



THÈSE DE DOCTORAT

---

# Contrôle Quantique de Quantum Dots

---

*Auteur :*  
Nicolas IACOBELLIS

*Promotrice :*  
Pr. Nathalie VAECK

*Thèse présentée en vue de l'obtention  
du grade de Docteur en Sciences  
dans le*

Service de Chimie Quantique et Photophysique,  
Département de Chimie, Faculté des Sciences

19 janvier 2020



« Nous pouvons apprivoiser le monde quantique à l'aide de nos mathématiques, mais cela ne l'empêche pas d'être étrange, plus étrange même que tout ce que peut nous proposer notre imagination. »

Heinz Pagels, *L'Univers Quantique*



UNIVERSITÉ LIBRE DE BRUXELLES

*Résumé*

Faculté des Sciences  
Département de Chimie

Docteur en Sciences

**Contrôle Quantique de Quantum Dots**

par Nicolas IACOBELLIS

The Thesis Abstract is written here (and usually kept to just this page). The page is kept centered vertically so can expand into the blank space above the title too...



## *Remerciements*

The acknowledgments and the people to thank go here, don't forget to include your project advisor...



# Table des matières

<b>Résumé</b>	<b>v</b>
<b>Remerciements</b>	<b>vii</b>
<b>1 Résultats des calculs TD-DFT</b>	<b>1</b>
1.1 Quantum dots de silicium . . . . .	1
1.1.1 Forme sphéroïdale . . . . .	1
Molécule Si <sub>5</sub> H <sub>12</sub> . . . . .	1
Molécule Si <sub>17</sub> H <sub>36</sub> . . . . .	1
Molécule Si <sub>29</sub> H <sub>36</sub> . . . . .	1
Molécule Si <sub>47</sub> H <sub>60</sub> . . . . .	1
Molécule Si <sub>87</sub> H <sub>76</sub> . . . . .	1
Molécule Si <sub>99</sub> H <sub>100</sub> . . . . .	1
1.1.2 Forme pyramidale . . . . .	6
Molécule Si <sub>29</sub> H <sub>52</sub> . . . . .	6
Molécule Si <sub>70</sub> H <sub>80</sub> . . . . .	6
1.2 Quantum dots de silicium-germanium . . . . .	10
1.2.1 Forme sphéroïdale . . . . .	10
Molécule Si <sub>4</sub> GeH <sub>12</sub> . . . . .	10
Molécule Si <sub>12</sub> Ge <sub>5</sub> H <sub>36</sub> . . . . .	10
Molécule Si <sub>24</sub> Ge <sub>5</sub> H <sub>36</sub> . . . . .	10
Molécule Si <sub>36</sub> Ge <sub>11</sub> H <sub>60</sub> . . . . .	10
Molécule Si <sub>68</sub> Ge <sub>19</sub> H <sub>76</sub> . . . . .	10
Molécule Si <sub>68</sub> Ge <sub>31</sub> H <sub>100</sub> . . . . .	14
1.2.2 Forme pyramidale . . . . .	14
Molécule Si <sub>18</sub> Ge <sub>11</sub> H <sub>52</sub> . . . . .	14
Molécule Si <sub>54</sub> Ge <sub>16</sub> H <sub>80</sub> . . . . .	14
1.3 Quantum dots de silicium contaminé à l'oxygène . . . . .	16
1.3.1 Forme sphéroïdale . . . . .	16
Molécule Si <sub>5</sub> OH <sub>10</sub> . . . . .	16
Molécule Si <sub>17</sub> O <sub>4</sub> H <sub>28</sub> . . . . .	16
Molécule Si <sub>29</sub> O <sub>6</sub> H <sub>24</sub> . . . . .	16
1.4 Quantum dots de silicium contaminés au phosphore . . . . .	19
1.4.1 Forme sphéroïdale . . . . .	19
Molécule Si <sub>15</sub> P <sub>2</sub> H <sub>34</sub> . . . . .	19
1.5 Quantum dots de silicium passivés au méthyle . . . . .	19
1.5.1 Forme sphéroïdale . . . . .	19
Molécule Si <sub>5</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sub>12</sub> . . . . .	19
<b>A Frequently Asked Questions</b>	<b>21</b>
A.1 How do I change the colors of links? . . . . .	21



# Table des figures

1.1	Image de la molécule Si <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	1
1.2	Image de la molécule Si <sub>17</sub> H <sub>36</sub>	3
1.3	Image de la molécule Si <sub>29</sub> H <sub>36</sub>	4
1.4	Image de la molécule Si <sub>47</sub> H <sub>60</sub>	5
1.5	Image de la molécule Si <sub>87</sub> H <sub>76</sub>	5
1.6	Image de la molécule Si <sub>99</sub> H <sub>100</sub>	6
1.7	Image de la molécule Si <sub>29</sub> H <sub>52</sub>	6
1.8	Image de la molécule Si <sub>70</sub> H <sub>80</sub>	8
1.9	Image de la molécule Si <sub>4</sub> GeH <sub>12</sub>	8
1.10	Image de la molécule Si <sub>12</sub> Ge <sub>5</sub> H <sub>36</sub>	9
1.11	Image de la molécule Si <sub>24</sub> Ge <sub>5</sub> H <sub>36</sub>	11
1.12	Image de la molécule Si <sub>36</sub> Ge <sub>11</sub> H <sub>60</sub>	12
1.13	Image de la molécule Si <sub>68</sub> Ge <sub>19</sub> H <sub>76</sub>	13
1.14	Image de la molécule Si <sub>68</sub> Ge <sub>31</sub> H <sub>100</sub>	14
1.15	Image de la molécule Si <sub>18</sub> Ge <sub>11</sub> H <sub>52</sub>	14
1.16	Image de la molécule Si <sub>54</sub> Ge <sub>16</sub> H <sub>80</sub>	16
1.17	Image de la molécule Si <sub>5</sub> OH <sub>10</sub>	16
1.18	Image de la molécule Si <sub>17</sub> O <sub>4</sub> H <sub>28</sub>	18
1.19	Image de la molécule Si <sub>29</sub> O <sub>6</sub> H <sub>24</sub>	19
1.20	Image de la molécule Si <sub>15</sub> P <sub>2</sub> H <sub>34</sub>	19
1.21	Image de la molécule Si <sub>5</sub> (CH <sub>3</sub> ) <sub>12</sub>	20



# Liste des tableaux

1.1	Multiplicité des états excités de la molécule Si <sub>5</sub> H <sub>12</sub> , ainsi que leur énergie d'excitation . . . . .	2
1.2	Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule Si <sub>5</sub> H <sub>12</sub> , exprimée en u.a. . . . .	2
1.3	Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule Si <sub>5</sub> H <sub>12</sub> , exprimée en cm <sup>-1</sup> . . . . .	2
1.4	Multiplicité des états excités de la molécule Si <sub>17</sub> H <sub>36</sub> , ainsi que leur énergie d'excitation . . . . .	2
1.5	Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule Si <sub>17</sub> H <sub>36</sub> , exprimée en u.a. . . . .	3
1.6	Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule Si <sub>17</sub> H <sub>36</sub> , exprimée en cm <sup>-1</sup> . . . . .	3
1.7	Multiplicité des états excités de la molécule Si <sub>29</sub> H <sub>36</sub> , ainsi que leur énergie d'excitation . . . . .	4
1.8	Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule Si <sub>29</sub> H <sub>36</sub> , exprimée en u.a. . . . .	4
1.9	Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule Si <sub>29</sub> H <sub>36</sub> , exprimée en cm <sup>-1</sup> . . . . .	5
1.10	Multiplicité des états excités de la molécule Si <sub>29</sub> H <sub>52</sub> , ainsi que leur énergie d'excitation . . . . .	7
1.11	Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule Si <sub>29</sub> H <sub>52</sub> , exprimée en u.a. . . . .	7
1.12	Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule Si <sub>29</sub> H <sub>52</sub> , exprimée en cm <sup>-1</sup> . . . . .	7
1.13	Multiplicité des états excités de la molécule Si <sub>4</sub> GeH <sub>12</sub> , ainsi que leur énergie d'excitation . . . . .	7
1.14	Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule Si <sub>4</sub> GeH <sub>12</sub> , exprimée en u.a. . . . .	8
1.15	Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule Si <sub>4</sub> GeH <sub>12</sub> , exprimée en cm <sup>-1</sup> . . . . .	9
1.16	Multiplicité des états excités de la molécule Si <sub>12</sub> Ge <sub>5</sub> H <sub>36</sub> , ainsi que leur énergie d'excitation . . . . .	9
1.17	Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule Si <sub>12</sub> Ge <sub>5</sub> H <sub>36</sub> , exprimée en u.a. . . . .	10
1.18	Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule Si <sub>12</sub> Ge <sub>5</sub> H <sub>36</sub> , exprimée en cm <sup>-1</sup> . . . . .	10
1.19	Multiplicité des états excités de la molécule Si <sub>24</sub> Ge <sub>5</sub> H <sub>36</sub> , ainsi que leur énergie d'excitation . . . . .	10
1.20	Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule Si <sub>24</sub> Ge <sub>5</sub> H <sub>36</sub> , exprimée en u.a. . . . .	11
1.21	Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule Si <sub>24</sub> Ge <sub>5</sub> H <sub>36</sub> , exprimée en cm <sup>-1</sup> . . . . .	11

