



**HAL**  
open science

# Action d'un champ magnétique et d'un champ électrique sur un exciton lié à une impureté de type donneur ionisé dans un puits quantique de semi-conducteur

Ismail Essaoudi

## ► To cite this version:

Ismail Essaoudi. Action d'un champ magnétique et d'un champ électrique sur un exciton lié à une impureté de type donneur ionisé dans un puits quantique de semi-conducteur. Physique [physics]. Université Paul Verlaine - Metz, 2000. Français. NNT : 2000METZ021S . tel-01775387

**HAL Id: tel-01775387**

**<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01775387>**

Submitted on 24 Apr 2018

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



## AVERTISSEMENT

Ce document est le fruit d'un long travail approuvé par le jury de soutenance et mis à disposition de l'ensemble de la communauté universitaire élargie.

Il est soumis à la propriété intellectuelle de l'auteur. Ceci implique une obligation de citation et de référencement lors de l'utilisation de ce document.

D'autre part, toute contrefaçon, plagiat, reproduction illicite encourt une poursuite pénale.

Contact : [ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr](mailto:ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr)

## LIENS

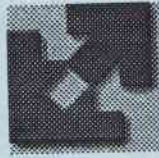
Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 335.2- L 335.10

[http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg\\_droi.php](http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php)

<http://www.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>

S172 00121



UNIVERSITE DE METZ  
LABORATOIRE DE THEORIE DE LA MATIERE CONDENSEE

# THESE

*présentée sous la co-tutelle*

*des Universités de Metz et de Meknès*

*pour obtenir le grade de*

## DOCTEUR en PHYSIQUE

des

### UNIVERSITES de METZ et de MEKNES

Spécialité Physique du Solide

par

## Ismaïl ESSAOUDI

*Action d'un champ magnétique et d'un champ électrique sur un exciton lié à une impureté de type donneur ionisé dans un puits quantique de semi-conducteur.*

soutenue le 4 octobre 2000  
à l'Université de Metz

*Rapporteurs :*

**E. FEDDI**

Professeur à l'Ecole Normale Supérieure de Tétouan.

**Mme L. STAUFFER**

Professeur à l'Université de Mulhouse.

*Examineurs :*

**J. HANSSEN**

Professeur à l'Université de Metz.

**M. SABER**

Professeur à l'Université Moulay Ismaïl de Meknès.

*Co-directeurs de thèse :*

**A. AINANE**

Professeur à l'Université Moulay Ismaïl de Meknès.

**B. STEBE**

Professeur à l'Université de Metz.

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE DE METZ

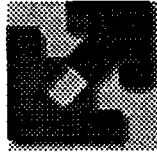


022 318147 8

6 167077

S 172 00/21

8



UNIVERSITE DE METZ  
LABORATOIRE DE THEORIE DE LA MATIERE CONDENSEE

# THESE

*présentée sous la co-tutelle*

*des Universités de Metz et de Meknès*

*pour obtenir le grade de*

## DOCTEUR en PHYSIQUE

des

UNIVERSITES de METZ et de MEKNES

Spécialité Physique du Solide

par

**Ismaïl ESSAOUDI**

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ	
N° inv.	2000/255
Cote	S/M3 00/21
Loc	Magasin

***Action d'un champ magnétique et d'un champ électrique sur un exciton lié à une impureté de type donneur ionisé dans un puits quantique de semi-conducteur.***

soutenue le 4 octobre 2000  
à l'Université de Metz

*Rapporteurs :*

**E. FEDDI** Professeur à l'Ecole Normale Supérieure de Tétouan.  
**Mme L. STAUFFER** Professeur à l'Université de Mulhouse.

*Examineurs :*

**J. HANSSEN** Professeur à l'Université de Metz.  
**M. SABER** Professeur à l'Université Moulay Ismaïl de Meknès.

*Co-directeurs de thèse :*

**A. AINANE** Professeur à l'Université Moulay Ismaïl de Meknès.  
**B. STEBE** Professeur à l'Université de Metz.

## Remerciements

*Ce travail a été effectué sous la co-tutelle des Universités de Metz et Moulay Ismaïl de Meknès N° 98/031 dans le cadre de l'action intégrée franco-marocaine N° 97/046/SM au sein du Laboratoire de Théorie de la Matière Condensée de l'Université de Metz.*

*Je tiens ici à exprimer toute ma profonde gratitude et ma reconnaissance à Monsieur le Professeur Bernard STEBE pour ses grandes qualités humaines et sa rigueur. En tant que directeur de thèse, je le remercie pour l'aide constante et le soutien qu'il m'a apporté en me faisant profiter de ses compétences scientifiques.*

*Je tiens aussi à remercier chaleureusement Monsieur Abdelmajid AINANE, Professeur à l'Université Moulay Ismaïl de Meknès, qui a accepté de codiriger mes travaux. Il m'a constamment prodigué ses encouragements et ces conseils éclairés lors de très nombreuses discussions : qu'il veuille bien ici l'expression de ma plus vive reconnaissance.*

*Mes remerciements s'adressent aussi à Madame Louise STAUFFER, Professeur à l'Université de Mulhouse, et à Monsieur El Mustapha FEDDI, Professeur à l'Ecole Normale Supérieure de Tétouan, pour avoir accepté la lourde tâche d'être rapporteurs de ce travail. Qu'ils soient ici assurés de ma profonde reconnaissance.*

*Messieurs Jocelyn HANSSEN, Professeur à l'Université de Metz et Mohammed SABER, Professeur à l'Université Moulay Ismaïl de Meknès m'ont fait l'honneur en participant à la commission d'examen de cette thèse. Qu'il me soit permis de leur exprimer toute ma gratitude.*

*Monsieur M. SABER m'a guidé et m'a fait profiter de sa compétence dans le domaine de magnétisme et grâce à lui j'ai pu faire un stage de deux mois au Centre International de Physique Théorique au Trieste (Italie). Notre collaboration nous a permis d'obtenir des résultats intéressants qui ont donné lieu à trois publications non exposées dans cette thèse. Je tiens à le remercier pour ces conseils avisés et ses multiples encouragements qui m'ont été d'une aide précieuse, et tout particulièrement pour le climat de confiance qu'il a su établir entre nous.*

*Messieurs Janusz ADAMOWSKI et Stanislaw BEDNAREK Professeurs à l'Université AGH de Cracovie (Pologne), ont bien voulu m'accueillir pendant 1 mois dans leur laboratoire dans le cadre de l'action franco-polognaise N° 01800PL. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma profonde gratitude pour les discussions enrichissantes que j'ai eues avec eux.*

*Je tiens à exprimer mes sincères remerciements aux membres du laboratoire qui m'ont apporté de l'aide dès que cela est possible. Monsieur Francis DUJARDIN Maître de conférence à l'Université qui n'hésitait jamais à proposer son aide tant pour les problèmes informatiques que scientifiques. Les discussions que j'ai eues avec mes collègues Abdellatif EL HASSANI, Aali MORADI et Bartłomiej SZAFRAN m'ont beaucoup apporté. La gentillesse et la sympathie des*

*membres du groupe de Monsieur Jean-Louis BRETONNET ont rendu mon séjour au laboratoire aussi agréable qu'enrichissant. Qu'ils trouvent ici le témoignage de ma reconnaissance et ma gratitude.*

*Je remercie également Philippe WECK qui a bien voulu assurer la correction de ce manuscrit, alors qu'il était lui-même fort occupé par la rédaction de sa thèse.*

*A tous mes amis et collègues de l'IPEM, du CLOES et de la Faculté des Sciences de Meknès, trop nombreux à citer, j'exprime ma gratitude pour l'atmosphère de sympathie et de soutien cordial dont ils m'ont entouré.*

# Table des Matières

<b>1</b>	<b>INTRODUCTION GENERALE</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>THEORIE DU COMPLEXE EXCITON-DONNEUR IONISE DANS L'APPROXIMATION DE LA FONCTION ENVELOPPE</b>	<b>11</b>
2.1	Introduction . . . . .	11
2.2	Approximation de la fonction enveloppe . . . . .	14
2.3	Equation de la masse effective d'un exciton lié à un donneur ionisé dans un puits quantique . . . . .	17
2.3.1	Etats du complexe $(D^+,X)$ dans un puits quantique . . . . .	20
2.3.2	Equation effective de la fonction enveloppe de $(D^+,X)$ . . . . .	21
2.4	Travaux antérieurs sur le complexe . . . . .	22
2.4.1	Semi-conducteur massif . . . . .	22
2.4.2	Boîte quantique . . . . .	25
2.4.3	Puits quantique . . . . .	25
<b>3</b>	<b>IMPURETE DANS UN PUIITS QUANTIQUE - INFLUENCE DES CHAMPS EXTERIEURS ET DE COUPLAGE ELECTRON-PHONON</b>	<b>29</b>

3.1	Introduction . . . . .	29
3.2	Energie de l'état fondamental en présence de champs extérieurs . . .	32
3.2.1	Hamiltonien du système en présence du champ magnétique . .	32
3.2.2	Choix de la fonction d'onde d'essai . . . . .	33
3.2.3	Hamiltonien du système en présence du champ électrique . . .	37
3.2.4	Calcul numérique et discussion des résultats . . . . .	40
3.3	Influence du couplage électron-phonon . . . . .	49
3.3.1	Hamiltonien du système . . . . .	50
3.3.2	Choix de la fonction d'onde d'essai . . . . .	51
3.3.3	Résultats . . . . .	53
3.4	Conclusion . . . . .	58
<b>4</b>	<b>ENERGIE DE L'ETAT FONDAMENTAL DU COMPLEXE (D<sup>+</sup>,X)</b>	
	<b>A CHAMP NUL</b>	<b>59</b>
4.1	Introduction . . . . .	59
4.2	Calcul variationnel de l'énergie de l'état fondamental . . . . .	60
4.3	Stabilité du complexe . . . . .	66
4.4	Résultats numériques et discussion . . . . .	69
4.5	Conclusion . . . . .	75
<b>5</b>	<b>ACTION DES CHAMPS EXTERIEURS SUR L'ENERGIE DE L'ETAT FONDAMENTAL DU COMPLEXE</b>	<b>77</b>
5.1	Introduction . . . . .	77
5.2	Action du champ magnétique . . . . .	79



5.2.1	Calcul variationnel de l'énergie de l'état fondamental . . . . .	80
5.2.2	Résultats numériques et discussion . . . . .	81
5.3	Action du champ électrique . . . . .	91
5.3.1	Choix de la fonction d'onde d'essai . . . . .	92
5.3.2	Résultats numériques et discussion . . . . .	93
5.4	Conclusion . . . . .	101
<b>6</b>	<b>CONCLUSION GENERALE</b>	<b>103</b>
<b>A</b>	<b>Particule dans un puits quantique en présence des champs extérieurs</b>	<b>107</b>
A.1	Action du champ magnétique . . . . .	107
A.2	Action du champ électrique . . . . .	109
<b>B</b>	<b>Energie de liaison d'un exciton en présence des champs extérieurs</b>	<b>115</b>
B.1	Action d'un champ magnétique . . . . .	116
B.1.1	Calcul variationnel de l'énergie de corrélation . . . . .	118
B.2	Action du champ électrique . . . . .	121
B.2.1	Calcul variationnel de l'énergie de corrélation . . . . .	121
B.3	Résultats du calcul variationnel . . . . .	123
<b>C</b>	<b>Calcul du terme de l'interaction coulombienne</b>	<b>129</b>



# Chapitre 1

## INTRODUCTION GENERALE

Le présent travail s'insère dans le cadre de l'étude des propriétés électroniques d'une impureté de type donneur ( $D^0$ ) et d'un exciton ( $X$ ) lié à une impureté ionisée ( $D^+, X$ ) dans un puits quantique de semi-conducteur, en présence des champs extérieurs.

La place considérable que prennent aujourd'hui la micro-électronique, l'informatique et les télécommunications, vient des progrès réalisés depuis plusieurs décennies dans la connaissance et la technologie des semi-conducteurs. Le rôle des défauts dans ces matériaux est déterminant. En effet, les semi-conducteurs auraient très peu d'applications sans la grande variété de propriétés qu'il est possible d'atteindre grâce à l'introduction judicieuse d'impuretés.

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, et par analogie avec un électron et un proton dans le vide, un électron de la bande de conduction dans un semi-conducteur peut se lier, par l'intermédiaire de l'interaction coulombienne, à un trou de la bande de valence pour former un pseudo-atome d'hydrogène que l'on nomme exciton. L'énergie minimale nécessaire pour créer cet exciton (ou l'énergie récupérée lors de sa recombinaison) est donc légèrement inférieure à l'énergie de gap (i.e. énergie qui sépare la bande de valence de la bande de conduction) d'une quantité qui définit l'énergie de liaison de la paire électron-trou.

Un exciton peut être libre dans un cristal comme il peut aussi être piégé par le potentiel perturbateur d'un défaut ou lié à d'autres particules libres, pouvant ainsi former différents types de complexes excitoniques.

Lampert (1958) fut le premier à avoir envisagé la possibilité de l'existence de ces complexes, en particulier les complexes  $(D^0, X)$ ,  $(A^0, X)$  et  $(D^+, X)$  résultant respectivement de la liaison d'un exciton avec une impureté neutre de type donneur, une impureté neutre de type accepteur et un donneur ionisé.

Le premier à avoir observé ce genre de complexes dans les semi-conducteurs massifs, fut Haynes (1960). Ce dernier a mesuré le taux de recombinaison radiative dans le Silicium dopé par les éléments III et V du tableau périodique. A 25 K, des raies fines apparaissent, qui sont associées d'après l'auteur à la recombinaison d'une impureté ionisée avec trois particules chargées. Le rapport entre l'énergie de dissociation du complexe et l'énergie d'ionisation du donneur est approximativement de l'ordre de 0,1 pour les dopants utilisés dans l'expérience (Sb, P, As, Bi, Al, Ga, et In). D'autres études expérimentales ont permis l'observation de ces complexes dans plusieurs semi-conducteurs [Thomas et al. (1962); Reynolds et al. (1965)].

Les excitons liés ont une durée de vie de l'ordre de la nanoseconde et sont intéressants pour les investigations spectroscopiques car ils donnent lieu à des raies étroites de positions bien définies dans le spectre [Dean et Herbert (1979), Monemar (1988)].

Récemment, un regain d'intérêt a été apporté aux excitons liés grâce aux progrès réalisés dans le domaine de la croissance cristalline. La fabrication de puits quantiques de haute qualité est actuellement possible grâce à plusieurs techniques de croissance telles que l'épitaxie par jet moléculaire (MBE) ou l'épitaxie en phase vapeur par décomposition organo-métallique (MOCVD).

Dans ce type de structures, les porteurs de charges sont confinés dans un espace très restreint, ce qui accentue le recouvrement entre les fonctions d'onde de l'électron et de trou. De ce fait, on peut s'attendre à une augmentation de l'énergie des excitons et des complexes excitoniques. Dans la mesure où l'énergie coulombienne croît avec le confinement, on prévoit également que leur observation expérimentale devienne possible à des températures élevées.

Dans la littérature, peu de travaux expérimentaux sont disponibles sur les complexes exciton-donneur neutre ou ionisé dans un puits quantique. A notre connaissance, Shanabrook et Comas (1984) furent les premiers à avoir relaté l'existence d'un complexe  $(D^0, X)$  dans un puits quantique multiple, dopé au centre du puits. Ces obser-

vations se traduisent par l'existence d'un pic de photoluminescence situé à 1,5 meV au-dessous de la raie excitonique. Ce pic est attribué à la recombinaison radiative de l'électron du donneur neutre, localisé au centre du puits, avec un trou lourd.

En utilisant les mesures de photoluminescence des excitations résonantes à haute résolution ainsi que celles dépendant de la température, Reynolds et al. (1989) ont pu déterminer l'énergie de  $(D^0, X)$  dans un puits quantique de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. Les résultats montrent que l'énergie de liaison croît quand la largeur du puits est inférieure à 100 Å et décroît au-delà de cette largeur. Une transition supplémentaire est observée et attribuée par les auteurs aux excitons liés aux donneurs ionisés  $(D^+, X)$ , situés au centre ou au bord du puits quantique.

Du point de vue théorique, plusieurs travaux ont été effectués pour étudier la stabilité du complexe  $(D^+, X)$ . En effet, dans les semi-conducteurs massifs (3D), Skettrup et al. (1971) ont étudié la stabilité du complexe en jouant sur le rapport des masses de l'électron et du trou  $\sigma = m_e/m_h$ , et ont conclu que le complexe reste stable tant que ce rapport est inférieur à une valeur critique  $\sigma_c = 0,426$ . Stébé et Stauffer (1988) ont calculé l'énergie de l'état fondamental du complexe dans un semi-conducteur idéal à deux dimensions (2D) en utilisant une procédure variationnelle. En choisissant une fonction d'onde d'essai à 55 termes de type Hylleraas (1929), ils ont trouvé que le complexe est stable pour un rapport de masse inférieur à 0,88, qui n'est autre que le double de la valeur trouvée par les mêmes auteurs dans les semi-conducteurs massifs ( $\sigma_c = 0,365$ ).

Stébé et Stauffer (1993) ont utilisé le même modèle pour étendre l'étude du complexe au cas du puits quantique de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As pour une concentration d'Aluminium égale à 0,15 et 0,30. Ils ont conclu que l'énergie de  $(D^+, X)$ , avec l'impureté ionisée placée au centre du puits, varie entre les deux cas limite de (3D) et (2D).

Les effets des champs extérieurs sur les semi-conducteurs apportent des informations intéressantes sur le spectre d'absorption optique et sur la stabilité des complexes excitoniques. En effet, l'application d'un champ magnétique donne lieu à l'apparition de nouveaux phénomènes tels que : la résonance cyclotronique décrivant les transitions entre les niveaux magnétiques dans la même bande, la magnétoabsorption associée

aux transitions directes et indirectes entre les niveaux de Landau des bandes de conduction et de valence, enfin l'effet Zeeman qui traduit les transitions entre les différents niveaux d'impuretés. Quant au champ électrique, il conduit à une modification des bandes de conduction et de valence dans la direction du champ appliqué. Par conséquent, l'électron et le trou pénètrent par effet tunnel dans la bande interdite et réduisent l'énergie du gap. Dans le cas des semiconducteurs massifs, un élargissement du bord d'absorption est observé (effet de "Franz-Keldysh") [Franz(1958)], alors que dans le cas des puits quantiques le champ électrique déplace le pic d'absorption excitonique vers les faibles énergies (effet Stark) [Miller(1984), Chemla(1985)].

