous sommes intéressés au paramètre de courbure "bowing" et à l'effet du désordre sur les propriétés électroniques et optiques de l'alliage. Nous avons ensuite calculé les discontinuités de bandes de conduction et de valence pour le système $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}/\text{Al}_{1-y}\text{Ga}_y\text{N}$. Les résultats de ce calcul seront appliqués à l'optimisation de certains dispositifs [19].

Parallèlement à cette étude, nous avons calculé, en tenant compte des contraintes, les discontinuités de bandes de conduction et de valence pour le système $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}/\text{In}_{1-y}\text{Ga}_y\text{N}$. Comme application, nous avons modélisé une structure à puits quantique $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}/\text{GaN}$. L'objectif de l'étude est d'obtenir la raie bleue à 2.86 eV. Plusieurs possibilités sont à envisager suivant la composition de l'alliage et les épaisseurs de couches [24,25]. Cette étude

a fait l'objet de la thèse de Mme Amel Bhourri.

Il est de plus en plus acquis que la solution solide GaN-InN est instable à haute température, suite à une démixtion spontanée lors de la croissance. Il serait alors intéressant d'avoir un alliage à base de GaN avec un gap plus faible pour émettre dans le bleu qui remplacerait le système instable GaInN. L'analyse des possibilités conduit à la solution des alliages GaN-ScN. En effet, ScN déjà épitaxié sur saphir, possède le même paramètre de maille que GaN cubique. Il est donc prévisible que l'on puisse réaliser des alliages GaScN sur substrats saphir sans générer trop de dislocations, tant que la solubilité entre Ga et Sc le permette.

Sur le plan de la recherche fondamentale, il s'agit d'un nouvel alliage. Les matériaux GaScN seraient particulièrement attrayants pour l'émission bleue sous réserve que la structure de bande l'autorise. Nous avons calculé les structures électroniques du ScN et de l'alliage ScGaN. Nous nous sommes intéressés à la variation du gap en fonction de la composition en scandium. De même nous avons étudié le comportement des masses effectives de cet alliage dans sa phase zinc blende au voisinage des minima Γ et X sans tenir compte de désordre compositionnel [36]. Nous avons poursuivi cette étude en calculant les constantes élastiques des GaN, ScN et ScGaN en phase cubique ainsi que la variation des fréquences des phonons en fonction de la composition avec et sans l'effet du désordre compositionnel [41]. Toujours, dans le même objectif, c.a.d, parcourir une très large gamme de longueur d'onde, nous avons aussi étudié les propriétés électroniques et élastiques de YN et YGaN et de l'interface YGaN/ScGaN [51].

D'autre part, l'incorporation d'une faible concentration d'azote dans des composés III-V (nitrides dilués) modifie considérablement leurs propriétés électroniques. Nous avons calculé pour l'alliage InNP, les bandes interdites, les masses effectives ainsi que la densité de charge. Nous avons aussi calculé les constantes élastiques ainsi que les fréquences de phonons optiques et acoustiques de InNP [34]. Dans un second temps, nous nous sommes intéressés à l'effet de l'azote dans les alliages (Ga,In)(As,N). Le choix de la composition d'alliage quaternaire nous a permis d'ajuster la valeur de la bande interdite et ainsi d'atteindre les longueurs d'onde 1,3 μ m et 1,55 μ m recherchées dans le domaine des communications.

(III) Conception et modélisation de diodes lasers pour moyen infrarouge (3-5 μ m)[40, 42, 44, 45, 52-55, 65,66]

Il existe aujourd'hui un besoin en sources lasers à semiconducteurs à faible seuil,