1.22 Multiplicité des états excités de la molécule $\text{Si}_{36}\text{Ge}_{11}\text{H}_{60}$ , ainsi que leur énergie d'excitation . . . . .	12
1.23 Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule $\text{Si}_{36}\text{Ge}_{11}\text{H}_{60}$ , exprimée en u.a. . . . .	12
1.24 Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule $\text{Si}_{36}\text{Ge}_{11}\text{H}_{60}$ , exprimée en $\text{cm}^{-1}$ . . . . .	13
1.25 Multiplicité des états excités de la molécule $\text{Si}_{18}\text{Ge}_{11}\text{H}_{52}$ , ainsi que leur énergie d'excitation . . . . .	15
1.26 Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule $\text{Si}_{18}\text{Ge}_{11}\text{H}_{52}$ , exprimée en u.a. . . . .	15
1.27 Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule $\text{Si}_{18}\text{Ge}_{11}\text{H}_{52}$ , exprimée en $\text{cm}^{-1}$ . . . . .	15
1.28 Multiplicité des états excités de la molécule $\text{Si}_5\text{OH}_{10}$ , ainsi que leur énergie d'excitation . . . . .	17
1.29 Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule $\text{Si}_5\text{OH}_{10}$ , exprimée en u.a. . . . .	17
1.30 Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule $\text{Si}_5\text{OH}_{10}$ , exprimée en $\text{cm}^{-1}$ . . . . .	17
1.31 Multiplicité des états excités de la molécule $\text{Si}_{17}\text{O}_4\text{H}_{28}$ , ainsi que leur énergie d'excitation . . . . .	17
1.32 Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule $\text{Si}_{17}\text{O}_4\text{H}_{28}$ , exprimée en u.a. . . . .	18
1.33 Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule $\text{Si}_{17}\text{O}_4\text{H}_{28}$ , exprimée en $\text{cm}^{-1}$ . . . . .	18

# List of Abbreviations

DFT	Density Functional Theory
TD-DFT	Time-Dependent Density Functional Theory



# Physical Constants

Speed of Light  $c_0 = 2.997\,924\,58 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$  (exact)



# List of Symbols

$\vec{r}$	vecteur position
$P$	power $\text{W} (\text{J s}^{-1})$
$\omega$	angular frequency rad



*For/Dedicated to/To my...*



## Chapitre 1

# Résultats des calculs TD-DFT

### 1.1 Quantum dots de silicium

#### 1.1.1 Forme sphéroïdale

Molécule Si<sub>5</sub>H<sub>12</sub>

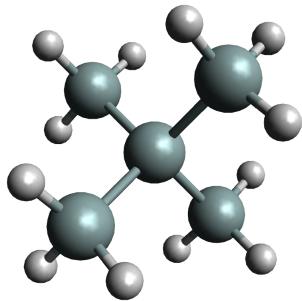


FIGURE 1.1 – Image de la molécule Si<sub>5</sub>H<sub>12</sub>

Molécule Si<sub>17</sub>H<sub>36</sub>

Molécule Si<sub>29</sub>H<sub>36</sub>

Molécule Si<sub>47</sub>H<sub>60</sub>

Résultats Q-CHEM en attente.

Molécule Si<sub>87</sub>H<sub>76</sub>

Résultats Q-CHEM en attente.

Molécule Si<sub>99</sub>H<sub>100</sub>

Résultats Q-CHEM en attente.

#	Multiplicité	Etiquette	Energie (eV)	Energie (cm <sup>-1</sup> )	Energie (nm)
0	Singulet	S0	-	-	-
1	Triplet	T1	5.7276	46 196.53	216.47
2	Triplet	T2	5.7277	46 197.34	216.46
3	Triplet	T3	5.7277	46 197.34	216.46
4	Triplet	T4	5.7799	46 618.36	214.51
5	Triplet	T5	5.7800	46 619.17	214.50
6	Triplet	T6	5.7803	46 621.59	214.49
7	Singulet	S1	6.3536	51 245.60	195.14
8	Singulet	S2	6.3537	51 246.40	195.14
9	Singulet	S3	6.3537	51 246.40	195.14
10	Singulet	S4	6.3539	51 248.02	195.13
11	Singulet	S5	6.3544	51 252.05	195.11
12	Singulet	S6	6.3546	51 253.66	195.11

TABLE 1.1 – Multiplicité des états excités de la molécule Si<sub>5</sub>H<sub>12</sub>, ainsi que leur énergie d'excitation

	S0	T1	T2	T3	T4	T5	T6	S1	S2	S3	S4	S5	S6
S0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	3.617E-03	4.239E-03	4.476E-03	4.282E-04	9.953E-04	7.293E-05
T1	0.0	0.0	1.566E-07	3.411E-07	2.141E-08	3.970E-08	4.137E-08	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
T2	0.0	1.566E-07	0.0	1.267E-07	3.170E-08	2.814E-08	3.963E-08	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
T3	0.0	3.411E-07	1.267E-07	0.0	4.558E-08	2.793E-08	2.248E-08	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
T4	0.0	2.141E-08	3.170E-08	4.558E-08	0.0	3.599E-07	9.464E-07	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
T5	0.0	3.970E-08	2.814E-08	2.793E-08	3.599E-07	0.0	1.972E-07	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
T6	0.0	4.137E-08	3.963E-08	2.248E-08	9.464E-07	1.972E-07	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S1	3.617E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	6.993E-07	4.946E-08	3.583E-06	1.229E-05	4.545E-06	
S2	4.239E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	6.993E-07	0.0	2.453E-07	3.462E-06	4.383E-06	1.427E-05
S3	4.476E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.946E-08	2.453E-07	0.0	2.841E-06	5.982E-06	1.386E-05
S4	4.282E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	3.583E-06	3.462E-06	2.841E-06	0.0	7.228E-06	6.394E-06
S5	9.953E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.229E-05	4.383E-06	5.982E-06	7.228E-06	0.0	1.875E-06
S6	7.293E-05	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.545E-06	1.427E-05	1.386E-05	6.394E-06	1.875E-06	0.0

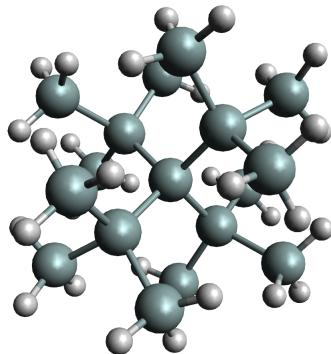
TABLE 1.2 – Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule Si<sub>5</sub>H<sub>12</sub>, exprimée en u.a.