L'objectif principal de notre travail est d'étudier l'effet des champs magnétique et électrique sur la stabilité du complexe  $(D^+, X)$  dans un puits quantique. A cet effet, nous étendons la théorie développée en l'absence de champs par Stébé et Stauffer (1993). De plus nous étudions l'effet de la position de l'impureté à l'intérieur du puits. En présence du champ magnétique, on s'attend à une augmentation, en valeur absolue, de l'énergie de corrélation grâce à l'effet diamagnétique quadratique en champ, ainsi qu'à une stabilité du complexe par rapport aux produits de dissociation les plus probables. Cependant, l'action du champ électrique a pour effet de diminuer, en valeur absolue, l'énergie de corrélation à cause des forces de sens contraire s'exerçant sur les particules de charges opposées.

Au deuxième chapitre, nous développons la théorie du complexe exciton-donneur ionisé dans l'approximation de la fonction enveloppe. Tout d'abord, nous dérivons l'approximation de la fonction enveloppe dans le cadre le plus général d'un semiconducteur dans lequel règne, en plus du potentiel de réseau cristallin, un potentiel lentement variable par rapport à la maille cristalline. Puis, nous nous plaçons dans un modèle à deux bandes simples, isotropes et paraboliques et nous établissons l'équation de la masse effective de  $(D^+, X)$  dans un puits quantique. Enfin, une revue des principaux travaux théoriques antérieurs sur le complexe sera donnée à la fin de ce chapitre.

Au troisième chapitre, nous nous intéressons à l'étude d'une impureté peu profonde dans un puits quantique. Nous examinons l'effet de la position du centre donneur ainsi que l'application de champs extérieurs sur l'énergie de corrélation, nous décrivons le

choix des fonctions d'onde pour chaque cas. Enfin nous évaluons l'effet de l'interaction des porteurs de charge avec les phonons optiques volumiques; à cet effet, nous adaptons la méthode de la transformation canonique élaborée par Bednarek et al. (1977) ainsi que Adamowski et al. (1985) pour l'étude des excitons et des polarons liés dans le cas des semi-conducteurs massifs.

Au quatrième chapitre, nous mettons en évidence l'effet du confinement ainsi que celui de la position de l'impureté à l'intérieur du système (puits-barrière) sur l'énergie de l'état fondamental de  $(D^+,X)$ . Nous décrivons le modèle variationnel pour l'état fondamental avec un choix judicieux de la fonction d'onde. Pour cela, nous allons dans un premier temps refaire le travail effectué par Stébé et Stauffer afin de comparer nos résultats dans le cas particulier où le donneur est localisé au centre du puits. En vue d'étudier la stabilité du complexe par rapport aux produits de dissociation les plus probables, nous utilisons le même modèle pour déterminer l'énergie de corrélation pour un donneur neutre et un exciton.

Dans la première partie du cinquième chapitre, nous étudions l'effet d'un champ magnétique extérieur, appliqué parallèlement au plan des couches, sur le  $(D^+,X)$ . Nous nous limitons au cas d'un donneur localisé au centre du puits. La fonction d'onde choisie est similaire à celle utilisée en l'absence du champ par Stébé et Stauffer. Les résultats obtenus montrent une augmentation de l'énergie de corrélation du complexe avec l'intensité du champ. Pour certaines largeurs du puits, nous comparons l'énergie de  $(D^+,X)$  à celles d'un donneur neutre et d'un exciton afin d'étudier la stabilité du complexe. L'action d'un champ électrique extérieur  $\vec{F}$  sur  $(D^+,X)$  fait l'objet de la deuxième partie de ce chapitre. Nous nous inspirons du travail de Dujardin et al. (1997) qui ont étudié son effet sur les trions excitoniques dans un puits quantique; nous utilisons le même modèle, en choisissant une fonction d'onde d'essai qui tient compte du champ électrique. Nous étudions les variations de l'énergie de corrélation de  $(D^+,X)$  en fonction de la largeur du puits pour différentes valeurs de  $\vec{F}$ . Enfin, nous discutons de la stabilité du complexe.

...

...

.

...

...

.

...

...

.



## Chapitre 2

# THEORIE DU COMPLEXE EXCITON-DONNEUR IONISE DANS L'APPROXIMATION DE LA FONCTION ENVELOPPE

### 2.1 Introduction

Aux semi-conducteurs existant dans la nature comme le Germanium, le Silicium ou les composés d'éléments III-V ou II-VI tels que GaAs et CdTe, les physiciens ont depuis une trentaine d'années ( suite à la proposition formulée par Esaki et Tsu [Esaki(1970)]) ajouté des semi-conducteurs totalement artificiels : les hétérostructures. Il s'agit, par exemple, d'un empilement de couches minces alternées de deux semi-conducteurs différents [figure (2.1)]. Ces matériaux sont déposés alternativement sur un substrat par une méthode de croissance cristalline sophistiquée telle que l'épitaxie en ultra-vide par jet moléculaires (MBE) ou l'épitaxie en phase vapeur par décomposition de composés organo-métalliques (MOCVD). Ces techniques permettent de contrôler l'épaisseur à une fraction de mono-couches près.

L'étude de la structure électronique de ces matériaux a été abordée par différentes techniques de calcul des structures de bandes. Citons la méthode des liaisons fortes [Schulman (1981), Chang (1982)] qui consiste à considérer l'hétérostructure comme un semi-conducteur massif dont la cellule élémentaire est très grande à l'échelle atomique, la méthode des pseudo-potentiels [Jaros (1984), (1985)] et l'approximation de

la fonction enveloppe [Bastard (1981), Alterelli (1983), Bastard et Brum (1986)]. La dernière approximation est utilisée au voisinage de la première zone de Brillouin, alors que les deux premières traitent le cas des états éloignés de cette zone.

Dans ce chapitre, nous allons tout d'abord dériver l'approximation de la fonction enveloppe dans le cadre le plus général d'un semi-conducteur dans lequel règne, en plus du potentiel  $V_c(\mathbf{r})$  du réseau cristallin, un potentiel  $V(\mathbf{r})$  lentement variable par rapport à la maille cristalline. Nous discutons ensuite le cas d'un électron d'une bande de conduction simple dans une hétérostructure.

Au second paragraphe, nous établissons, dans un modèle à deux bandes non dégénérées, l'équation de la masse effective du complexe exciton-donneur ionisé dans un puits quantique. Nous négligeons les effets dus au spin, ainsi que les interactions d'échange électrons-trous. Nous supposons que le nombre d'électrons et de trous sont fixés, ce qui revient à négliger les termes dus aux transitions virtuelles entre la bande de conduction et celle de valence.

Dans le dernier paragraphe nous proposons une revue des différents travaux théoriques menés sur le complexe  $(D^+, X)$  dans les semi-conducteurs massifs et confinés.

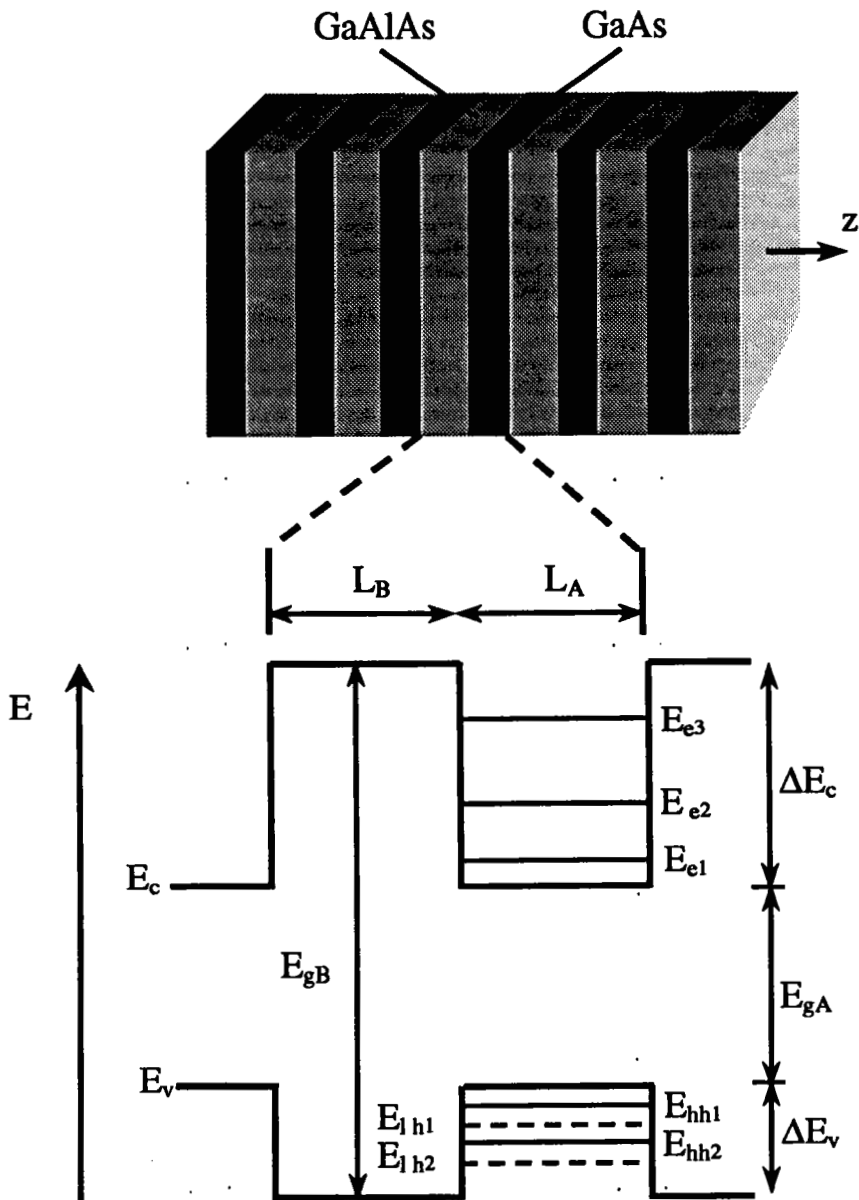


Figure (2.1) : Séquence périodique des couches d'une structure à multiple puits quantique.

Profil des puits de potentiels dans les bandes de valence et de conduction d'énergies respectivement  $E_v$  et  $E_c$ .

$L_A$  ( $L_B$ ) représente l'épaisseur du matériau puits (barrière).

$E_{gA}$  ( $E_{gB}$ ) représente l'énergie de la bande interdite du matériau puits (barrière).

$E_e$ ,  $E_{hh}$  et  $E_{lh}$  représentent respectivement les énergies de l'électron, trou lourd et du trou léger.

## 2.2 Approximation de la fonction enveloppe

L'approximation de la fonction enveloppe, basée sur la méthode de la masse effective, consiste à prendre en considération une perturbation  $V(\mathbf{r})$  présentant une variation lente en fonction de  $\mathbf{r}$  et s'ajoutant au potentiel effectif de Hartree-Fock  $V_c(\mathbf{r})$ . Cette perturbation peut être due soit à un puits quantique, un champ électrique, un champ magnétique ou une impureté. L'Hamiltonien d'un électron de masse  $m_0$  et soumis à cette combinaison de potentiels s'écrit alors :

$$H = \frac{P^2}{2m_0} + V_c(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}). \quad (2.1)$$

Pour  $V(\mathbf{r}) = 0$ , les solutions de l'équation de Schrödinger  $H\psi = E\psi$  sont des ondes de Bloch  $|n, \mathbf{k}\rangle$ ,

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

où  $\Omega$  est le volume du cristal,  $n$  désigne la bande et  $u_{n\mathbf{k}}$  une fonction dont la période est celle du réseau cristallin. L'énergie correspondante est  $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$ .

Pour  $V(\mathbf{r}) \neq 0$ , nous développons les solutions de l'équation (2.1) sur cette base de fonctions de Bloch selon :

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{n\mathbf{k}} a_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

qui doivent donc satisfaire l'équation :

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{P^2}{2m_0} + V_c(\mathbf{r}) \right] \sum_{n\mathbf{k}} a_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \sum_{n\mathbf{k}} V(\mathbf{r}) a_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ & = E \sum_{n\mathbf{k}} a_{n\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.4)$$

En projetant cette expression sur une base de fonctions d'onde  $|N\mathbf{K}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} u_{N\mathbf{K}}(\mathbf{r})$  et en utilisant l'orthogonalité des ondes de Bloch, nous obtenons une équation équivalente de l'équation de Schrödinger :

$$\sum_{n\mathbf{k}} a_{n\mathbf{k}} \int_{\Omega} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} u_{N\mathbf{K}}^*(\mathbf{r}) V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = (E - \varepsilon_{N\mathbf{K}}) a_{N\mathbf{K}}. \quad (2.5)$$

En utilisant le fait que le potentiel  $V(\mathbf{r})$  est lentement variable, sa transformée de Fourier  $V_{\mathbf{q}}$  est nulle sauf pour des valeurs de  $\mathbf{q}$  très petites par rapport au rayon de

la zone de Brillouin. En substituant cette transformée dans l'équation précédente, on voit apparaître le terme

$$\sum_{n\mathbf{k}\mathbf{q}} a_{n\mathbf{k}} \frac{V_{\mathbf{q}}}{\Omega} \int_{\Omega} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} u_{N\mathbf{K}}^*(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2.6)$$

qui serait majoritairement nul si  $V$  était constant. Puisque les fonctions  $u_{N\mathbf{K}}$  et  $u_{n\mathbf{k}}$  sont périodiques, nous pouvons poser  $\mathbf{r} = \mathbf{R}_i + \mathbf{r}'$ , où  $\mathbf{R}_i$  désigne la position de la cellule  $i$ , et  $\mathbf{r}'$  est restreint au volume d'une cellule élémentaire, ce qui mène à la somme sur  $i$  suivante :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Omega} \int e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}} u_{N\mathbf{K}}^*(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= \frac{1}{\Omega} \sum_i e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{K})\cdot\mathbf{R}_i} \\ &\cdot \int_{cell} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{K})\cdot\mathbf{r}'} u_{N\mathbf{K}}^*(\mathbf{r}') u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ &= \Delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{K}} \frac{1}{\Omega_{cell}} \int_{cell} u_{N\mathbf{K}}^*(\mathbf{r}') u_{n\mathbf{K}+\mathbf{q}}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (2.7)$$

où  $\int_{cell}$  désigne l'intégration sur une cellule élémentaire et  $\Delta_{\mathbf{k}}$  est le symbole de Kronecker.

Nous utilisons encore une fois le fait que seules les petites valeurs de  $\mathbf{q}$  contribuent au potentiel, pour développer l'intégrale de recouvrement des parties périodiques des ondes de Bloch selon  $\mathbf{q}$  soit :

$$\frac{1}{\Omega_{cell}} \int_{cell} u_{N\mathbf{K}}^*(\mathbf{r}') u_{n\mathbf{K}+\mathbf{q}}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \cong \Delta_{Nn} + \frac{1}{\Omega_{cell}} \mathbf{q} \cdot \int_{cell} u_{N\mathbf{K}}^*(\mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{K}} u_{n\mathbf{K}}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (2.8)$$

L'approximation la plus simple est maintenant de ne tenir compte que du premier terme, ce qui permet de découpler les différentes bandes dans l'équation de Schrödinger (2.5). Compte tenu de (2.7) et (2.8), cette équation dans l'espace réciproque prend la forme :

$$\varepsilon_{N\mathbf{K}} a_{N\mathbf{K}} + \sum_{\mathbf{q}} a_{N\mathbf{K}+\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} = E a_{N\mathbf{K}}. \quad (2.9)$$

En introduisant la fonction enveloppe :

$$\zeta_N(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} a_{N\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}, \quad (2.10)$$

nous pouvons transformer l'équation (2.9) dans l'espace réel :

$$\int \frac{d^3\mathbf{K}}{(2\pi)^3} \varepsilon_{N\mathbf{K}} a_{N\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) \zeta_N(\mathbf{r}) = E \zeta_N(\mathbf{r}). \quad (2.11)$$

Comme seules les composantes proches de  $\mathbf{K}$  sont couplées par l'équation (2.9), nous pouvons développer en série la relation de dispersion de la bande  $\varepsilon_{N\mathbf{K}}$  autour de  $\mathbf{K}$ . Pour le cas le plus important où  $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ , on introduit la masse effective  $m_N^*$  de la bande  $N$  :

$$\varepsilon_{N\mathbf{K}} = \varepsilon_{N\mathbf{0}} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_N^*}, \quad (2.12)$$

que nous prenons isotrope par mesure de simplicité.

Reportant (2.12) dans (2.11), on trouve alors l'équation de Schrödinger pour la fonction enveloppe :

$$\left[ \frac{p^2}{2m_N^*} + V(\mathbf{r}) \right] \zeta_N(\mathbf{r}) = (E - \varepsilon_{N\mathbf{0}}) \zeta_N(\mathbf{r}). \quad (2.13)$$

On peut conclure que pour un potentiel variant lentement par rapport au potentiel cristallin, la fonction d'onde d'un électron de la bande  $N$  est celle d'une particule ayant la masse effective de la bande et soumise au potentiel  $V(\mathbf{r})$ . Toute l'influence du matériau est prise en compte par la seule présence de la masse effective  $m_N^*$  et de l'énergie  $\varepsilon_{N\mathbf{0}}$  de la bande concernée en  $\mathbf{K} = \mathbf{0}$  dans l'équation de Schrödinger (2.13). Dans l'approximation retenue, la fonction d'onde complète est donnée par :

$$\psi_N(\mathbf{r}) \cong \zeta_N(\mathbf{r}) u_{N\mathbf{0}}(\mathbf{r}). \quad (2.14)$$

Dans le cas d'une hétérostructure dans laquelle le potentiel externe  $V(\mathbf{r})$  présente une discontinuité sur une distance atomique, nous approximations les solutions de chaque côté de l'hétérojonction par (2.13) et (2.14) avec une fonction de Bloch  $u_{N\mathbf{0}}(\mathbf{r})$  propre à chaque matériau. Pour trouver les états stationnaires d'un électron, il faut tout d'abord que la fonction d'onde soit continue, et la solution exacte doit conserver le flux de probabilité qui traverse l'interface ( $z = 0$ ). Le courant de probabilité est donné par :

$$J = \frac{\hbar}{m_N^*} [\zeta_N^*(\mathbf{r}) \nabla \zeta_N(\mathbf{r}) - \zeta_N(\mathbf{r}) \nabla \zeta_N^*(\mathbf{r})], \quad (2.15)$$

et la conservation de courant à travers l'interface mène donc à l'équation de continuité :

$$\frac{1}{m_N^+} \partial_z \zeta_N(0^+) = \frac{1}{m_N^-} \partial_z \zeta_N(0^-),$$

où les signes  $\pm$  désignent les matériaux à gauche et à droite de l'interface. Cette dernière condition peut être incorporée dans le formalisme en écrivant l'équation de Schrödinger pour la fonction enveloppe sous la forme :

$$\left[ -\nabla \frac{\hbar^2}{2m_N^*(\mathbf{r})} \nabla + V(\mathbf{r}) \right] \zeta_N(\mathbf{r}) = (E - \varepsilon_{N\mathbf{0}}) \zeta_N(\mathbf{r}). \quad (2.16)$$

On remarque que cette approche assez heuristique de l'hétérojonction cache bien des problèmes importants. Ainsi nous nous sommes limités à l'approximation à une bande simple, dont la masse effective ne dépend pas de  $\mathbf{K}$ . Or, si les énergies en jeu  $E$  et  $\Delta V(\mathbf{r})$  sont importantes, cette hypothèse n'est plus valable.