émettant dans le moyen infrarouge, pour des applications en analyse de gaz (contrôle de la pollution atmosphérique, suivi de procédés industriels, détection de fuites), en médecine (aide au diagnostic) et en télécommunications (transmissions directes à travers l'atmosphère). Ces lasers doivent opérer à température ambiante en continu, dans la gamme de longueurs d'onde 3 – 5 μm . De tels lasers n'existent pas à ce jour. De nouvelles structures, nécessairement à faible courant de seuil, doivent être conçues. Le courant de seuil étant contrôlé par les mécanismes non radiatifs Auger, lesquels sont étroitement liés à la structure de bandes des puits quantiques "actifs" de la structure laser. Il faut donc trouver des hétérostructures lasers possédant une structure de bandes d'énergie interdisant (réduisant) les processus Auger. L'objet de notre travail est de proposer plusieurs structures lasers possibles, de déterminer théoriquement leur courant de seuil après avoir évalué les coefficients Auger, et d'en déduire une structure laser optimisée. L'émission est fixée à 3,3 μm , raie d'absorption du méthane. Le travail se fait en 3 étapes :

- Définition de nouvelles structures: cette première partie consiste à déterminer le diagramme de bandes d'énergie des structures envisagées, à déterminer les transitions $e1-hh1$ fondamentales, le taux de recouvrement des fonctions d'onde d'électrons et de trous, et à en déduire un « design » pour chaque structure (composition et largeur des puits et barrières)
- Calcul du courant de seuil de chaque structure laser
- Proposition d'une structure optimisée: la structure choisie aura à 300K le coefficient Auger le plus faible parmi les structures étudiées.

Trois thèses sont déjà engagées sur ce thème. Les premiers résultats sont publiés dans [40, 42, 44, 45, 52-55, 65,66, 70].

(IV) Nanostructuration d'adsorbats sur des surfaces vicinales et contrôle des morphologies de surface à l'aide d'une théorie spectrale

IV-a) Nanostructuration d'adsorbats sur des faces vicinales métalliques

Dans ce thème, on se propose d'étudier la croissance de nanostructures filiformes sur des surfaces à marches. Il s'agit en particulier d'éviter la formation d'îlots qui rompraient la régularité des fils, ou d'exploiter la formation d'alliages filiformes ordonnés à la surface du matériau métallique ou semi-conducteur. Ce projet, réalisé en étroite collaboration avec des expérimentateurs, vise à choisir les espèces et à déterminer les conditions expérimentales idéales (flux, température, taux de couverture) en vue de l'élaboration de ces nanostructures particulières utiles pour le stockage et le transport d'information.

Après avoir déterminé, à l'aide d'une méthode semi empirique, les paramètres de potentiels et les barrières de potentiels, un algorithme du programme de Monte Carlo Cinétique « Kinetic Monte Carlo (KMC) » a été utilisé pour simuler la cinétique de croissance. Le modèle a été ensuite raffiné pour rendre compte des données expérimentales, en particulier en considérant d'autres marches (A, B) et en modifiant le code de simulation de croissance KMC afin de tenir compte du mécanisme d'échange entre les atomes adsorbés et ceux du substrat. Les premiers résultats sont encourageants [60,62,67, 69].

Ce thème a fait l'objet de deux thèses (W. Essolaani et H. Garbouj).

IV-b) Théorie du contrôle spectral de la qualité d'une surface.

Dans ces études, la qualité de la surface est très importante, il est donc nécessaire de se renseigner d'une part sur la propreté de la surface et d'autre part sur la qualité de formation de nanostructures sur cette surface. Nous avons donc jugé utile d'entamer une étude sur le « contrôle de la morphologie d'une surface et de sa qualité ». Notre étude théorique concerne le contrôle de surface par spectroscopie infrarouge (IR) et génération de fréquence somme (SFG). En effet, si on place des molécules sur une surface, cette dernière joue le rôle de sonde et permet de contrôler la morphologie d'une surface et de sa croissance. Le développement de l'expression de l'Hamiltonien total du système est nécessaire à l'étude du spectre de molécules adsorbées sur des surfaces defectueuses. A partir des expressions des potentiels décrivant les différentes interactions : adsorbat-surface, adsorbat-adsorbat et adsorbat-défauts de surface, l'influence des inhomogénéités de surface sur les spectres linéaire infrarouge (IR) et non linéaire de génération de fréquence somme (SFG) est étudiée.

Les premiers résultats sont publiés [61]. Ce thème a fait l'objet de la thèse (H. Zorgati).