	S0	T1	T2	T3	T4	T5	T6	S1	S2	S3	S4	S5	S6
S0	0.000	11.607	11.638	11.659	0.041	0.019	0.025	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
T1	11.607	46196.531	0.803	0.871	1.087	16.362	17.199	25.028	32.328	26.125	16.840	33.579	33.070
T2	11.638	0.803	46197.337	0.931	17.039	5.486	15.597	35.813	10.284	26.138	34.099	22.215	33.584
T3	11.659	0.871	0.931	46197.337	16.582	16.327	4.809	16.658	30.230	25.646	36.371	32.414	25.047
T4	0.041	1.087	17.039	16.582	46618.361	17.235	17.277	9.476	6.295	4.851	6.851	18.654	20.845
T5	0.019	16.362	5.486	16.327	17.235	46619.168	17.271	10.414	5.053	4.860	20.493	14.142	14.189
T6	0.025	17.199	15.597	4.809	17.277	17.271	46621.588	5.861	6.323	3.792	19.525	14.149	17.175
S1	0.000	25.028	35.813	16.658	9.476	10.414	5.861	51245.596	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
S2	0.000	32.328	10.284	30.230	6.295	5.053	6.323	0.000	51246.403	0.000	0.000	0.000	0.000
S3	0.000	26.125	26.138	25.646	4.851	4.860	3.792	0.000	0.000	51246.403	0.000	0.000	0.000
S4	0.000	16.840	34.099	36.371	6.851	20.493	19.525	0.000	0.000	0.000	51248.016	0.000	0.000
S5	0.000	33.579	22.215	32.414	18.654	14.142	14.149	0.000	0.000	0.000	0.000	51252.049	0.000
S6	0.000	33.070	33.584	25.047	20.845	14.189	17.175	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	51253.662

TABLE 1.3 – Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule Si<sub>5</sub>H<sub>12</sub>, exprimée en cm<sup>-1</sup>

#	Multiplicité	Etiquette	Energie (eV)	Energie (cm <sup>-1</sup> )	Energie (nm)
0	Singulet	S0	-	-	-
1	Triplet	T1	4.6445	37 460.68	266.95
2	Triplet	T2	4.6447	37 462.29	266.94
3	Triplet	T3	4.6450	37 464.71	266.92
4	Triplet	T4	4.8000	38 714.88	258.30
5	Singulet	S1	5.0178	40 471.57	247.09
6	Singulet	S2	5.0188	40 479.63	247.04
7	Singulet	S3	5.0190	40 481.25	247.03
8	Singulet	S4	5.1058	41 181.34	242.83

TABLE 1.4 – Multiplicité des états excités de la molécule Si<sub>17</sub>H<sub>36</sub>, ainsi que leur énergie d'excitation

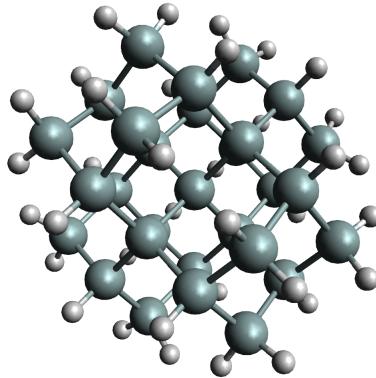
FIGURE 1.2 – Image de la molécule  $\text{Si}_{17}\text{H}_{36}$ 

	S0	T1	T2	T3	T4	S1	S2	S3	S4
S0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.726E-02	2.742E-02	2.766E-02	1.172E-03
T1	0.0	0.0	1.241E-10	1.828E-10	4.543E-05	0.0	0.0	0.0	0.0
T2	0.0	1.241E-10	0.0	1.210E-10	4.063E-05	0.0	0.0	0.0	0.0
T3	0.0	1.828E-10	1.210E-10	0.0	4.791E-05	0.0	0.0	0.0	0.0
T4	0.0	4.543E-05	4.063E-05	4.791E-05	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S1	2.726E-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	6.525E-07	3.662E-07	3.203E-06
S2	2.742E-02	0.0	0.0	0.0	0.0	6.525E-07	0.0	1.329E-07	5.315E-06
S3	2.766E-02	0.0	0.0	0.0	0.0	3.662E-07	1.329E-07	0.0	5.236E-06
S4	1.172E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	3.203E-06	5.315E-06	5.236E-06	0.0

TABLE 1.5 – Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{17}\text{H}_{36}$ , exprimée en u.a.

	S0	T1	T2	T3	T4	S1	S2	S3	S4
S0	0.000	3.029	3.032	3.038	0.873	0.000	0.000	0.000	0.000
T1	3.029	37460.679	76.018	75.877	21.419	64.367	63.416	12.866	9.459
T2	3.032	76.018	37462.292	75.900	27.625	25.001	59.843	64.080	10.346
T3	3.038	75.877	75.900	37464.712	18.510	59.558	26.820	63.612	7.319
T4	0.873	21.419	27.625	18.510	38714.880	3.314	8.550	7.720	36.150
S1	0.000	64.367	25.001	59.558	3.314	40471.568	0.000	0.000	0.000
S2	0.000	63.416	59.843	26.820	8.550	0.000	40479.633	0.000	0.000
S3	0.000	12.866	64.080	63.612	7.720	0.000	0.000	40481.246	0.000
S4	0.000	9.459	10.346	7.319	36.150	0.000	0.000	0.000	41181.340

TABLE 1.6 – Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{17}\text{H}_{36}$ , exprimée en  $\text{cm}^{-1}$

FIGURE 1.3 – Image de la molécule Si<sub>29</sub>H<sub>36</sub>

#	Multiplicité	Etiquette	Energie (eV)	Energie (cm <sup>-1</sup> )	Energie (nm)
0	Singulet	S0	-	-	-
1	Triplet	T1	4.2163	34 006.99	294.06
2	Triplet	T2	4.2163	34 006.99	294.06
3	Triplet	T3	4.2163	34 006.99	294.06
4	Triplet	T4	4.3113	34 773.22	287.58
5	Triplet	T5	4.3114	34 774.03	287.57
6	Triplet	T6	4.3114	34 774.03	287.57
7	Triplet	T7	4.3494	35 080.52	285.06
8	Triplet	T8	4.3494	35 080.52	285.06
9	Triplet	T9	4.3494	35 080.52	285.06
10	Singulet	S1	4.4171	35 626.56	280.69
11	Singulet	S2	4.4171	35 626.56	280.69
12	Singulet	S3	4.4172	35 627.37	280.68
13	Singulet	S4	4.5031	36 320.20	275.33
14	Singulet	S5	4.5031	36 320.20	275.33
15	Singulet	S6	4.5031	36 320.20	275.33
16	Singulet	S7	4.5188	36 446.83	274.37
17	Singulet	S8	4.5188	36 446.83	274.37
18	Singulet	S9	4.5188	36 446.83	274.37

TABLE 1.7 – Multiplicité des états excités de la molécule Si<sub>29</sub>H<sub>36</sub>, ainsi que leur énergie d'excitation

	S0	T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	T9	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	
T1	0.0	0.0	8.425E-09	1.859E-08	1.293E-06	1.139E-06	2.080E-07	1.598E-04	1.721E-04	9.781E-06	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
T2	0.0	8.425E-09	0.0	6.691E-09	1.276E-06	2.358E-07	1.127E-06	1.254E-04	8.985E-04	1.266E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
T3	0.0	1.859E-08	6.691E-09	0.0	3.009E-08	1.278E-06	1.317E-06	5.686E-05	7.960E-05	2.046E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
T4	0.0	1.293E-06	1.276E-06	3.009E-08	0.0	2.026E-08	2.378E-08	4.468E-06	4.812E-06	6.273E-07	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
T5	0.0	1.139E-06	2.358E-07	1.278E-06	2.026E-08	0.0	1.218E-08	1.311E-06	4.112E-06	4.307E-06	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
T6	0.0	2.080E-07	1.127E-06	1.317E-06	2.378E-08	1.218E-08	0.0	3.964E-06	8.496E-07	4.876E-06	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
T7	0.0	1.596E-04	1.254E-04	5.686E-05	4.468E-06	1.311E-06	3.964E-06	0.0	2.321E-06	4.782E-08	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
T8	0.0	1.721E-04	8.985E-05	7.960E-05	4.812E-06	4.112E-06	8.496E-07	2.321E-08	0.0	3.820E-09	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
T9	0.0	9.781E-06	1.266E-04	2.046E-04	6.273E-07	4.307E-06	4.876E-08	4.782E-08	3.820E-09	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
S1	6.274E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	6.209E-09	6.068E-09	1.634E-09	1.395E-09	9.338E-07	1.292E-06	2.202E-06	3.725E-06		
S2	6.274E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	6.209E-09	0.0	6.475E-09	1.065E-08	1.758E-06	1.158E-06	1.614E-06	4.122E-06	1.470E-06	
S3	6.274E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	6.475E-09	0.0	1.255E-06	8.290E-07	1.862E-06	4.391E-06	1.834E-06	1.834E-06		
S4	1.452E-09	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.062E-06	1.255E-06	2.946E-05	1.834E-05		
S5	1.139E-09	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.395E-06	1.788E-06	8.290E-07	9.111E-08		
S6	2.230E-09	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	8.601E-09	1.408E-09	3.295E-05	2.037E-05		
S7	2.200E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.581E-06	1.581E-06	9.111E-08	0.0		
S8	2.193E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.302E-06	4.122E-06	8.319E-07	2.866E-05	5.846E-06	6.142E-09
S9	2.186E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	3.725E-06	1.470E-06	1.834E-05	1.472E-08	1.555E-09	

TABLE 1.8 – Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule Si<sub>29</sub>H<sub>36</sub>, exprimée en u.a.