## 2.3 Equation de la masse effective d'un exciton lié à un donneur ionisé dans un puits quantique

En négligeant les effets dus aux spins, l'Hamiltonien électronique dans un puits quantique en présence d'une impureté s'écrit :

$$H^{el} = \int d\mathbf{r} \Psi^+(\mathbf{r}) \left[ \frac{p^2}{2m_0} + V_{eff} + V_w + U_I(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

$$+ \frac{1}{2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Psi^+(\mathbf{r}) \Psi^+(\mathbf{r}') \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}),$$

où le premier terme représente l'Hamiltonien d'un électron dans un puits quantique de potentiel  $V_w$  soumis à la fois au potentiel cristallin  $V_{eff}$ , et à celui d'une impureté excédentaire  $U_I$  qui vaut  $-e^2/\epsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|$  dans le cas d'un donneur au point  $\mathbf{r}_i$ . Quant au second terme, il traduit l'interaction entre deux particules dans l'approximation non relativiste.

$\Psi^+(\mathbf{r})$  et  $\Psi(\mathbf{r})$  sont des opérateurs champs de fermions correspondant à la création et à la destruction d'un électron au point  $\mathbf{r}$ . Ils peuvent être développés dans une base complète de fonctions d'onde à une particule  $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  comme suit :

$$\Psi^+(\mathbf{r}) = \sum_{n\mathbf{k}} a_{n\mathbf{k}}^+ \phi_{n\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{n\mathbf{k}} a_{n\mathbf{k}} \phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.19)$$

où  $a_{n\mathbf{k}}^+$  et  $a_{n\mathbf{k}}$  sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation d'un électron dans la bande  $n$  et l'état  $\mathbf{k}$ .

Nous ne nous intéressons qu'aux excitations de type optique où l'énergie mise en jeu est de l'ordre de grandeur du gap et de celle correspondant à la décomposition des deux dernières bandes de valence, par suite du couplage spin orbite qu'on néglige ici. Ainsi, nous pouvons limiter la sommation à la dernière bande de valence ( $n = v$ ) et à la première bande de conduction ( $n = c$ ). Dans ces conditions, les opérateurs champs de fermions deviennent :

$$\begin{aligned}
\Psi(\mathbf{r}) &= \Psi_e(\mathbf{r}) + \Psi_h(\mathbf{r}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}} a_{c\mathbf{k}} \phi_{c\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{k}} a_{v\mathbf{k}} \phi_{v\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\
&= \sum_{\mathbf{k}} a_{c\mathbf{k}} \phi_{c\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \sum_{\mathbf{k}} d_{v\mathbf{k}}^+ \phi_{v\mathbf{k}}(\mathbf{r}),
\end{aligned} \tag{2.20}$$

où  $d_{v\mathbf{k}}^+$  désigne l'opérateur de création d'un trou dans la bande de valence. Comme les fonctions  $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  sont orthonormées et forment une base complète, nous pouvons exprimer les opérateurs de création des quasi-particules en fonction des opérateurs champs :

$$a_{c\mathbf{k}} = \int d\mathbf{r} \phi_{c\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \Psi_e(\mathbf{r}) \tag{2.21}$$

$$d_{v\mathbf{k}} = \int d\mathbf{r} \phi_{h\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \Psi_h^+(\mathbf{r}). \tag{2.22}$$

Ils obéissent aux relations d'anticommutation suivantes :

$$[a_i^+, a_j^+]_+ = [a_i, a_j]_+ = 0 \quad \text{et} \quad [a_i^+, a_j]_+ = \delta_{ij} \tag{2.23}$$

$$[d_i^+, d_j^+]_+ = [d_i, d_j]_+ = 0 \quad \text{et} \quad [d_i^+, d_j]_+ = \delta_{ij} \tag{2.24}$$

Nous insérons les expressions des opérateurs champs de fermions dans l'Hamiltonien électronique  $H^{el}$  et nous développons en supposant que le nombre d'électrons et de trous est fixé, ce qui revient à négliger les termes dus aux transitions virtuelles entre la bande de conduction et celle de valence. Compte tenu des diverses relations de commutation entre opérateurs d'électrons et de trous, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
H^{el} &= \mathcal{E}_0 \\
&+ \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} E_{c\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'} V_w ({}^c_{\mathbf{k}} | {}^c_{\mathbf{k}'}) + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'} U_I ({}^c_{\mathbf{k}} | {}^c_{\mathbf{k}'}) \\
&- \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} E_{v\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}'} V_w ({}^v_{\mathbf{k}} | {}^v_{\mathbf{k}'}) - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}'} U_I ({}^v_{\mathbf{k}} | {}^v_{\mathbf{k}'}) \\
&+ \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_4} d_{\mathbf{k}_3}^+ d_{\mathbf{k}_2} [W ({}^c_{\mathbf{k}_1} {}^v_{\mathbf{k}_2} | {}^v_{\mathbf{k}_3} {}^c_{\mathbf{k}_4}) - W ({}^v_{\mathbf{k}_2} {}^c_{\mathbf{k}_1} | {}^v_{\mathbf{k}_3} {}^c_{\mathbf{k}_4})] \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_2}^+ a_{\mathbf{k}_3} a_{\mathbf{k}_4} W ({}^c_{\mathbf{k}_1} {}^c_{\mathbf{k}_2} | {}^c_{\mathbf{k}_3} {}^c_{\mathbf{k}_4}) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} d_{\mathbf{k}_1}^+ d_{\mathbf{k}_2}^+ d_{\mathbf{k}_3} d_{\mathbf{k}_4} W ({}^v_{\mathbf{k}_1} {}^v_{\mathbf{k}_2} | {}^v_{\mathbf{k}_3} {}^v_{\mathbf{k}_4}),
\end{aligned} \tag{2.25}$$



où  $\mathcal{E}_0$  est l'énergie de la bande de valence pleine dans l'approximation de Hartree Fock.

La deuxième (troisième) ligne représente l'énergie des électrons (trous) de conduction (valence) n'interagissant ni mutuellement ni avec les trous (électrons).  $V_w \left( \begin{smallmatrix} i \\ \mathbf{k} \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} i' \\ \mathbf{k}' \end{smallmatrix} \right)$  et  $U_I \left( \begin{smallmatrix} i \\ \mathbf{k} \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} i' \\ \mathbf{k}' \end{smallmatrix} \right)$ , avec  $i, i' = c$  ou  $v$ , ont les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} V_w \left( \begin{smallmatrix} i \\ \mathbf{k} \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} i' \\ \mathbf{k}' \end{smallmatrix} \right) &= \int d\mathbf{r} \phi_{i,\mathbf{k}}^* V_w \phi_{i',\mathbf{k}'} \\ U_I \left( \begin{smallmatrix} i \\ \mathbf{k} \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} i' \\ \mathbf{k}' \end{smallmatrix} \right) &= \int d\mathbf{r} \phi_{i,\mathbf{k}}^* U_I \phi_{i',\mathbf{k}'} \end{aligned} \quad (2.26)$$

la quatrième ligne rend compte des interactions coulombiennes directe et d'échange entre un électron de conduction et un trou. Concernant les deux dernières lignes, elles décrivent respectivement l'interaction coulombienne entre deux électrons et entre deux trous avec :

$$W \left( \begin{smallmatrix} i_1 & i_2 & i_3 & i_4 \\ \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \end{smallmatrix} \right) = \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi_{i_1,\mathbf{k}_1}^* (\mathbf{r}) \phi_{i_2,\mathbf{k}_2}^* (\mathbf{r}') \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_{i_3,\mathbf{k}_3} (\mathbf{r}') \phi_{i_4,\mathbf{k}_4} (\mathbf{r}). \quad (2.27)$$

En l'absence de toute perturbation extérieure (impureté et puits quantique) les fonctions d'onde solutions de l'équation de Schrödinger à une particule s'écrivent sous la forme :

$$\phi_{c\mathbf{k}_e}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_e \mathbf{r}) u(\mathbf{r}) \quad (2.28)$$

$$\phi_{v\mathbf{k}_h}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_h \mathbf{r}) u(\mathbf{r}) \quad (2.29)$$

De même qu'au premier paragraphe, on admet que les potentiels dus à l'impureté et au puits quantique varient lentement sur une cellule élémentaire  $\Omega_0$ . Ceci revient à se limiter au cas d'une impureté peu profonde (shallow impurity) et aux puits quantiques dont la largeur n'est pas trop petite. Dans ces conditions, et en tenant compte de la périodicité des ondes de Bloch, nous pouvons remplacer les intégrales sur le volume  $\Omega$  par une somme, sur toutes les cellules, d'intégrales sur les cellules élémentaires  $\Omega_0$ . Nous nous intéressons aux états au voisinage de la zone de Brillouin, donc avec  $\mathbf{k}$  très petit; les termes en exponentielles peuvent être considérés comme pratiquement constants pour une cellule donnée. Les expressions de  $V_w$  et  $U_I$  se simplifient à :

$$\begin{aligned} V_w \left( \begin{smallmatrix} i \\ \mathbf{k} \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} i' \\ \mathbf{k}' \end{smallmatrix} \right) &\cong \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{k} \mathbf{r}) V_w (\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}' \mathbf{r}) \\ U_I \left( \begin{smallmatrix} i \\ \mathbf{k} \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} i' \\ \mathbf{k}' \end{smallmatrix} \right) &\cong \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{r} \exp(-i\mathbf{k} \mathbf{r}) U_I (\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}' \mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.30)$$

En suivant un raisonnement analogue et en supposant que l'électron et le trou sont suffisamment éloignés, on montre que l'expression de l'interaction coulombienne  $W$  se réduit à :

$$W \begin{pmatrix} i_1 & i_2 & i_3 & i_4 \\ \mathbf{k}_1 & \mathbf{k}_2 & \mathbf{k}_3 & \mathbf{k}_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{\Omega^2} \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \exp[-i(\mathbf{k}_{i_1} \mathbf{r} + \mathbf{k}_{i_2} \mathbf{r}')] \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \exp[i(\mathbf{k}_{i_3} \mathbf{r} + \mathbf{k}_{i_4} \mathbf{r}')] \quad (2.31)$$

### 2.3.1 Etats du complexe $(D^+, X)$ dans un puits quantique

A très basse température, les bandes de valence d'un semi-conducteur sont complètement occupées, alors que celles de conduction sont totalement vides. Le matériau est alors transparent pour un rayonnement d'énergie inférieure au gap et devient absorbant au-delà de ce seuil. L'énergie ainsi emmagasinée permet à un électron de valence de passer dans la bande de conduction et de créer par la même occasion un trou dans la bande de valence interprété physiquement comme une quasi-particule de charge positive, avec lequel il peut se lier par l'intermédiaire d'une interaction coulombienne pour former un état stable appelé exciton. A son tour, cet exciton peut se lier à une impureté ionisée de type donneur pour former le complexe  $(D^+, X)$ .

Les états de  $(D^+, X)$  dans un puits quantique sont obtenus par combinaison linéaire des états non perturbés de la paire électron-trou non liée :

$$|\phi_{(D^+, X)}\rangle = \sum_{\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h} C_{\mathbf{k}_e \mathbf{k}_h} a_{\mathbf{k}_e}^+ d_{\mathbf{k}_h}^+ |\phi_0\rangle, \quad (2.32)$$

où  $|\phi_0\rangle$  désigne l'état du cristal avec les bandes de valences pleines.

D'après la définition des opérateurs de création d'électron et de trou [eqs. (2.21) et (2.22)], les états du complexe  $(D^+, X)$  s'écrivent dans l'espace des coordonnées comme suit :

$$|\phi_{(D^+, X)}\rangle = \iint d\mathbf{r}_e d\mathbf{r}_h F_{(D^+, X)}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \Psi_e^\dagger(\mathbf{r}_e) \Psi_h^\dagger(\mathbf{r}_h) |\phi_0\rangle, \quad (2.33)$$

avec,

$$F_{(D^+, X)}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \sum_{\mathbf{k}_e, \mathbf{k}_h} C_{\mathbf{k}_e \mathbf{k}_h} \phi_{e\mathbf{k}_e}(\mathbf{r}_e) \phi_{h\mathbf{k}_h}(\mathbf{r}_h) \quad (2.34)$$

qui est la fonction d'onde du complexe dans l'espace direct. Cette dernière peut être décomposée en un produit d'une fonction enveloppe  $\psi_{(D^+, X)}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$  et d'une fonction

crystalline  $g_{crist}$  :

$$\psi_{(D^+,X)}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}_e \mathbf{k}_h} C_{\mathbf{k}_e \mathbf{k}_h} \exp(i\mathbf{k}_e \mathbf{r}_e) \exp(i\mathbf{k}_h \mathbf{r}_h), \quad (2.35)$$

$$g_{crist} = u_c(\mathbf{r}_e) u_v^*(\mathbf{r}_h). \quad (2.36)$$

### 2.3.2 Equation effective de la fonction enveloppe de $(D^+, X)$

Afin de déterminer l'énergie  $\mathcal{E}^{(D^+,X)}$  associée à l'état du complexe ainsi que les coefficients  $C_{\mathbf{k}_e \mathbf{k}_h}$  de la fonction enveloppe, nous procédons à l'aide d'une méthode variationnelle. Pour cela nous calculons la valeur moyenne de l'Hamiltonien effectif :

$$\langle \phi_{(D^+,X)} | H^{(D^+,X)} | \phi_{(D^+,X)} \rangle = \mathcal{E}^{(D^+,X)} \langle \phi_{(D^+,X)} | \phi_{(D^+,X)} \rangle \quad (2.37)$$

En tenant compte du fait que le  $(D^+, X)$  n'est constitué que d'une seule paire électron-trou, les deux derniers termes de l'Hamiltonien électronique (2.25) ne donnent lieu à aucune contribution. Dans ces conditions et en négligeant l'effet d'échange qui est généralement petit et à courte portée, la valeur moyenne de l'Hamiltonien du complexe se réduit à :

$$\begin{aligned} & \langle \phi_{(D^+,X)} | \left[ \mathcal{E}_0 + \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}} E_{c\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'} V_w(\mathbf{k} | \mathbf{k}') + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}}^+ a_{\mathbf{k}'} U_I(\mathbf{k} | \mathbf{k}') \right. \\ & - \sum_{\mathbf{k}} d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}} E_{v\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}'} V_w(\mathbf{k} | \mathbf{k}') - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} d_{\mathbf{k}}^+ d_{\mathbf{k}'} U_I(\mathbf{k} | \mathbf{k}') \\ & \left. + \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} a_{\mathbf{k}_1}^+ a_{\mathbf{k}_4} d_{\mathbf{k}_3}^+ d_{\mathbf{k}_2} [W(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4) - W(\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 | \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4)] \right] | \phi_{(D^+,X)} \rangle \\ & = \mathcal{E}^{(D^+,X)} \langle \phi_{(D^+,X)} | \phi_{(D^+,X)} \rangle. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Nous simplifions l'expression précédente en tenant compte des relations de commutation entre opérateurs, d'une part, de l'action des opérateurs d'annihilation sur la bande de valence pleine, d'autre part, ainsi que des définitions des états de  $(D^+, X)$ . En outre, en multipliant par  $\exp(i\mathbf{k}_e \mathbf{r}_e) \exp(i\mathbf{k}_h \mathbf{r}_h)$  et sommant sur  $\mathbf{k}_e$  et  $\mathbf{k}_h$ , nous obtenons l'équation de la masse effective permettant de déterminer la fonction enveloppe  $\psi_{(D^+,X)}$  et l'énergie associée :

$$\begin{aligned} & \left[ E_c(\mathbf{k}_e) - E_v(\mathbf{k}_h) + V_w(\mathbf{r}_e) + V_w(\mathbf{r}_h) + U_I(\mathbf{r}_e) + U_I(\mathbf{r}_h) - \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \right] \psi_{(D^+,X)} \\ & = \left( \mathcal{E}^{(D^+,X)} - \mathcal{E}_0 \right) \psi_{(D^+,X)} \end{aligned} \quad (2.39)$$

Dans le cas des bandes isotropes et non dégénérées, et à gap direct en  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ , les relations de dispersion des bandes de conduction et de valence s'écrivent au voisinage de  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ ,

$$\begin{aligned} E_v(\mathbf{k}_h) &= E_v(\mathbf{0}) - \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_h^2}{2m_h^*} && \text{pour la bande de valence} \\ E_c(\mathbf{k}_e) &= E_c(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_e^2}{2m_e^*} && \text{pour la bande de conduction} \end{aligned} \quad (2.40)$$

En remplaçant  $E_c(\mathbf{k}_e)$  et  $E_v(\mathbf{k}_h)$  par leurs expressions, on obtient l'équation de la masse effective du  $(D^+, X)$  :

$$\begin{aligned} &\left[ \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_e^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_h^2}{2m_h^*} + V_w(\mathbf{r}_e) + V_w(\mathbf{r}_h) - \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_i|} + \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_h - \mathbf{r}_i|} - \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \right] \psi_{(D^+, X)} \\ &= \left( \mathcal{E}^{(D^+, X)} - \mathcal{E}_0 - E_g \right) \psi_{(D^+, X)}, \end{aligned} \quad (2.41)$$

avec  $E_g = E_c(\mathbf{0}) - E_v(\mathbf{0})$  représente l'énergie de la bande interdite.

## 2.4 Travaux antérieurs sur le complexe

Dans ce paragraphe nous rappelons les principaux travaux théoriques menés sur le complexe  $(D^+, X)$  dans les semi-conducteurs massifs, et dans les boîtes et puits quantiques.

### 2.4.1 Semi-conducteur massif

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, et dans un milieu isotrope, l'Hamiltonien du complexe  $(D^+, X)$  dans un semi-conducteur massif s'écrit, en utilisant les unités atomiques de longueur ( $a_D = \epsilon \hbar^2 / e^2 m_e^*$ ) et d'énergie ( $2R_y = \hbar^2 / m_e^* a_D^2$ ), comme suit :

$$H = -\frac{1}{2} \Delta_{r_e} - \frac{\sigma}{2} \Delta_{r_h} - \frac{1}{r_e} + \frac{1}{r_h} - \frac{1}{r_{eh}}. \quad (2.42)$$

Dans le nouveau système d'unités, l'Hamiltonien ne dépend que du rapport  $\sigma$  des masses effectives de l'électron et du trou. L'énergie de l'état fondamental du complexe aura alors un caractère plus général, car tous les paramètres du semi-conducteur seront inclus dans les unités atomiques.