	S0	T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	T9	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	
S0	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000		
T1	0.000	34008.989	104.520	104.520	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	66.012	77.024	30.10	6.01	0.048	10.385	10.367	1.168		
T2	0.000	104.520	34008.989	104.520	0.217	0.347	0.007	0.000	0.000	0.000	76.016	7.200	3.007	7.101	10.379	1.185	10.371	1.168		
T3	0.002	104.520	104.520	34008.989	0.424	0.249	0.278	25.533	27.490	13.055	77.210	76.632	9.458	7.158	6.464	3.430	1.027	10.380	10.407	
T4	7.126	0.202	0.217	0.424	34774.221	19.232	19.237	28.882	32.618	3.207	3.681	6.556	21.864	26.341	34.189	65.059	35.783	32.487		
T5	7.123	0.311	0.347	0.249	19.232	34774.028	19.353	42.488	50.636	44.053	4.749	5.988	3.049	30.978	30.498	21.488	31.346	58.932	45.965	
T6	7.124	0.306	0.327	0.278	19.237	19.353	34774.028	54.696	51.893	24.986	5.854	4.304	3.821	30.105	26.857	26.850	36.790	42.692	58.267	
T7	0.006	28.223	12.350	25.533	38.882	42.488	54.696	35080.521	52.318	52.426	14.516	12.789	14.796	60.337	42.473	50.846	27.781	16.466	31.150	
T8	0.018	6.712	28.271	27.490	32.618	50.626	51.893	52.311	52.346	9.261	15.360	16.417	42.952	60.450	50.349	30.345	31.634	9.701		
T9	0.008	27.534	25.445	13.865	61.217	44.053	24.986	52.426	52.346	35080.521	17.170	13.856	10.183	50.472	50.740	53.904	18.185	27.298	30.803	
S1	0.000	40.404	65.792	77.210	3.302	4.749	5.854	14.516	9.261	17.170	35626.562	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
S2	0.000	66.012	41.140	76.632	3.681	5.958	4.304	12.789	15.360	13.856	0.000	35626.562	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
S3	0.000	77.024	76.816	9.458	6.556	3.049	3.821	14.796	16.417	10.183	0.000	0.000	35627.368	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
S4	0.000	3.910	6.200	7.158	21.864	30.978	30.105	60.337	42.952	0.000	0.000	0.000	36320.203	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	
S5	0.000	6.931	3.907	6.464	26.341	30.498	26.857	42.473	60.450	50.740	0.000	0.000	0.000	36320.203	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
S6	0.000	6.448	7.191	3.430	34.189	21.488	26.850	50.846	50.349	53.904	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	36320.203	0.000	0.000	0.000	
S7	0.000	10.385	10.379	1.027	65.059	31.346	36.790	27.781	30.345	18.185	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	36446.833	0.000	0.000	0.000	
S8	0.000	10.367	1.185	10.380	35.783	58.932	42.692	16.466	31.634	27.298	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	36446.833	0.000	
S9	0.000	1.168	10.371	10.407	32.687	45.965	58.267	31.150	9.701	30.803	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	36446.833	0.000	

TABLE 1.9 – Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{29}\text{H}_{36}$ , exprimée en  $\text{cm}^{-1}$

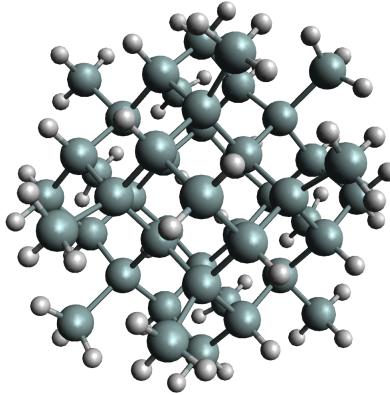


FIGURE 1.4 – Image de la molécule  $\text{Si}_{47}\text{H}_{60}$

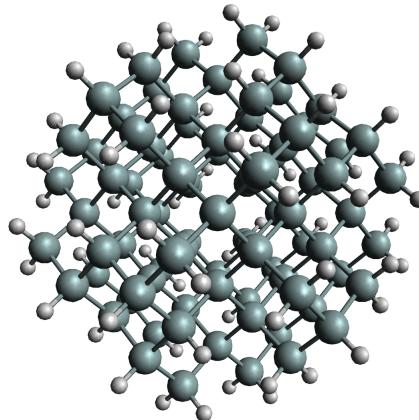


FIGURE 1.5 – Image de la molécule  $\text{Si}_{87}\text{H}_{76}$

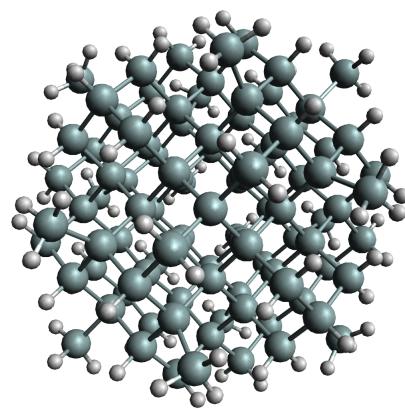


FIGURE 1.6 – Image de la molécule Si<sub>99</sub>H<sub>100</sub>

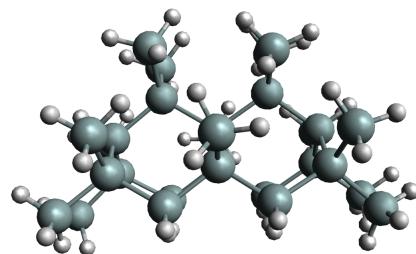


FIGURE 1.7 – Image de la molécule Si<sub>29</sub>H<sub>52</sub>

### 1.1.2 Forme pyramidale

**Molécule Si<sub>29</sub>H<sub>52</sub>**

**Molécule Si<sub>70</sub>H<sub>80</sub>**

Résultats Q-CHEM en attente.

#	Multiplicité	Etiquette	Energie (eV)	Energie ( $\text{cm}^{-1}$ )	Energie (nm)
0	Singulet	S0	-	-	-
1	Triplet	T1	4.1868	33 769.05	296.13
2	Triplet	T2	4.2782	34 506.25	289.80
3	Triplet	T3	4.3024	34 701.44	288.17
4	Triplet	T4	4.3666	35 219.25	283.94
5	Singulet	S1	4.4042	35 522.52	281.51
6	Singulet	S2	4.5053	36 337.95	275.19
7	Singulet	S3	4.5857	36 986.42	270.37
8	Singulet	S4	4.5892	37 014.65	270.16

TABLE 1.10 – Multiplicité des états excités de la molécule  $\text{Si}_{29}\text{H}_{52}$ , ainsi que leur énergie d'excitation

	S0	T1	T2	T3	T4	S1	S2	S3	S4
S0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	5.854E-02	7.671E-03	2.018E-04	9.525E-03
T1	0.0	0.0	1.033E-04	1.374E-03	1.507E-03	0.0	0.0	0.0	0.0
T2	0.0	1.033E-04	0.0	3.275E-06	3.630E-04	0.0	0.0	0.0	0.0
T3	0.0	1.374E-03	3.275E-06	0.0	2.741E-07	0.0	0.0	0.0	0.0
T4	0.0	1.507E-03	3.630E-04	2.741E-07	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S1	5.854E-02	0.0	0.0	0.0	0.0	2.887E-06	1.006E-03	1.100E-04	
S2	7.671E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	2.887E-06	0.0	3.449E-05	4.214E-04
S3	2.018E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	1.006E-03	3.449E-05	0.0	2.100E-04
S4	9.525E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	1.100E-04	4.214E-04	2.100E-04	0.0

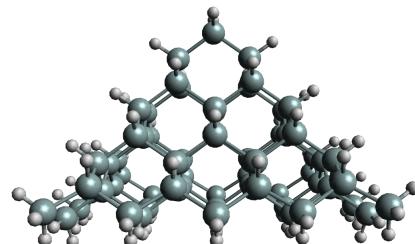
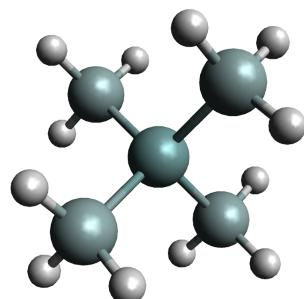
TABLE 1.11 – Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{29}\text{H}_{52}$ , exprimée en u.a.

	S0	T1	T2	T3	T4	S1	S2	S3	S4
S0	0.000	1.856	11.468	3.919	1.812	0.000	0.000	0.000	0.000
T1	1.856	33769.054	0.191	6.467	48.182	1.509	0.946	2.751	0.504
T2	11.468	0.191	34506.250	8.084	50.773	0.967	0.224	0.787	3.301
T3	3.919	6.467	8.084	34701.437	7.629	7.163	3.661	3.737	1.515
T4	1.812	48.182	50.773	7.629	35219.249	32.101	49.224	2.489	25.760
S1	0.000	1.509	0.967	7.163	32.101	35522.516	0.000	0.000	0.000
S2	0.000	0.946	0.224	3.661	49.224	0.000	36337.948	0.000	0.000
S3	0.000	2.751	0.787	3.737	2.489	0.000	0.000	36986.422	0.000
S4	0.000	0.504	3.301	1.515	25.760	0.000	0.000	0.000	37014.652

TABLE 1.12 – Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{29}\text{H}_{52}$ , exprimée en  $\text{cm}^{-1}$ 

#	Multiplicité	Etiquette	Energie (eV)	Energie ( $\text{cm}^{-1}$ )	Energie (nm)
0	Singulet	S0	-	-	-
1	Triplet	T1	5.7485	46 365.10	215.68
2	Triplet	T2	5.7487	46 366.71	215.67
3	Triplet	T3	5.7488	46 367.52	215.67
4	Triplet	T4	5.8755	47 389.43	211.02
5	Singulet	S1	6.3577	51 278.67	195.01
6	Singulet	S2	6.3589	51 288.34	194.98
7	Singulet	S3	6.3594	51 292.38	194.96
8	Singulet	S4	6.4210	51 789.22	193.09

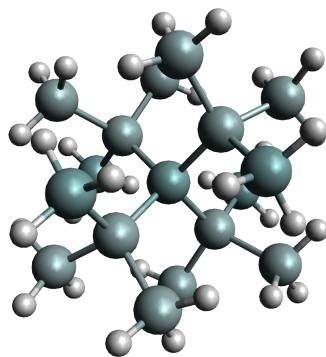
TABLE 1.13 – Multiplicité des états excités de la molécule  $\text{Si}_4\text{GeH}_{12}$ , ainsi que leur énergie d'excitation

FIGURE 1.8 – Image de la molécule  $\text{Si}_{70}\text{H}_{80}$ FIGURE 1.9 – Image de la molécule  $\text{Si}_4\text{GeH}_{12}$ 

	S0	T1	T2	T3	T4	S1	S2	S3	S4
S0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.095E-02	4.072E-02	4.066E-02	7.923E-06
T1	0.0	0.0	2.772E-08	1.924E-08	1.078E-04	0.0	0.0	0.0	0.0
T2	0.0	2.772E-08	0.0	1.347E-08	6.366E-05	0.0	0.0	0.0	0.0
T3	0.0	1.924E-08	1.347E-08	0.0	4.158E-05	0.0	0.0	0.0	0.0
T4	0.0	1.078E-04	6.366E-05	4.158E-05	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S1	4.095E-02	0.0	0.0	0.0	0.0	2.387E-05	1.293E-05	1.196E-03	
S2	4.072E-02	0.0	0.0	0.0	0.0	2.387E-05	0.0	1.356E-05	1.225E-03
S3	4.066E-02	0.0	0.0	0.0	0.0	1.293E-05	1.356E-05	0.0	6.726E-06
S4	7.923E-06	0.0	0.0	0.0	0.0	1.196E-03	1.225E-03	6.726E-06	0.0

TABLE 1.14 – Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule  $\text{Si}_4\text{GeH}_{12}$ , exprimée en u.a.

	S0	T1	T2	T3	T4	S1	S2	S3	S4
S0	0.000	0.069	0.429	0.286	184.276	0.000	0.000	0.000	0.000
T1	0.069	46365.102	147.737	147.804	51.048	35.430	196.165	198.447	32.645
T2	0.429	147.737	46366.715	147.908	69.422	196.656	135.728	148.864	41.654
T3	0.286	147.804	147.908	46367.521	87.103	198.897	149.094	132.095	50.852
T4	184.276	51.048	69.422	87.103	47389.433	39.836	74.317	86.766	13.960
S1	0.000	35.430	196.656	198.897	39.836	51278.665	0.000	0.000	0.000
S2	0.000	196.165	135.728	149.094	74.317	0.000	51288.344	0.000	0.000
S3	0.000	198.447	148.864	132.095	86.766	0.000	0.000	51292.377	0.000
S4	0.000	32.645	41.654	50.852	13.960	0.000	0.000	0.000	51789.218

TABLE 1.15 – Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule  $\text{Si}_4\text{GeH}_{12}$ , exprimée en  $\text{cm}^{-1}$ FIGURE 1.10 – Image de la molécule  $\text{Si}_{12}\text{Ge}_5\text{H}_{36}$ 

#	Multiplicité	Etiquette	Energie (eV)	Energie ( $\text{cm}^{-1}$ )	Energie (nm)
0	Singulet	S0	-	-	-
1	Triplet	T1	4.3527	35 107.14	284.84
2	Triplet	T2	4.3598	35 164.40	284.38
3	Triplet	T3	4.3786	35 316.04	283.16
4	Singulet	S1	4.7467	38 284.98	261.20
5	Singulet	S2	4.7548	38 350.31	260.75
6	Singulet	S3	4.7830	38 577.76	259.22
7	Triplet	T4	4.7863	38 604.38	259.04
8	Singulet	S4	5.0686	40 881.30	244.61

TABLE 1.16 – Multiplicité des états excités de la molécule  $\text{Si}_{12}\text{Ge}_5\text{H}_{36}$ , ainsi que leur énergie d'excitation

	S0	T1	T2	T3	S1	S2	S3	T4	S4
S0	0.0	0.0	0.0	0.0	7.883E-02	8.294E-02	7.512E-02	0.0	8.441E-05
T1	0.0	0.0	1.391E-05	1.340E-05	0.0	0.0	0.0	8.640E-07	0.0
T2	0.0	1.391E-05	0.0	1.053E-05	0.0	0.0	0.0	5.934E-06	0.0
T3	0.0	1.340E-05	1.053E-05	0.0	0.0	0.0	0.0	1.874E-03	0.0
S1	7.883E-02	0.0	0.0	0.0	0.0	4.969E-05	2.758E-05	0.0	1.501E-03
S2	8.294E-02	0.0	0.0	0.0	4.969E-05	0.0	2.891E-05	0.0	2.598E-06
S3	7.512E-02	0.0	0.0	0.0	2.758E-05	2.891E-05	0.0	0.0	6.772E-03
T4	0.0	8.640E-07	5.934E-06	1.874E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S4	8.441E-05	0.0	0.0	0.0	1.501E-03	2.598E-06	6.772E-03	0.0	0.0

TABLE 1.17 – Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{12}\text{Ge}_5\text{H}_{36}$ , exprimée en u.a.