Lorsque la masse effective du trou est très supérieure à celle de l'électron, l'Hamiltonien (2.42) et celui de l'ion moléculaire  $H_2^+$  sont similaires; le donneur chargé et le trou

lourd jouent le rôle des deux protons. L'énergie fondamentale vaut  $1.21\mathcal{E}_H$  où  $\mathcal{E}_H$ , représente l'énergie de liaison hydrogénoïde dans le cristal. L'énergie prévue pour le complexe  $(D^+, X)$  étant plus basse que celle du système  $\{D^+e^- + h\}$  ( $1.21\mathcal{E}_H < \mathcal{E}_H$ ) nous concluons qu'il y a, en principe, possibilité d'observation de l'exciton lié au donneur ionisé.

La dissociation thermique (par réchauffement du cristal) du complexe est plus favorable selon  $(D^+, X) \rightarrow D^0 + h$  que selon  $(D^+, X) \rightarrow D^+ + X$  puisque le donneur neutre est plus stable que l'exciton libre. Nous discuterons donc sa stabilité par rapport à  $(D^0)$ , et la condition s'écrit  $\frac{E_{(D^+, X)}}{E_{D^0}} \geq 1$ .

La question cruciale à laquelle essayaient de répondre plusieurs auteurs est la suivante : Pour quelle valeur de  $\sigma$  le complexe est-il stable ?

Sharma et Rodriguez (1967) ont affirmé qu'il existe deux régions séparées de stabilité :  $\sigma \leq 0.2$  et  $\sigma \geq 4$ . Puis, Leblond(1969) a démontré que l'énergie  $E_{(D^+, X)}(\sigma)$  est une fonction strictement monotone en fonction de  $\sigma$  et que la deuxième région n'existe pas, alors que la première peut être remplacée par le résultat de Frost (1964). Ce dernier a utilisé le même principe variationnel que Sharma mais avec une fonction d'essai plus raffinée. Il a trouvé que la valeur critique à partir de laquelle le complexe cesse d'être stable est 0.383.

Suffczynski (1967) a trouvé un résultat proche de celui de Frost en utilisant une fonction d'essai de la forme :

$$\psi = r_h^p \sum_{i=1}^N X_i \exp[-(A_i r_e + B_i r_{eh} + C_i r_h)], \quad (2.43)$$

où  $X_i$  sont des paramètres variationnels linéaires alors que  $A_i$ ,  $B_i$  et  $C_i$  sont des paramètres non linéaires. Les méthodes de Monte Carlo et du gradient sont utilisées pour minimiser l'énergie de l'état fondamental du complexe.

En prenant  $p = 3$  et en se limitant à  $N = 4$ , Suffczynski a trouvé une valeur critique de  $\sigma$  égale à 0.365. Ensuite, Gorzkowski (1976) a étendu l'étude du complexe aux systèmes  $CdS$ ,  $CdSe$ ,  $CdTe$ ,  $ZnO$  et  $ZnTe$ . En conservant  $N = 4$  et en prenant  $p = 3$  pour  $\sigma < 0.2$  et  $p = 2.5$  pour  $\sigma > 0.2$ , il a trouvé une valeur meilleure que celle de Frost :  $\sigma_c = 0.3902$ .

Dans le but de calculer l'énergie de liaison, les distances interparticules, forces d'oscilla-

tion et les corrections dues à l'effet d'échange du complexe, Skettrup (1971) a rajouté à la fonction d'onde d'essai utilisée par Suffczynski le terme

$$X_{N+1} \exp(-A_0 r_e) \frac{\exp(-C_0 r_h) - \exp(-C r_h)}{r_h}. \quad (2.44)$$

Ce terme, similaire à celui utilisé par Rotenberg et Stein(1969), décrit le comportement asymptotique du complexe quand  $\sigma$  est proche de la valeur critique  $\sigma_c$ , c'est-à-dire, lorsque l'électron se trouve sur le niveau du donneur et loin d'être lié au trou. Comme résultats :

- la stabilité est vérifiée pour  $\sigma < 0.426$ ,
- les distances interparticules sont cinquante fois plus grandes que le rayon de l'exciton,
- les corrections dues à l'effet d'échange sont comparables à celles d'un exciton libre,
- pour les calculs appliqués à *CdS* et *ZnO*, un bon accord entre les résultats théoriques et expérimentaux est obtenu.

Afin de tenir compte de l'effet de la polarisation sur l'énergie de  $(D^+, X)$  dans les semi-conducteurs, Elkomoss (1971) a remplacé, dans l'Hamiltonien général du complexe, le potentiel coulombien par le potentiel de Haken (1956) où la constante diélectrique dépend des distances entre-particules, des masses effectives, des constantes diélectriques optique  $\epsilon_\infty$  et statique  $\epsilon_0$  et de la fréquence longitudinale du réseau  $\omega$  :

$$\frac{1}{\epsilon(r_{12})} = \frac{1}{\epsilon_0} + \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \left[ 1 - \frac{1}{2} (e^{-\kappa_e r_{12}} + e^{-\kappa_h r_{12}}) \right]; \quad (2.45)$$

avec  $\kappa_e = \sqrt{\frac{4\pi m_e^* \omega}{\hbar}}$ , et  $\kappa_h = \sqrt{\frac{4\pi m_h^* \omega}{\hbar}}$ ,  $\hbar$  étant la constante de Planck.

Les modifications faites sur la constante diélectrique influent d'une façon notable sur l'énergie de liaison du complexe et, par conséquent, sur la valeur critique  $\sigma_c$  qui dépend non seulement de la fonction d'onde utilisée mais aussi des paramètres du matériau et des distances entre-particules. Les résultats obtenus sont en accord avec l'expérience dans le cas de (*CdS*, *CdTe*, *ZnSe*, *ZnTe*, *ZnO*).

Stauffer et al. (1982)(1983) ont étudié l'effet de l'anisotropie du milieu sur l'énergie et les propriétés optiques du complexe. Ils ont conclu que :

- L'énergie augmente de près de 30% lorsque le coefficient d'anisotropie  $\gamma_e$  de l'électron croît de 0 à 0.9. L'influence du coefficient d'anisotropie du trou  $\gamma_h$  est,

par contre, négligeable. L'analyse de leurs résultats montre également que les effets de l'anisotropie sont faibles au voisinage du rapport des masses critiques  $\sigma_c$ , ce qui n'affectent que très peu la stabilité du complexe.

- L'anisotropie de l'électron diminue considérablement l'intensité d'oscillateur, tandis que celle du trou ne donne pas lieu à un effet appréciable.

## 2.4.2 Boîte quantique

Lorsque la réduction des dimensions porte sur les trois directions, on aboutit à des systèmes (0D), tels que les boîtes quantiques, les points quantiques ou les cristallites quantiques. Dans ces systèmes, les porteurs de charge sont "gelés" à l'intérieur de la microstructure. Le spectre des énergies devient complètement discret et la densité d'états se trouve réduite à une série de pics de Dirac.

En modélisant le confinement quantique à l'intérieur d'une microcristallite de semi-conducteur de forme sphérique par un puits de potentiel infiniment profond, Assaid et al.(1994) et Stébé et al.(1996) ont déterminé l'énergie fondamentale du complexe ( $D^+, X$ ). Ils ont étudié ses variations en fonction du rayon  $R$  de la microsphère et du rapport  $\sigma$  des masses effectives de l'électron et du trou.

Les mêmes auteurs ont étudié les propriétés optiques du complexe dans le même type de microstructure. Ils ont comparé l'intensité d'oscillateur du complexe confiné, à celle correspondant à la recombinaison radiative donneur neutre-trou, d'une part, et à l'oscillateur excitonique, d'autre part. Cette comparaison a montré que le confinement quantique privilégie l'absorption du complexe au détriment des absorptions de l'exciton et l'ensemble  $\{D^0, h\}$ . Pour les microsphères dont la taille est comparable à la taille excitonique, l'intensité d'oscillateur du complexe est nettement supérieure à l'intensité d'oscillateur excitonique.

## 2.4.3 Puits quantique

Le complexe exciton donneur ionisé dans un puits quantique a été l'objet de très peu d'études théoriques. Parmi les travaux effectués, citons le calcul variationnel de Haufe (1988). En appliquant la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT), ce dernier a calculé l'énergie de l'état fondamental d'un exciton lié à un donneur neutre

et d'un exciton et d'un biexciton ( $X_2$ ), tous les deux liés à un donneur ionisé dans une structure du type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As en fonction de la largeur du puits.

Dans la théorie de la densité fonctionnelle [Kohn (1965)], l'énergie fonctionnelle s'écrit sous la forme :

$$E = \sum_{\lambda} n_{\lambda} \int d^3r \varphi_{\lambda}^*(\mathbf{r}) \left\{ -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m_{\lambda}^*} \right\} \varphi_{\lambda}(\mathbf{r}) + \sum_{\lambda} \int d^3r \left\{ V_{\lambda}(z) - \frac{e_{\lambda}e}{\epsilon_0 r} \right\} n_{\lambda}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda'} \int d^3r \int d^3r' \frac{e_{\lambda}n_{\lambda}(\mathbf{r})e_{\lambda'}n_{\lambda'}(\mathbf{r}')}{\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \int d^3r \epsilon_{xc}^{LDA}(\mathbf{r}, [n_e, n_h]), \quad (2.46)$$

où  $\lambda = e$  pour les électrons et  $h$  pour les trous,  $n_{\lambda}(\mathbf{r})$  sont les orbitales de Kohn-Sham définies comme suit :

$$n_{\lambda}(\mathbf{r}) = n_{\lambda} |\varphi_{\lambda}(\mathbf{r})|^2, \quad (2.47)$$

$n_{\lambda}$  dénote le nombre d'occupation. Dans le cas du ( $D^0, X$ ),  $n_e = 2$  et  $n_h = 1$ .

Les termes constituant la formule (2.46) décrivent respectivement (de gauche à droite) l'énergie cinétique, l'énergie potentielle résultant de l'effet du confinement des porteurs de charge dans le puits quantique et leur interaction avec l'impureté, la contribution de Hartree et enfin l'interaction d'échange suivant la formule donnée par Wünsche(1979). Comme résultat de ce travail, Haufe a comparé l'énergie des complexes ( $D^+, X$ ) et ( $D^+, X_2$ ) à celle de l'exciton et il a montré que ces complexes restent stables dans la gamme des largeurs de puits exploitées.

Dans les semi-conducteurs strictement bidimensionnels, Stauffer et Stébé (1989) ont calculé l'énergie de l'état fondamental du ( $D^+, X$ ) en utilisant une fonction d'onde d'essai de type Hylleraas centrée sur l'électron plutôt que sur le centre donneur :

$$\psi(s, t, u) = \sum_{lmn} C_{lmn} k^{l+m+n} e^{-ks/2} s^l u^m t^n, \quad (2.48)$$

où  $k$  est un facteur d'échelle.  $l, m$  et  $n$  sont des entiers positifs ou nuls et  $s, t$  et  $u$  sont les coordonnées elliptiques.

En utilisant 55 termes dans la fonction d'onde, ils ont montré que le complexe reste stable pour tout rapport de masse  $\sigma$  inférieur à 0.88, qui est le double de la valeur trouvée dans le cas massif. Bien qu'un semi-conducteur strictement bidimensionnel soit un cas idéal et difficile à réaliser, ce résultat montre bien que le confinement renforce d'une manière notable la stabilité du complexe. Les mêmes auteurs [Stauffer(1991),



Stébé(1993)] ont étendu l'étude au cas du puits quantique de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. Ils ont utilisé une fonction d'onde d'essai de la forme :

$$\psi = f_e(z_e)f_h(z_h)(1 + z_e z_h)e^{-s/2} \sum_{lmn} C_{lmn} s^l u^m t^n, \quad (2.49)$$

où  $f_e(z_e)$  et  $f_h(z_h)$  sont les fonctions d'onde exactes de l'électron et du trou dans un puits quantiques.

Les résultats sont donnés pour deux concentrations d'Aluminium  $x = 0.15$  et  $0.30$ . Pour le trou lourd, ils ont montré que la stabilité du complexe est assurée quelle que soit la largeur du puits et que l'énergie de corrélation présente un minimum pour une largeur de puits au voisinage de 5 nm.

Lorsque la concentration de l'Aluminium  $x \geq 0.42$  et en particulier dans un puits quantique de type GaAs/AlAs, les deux matériaux ont leur minimum de la bande de conduction aux différents points de la zone de Brillouin. Cunha Lima et al. [Cunha Lima (1996)] ont calculé l'énergie de l'état fondamental d'un exciton lié à une impureté ionisée peu profonde dans ce type de puits quantique (au voisinage de la transition d'un puits de type I à un puits de type II). Ils ont tenu compte de l'hybridation ( $\Gamma - X$ ) au voisinage de la zone de Brillouin, qui entre en jeu lorsque les minima d'énergies de la bande de conduction deviennent très proches. Ils ont développé les calculs par la méthode variationnelle en utilisant la fonction d'onde d'essai suivante :

$$\psi = N_{\alpha\beta\gamma} f_e(z_e) f_h(z_h) e^{-(\rho_e/\alpha + \rho_h/\beta + |\rho_e - \rho_h|/\gamma)} \quad (2.50)$$

où  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  sont des paramètres variationnels.

Par le même modèle, ils ont calculé l'énergie de l'état fondamental de l'exciton et celle du donneur neutre. Un rapport entre l'énergie de ( $D^+, X$ ) et celle de  $D^0$  égal à  $0.95 \pm 0.005$  a été obtenu pour différentes largeurs du puits, indépendamment de la position du centre donneur. Enfin ils ont prouvé que trois pics apparaissent dans les spectres de photoluminescence, ce qui est en accord avec les observations expérimentales.



## Chapitre 3

# IMPURETE DANS UN PUIITS QUANTIQUE - INFLUENCE DES CHAMPS EXTERIEURS ET DE COUPLAGE ELECTRON-PHONON

### 3.1 Introduction

Les états d'impureté sont des états localisés qui apparaissent lorsqu'on dope un semi-conducteur avec un élément étranger. Lorsqu'un atome d'impureté est introduit dans le réseau cristallin, il entre en interaction avec les atomes du semiconducteur et de ce fait, l'énergie de liaison des électrons avec le noyau de l'atome d'impureté se trouve réduite par rapport à celle existant dans un atome isolé.

La discussion de la liaison hydrogénoïde d'un électron avec une impureté de type donneur dans les hétérostructures a été l'objet de plusieurs études aussi bien théoriques qu'expérimentales. Ces études ont tenté d'évaluer les effets de la position de l'impureté, des dimensions du puits et de la barrière de potentiel finie ou infinie à l'interface sur l'énergie du donneur. Bastard (1981) est le premier à avoir calculé l'énergie de liaison d'une impureté de type donneur dans un puits quantique. Dans son calcul, Bastard a trouvé que l'énergie de liaison de l'impureté augmente au fur et à mesure que la largeur du puits diminue et dépend de la localisation des impuretés à l'intérieur du

puits. Dans les limites des puits très étroits ( $L \rightarrow 0$ ), le problème étudié par Bastard se réduit à celui d'un atome strictement bidimensionnel. Ce dernier problème a été résolu par Kohen et Luttinger (1955) qui ont trouvé que l'énergie de liaison de l'état fondamental d'impureté est de quatre fois sa valeur dans le cas tridimensionnel.

Les énergies de transition entre l'état fondamental et les trois états excités ( $2s$ ,  $2p_y$  et  $2p_z$ ) de l'impureté dans un puits quantique de type  $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ , en l'absence et en présence d'un champ magnétique parallèle et perpendiculaire aux interfaces, ont été examinées par Green et Chen [Greene et Bajaj (1983), (1985), (1988), Chen (1991)] en tenant compte de l'intensité du champ et de la position de l'impureté le long de l'axe de croissance. Ils ont conclu que le champ magnétique renforce l'énergie de liaison du donneur.

L'effet d'un champ électrique appliqué dans la direction de confinement sur les états d'impuretés a été l'objet de nombreux travaux durant ces quinze dernières décennies [Brum (1985), Weber (1990), López (1990)]. Brum et al. (1985) sont les premiers à avoir calculé l'énergie de liaison de l'état fondamental d'un donneur. Ils ont montré que l'énergie de liaison est peu affectée par le champ dans le cas des puits étroits de type  $\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  et que pour des grandes largeurs de puits une diminution significative de l'énergie a lieu.

La plupart des structures à puits quantiques sont composées par des matériaux polaires. Par conséquent, le couplage des électrons avec les vibrations optiques est en général important pour décrire les états électroniques dans un puits quantique [Erçelebi (1985), Degani (1986), Mason (1986)]. Les résultats expérimentaux [Bouchalkha (1992)] montrent qu'il existe deux types de phonons LO dans les systèmes de basse dimensionalité, engendrés par les discontinuités des interfaces. L'un des types, est dit volumique, dont le comportement est analogue à celui des phonons LO dans le massif. L'autre, caractérisé par la quantification du vecteur d'onde dans la direction du confinement du système, est dit confiné. Différentes méthodes ont été utilisées pour calculer les corrections apportées à l'énergie de liaison {techniques variationnelles, perturbatives et de Feynman (path-integral)}. Les résultats montrent que la contribution polaronique due à ces deux types de phonons augmente avec l'énergie de liaison de l'impureté hydrogénéide.

En vue de l'étude ultérieure de la stabilité du complexe  $(D^+, X)$ , il est nécessaire de connaître l'énergie de  $(D^0)$  en présence des champs extérieurs. Ainsi dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'étude d'une impureté peu profonde dans un puits quantique. Dans un premier temps, nous examinons l'effet de la position du centre donneur ainsi que l'application des champs extérieurs sur l'énergie de corrélation, nous décrivons le choix des fonctions d'onde pour chaque cas. Cette étude va nous servir pour discuter dans les chapitres qui suivent la stabilité du complexe  $(D^+, X)$  par rapport aux produits de dissociation. Enfin, nous évaluons l'effet de l'interaction des porteurs de charge avec les phonons optiques volumiques. A cet effet, nous utilisons la méthode de la transformation canonique élaborée par Bednarek et al. (1977) et Adamowski et al. (1985) pour l'étude des excitons et des polarons liés dans le cas des semi-conducteurs massifs, et que nous avons adaptée au cas des puits quantiques.