	S0	T1	T2	T3	S1	S2	S3	T4	S4
S0	0.000	33.543	27.628	6.878	0.000	0.000	0.000	194.534	0.000
T1	33.543	35107.137	261.782	259.871	184.674	3.512	187.847	0.191	0.122
T2	27.628	261.782	35164.403	265.530	4.539	185.428	193.149	75.462	29.005
T3	6.878	259.871	265.530	35316.036	188.297	185.199	2.809	22.258	5.144
S1	0.000	184.674	4.539	188.297	38284.984	0.000	0.000	8.071	0.000
S2	0.000	3.512	185.428	185.199	0.000	38350.315	0.000	0.218	0.000
S3	0.000	187.847	193.149	2.809	0.000	0.000	38577.765	11.717	0.000
T4	194.534	0.191	75.462	22.258	8.071	0.218	11.717	38604.381	0.802
S4	0.000	0.122	29.005	5.144	0.000	0.000	0.000	0.802	40881.300

TABLE 1.18 – Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{12}\text{Ge}_5\text{H}_{36}$ , exprimée en  $\text{cm}^{-1}$ 

## 1.2 Quantum dots de silicium-germanium

### 1.2.1 Forme sphéroïdale

**Molécule  $\text{Si}_4\text{GeH}_{12}$**

**Molécule  $\text{Si}_{12}\text{Ge}_5\text{H}_{36}$**

**Molécule  $\text{Si}_{24}\text{Ge}_5\text{H}_{36}$**

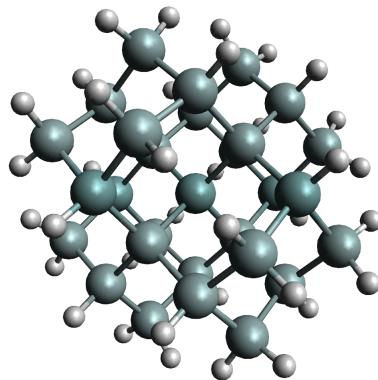
**Molécule  $\text{Si}_{36}\text{Ge}_{11}\text{H}_{60}$**

**Molécule  $\text{Si}_{68}\text{Ge}_{19}\text{H}_{76}$**

Résultats Q-CHEM en attente.

#	Multiplicité	Etiquette	Energie (eV)	Energie ( $\text{cm}^{-1}$ )	Energie (nm)
0	Singulet	S0	-	-	-
1	Triplet	T1	4.0778	32 889.90	304.04
2	Triplet	T2	4.0779	32 890.71	304.04
3	Triplet	T3	4.1170	33 206.08	301.15
4	Triplet	T4	4.2475	34 258.64	291.90
5	Triplet	T5	4.2478	34 261.06	291.88
6	Singulet	S1	4.2934	34 628.85	288.78
7	Singulet	S2	4.2935	34 629.65	288.77
8	Singulet	S3	4.3210	34 851.46	286.93
9	Singulet	S4	4.4004	35 491.87	281.75
10	Singulet	S5	4.4004	35 491.87	281.75

TABLE 1.19 – Multiplicité des états excités de la molécule  $\text{Si}_{24}\text{Ge}_5\text{H}_{36}$ , ainsi que leur énergie d'excitation

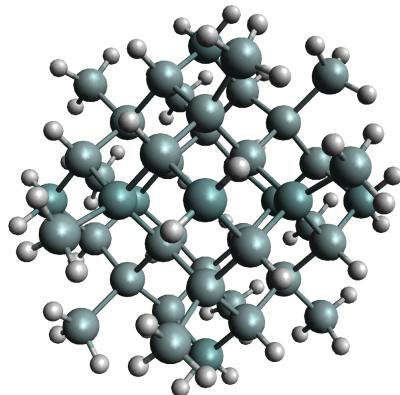
FIGURE 1.11 – Image de la molécule  $\text{Si}_{24}\text{Ge}_5\text{H}_{36}$ 

	S0	T1	T2	T3	T4	T5	S1	S2	S3	S4	S5
S0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.015E-03	2.007E-03	4.011E-03	8.849E-04	8.789E-04
T1	0.0	0.0	1.812E-11	7.010E-05	1.019E-04	2.442E-07	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
T2	0.0	1.812E-11	0.0	6.957E-05	2.419E-07	1.013E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
T3	0.0	7.010E-05	6.957E-05	0.0	1.339E-04	1.334E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
T4	0.0	1.019E-04	2.419E-07	1.339E-04	0.0	4.383E-10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
T5	0.0	2.442E-07	1.013E-04	1.334E-04	4.383E-10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S1	2.015E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.312E-09	9.217E-05	2.555E-05	1.306E-06
S2	2.007E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.312E-09	0.0	9.159E-05	1.310E-06	2.494E-05
S3	4.011E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	9.217E-05	9.159E-05	0.0	1.982E-06	1.971E-06
S4	8.849E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	2.555E-05	1.310E-06	1.982E-06	0.0	6.780E-12
S5	8.789E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.306E-06	2.494E-05	1.971E-06	6.780E-12	0.0

TABLE 1.20 – Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{24}\text{Ge}_5\text{H}_{36}$ , exprimée en u.a.

	S0	T1	T2	T3	T4	T5	S1	S2	S3	S4	S5
S0	0.000	25.693	25.851	0.265	31.195	31.302	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
T1	25.693	32889.904	262.006	255.178	0.513	11.827	11.780	181.487	184.520	1.170	14.459
T2	25.851	262.006	32890.710	255.180	11.898	0.435	181.534	11.785	184.676	14.485	1.177
T3	0.265	255.178	255.180	33206.075	4.165	4.237	182.108	182.029	0.409	6.634	6.528
T4	31.195	0.513	11.898	4.165	34258.636	182.331	0.656	6.528	29.046	18.625	170.251
T5	31.302	11.827	0.435	4.237	182.331	34261.056	6.805	0.506	29.211	170.302	18.762
S1	0.000	11.780	181.534	182.108	0.656	6.805	34628.847	0.000	0.000	0.000	0.000
S2	0.000	181.487	11.785	182.029	6.528	0.506	0.000	34629.654	0.000	0.000	0.000
S3	0.000	184.520	184.676	0.409	29.046	29.211	0.000	0.000	34851.458	0.000	0.000
S4	0.000	1.170	14.485	6.634	18.625	170.302	0.000	0.000	0.000	35491.866	0.000
S5	0.000	14.459	1.177	6.528	170.251	18.762	0.000	0.000	0.000	0.000	35491.866

TABLE 1.21 – Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{24}\text{Ge}_5\text{H}_{36}$ , exprimée en  $\text{cm}^{-1}$

FIGURE 1.12 – Image de la molécule  $\text{Si}_{36}\text{Ge}_{11}\text{H}_{60}$ 

#	Multiplicité	Etiquette	Energie (eV)	Energie ( $\text{cm}^{-1}$ )	Energie (nm)
0	Singulet	S0	-	-	-
1	Triplet	T1	3.6183	29 183.76	342.66
2	Triplet	T2	3.6285	29 266.03	341.69
3	Triplet	T3	3.6292	29 271.68	341.63
4	Singulet	S1	3.7655	30 371.02	329.26
5	Singulet	S2	3.7914	30 579.92	327.01
6	Singulet	S3	3.7925	30 588.79	326.92
7	Triplet	T4	3.8303	30 893.67	323.69
8	Singulet	S4	3.9135	31 564.73	316.81

TABLE 1.22 – Multiplicité des états excités de la molécule  $\text{Si}_{36}\text{Ge}_{11}\text{H}_{60}$ , ainsi que leur énergie d'excitation

	S0	T1	T2	T3	S1	S2	S3	T4	S4
S0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.778E-02	1.981E-02	2.003E-02	0.0	6.228E-04
T1	0.0	0.0	5.201E-05	5.886E-05	0.0	0.0	0.0	1.407E-06	0.0
T2	0.0	5.201E-05	0.0	1.282E-06	0.0	0.0	0.0	8.370E-05	0.0
T3	0.0	5.886E-05	1.282E-06	0.0	0.0	0.0	0.0	1.208E-04	0.0
S1	1.778E-02	0.0	0.0	0.0	0.0	2.447E-04	2.698E-04	0.0	1.188E-02
S2	1.981E-02	0.0	0.0	0.0	2.447E-04	0.0	6.636E-06	0.0	4.409E-03
S3	2.003E-02	0.0	0.0	0.0	2.698E-04	6.636E-06	0.0	0.0	8.605E-03
T4	0.0	1.407E-06	8.370E-05	1.208E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S4	6.228E-04	0.0	0.0	0.0	1.188E-02	4.409E-03	8.605E-03	0.0	0.0

TABLE 1.23 – Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{36}\text{Ge}_{11}\text{H}_{60}$ , exprimée en u.a.

	S0	T1	T2	T3	S1	S2	S3	T4	S4
S0	0.000	1.243	24.188	25.097	0.000	0.000	0.000	159.826	0.000
T1	1.243	29183.760	266.602	266.709	28.479	191.911	193.429	27.119	2.437
T2	24.188	266.602	29266.030	278.997	194.622	24.306	199.090	30.470	12.689
T3	25.097	266.709	278.997	29271.676	195.881	199.218	11.907	26.212	9.094
S1	0.000	28.479	194.622	195.881	30371.017	0.000	0.000	21.102	0.000
S2	0.000	191.911	24.306	199.218	0.000	30579.916	0.000	10.117	0.000
S3	0.000	193.429	199.090	11.907	0.000	0.000	30588.788	12.146	0.000
T4	159.826	27.119	30.470	26.212	21.102	10.117	12.146	30893.668	7.714
S4	0.000	2.437	12.689	9.094	0.000	0.000	0.000	7.714	31564.726

TABLE 1.24 – Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule Si<sub>36</sub>Ge<sub>11</sub>H<sub>60</sub>, exprimée en cm<sup>-1</sup>

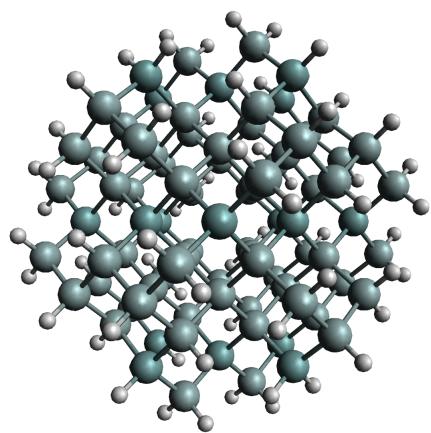


FIGURE 1.13 – Image de la molécule Si<sub>68</sub>Ge<sub>19</sub>H<sub>76</sub>

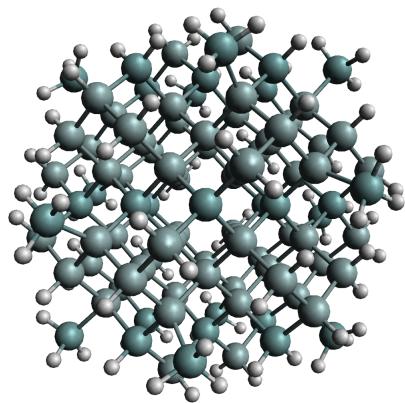


FIGURE 1.14 – Image de la molécule  $\text{Si}_{68}\text{Ge}_{31}\text{H}_{100}$

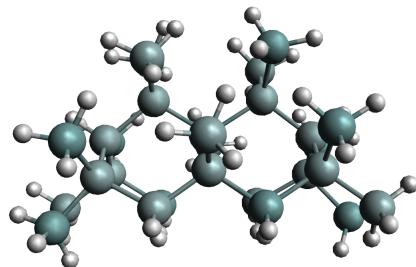


FIGURE 1.15 – Image de la molécule  $\text{Si}_{18}\text{Ge}_{11}\text{H}_{52}$

**Molécule  $\text{Si}_{68}\text{Ge}_{31}\text{H}_{100}$**

Résultats Q-CHEM en attente.

### 1.2.2 Forme pyramidale

**Molécule  $\text{Si}_{18}\text{Ge}_{11}\text{H}_{52}$**

**Molécule  $\text{Si}_{54}\text{Ge}_{16}\text{H}_{80}$**

Résultats Q-CHEM en attente.

#	Multiplicité	Etiquette	Energie (eV)	Energie ( $\text{cm}^{-1}$ )	Energie (nm)
0	Singulet	S0	-	-	-
1	Triplet	T1	4.0229	32 447.10	308.19
2	Triplet	T2	4.0974	33 047.99	302.59
3	Triplet	T3	4.1968	33 849.71	295.42
4	Triplet	T4	4.2263	34 087.65	293.36
5	Singulet	S1	4.2502	34 280.41	291.71
6	Singulet	S2	4.4095	35 565.26	281.17
7	Singulet	S3	4.4493	35 886.27	278.66
8	Singulet	S4	4.4940	36 246.81	275.89

TABLE 1.25 – Multiplicité des états excités de la molécule  $\text{Si}_{18}\text{Ge}_{11}\text{H}_{52}$ , ainsi que leur énergie d'excitation

	S0	T1	T2	T3	T4	S1	S2	S3	S4
S0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	9.410E-03	9.100E-03	1.681E-03	1.633E-02
T1	0.0	0.0	1.003E-03	8.135E-05	5.971E-03	0.0	0.0	0.0	0.0
T2	0.0	1.003E-03	0.0	4.098E-04	3.007E-05	0.0	0.0	0.0	0.0
T3	0.0	8.135E-05	4.098E-04	0.0	1.388E-05	0.0	0.0	0.0	0.0
T4	0.0	5.971E-03	3.007E-05	1.388E-05	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S1	9.410E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	6.263E-03	2.611E-02	7.070E-04
S2	9.100E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	6.263E-03	0.0	1.878E-04	1.198E-03
S3	1.681E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	2.611E-02	1.878E-04	0.0	4.614E-04
S4	1.633E-02	0.0	0.0	0.0	0.0	7.070E-04	1.198E-03	4.614E-04	0.0

TABLE 1.26 – Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{18}\text{Ge}_{11}\text{H}_{52}$ , exprimée en u.a.

	S0	T1	T2	T3	T4	S1	S2	S3	S4
S0	0.000	44.223	26.180	31.510	15.374	0.000	0.000	0.000	0.000
T1	44.223	32447.102	231.520	203.997	23.733	2.798	164.665	24.939	136.678
T2	26.180	231.520	33047.989	231.086	28.630	160.617	3.978	27.243	133.435
T3	31.510	203.997	231.086	33849.710	73.889	135.422	154.785	70.153	1.400
T4	15.374	23.733	28.630	73.889	34087.645	10.473	24.805	0.877	64.073
S1	0.000	2.798	160.617	135.422	10.473	34280.413	0.000	0.000	0.000
S2	0.000	164.665	3.978	154.785	24.805	0.000	35565.263	0.000	0.000
S3	0.000	24.939	27.243	70.153	0.877	0.000	0.000	35886.274	0.000
S4	0.000	136.678	133.435	1.400	64.073	0.000	0.000	0.000	36246.806

TABLE 1.27 – Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{18}\text{Ge}_{11}\text{H}_{52}$ , exprimée en  $\text{cm}^{-1}$

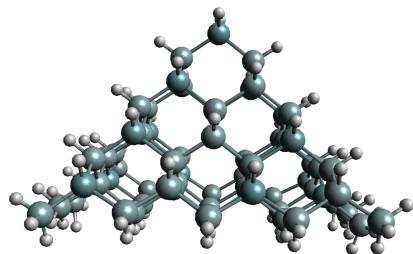


FIGURE 1.16 – Image de la molécule  $\text{Si}_{54}\text{Ge}_{16}\text{H}_{80}$

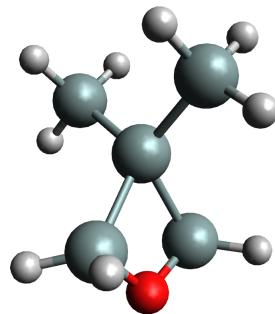


FIGURE 1.17 – Image de la molécule  $\text{Si}_5\text{OH}_{10}$

### 1.3 Quantum dots de silicium contaminé à l'oxygène

#### 1.3.1 Forme sphéroïdale

Molécule  $\text{Si}_5\text{OH}_{10}$

Molécule  $\text{Si}_{17}\text{O}_4\text{H}_{28}$

Molécule  $\text{Si}_{29}\text{O}_6\text{H}_{24}$

Résultats Q-CHEM en attente.