## 3.2 Energie de l'état fondamental en présence de champs extérieurs

### 3.2.1 Hamiltonien du système en présence du champ magnétique

Dans ce paragraphe, nous étudions l'influence d'un champ magnétique  $\mathbf{B}$  sur l'énergie de l'état fondamental d'une impureté de type donneur ( $D^0$ ) dans un puits quantique. Nous supposons que le centre donneur est placé au point  $z_i$  et que le champ magnétique est parallèle à l'axe de croissance ( $oz$ ). Nous traitons le problème dans le cadre de l'approximation de la masse effective, ce qui n'est valable que pour les impuretés peu profondes. Nous supposons que les bandes de conduction des deux matériaux formant le puits et les barrières sont isotropes et paraboliques. Dans ces conditions, l'Hamiltonien du système s'écrit :

$$H_{(D^0)} = \frac{1}{2m_e^*} \left[ \mathbf{p}_e + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right]^2 - \frac{e^2}{\kappa_\infty |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_i|} + V_e \Theta \left( \frac{L}{2} - |z_e| \right). \quad (3.1)$$

Le premier terme est l'opérateur d'énergie cinétique en présence du champ magnétique de potentiel vecteur  $\mathbf{A}$ , où  $m_e$  est la masse effective de l'électron de conduction et  $c$  représente la vitesse de la lumière dans le vide. Le second terme désigne l'opérateur énergie potentielle coulombienne traduisant l'interaction entre l'électron et le centre donneur, avec  $\mathbf{r}_i$  ayant pour coordonnées  $(0,0,z_i)$  et  $\kappa_\infty$ , la constante diélectrique optique du milieu. Quant au dernier terme, il décrit l'opérateur d'énergie potentielle de confinement dans un puits quantique carré, où  $V_e$  représente la hauteur de la barrière et  $\Theta(z)$  la fonction de Heaviside ( $\Theta(z) = 1$  si  $z > 0$ ;  $\Theta(z) = 0$  si  $z \leq 0$ ).

En général,  $\mathbf{p}_e$  ne commute avec  $\mathbf{A}$  que si  $\text{div} \mathbf{A} = 0$ . Ce qui peut être réalisé en choisissant une jauge de coulomb symétrique :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}. \quad (3.2)$$

Compte tenu de la symétrie du système étudié, il est naturel d'introduire les coordonnées cylindriques  $(\rho_e, \phi_e, z_e)$ . En utilisant un système d'unités "atomiques", avec comme unité de longueur le rayon de Bohr effectif du donneur neutre dans le semi-conducteur massif ( $a_D = \kappa_\infty \hbar^2 / m_e^* e^2$ ), et comme unité d'énergie le double de la valeur absolue de l'énergie de l'état fondamental du donneur neutre dans le matériau massif

( $2Ry = \hbar^2/m_e^*a_D^2$ ), l'Hamiltonien ci-dessus se simplifie :

$$H_{(D^0)} = -\frac{1}{2} \left[ \partial_{\rho_e^2}^2 + \frac{1}{\rho_e} \partial_{\rho_e} + \frac{1}{\rho_e^2} \partial_{\phi_e^2}^2 \right] - \frac{1}{2} \partial_{z_e^2}^2 + \frac{\gamma^2}{8} \rho_e^2 - \frac{\gamma}{2} L_z - \frac{1}{\sqrt{\rho_e^2 + (z_e - z_i)^2}} + V_e \Theta \left( \frac{L}{2} - |z_e| \right), \quad (3.3)$$

où  $L_z$  représente la composante suivant  $z$  du moment cinétique orbital  $L$  de l'électron, et  $\gamma$  est la fréquence cyclotronique effective définie par  $\gamma = e\hbar B/2Rym_e^*$ . Dans l'Hamiltonien précédent, le troisième terme, en  $\gamma^2$ , représente la contribution diamagnétique quadratique en champ. Il a un effet important sur la distribution de charge électronique, et tend à compresser la fonction d'onde décrivant l'impureté à l'état fondamental dans le plan perpendiculaire au champ magnétique  $\mathbf{B}$ . Concernant le quatrième terme linéaire en champ, il décrit l'effet Zeeman qui exprime le couplage entre le champ magnétique et le moment orbital de l'électron  $\mathbf{M}$  ( $\mathbf{M} = e\mathbf{L}/2m_e^*c$ ).

L'énergie  $E_{D^0}$  et la fonction d'onde enveloppe  $\psi_{D^0}$  sont obtenues par résolution de l'équation de Schrödinger :

$$H_{(D^0)}\psi_{D^0} = E_{D^0}\psi_{D^0}. \quad (3.4)$$

### 3.2.2 Choix de la fonction d'onde d'essai

L'équation de Schrödinger précédente ne peut être résolue avec exactitude, par conséquent, nous devons nous contenter d'une méthode approchée. Nous avons choisi de déterminer l'état fondamental par la méthode variationnelle de Ritz. Cette dernière consiste à minimiser l'énergie totale moyenne par rapport aux paramètres variationnels intervenant dans la fonction d'onde d'essai choisie :

$$E = \min \left( \frac{\langle \psi_{D^0} | H_{D^0} | \psi_{D^0} \rangle}{\langle \psi_{D^0} | \psi_{D^0} \rangle} \right). \quad (3.5)$$

L'Hamiltonien total  $H_{D^0}$  commute avec  $L_z$ , et leur vecteur propre commun a la forme suivante :  $\exp(im\phi)$ . Puisque nous ne nous intéressons qu'à l'énergie de l'état fondamental ( $m = 0$ ), le terme angulaire ne va pas intervenir dans la fonction d'onde  $\psi_{D^0}$ , et par conséquent, l'action du terme de Zeeman sur  $\psi_{D^0}$  sera nulle.

Suivant que l'épaisseur du puits  $L$  soit très supérieure ou inférieure à  $a_D$ , la fonction d'onde de l'état fondamental de l'impureté va présenter des comportements en  $z$  très différents. De même, les énergies de liaison et les fonctions d'onde seront affectées

par la position  $z_i$  du centre donneur. Considérons, pour simplifier, le cas d'un puits infini [Figure (3.1)] où la fonction d'onde de l'état fondamental est quasiment nulle à l'extérieur du puits. Dans le cas où le donneur est placé au centre d'un puits de largeur très grande, on devine que l'état hydrogénoïde du matériau massif va être peu affecté par les effets de bords. En revanche, pour des puits très étroits, la décroissance exponentielle habituelle de l'état fondamental sera fortement modifiée, car la fonction d'onde doit s'annuler aux bords.

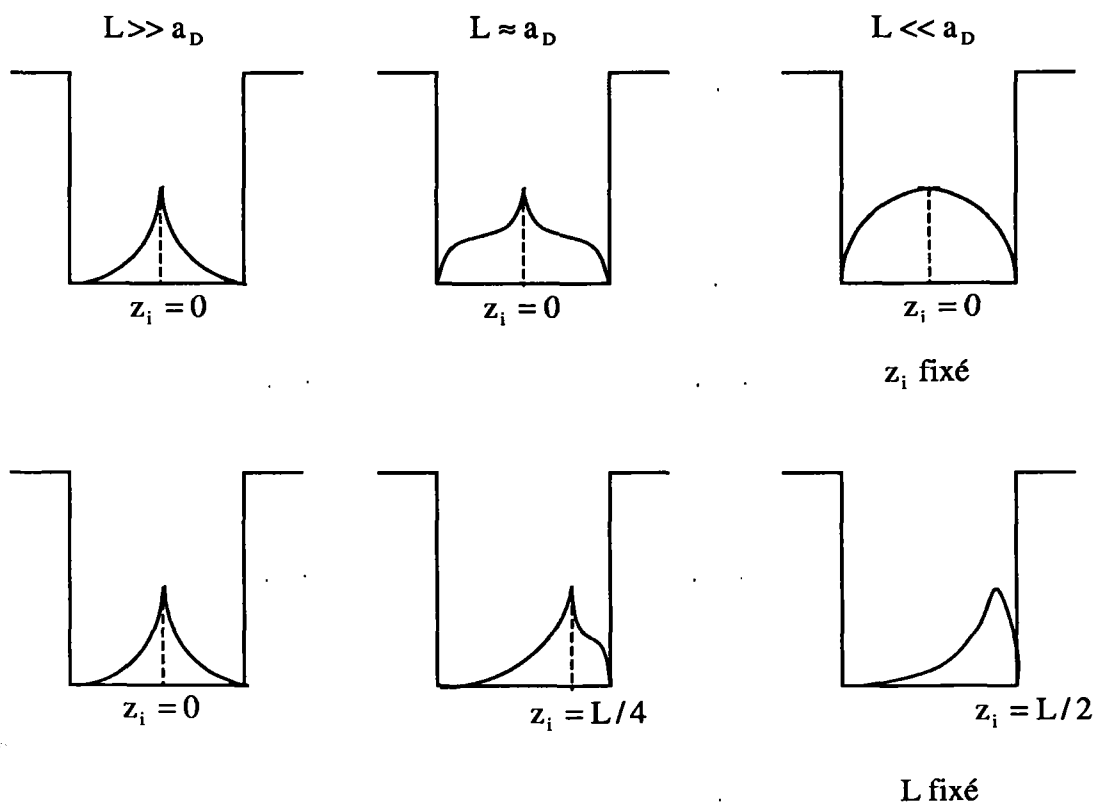


Figure (3.1) : Représentation schématique du comportement de la fonction d'onde associée à l'état fondamental d'une impureté dans un puits quantique.



Dans la littérature, deux fonctions d'ondes d'essais sont choisies; la première, dite de forme séparable [Priester (1983), (1984)] a pour expression :

$$\psi_I = A f_e(z_e) \exp(-\rho/\alpha), \quad (3.6)$$

où  $f_e(z)$  est la fonction d'onde de l'état fondamental de l'électron dans un puits quantique,  $\alpha$  un paramètre variationnel et  $A$  une constante de normation.

Le choix de  $\psi_I$  revient à négliger le couplage entre sous bandes. Par conséquent, elle est mal adaptée aux situations limites ( $L \rightarrow \infty$  et  $L \rightarrow 0$ ). Quand l'épaisseur du puits est très large, la différence d'énergie de deux sous bandes successives tend vers zéro, et la fonction d'onde  $\psi_I$  ne peut décrire l'état fondamental. Si  $L$  tend vers zéro, l'énergie de la première sous bande sera proche de  $V_e$  et la fonction d'onde  $f_e(z_e)$  sera de moins en moins localisée dans le puits et, à  $L = 0$ , le seul résultat possible est l'obtention d'une liaison de  $1Ry$  du matériau barrière [Mailhiot(1982)].

La deuxième fonction d'essai est de forme non séparable [Bastard(1981)]:

$$\psi_{II} = A f_e(z_e) \exp\left(-\frac{1}{\alpha} \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_i)^2}\right). \quad (3.7)$$

Cette fonction a la particularité de couvrir une large région du puits et les difficultés rencontrées avec la première dans les cas limites des puits très étroits et très larges sont résolues.

Dans notre cas de figure, et afin que nos calculs nous servent dans l'étude ultérieure de la stabilité du complexe exciton-donneur ionisé, nous choisissons une fonction d'onde d'essai de la forme suivante :

$$\psi_{D^0} = \sum_p C_p f_e(z_e) (z_e - z_i)^p \exp[-\alpha_e(z_e - z_i)^2] \exp(-k\rho), \quad (3.8)$$

avec,

$$f_e(z_e) = \begin{cases} A_e \cos\left(\sqrt{2E_e^0} z_e\right) & \text{si } |z_e| \leq \frac{L}{2} \\ B_e \exp\left(-\sqrt{2(V_e - E_e^0)} \cdot |z_e|\right) & \text{si } |z_e| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (3.9)$$

$E_e^0$  représente l'énergie de l'état fondamental d'un électron dans un puits quantique.  $A_e$  et  $B_e$  sont des constantes de normations obtenues en écrivant les conditions de continuité de la fonction  $f_e(z_e)$  et de sa dérivée aux interfaces.

Les coefficients  $C_p$  sont des paramètres variationnels linéaires, avec  $p$  un entier positif ou nul, alors que  $\alpha_e$  et  $k$  sont des paramètres variationnels non linéaires. Ces paramètres sont déterminés de façon à minimiser la moyenne de l'énergie de l'état fondamental, ce qui revient à résoudre le système aux valeurs propres suivant :

$$(\mathbf{H} - E \mathbf{S}) \mathbf{C} = 0, \quad (3.10)$$

où  $\mathbf{C}$  représente la matrice colonne des coefficients linéaires  $C_p$ , alors que les matrices  $\mathbf{H}$  et  $\mathbf{S}$  sont les matrices de l'opérateur  $H_{D^0}$  et de l'opérateur unitaire, respectivement.

Leurs éléments de matrices s'écrivent dans la base des fonctions  $|\chi_p\rangle$  comme suit :

$$(H_{D^0})_p^{p'} = \langle \chi_{p'} | H_{D^0} | \chi_p \rangle, \quad S_p^{p'} = \langle \chi_{p'} | \chi_p \rangle, \quad (3.11)$$

où

$$\chi_p = f_e(z_e) (z_e - z_i)^p \exp[-\alpha_e(z - z_i)^2] \exp(-k\rho). \quad (3.12)$$

Ces éléments de matrices auront pour expressions :

$$S_p^{p'} = \frac{\pi}{2k^2} W Z_e^0(p, p') \quad (3.13)$$

et

$$(H_{D^0})_p^{p'} = \frac{\pi}{4} W Z_e^0(p, p') \left[ 1 + \frac{3\gamma^2}{8k^4} + \frac{2}{k^2} E_e^0 \right] - \frac{\pi}{2k^2} \left[ W Z_e^1(p, p') + \frac{1}{2} W Z_e^2(p, p') \right] + \frac{\pi}{2k^2} Z_e(p, p'). \quad (3.14)$$

$W Z_e^0(p, p')$ ,  $W Z_e^1(p, p')$ ,  $W Z_e^2(p, p')$  et  $Z_e(p, p')$  sont des intégrales définies par :

$$\begin{aligned} W Z_e^0(p, p') &= \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e - z_i) | f_e(z_e) a_p(z_e - z_i) \rangle, \\ W Z_e^1(p, p') &= \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e - z_i) | f_e'(z_e) a_p'(z_e - z_i) \rangle, \\ W Z_e^2(p, p') &= \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e - z_i) | f_e''(z_e) a_p''(z_e - z_i) \rangle, \\ Z_e(p, p') &= \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e - z_i) | \frac{-1}{\frac{\pi}{4} + |z - z_i|} | f_e(z_e) a_p(z_e - z_i) \rangle. \end{aligned} \quad (3.15)$$

$a_p'(z_e)$  et  $a_p''(z_e)$  désignent les dérivées première et seconde de  $a_p(z_e)$  avec :

$$a_p(z_e) = z_e^p \exp[-\alpha_e z_e^2]. \quad (3.16)$$

l'évaluation numérique de ces intégrales est effectuée à l'aide de la méthode de Gauss-Laguerre et Gauss-Legendre.

### 3.2.3 Hamiltonien du système en présence du champ électrique

Classiquement, les états d'un puits quantique sont liés à cause de la présence des barrières de confinement. Soit  $E_e^0$  l'énergie correspondant à un de ces états. Si un champ électrique  $F$  est appliqué perpendiculairement au plan des couches, le mouvement électronique sera profondément perturbé [figure (3.2)], puisque l'énergie potentielle est négative et plus élevée en valeur absolue pour de grandes valeurs négatives de  $z$ . Toutefois, il existe un minimum relatif de cette énergie potentielle correspondant à  $z = L/2$  dans le cas des électrons. L'état quasi-lié associé à ce minimum relatif a une durée de vie finie, l'électron finissant par s'échapper du puits. Cet état peut être considéré comme quasi lié si la fonction d'onde est suffisamment localisée dans la barrière pour que la probabilité de la franchir par effet tunnel soit négligeable.

Soit,  $k_e = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_e^*(V_e - E_e^0)}$ , l'inverse de la longueur caractéristique de pénétration de l'électron dans la barrière à champ nul. La durée de vie de l'état issu de  $E_e^0$  à  $F \neq 0$  sera longue si  $eF/k_e$ , l'énergie potentielle gagnée dans le champ électrique, demeure petite vis-à-vis de  $V_e - E_e^0$ . Cette condition assure que la fonction d'onde ait décliné suffisamment dans la barrière avant que cette dernière n'ait été abaissée de manière significative par le champ.

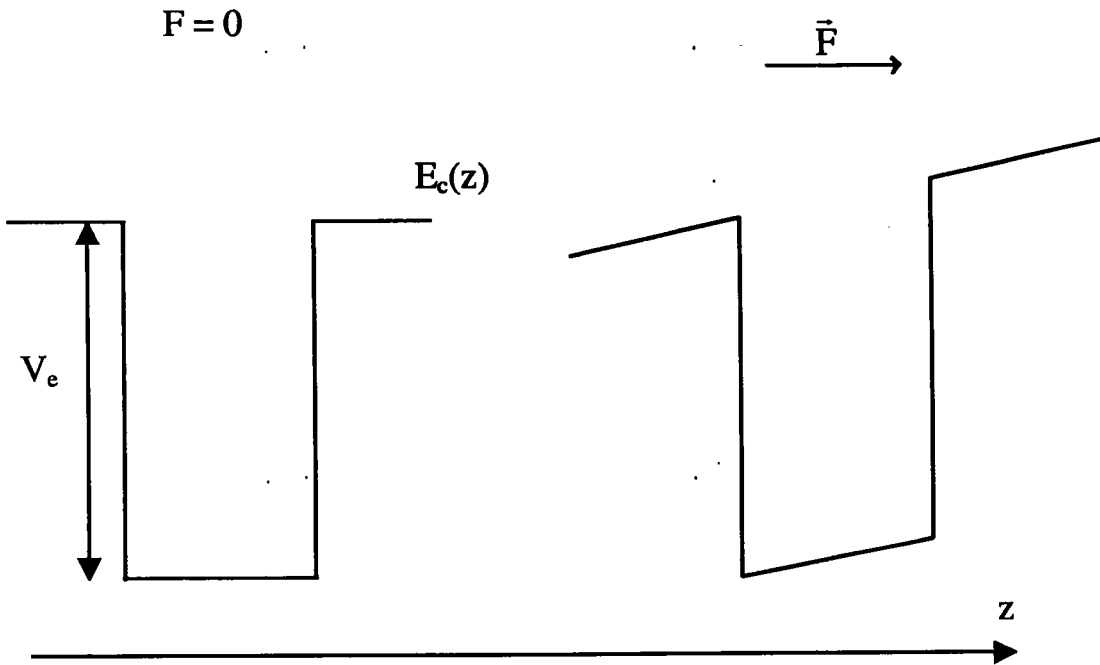


Figure (3.2) : Schéma d'un puits quantique en absence et en présence du champ électrique  $\vec{F}$ .

Dans ce qui suit, nous supposons que cette condition soit bien remplie.

Afin de simplifier les calculs, nous supposons que l'impureté de type donneur est placée au centre du puits quantique. Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, et en négligeant les effets dus aux structures de bandes (non-parabolicité de la bande de valence, masse effective identique dans les matériaux puits et barrières), l'Hamiltonien d'une impureté dans puits quantique en présence d'un champ électrique longitudinal  $F$  s'écrit comme suit :

$$H_{(D^0)} = \frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_{r_e} - \frac{e^2}{\kappa_{\infty} \Gamma_e} + V_e \Theta \left( \frac{L}{2} - |z_e| \right) + eFz. \quad (3.17)$$

L'origine des coordonnées et le zéro du potentiel électrostatique associé à  $F$  sont pris au centre du puits.