#	Multiplicité	Etiquette	Energie (eV)	Energie ( $\text{cm}^{-1}$ )	Energie (nm)
0	Singulet	S0	-	-	-
1	Triplet	T1	4.5927	37 042.88	269.96
2	Triplet	T2	4.7611	38 401.13	260.41
3	Triplet	T3	4.7972	38 692.30	258.45
4	Triplet	T4	5.2293	42 177.44	237.09
5	Singulet	S1	5.2312	42 192.77	237.01
6	Singulet	S2	5.3259	42 956.58	232.79
7	Singulet	S3	5.6008	45 173.81	221.37
8	Singulet	S4	5.7580	46 441.72	215.32

TABLE 1.28 – Multiplicité des états excités de la molécule  $\text{Si}_5\text{OH}_{10}$ , ainsi que leur énergie d'excitation

	S0	T1	T2	T3	T4	S1	S2	S3	S4
S0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	5.565E-02	5.722E-05	6.912E-04	6.539E-02
T1	0.0	0.0	6.790E-05	2.281E-05	3.700E-04	0.0	0.0	0.0	0.0
T2	0.0	6.790E-05	0.0	4.784E-07	3.662E-04	0.0	0.0	0.0	0.0
T3	0.0	2.281E-05	4.784E-07	0.0	3.326E-03	0.0	0.0	0.0	0.0
T4	0.0	3.700E-04	3.662E-04	3.326E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S1	5.565E-02	0.0	0.0	0.0	0.0	1.535E-05	4.282E-03	8.410E-04	
S2	5.722E-05	0.0	0.0	0.0	0.0	1.535E-05	0.0	2.662E-07	1.382E-05
S3	6.912E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	4.282E-03	2.662E-07	0.0	1.620E-05
S4	6.539E-02	0.0	0.0	0.0	0.0	8.410E-04	1.382E-05	1.620E-05	0.0

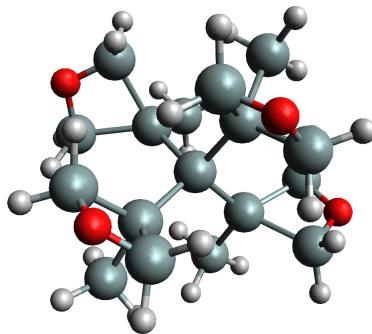
TABLE 1.29 – Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule  $\text{Si}_5\text{OH}_{10}$ , exprimée en u.a.

	S0	T1	T2	T3	T4	S1	S2	S3	S4
S0	0.000	41.868	1.610	17.088	19.819	0.000	0.000	0.000	0.000
T1	41.868	37042.881	60.485	26.460	23.993	0.187	17.259	56.495	23.704
T2	1.610	60.485	38401.128	39.175	9.753	13.072	20.694	1.018	2.659
T3	17.088	26.460	39.175	38692.296	72.614	12.871	0.948	2.545	13.369
T4	19.819	23.993	9.753	72.614	42177.442	17.839	53.676	18.912	21.926
S1	0.000	0.187	13.072	12.871	17.839	42192.767	0.000	0.000	0.000
S2	0.000	17.259	20.694	0.948	53.676	0.000	42956.579	0.000	0.000
S3	0.000	56.495	1.018	2.545	18.912	0.000	0.000	45173.812	0.000
S4	0.000	23.704	2.659	13.369	21.926	0.000	0.000	0.000	46441.725

TABLE 1.30 – Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule  $\text{Si}_5\text{OH}_{10}$ , exprimée en  $\text{cm}^{-1}$ 

#	Multiplicité	Etiquette	Energie (eV)	Energie ( $\text{cm}^{-1}$ )	Energie (nm)
0	Singulet	S0	-	-	-
1	Triplet	T1	4.1270	33 286.73	300.42
2	Triplet	T2	4.1673	33 611.77	297.51
3	Triplet	T3	4.2282	34 102.97	293.23
4	Triplet	T4	4.2823	34 539.32	289.53
5	Singulet	S1	4.4600	35 972.58	277.99
6	Singulet	S2	4.4862	36 183.89	276.37
7	Singulet	S3	4.5463	36 668.64	272.71
8	Singulet	S4	4.5928	37 043.69	269.95

TABLE 1.31 – Multiplicité des états excités de la molécule  $\text{Si}_{17}\text{O}_4\text{H}_{28}$ , ainsi que leur énergie d'excitation

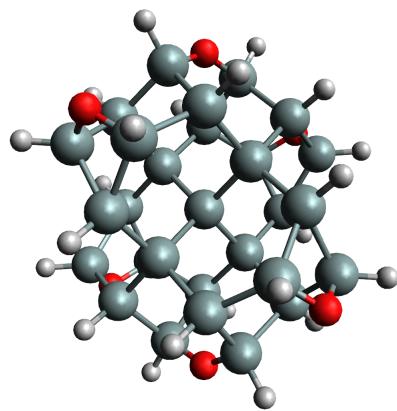
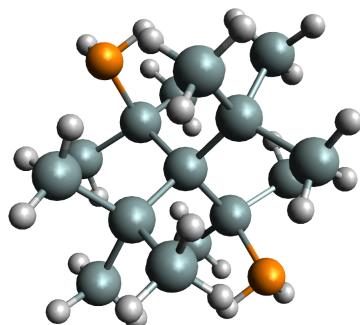
FIGURE 1.18 – Image de la molécule  $\text{Si}_{17}\text{O}_4\text{H}_{28}$ 

	S0	T1	T2	T3	T4	S1	S2	S3	S4
S0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.804E-02	9.694E-03	5.788E-03	4.389E-03
T1	0.0	0.0	5.123E-04	1.535E-03	3.571E-03	0.0	0.0	0.0	0.0
T2	0.0	5.123E-04	0.0	1.552E-03	7.164E-04	0.0	0.0	0.0	0.0
T3	0.0	1.535E-03	1.552E-03	0.0	4.287E-04	0.0	0.0	0.0	0.0
T4	0.0	3.571E-03	7.164E-04	4.287E-04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
S1	1.804E-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	4.825E-04	2.654E-03	7.522E-03
S2	9.694E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	4.825E-04	0.0	5.265E-03	4.146E-03
S3	5.788E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	2.654E-03	5.265E-03	0.0	4.703E-04
S4	4.389E-03	0.0	0.0	0.0	0.0	7.522E-03	4.146E-03	4.703E-04	0.0

TABLE 1.32 – Matrice des moments dipolaires associés aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{17}\text{O}_4\text{H}_{28}$ , exprimée en u.a.

	S0	T1	T2	T3	T4	S1	S2	S3	S4
S0	0.000	13.447	17.574	19.435	26.179	0.000	0.000	0.000	0.000
T1	13.447	33286.731	64.302	57.872	30.567	3.675	44.018	45.036	29.317
T2	17.574	64.302	33611.775	29.646	29.798	47.954	10.300	18.872	29.965
T3	19.435	57.872	29.646	34102.970	32.933	40.663	20.751	7.586	26.456
T4	26.179	30.567	29.798	32.933	34539.319	23.942	29.344	13.894	2.345
S1	0.000	3.675	47.954	40.663	23.942	35972.576	0.000	0.000	0.000
S2	0.000	44.018	10.300	20.751	29.344	0.000	36183.895	0.000	0.000
S3	0.000	45.036	18.872	7.586	13.894	0.000	0.000	36668.637	0.000
S4	0.000	29.317	29.965	26.456	2.345	0.000	0.000	0.000	37043.688

TABLE 1.33 – Matrice Hamiltonien associée aux états excités de la molécule  $\text{Si}_{17}\text{O}_4\text{H}_{28}$ , exprimée en  $\text{cm}^{-1}$

FIGURE 1.19 – Image de la molécule  $\text{Si}_{29}\text{O}_6\text{H}_{24}$ FIGURE 1.20 – Image de la molécule  $\text{Si}_{15}\text{P}_2\text{H}_{34}$ 

## 1.4 Quantum dots de silicium contaminés au phosphore

### 1.4.1 Forme sphéroïdale

Molécule  $\text{Si}_{15}\text{P}_2\text{H}_{34}$

Résultats Q-CHEM en attente.

## 1.5 Quantum dots de silicium passivés au méthyle

### 1.5.1 Forme sphéroïdale

Molécule  $\text{Si}_5(\text{CH}_3)_{12}$

Résultats Q-CHEM en attente.

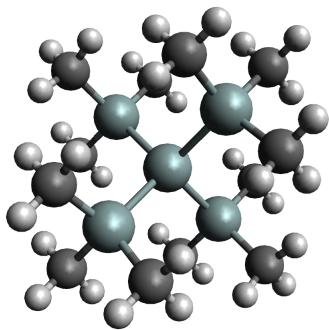


FIGURE 1.21 – Image de la molécule  $\text{Si}_5(\text{CH}_3)_{12}$

## Annexe A

# Frequently Asked Questions

### A.1 How do I change the colors of links ?

The color of links can be changed to your liking using :

\hypersetup{urlcolor=red}, or  
\hypersetup{citecolor=green}, or  
\hypersetup{allcolor=blue}.

If you want to completely hide the links, you can use :

\hypersetup{allcolors= .}, or even better :  
\hypersetup{hidelinks}.

If you want to have obvious links in the PDF but not the printed text, use :

\hypersetup{colorlinks=false}.