Pour le calcul de l'énergie de l'état fondamental, on procède comme dans le cas du champ magnétique à l'aide d'une procédure variationnelle. Nous choisissons une fonction d'onde d'essai de la forme suivante :

$$\psi_{D^0} = \sum_p C_p \zeta_e(z_e) z_e^p \exp[-\alpha_e z_e^2] \exp(-k\rho), \quad (3.18)$$

où  $\zeta_e(z_e)$  représente la fonction d'onde d'un électron dans un puits quantique en présence du champ électrique longitudinal [Brum (1985)] :

$$\zeta_e(z_e) = \begin{cases} A_e \exp(-\beta_e z_e) \cos(\sqrt{2E_e^0} z_e) & \text{si } |z_e| \leq \frac{L}{2} \\ B_e \exp(-\beta_e z_e) \exp(-\sqrt{2(V_e - E_e^0)} |z_e|) & \text{si } |z_e| > \frac{L}{2} \end{cases}. \quad (3.19)$$

En réalité, la fonction d'onde qui décrit un électron dans un puits quantique en présence du champ électrique s'écrit comme combinaison linéaire de deux fonctions d'Airy dans chaque région du puits [Austin(1985)]. Toutefois, l'utilisation de cette fonction s'avère compliquée pour calculer l'énergie de l'électron à l'état fondamental. Pour cela, nous utilisons la fonction  $\zeta_e(z_e)$  donnée ci-dessus qui a la particularité d'avoir un paramètre variationnel  $\beta_e$ . Ce dernier est introduit afin de tenir compte de l'effet du champ électrique.

Les coefficients  $C_p$  et les paramètres variationnels  $k$ ,  $\alpha_e$  sont déterminés de manière à minimiser l'énergie moyenne :

$$E_{D^0} = \frac{\sum_{pp'} C_p C_{p'} (H_{D^0})_p^{p'}}{\sum_{pp'} C_p C_{p'} S_p^{p'}}. \quad (3.20)$$

Les éléments de matrices s'écrivent dans la base des fonctions  $|\theta_p\rangle$  comme suit :

$$(H_{D^0})_p^{p'} = \langle \theta_{p'} | H_{D^0} | \theta_p \rangle, \quad S_p^{p'} = \langle \theta_{p'} | \theta_p \rangle. \quad (3.21)$$

Avec,

$$|\theta_p\rangle = \zeta_e(z_e) z_e^p \exp[-\alpha_e z_e^2] \exp(-k\rho), \quad (3.22)$$

$S_p^{p'}$  et  $(H_{D^0})_p^{p'}$  se simplifient à :

$$S_p^{p'} = \frac{\pi}{2k^2} WE_e^0(p, p'), \quad (3.23)$$

et

$$(H_{D^0})_p^{p'} = \frac{\pi}{4} WE_e^0(p, p') \left[ 1 + \frac{\pi^2}{k^2} E_e \right] - \frac{\pi}{2k^2} \left[ -WE_e^1(p, p') - \frac{1}{2} WE_e^2(p, p') \right] + \frac{\pi}{2k^2} ZE_e(p, p'), \quad (3.24)$$

$WE_e^0(p, p')$ ,  $WE_e^1(p, p')$ ,  $WE_e^2(p, p')$  sont des intégrales qui s'écrivent :

$$\begin{aligned} WE_e^0(p, p') &= \langle \zeta_e(z_e) a_{p'}(z_e) | \zeta_e(z_e) a_p(z_e) \rangle, \\ WE_e^1(p, p') &= \langle \zeta_e(z_e) a_{p'}(z_e) | \zeta_e'(z_e) a_p'(z_e) \rangle, \\ WE_e^2(p, p') &= \langle \zeta_e(z_e) a_{p'}(z_e) | \zeta_e''(z_e) a_p''(z_e) \rangle, \\ ZE_e(p, p') &= \langle \zeta_e(z_e) a_{p'}(z_e) | \frac{-1}{\frac{\pi}{4} + |z - z_i|} | \zeta_e(z_e) a_p(z_e) \rangle \end{aligned} \quad (3.25)$$

$a_p'(z_e)$  et  $a_p''(z_e)$  désignent les dérivées première et seconde de  $a_p(z_e)$ , avec :

$$a_p(z_e) = z_e^p \exp[-\alpha_e z_e^2]. \quad (3.26)$$

### 3.2.4 Calcul numérique et discussion des résultats

En l'absence du champ électrique, et lorsque l'impureté est placée au centre du puits quantique, l'Hamiltonien du système est à parité définie à cause de la symétrie du puits suivant l'axe (oz). Dans ce cas, nous nous limitons aux valeurs paires de  $p$  pour que la fonction d'onde soit symétrique. Cependant, si l'on applique un champ électrique dans la direction de croissance ou si l'impureté est décentrée, cette symétrie est brisée et la parité de  $p$  n'est plus définie. Dans nos calculs nous avons utilisé une fonction d'onde à 3 termes ( $p \leq 2$ ); ce développement est suffisant pour avoir une bonne convergence pour les valeurs propres.

Afin de mettre en évidence l'effet du couplage de l'électron avec le centre donneur, nous définissons "l'énergie de corrélation"  $E_{D^0}^c$  en retranchant de l'énergie totale de l'état fondamental l'énergie de l'électron.

$$E_{D^0}^c = E_{D^0} - E_e, \quad (3.27)$$

où  $E_e$  représente l'énergie de l'état fondamental d'un électron dans un puits quantique en présence du champ magnétique ou électrique (voir Appendice A).

Par la suite, nos résultats seront appliqués à un puits quantique de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. Nous travaillerons avec la valeur suivante [Miller(1984)] :  $m_e^*/m_0 = 0.665$  pour la masse effective de l'électron. Nous prenons pour constante diélectrique du matériau puits  $\kappa_\infty = 12.5$  [Greene(1984)]. Dans ce cas, nous obtenons pour les unités de longueur et d'énergie :  $a_D = 9.95$  nm et  $2Ry = 11.58$  meV, respectivement.

Le décalage de la bande de conduction est  $V_e = Q_e \Delta\epsilon_g$ , avec  $Q_e = 0.57$ . D'autre part, nous supposons que la différence de gap  $\Delta\epsilon_g$  et le pourcentage  $x$  d'Aluminium dans le substrat sont reliés par :  $\Delta\epsilon_g = 1.115x + 0.37x^2$  (eV) [Lee (1980)]. Nous obtenons alors pour  $x = 0.15$ ,  $V_e = 103.5$  meV et pour  $x = 0.30$ ,  $V_e = 216.5$  meV.

Sur la figure (3.3), nous montrons l'effet de la position du centre donneur sur l'énergie de corrélation d'une impureté dans un puits quantique de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As (avec  $x = 0.30$ ) en l'absence de champs extérieurs et pour une largeur de puits égale à 10 nm. Nous constatons que l'énergie de corrélation diminue, en valeur absolue, lorsque l'impureté s'éloigne du centre du puits, ce qui est conforme aux résultats de Green et Bajaj (1985). Nous avons donné un profil complet de l'énergie de corrélation, même pour une impureté placée dans le matériau barrière. Nous remarquons que cette énergie est toujours négative, ce qui prouve que l'électron peut rester lié même pour une position du donneur dans la barrière atteignant plusieurs nm par rapport au centre. Ce résultat est différent de celui du cas des semi-conducteurs massifs où l'énergie de liaison est indépendante de la position de l'impureté, puisqu'il n'y a aucun potentiel de confinement.

Sur la figure (3.4), nous avons représenté la variation de l'énergie de corrélation en fonction de la largeur du puits pour deux valeurs de la concentration ( $x = 0.15$  et  $x = 0.30$ ) en l'absence et en présence du champ magnétique ( $B = 0$ T et 5T). Nous re-

marquons que le confinement quantique, ainsi que le champ magnétique, augmentent la corrélation coulombienne. En effet, nous observons que l'énergie de corrélation présente un minimum pour  $L \simeq 5$  nm. Ce minimum est d'autant plus marqué que la hauteur de la barrière est plus importante. Dans la limite de grandes largeurs de puits, l'action du potentiel de confinement devient très faible, seule l'action du potentiel coulombien subsiste, et l'énergie tend vers le cas massif.

Le champ magnétique a pour effet de réduire l'extension de l'orbitale de l'électron dans le plan des couches via le terme diamagnétique quadratique en champ, ce qui conduit à une augmentation, en valeur absolue, de l'énergie de corrélation du donneur. Sur la figure (3.5) nous présentons la variation de l'énergie totale en fonction du champ magnétique pour trois largeurs de puits ( $L = 5$  nm, 10 nm, 20 nm). Nous remarquons que l'énergie totale augmente aussi avec le champ.

L'effet de position de l'impureté dont nous n'avons pas tenu compte dans nos calculs, a été exploité par Green et Bajaj (1985). Ils ont montré que le comportement de l'énergie de liaison dans le cas d'une impureté placée aux bords du puits est négligeable.

Dans la figure (3.6) nous présentons les variations de l'énergie de corrélation d'une impureté de type donneur en fonction de la largeur du puits pour trois valeurs du champ électrique ( $F = 0, 10, 20$  kV/cm) et pour deux valeurs de la concentration d'Aluminium ( $x = 0.15$  et  $x = 0.30$ ). A champ nul les résultats obtenus en utilisant la fonction d'onde d'essai [eq.(3.18)] sont comparables à ceux obtenus en utilisant la fonction d'onde [eq.(3.8)]; cela justifie le bon choix de cette fonction d'onde. Lorsque l'intensité du champ électrique augmente, l'énergie de corrélation diminue en valeur absolue pour toutes les valeurs de la largeur du puits. Cette diminution est négligeable pour des puits étroits et devient significative pour des largeurs de puits supérieures à 10 nm. Ceci est bien montré sur la figure (3.7) où nous avons tracé les variations de l'énergie de corrélation en fonction de l'intensité du champ pour différentes valeurs de  $L$ . Le champ électrique tend à éloigner l'électron du centre donneur, ce qui conduit à une réduction de l'énergie potentielle coulombienne, donc à une diminution en valeur absolue de l'énergie de corrélation.

Brum et al. (1985), ont étudié le même problème mais en tenant compte de la position



de l'impureté. Ils ont remarqué que pour  $L = 10$  nm et  $z_i \geq 0$ , l'énergie de liaison décroît quand l'intensité du champ augmente. Alors que pour  $z_i \leq 0$ , cette énergie augmente avec le champ. Ceci est expliqué par le fait que le champ électrique déforme la fonction d'onde de l'électron, qui tend à se concentrer près de l'interface.

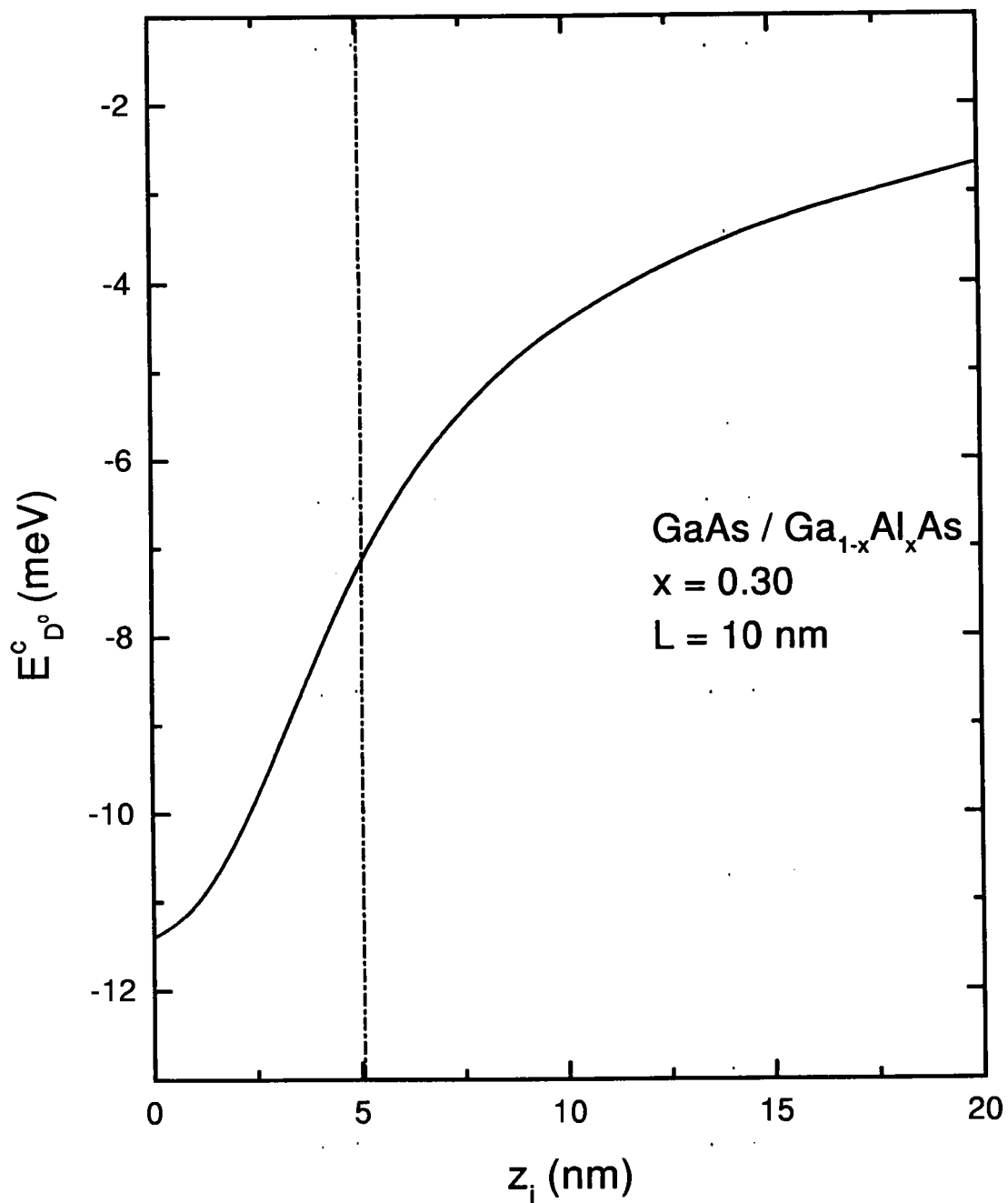


Figure (3.3) : Variation de l'énergie de corrélation d'une impureté en fonction de la position du centre donneur dans un puits quantique de type GaAs/GaAlAs de largeur  $L = 10$  nm.

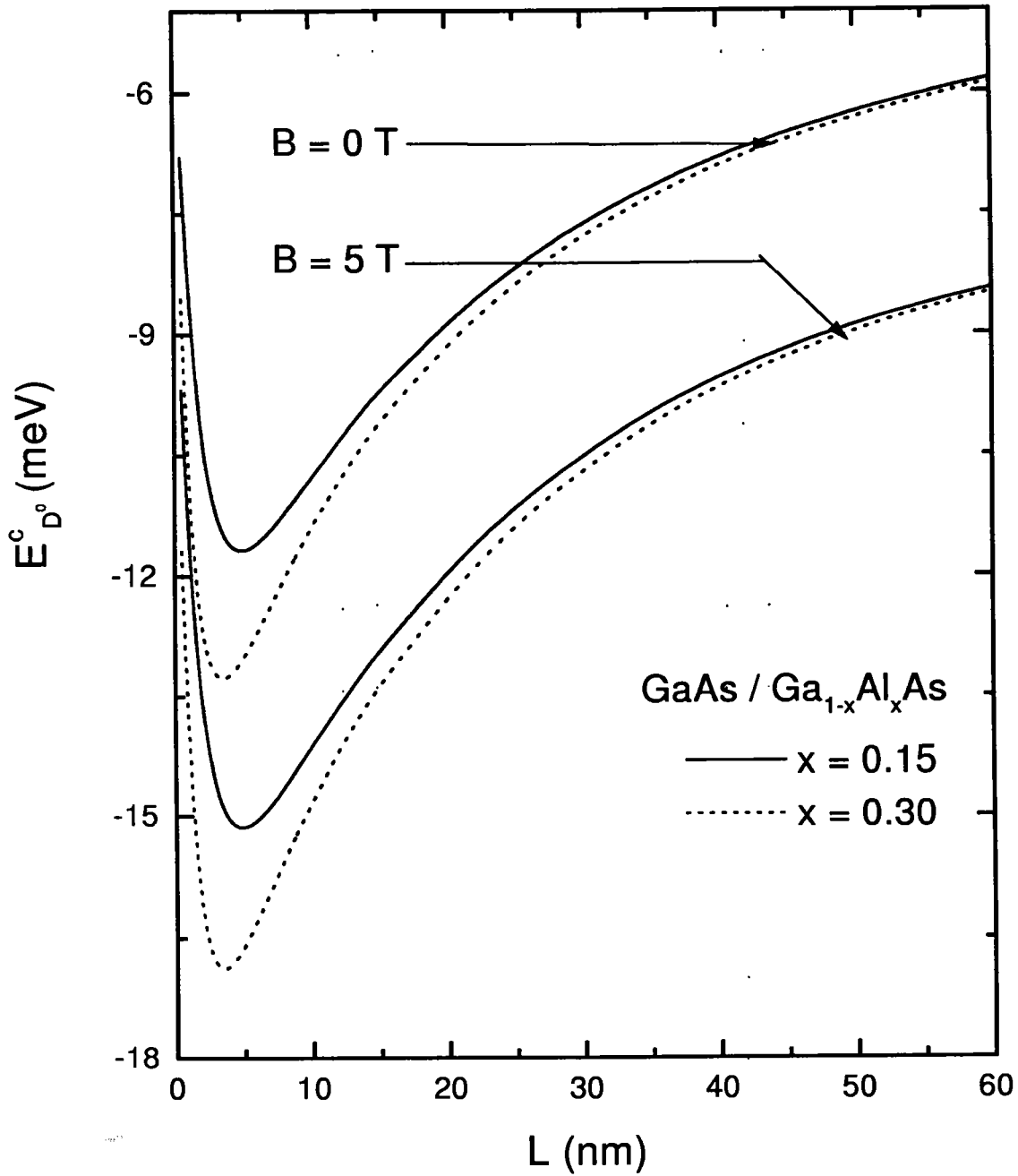


Figure (3.4) : Variation de l'énergie de corrélation du donneur en fonction de la largeur d'un puits quantique de type GaAs/GaAlAs, pour deux valeurs du champ magnétique.

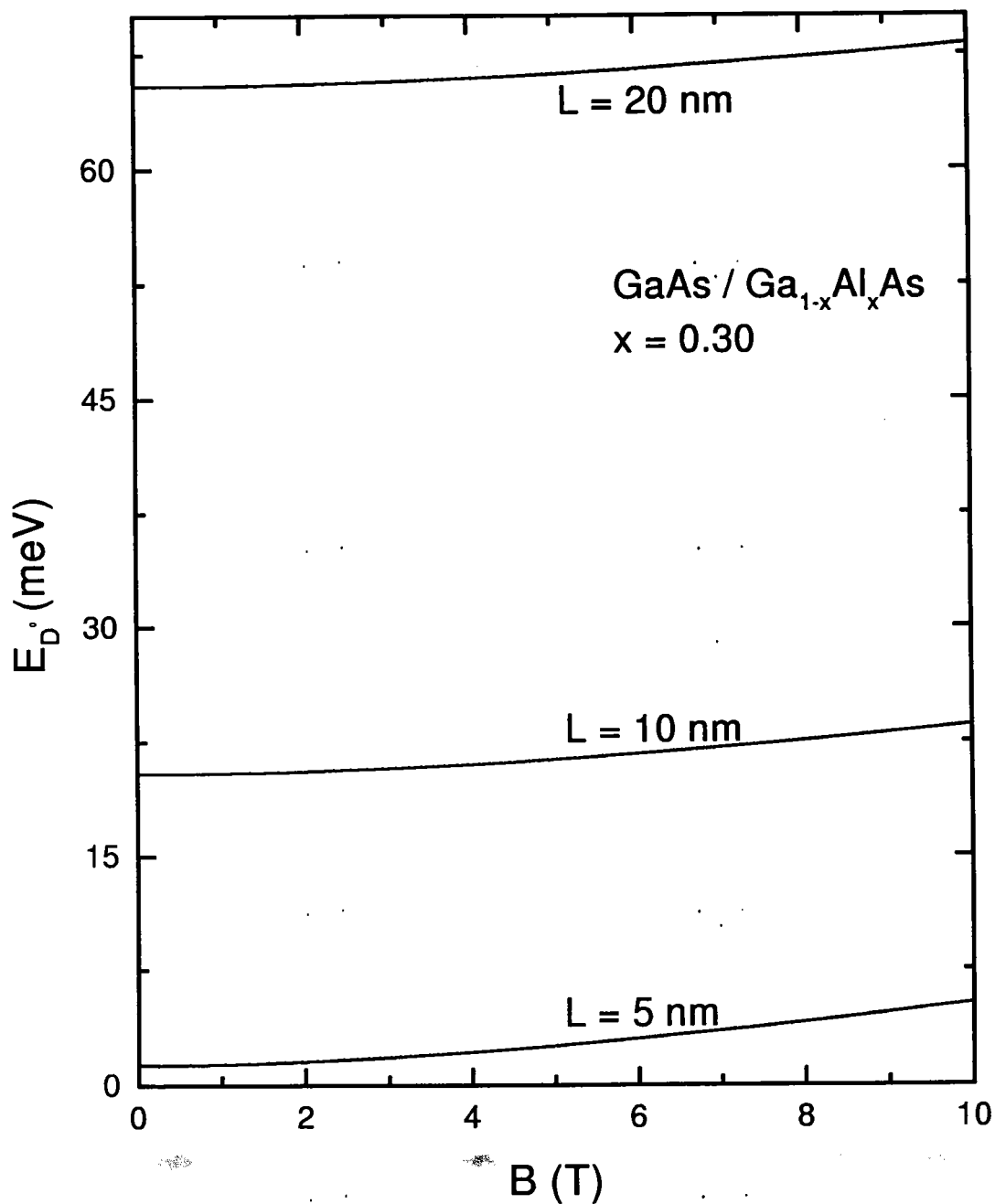


Figure (3.5) : Variation de l'énergie totale de l'état fondamental d'une impureté en fonction du champ magnétique pour différentes largeurs de puits.

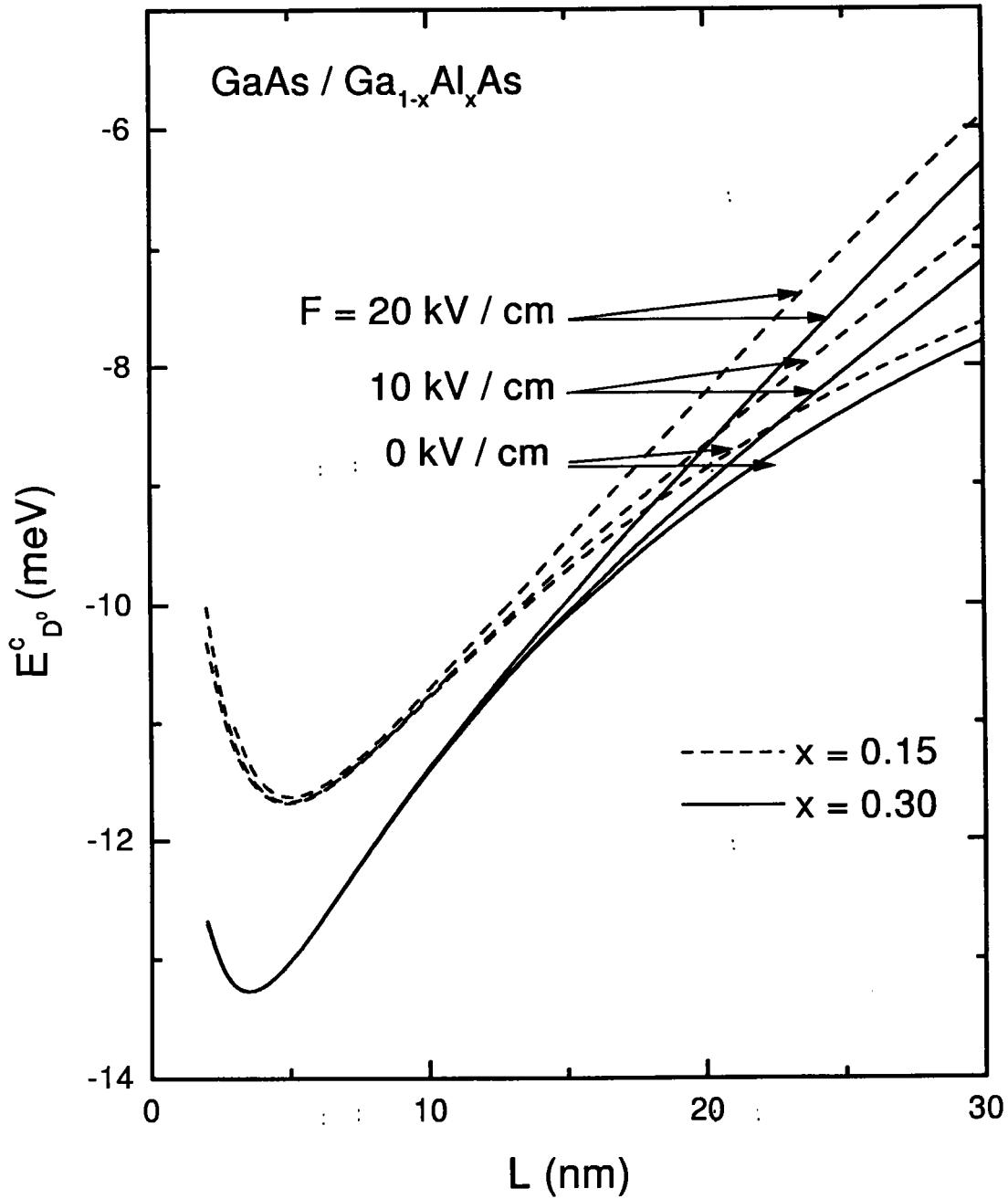


Figure (3.6) : Variation de l'énergie de corrélation du donneur en fonction de la largeur d'un puits quantique de type GaAs/GaAlAs, pour différentes valeurs du champ électrique.

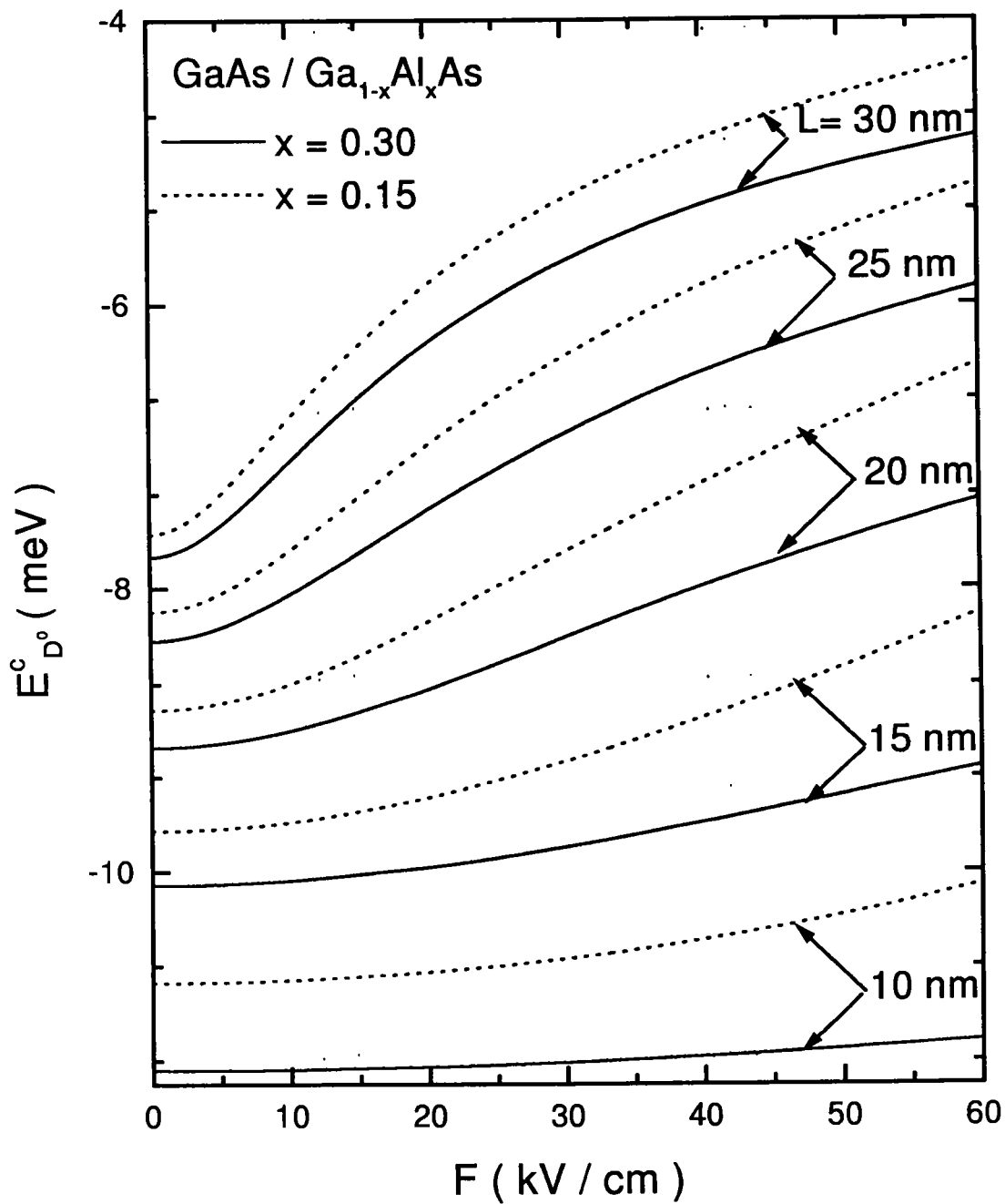


Figure (3.7) : Variation de l'énergie de corrélation du donneur en fonction de l'intensité du champ électrique, pour différentes largeurs de puits de type GaAs/ GaAlAs et pour deux concentrations d'Aluminium  $x = 0.15$  et  $0.30$ .

### 3.3 Influence du couplage électron-phonon

Dans le paragraphe précédent, nous avons étudié les états d'impuretés dans un puits quantique dans le cadre de l'approximation de la masse effective en supposant que le réseau est rigide. En réalité, ce dernier est le siège de vibrations. La quantification de ces vibrations conduit à la notion de "phonon". L'importance de l'interaction de l'électron avec ces phonons dépend du cristal envisagé; dans les cristaux polaires et ioniques cette interaction est importante, du moins en ce qui concerne les phonons optiques longitudinaux (LO). Elle est d'autant plus représentative que la polarisation du cristal est élevée.

Dans les puits quantiques de semi-conducteurs, les propriétés polaroniques d'une impureté sont modifiées par deux effets. Le premier est l'apparition de nouveaux modes de phonons (les modes d'interfaces et confinés) [Mori(1989)]. Le second est dû au confinement de l'électron dans le puits et au changement de la localisation de l'électron autour du centre donneur qui modifient tous deux les énergies des transitions optiques entre les états de l'impureté. Si les propriétés diélectriques des deux semiconducteurs formant le puits quantique sont semblables ( $\text{CdTe}/\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{Te}$  par exemple), c'est à dire, lorsque les modes de phonons et les amplitudes d'interactions sont légèrement modifiés), l'amplitude de l'interaction de Fröhlich [Fröhlich(1951)] dans le cas des phonons (LO) volumiques peut être utilisée comme une amplitude moyenne d'interaction entre les électrons et les phonons.

Dans ce paragraphe, nous étudions l'influence du couplage électron phonon sur le spectre optique d'une impureté dans un puits quantique. Nous calculons l'énergie de liaison dans l'état fondamental, ainsi que celle de la transition 1s-2p en utilisant la méthode de la transformation canonique élaborée pour l'étude des excitons par Bednarek et al. [Bednarek (1977)] et pour le polaron lié par Adamowski [Adamowski (1985)].

### 3.3.1 Hamiltonien du système

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, l'Hamiltonien d'une impureté placée au centre d'un puits quantique en interaction avec les phonons (LO) s'écrit :

$$H_{(D^0)} = \frac{-\hbar^2 \Delta_{\mathbf{r}_e}}{2m_e^*} - \frac{e^2}{\kappa_\infty r_e} + V_e \Theta \left( \frac{L}{2} - |z_e| \right) + \sum_{\mathbf{k}} \hbar \Omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} [v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} (e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - 1) + H.c.] \quad (3.28)$$

Dans cette expression, les trois premiers termes décrivent l'Hamiltonien d'une impureté dans un puits quantique, le quatrième représente l'Hamiltonien du champ de phonons, alors que le dernier décrit l'interaction de l'électron et du centre donneur avec les phonons optiques longitudinaux.  $a_{\mathbf{k}}$  et  $a_{\mathbf{k}}^\dagger$  sont respectivement les opérateurs d'annihilation et de création d'un phonon (LO) de fréquence  $\Omega_{\mathbf{k}}$  et de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ , et  $v_{\mathbf{k}}$  désigne l'intensité du couplage électron-phonon [Fröhlich(1951)], donnée par :

$$v_{\mathbf{k}} = -\frac{i}{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi e^2}{(1/\kappa_\infty - 1/\kappa_0) \hbar \Omega_{\mathbf{k}} V}}, \quad (3.29)$$

où  $\kappa_0$  et  $V$  désignent, respectivement, la constante diélectrique statique et le volume du cristal.

A cause de la divergence du terme  $\sum_{\mathbf{k}} [v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} + H.c.]$ , nous utilisons la transformation canonique de Platzmann (1962). L'Hamiltonien transformé  $\hat{H}$  s'écrit :

$$\hat{H} = U_{Pl}^\dagger H U_{Pl}, \quad (3.30)$$

avec

$$U_{Pl} = \exp \left[ \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{v_{\mathbf{k}}^*}{\hbar \Omega_{\mathbf{k}}} a_{\mathbf{k}} + H.c \right) \right]. \quad (3.31)$$

L'Hamiltonien transformé aura donc l'expression suivante :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{(D^0)} = & \frac{-\hbar^2 \Delta_{\mathbf{r}_e}}{2m_e^*} - \frac{e^2}{\kappa_0 r_e} + V_w \Theta \left( \frac{L}{2} - |z_e| \right) \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \hbar \Omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k}} [v_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + H.c.], \end{aligned} \quad (3.32)$$

où nous avons négligé le terme  $\sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 / \hbar \Omega_{\mathbf{k}}$ , qui représente une self-énergie infinie, par un choix judicieux de l'origine des énergies.



### 3.3.2 Choix de la fonction d'onde d'essai

Nous résolvons le système aux valeurs propres par une approche variationnelle appelée "méthode de la transformation canonique optimisée" [Bednarek(1977)] que nous avons adaptée au polaron lié dans les puits quantiques. Selon cette approche, la fonction d'onde d'essai du système électron-phonon est choisie sous la forme :

$$|\psi\rangle = U\varphi(\mathbf{r})|0\rangle_{ph}, \quad (3.33)$$

où  $U$  est l'opérateur de la transformation canonique que nous choisissons sous la forme :

$$U = \exp \left[ \sum_{\mathbf{k}} \left( F_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})a_{\mathbf{k}}^{\dagger} - H.c \right) \right], \quad (3.34)$$

et  $F_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  est l'amplitude de déplacement que nous allons préciser par la suite.

$\varphi(\mathbf{r})$  est la fonction d'onde d'essai d'une impureté dans un puits quantique et  $|0\rangle_{ph}$  est l'état du vide des phonons.

Les calculs sont effectués en deux étapes: la première a pour but d'éliminer les variables de phonons par l'intermédiaire de la transformation canonique afin d'obtenir une équation effective aux valeurs propres pour le système de fermions, alors que la deuxième étape consiste à résoudre cette équation par la méthode variationnelle en utilisant la fonction d'onde d'essai  $\varphi(\mathbf{r})$ .

La fonction  $\varphi(\mathbf{r})$  est choisie sous la forme d'une combinaison linéaire de fonctions Gaussiennes  $\exp[-\alpha_n(x^2 + y^2) - \beta_n z^2]$ , où  $\alpha_n$  et  $\beta_n$  sont des paramètres variationnels nonlinéaires.

Les tests préliminaires sur les calculs de la contribution polaronique à l'énergie de l'état fondamental sont effectués avec un seul terme dans la fonction d'onde d'essai ( $n = 1$ ). Alors que pour le spectre d'énergie, nous avons utilisé quinze termes ( $n = 1, \dots, 15$ ).

Afin de tenir compte de la symétrie des états  $2p$ , nous avons multiplié la fonction d'onde  $\varphi(\mathbf{r})$  par  $(x + iy)$ .

Nous avons effectué une recherche systématique de l'amplitude optimale de déplacement. Sur la figure (3.8), nous montrons les résultats des tests préliminaires de calcul de la contribution polaronique à l'énergie de l'état fondamental pour les amplitudes

de déplacement suivantes :

$$\begin{aligned}
F_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) &= g_{\mathbf{k}}^{(1)}, \\
F_{\mathbf{k}}^{(2)}(\mathbf{r}) &= g_{\mathbf{k}}^{(2)} \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}), \\
F_{\mathbf{k}}^{(3)}(\mathbf{r}) &= g_{\mathbf{k}}^{(3)} \exp(-i\mathbf{k}_{\perp}\cdot\mathbf{r}), \\
F_{\mathbf{k}}^{(4)}(\mathbf{r}) &= g_{\mathbf{k}}^{(4)} \exp(-i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\mathbf{r}),
\end{aligned} \tag{3.35}$$

ainsi que de leurs combinaisons linéaires, par exemple,  $F_{\mathbf{k}}^{(12)}(\mathbf{r}) = F_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + F_{\mathbf{k}}^{(2)}(\mathbf{r})$  et  $F_{\mathbf{k}}^{(123)}(\mathbf{r}) = F_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r}) + F_{\mathbf{k}}^{(2)}(\mathbf{r}) + F_{\mathbf{k}}^{(3)}(\mathbf{r})$ , avec  $\mathbf{k}_{\perp}$  et  $\mathbf{k}_{\parallel}$  désignent, respectivement, les composantes dans le plan et suivant  $z$  du vecteur d'onde  $\mathbf{k}$ .

Les amplitudes de phonons  $g_{\mathbf{k}}^{(i)}$  sont déterminées de telle façon à minimiser l'énergie totale moyenne du système :

$$\frac{\partial}{\partial g_{\mathbf{k}}^{(i)}} \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0. \tag{3.36}$$

Les amplitudes  $F_{\mathbf{k}}^{(1)}(\mathbf{r})$  et  $F_{\mathbf{k}}^{(2)}(\mathbf{r})$  sont appropriées, respectivement, au cas d'un couplage électron-phonon fort et faible dans les cristaux massifs, alors que  $F_{\mathbf{k}}^{(3)}(\mathbf{r})$  et  $F_{\mathbf{k}}^{(4)}(\mathbf{r})$  nous permettent de tenir compte de la symétrie du cristal à cause du puits quantique.

En utilisant les amplitudes optimales de phonons, nous calculons la contribution des effets polaroniques à l'énergie de l'état fondamental d'une impureté que nous appelons par la suite "énergie de relaxation du réseau ( $W$ )", c'est à dire, en ne tenant compte que des deux derniers termes de l'Hamiltonien (3.32).

L'expression de l'énergie de relaxation du réseau  $W$  calculée avec l'amplitude  $F_{\mathbf{k}}^{(123)}(\mathbf{r})$  est donnée par :

$$\begin{aligned}
W = - \sum_{\mathbf{k}} |v_{\mathbf{k}}|^2 & \left[ \frac{(1 - |\rho_{\parallel}|^2)^2}{T - T_{\perp} |\rho_{\parallel}|^2 + \hbar\Omega (1 - |\rho|^2) (1 - |\rho_{\parallel}|^2)} \right. \\
& \left. + \frac{|\rho_{\parallel}|^2 (1 - |\rho_{\perp}|^2)^2}{T_{\perp} + \hbar\Omega (1 - |\rho_{\perp}|^2)} + \frac{|\rho|^2}{\hbar\Omega} \right],
\end{aligned} \tag{3.37}$$

où  $\rho = \langle \varphi | \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) | \varphi \rangle$ ,  $\rho_{\parallel} = \langle \varphi | \exp(-i\mathbf{k}_{\parallel}\cdot\mathbf{r}) | \varphi \rangle$ ,  $\rho_{\perp} = \langle \varphi | \exp(-i\mathbf{k}_{\perp}\cdot\mathbf{r}) | \varphi \rangle$ ,  $T = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$  et  $T_{\perp} = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_e^*}$ .

### 3.3.3 Résultats

En analysant l'équation (3.37), nous pouvons déduire l'influence du confinement spatial sur l'énergie de relaxation du réseau. Le potentiel de confinement conduit à une forte localisation de l'électron dans la direction  $z$ , ce qui donne lieu à une augmentation en valeur absolue de la densité de probabilité  $|\rho_{||}|$  et, par conséquent, à une augmentation de l'énergie  $W$ . Puisque cette énergie est négative, elle va donner lieu à un renforcement de la liaison de l'électron avec le centre donneur. Cet effet est bien montré sur la figure (3.8), où nous donnons les résultats de calculs d'essais pour l'énergie de l'état fondamental dans un puits quantique de type CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te, avec  $x = 0.3$ , en fonction de la largeur du puits. Nous remarquons que l'énergie de relaxation du réseau est maximale pour une largeur de puits égale à 30 Å. Cette énergie correspond à une forte localisation de l'électron dans la direction de l'axe de croissance, c'est à dire, au minimum de la racine de la moyenne du carré de la coordonnée  $z$  ( $\sqrt{\langle z^2 \rangle}$ ) de l'électron [figure (3.8)].

Les meilleurs résultats sont obtenus avec une combinaison linéaire des quatre amplitudes de déplacement. Néanmoins, les résultats obtenus en utilisant  $F_{\mathbf{k}}^{(123)}(\mathbf{r})$  sont presque identiques à ceux obtenus avec  $F_{\mathbf{k}}^{(1234)}(\mathbf{r})$ . Par conséquent, nous utilisons  $F_{\mathbf{k}}^{(123)}(\mathbf{r})$  pour calculer l'énergie de l'état fondamental et le premier état excité du polaron lié dans un puits quantique.

Dans la figure (3.9), nous présentons les contributions polaroniques à l'énergie de l'état fondamental d'un l'électron libre et aux énergies des états fondamental et excité (2p) du donneur, dans un puits quantique de type CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te, en fonction de la largeur du puits. Nous remarquons que l'énergie du premier état excité (2p) du donneur et celle de l'état (1s) du polaron libre sont approximativement égales, et sont considérablement différentes de celle de l'état fondamental du donneur. Dans les puits quantiques de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As, les états (1s) et (2p) sont faiblement localisés et les énergies dues à la contribution polaronique sont presque les mêmes dans les deux états.

Nous avons également déterminé l'énergie de liaison de l'état fondamental  $E_B$  et l'énergie de transition (1s-2p)  $E_T$  d'un donneur dans les puits quantiques GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As, CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te et CdF<sub>2</sub>/CaF<sub>2</sub> qui correspondent, respectivement,

au couplage électron-phonon faible, intermédiaire et fort. Les résultats montrent que pour les hétérostructures faiblement ioniques, les énergies  $E_B$  et  $E_T$  sont très négligeables. Par conséquent, nous n'allons pas les présenter dans le cas du GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. Seuls les résultats de CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te ( $V_e = 0.146\text{eV}$ ) et CdF<sub>2</sub>/CaF<sub>2</sub> ( $V_e = 3.0\text{eV}$ ) seront présentés sur la figure (3.10).

Dans ces deux hétérostructures ioniques, les effets polaroniques, de même que le confinement spatial, sont importants et donnent lieu à une augmentation considérable de l'énergie de liaison. Les énergies de liaison de l'état (1s) et de transition (1s-2p) passent par des maxima pour certaines largeurs du puits qui correspondent à la plus forte localisation de l'électron dans la direction z.

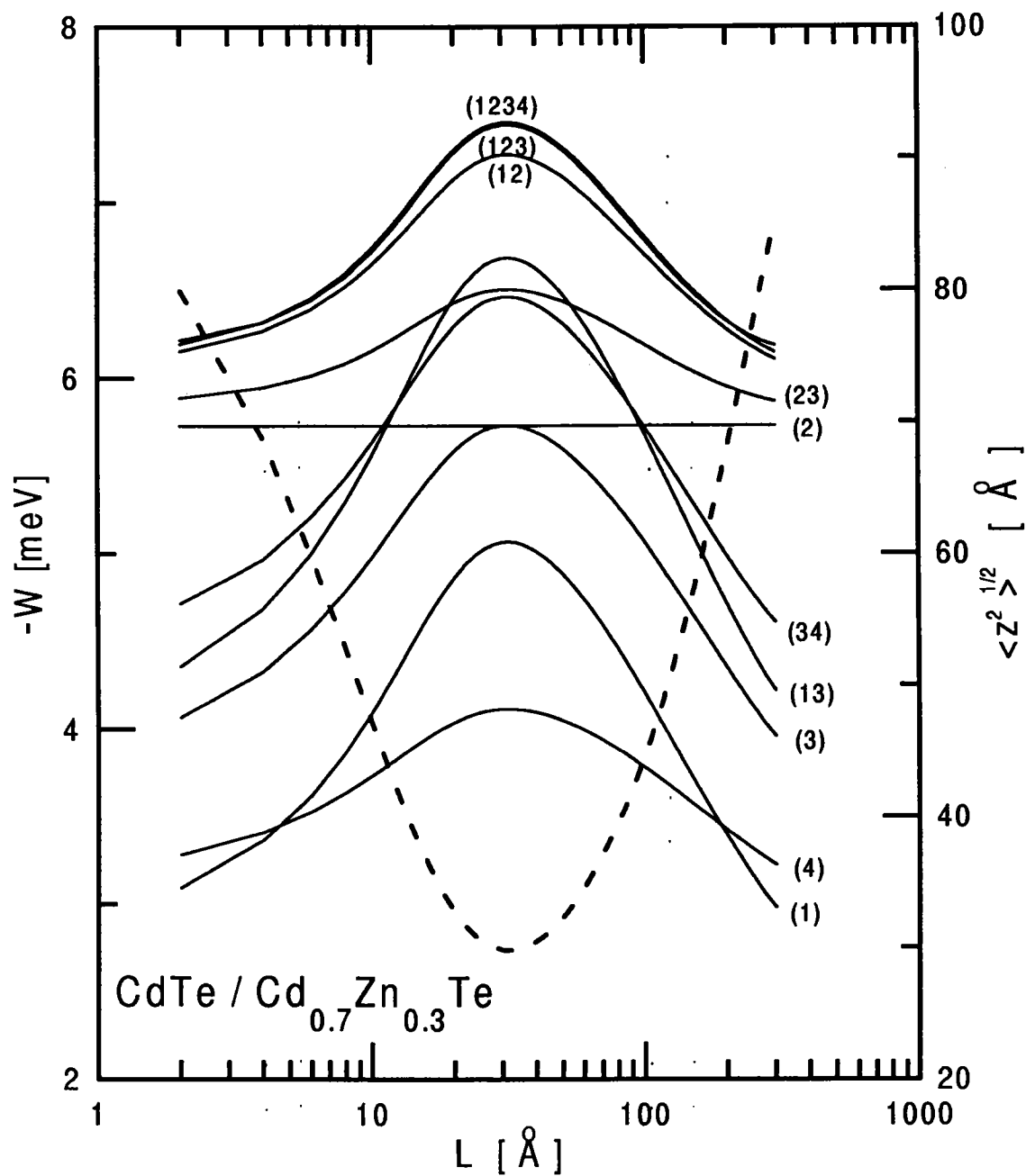


Figure (3.8) : Variation de l'énergie de relaxation du réseau  $W$  pour l'état fondamental du donneur en fonction de la largeur du puits de type CdTe/CdZnTe.

Les courbes pleines présentent les résultats obtenus avec différentes amplitudes de déplacement. La courbe avec les tirets montre les variations de  $\sqrt{\langle z^2 \rangle}$  en fonction de  $L$ .

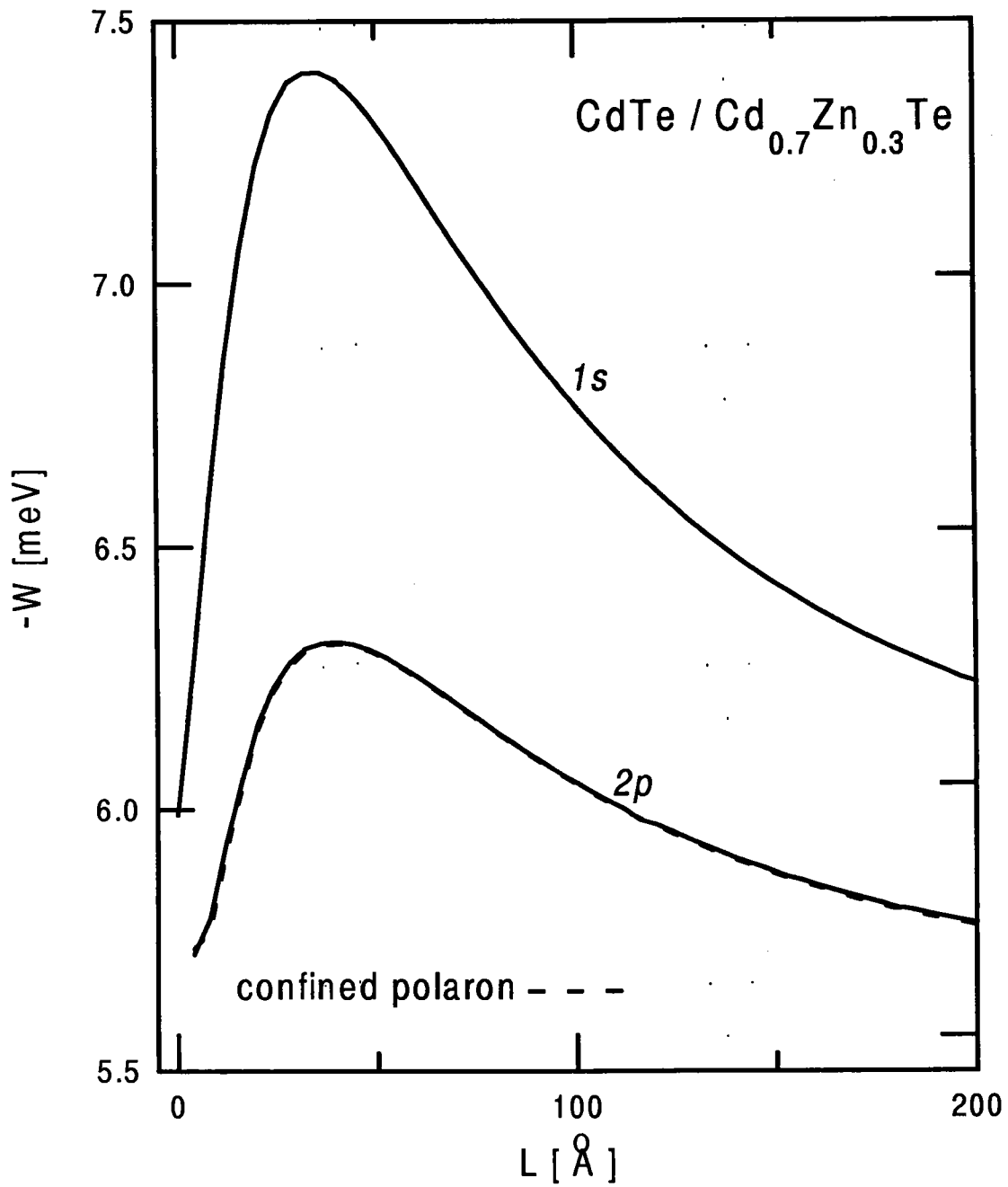


Figure (3.9) : Variation de l'énergie de relaxation du réseau pour les états  $1s$  et  $2p$  du donneur (courbe pleines) et l'état fondamental du polaron confiné (courbe avec les tirets) en fonction de  $L$ .

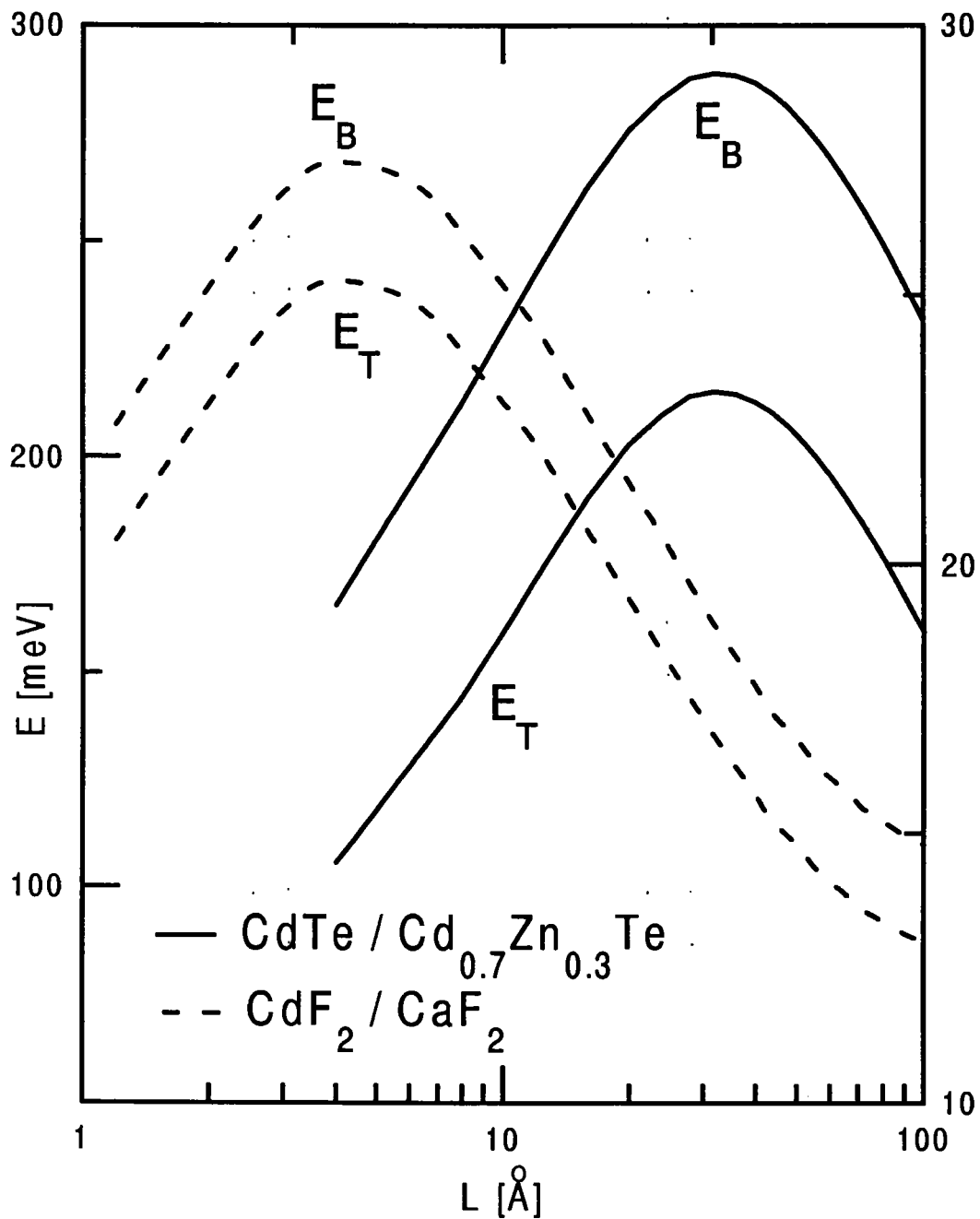


Figure (3.10) : Variation de l'énergie de liaison de l'état fondamental ( $E_B$ ) et l'énergie de transition  $1s - 2p$  ( $E_T$ ) en fonction de  $L$  dans les puits CdTe/CdZnTe (courbes pleines, échelle d'énergie de droite) et CdF<sub>2</sub>/CaF<sub>2</sub> (courbes avec les tirets, échelle d'énergie de gauche).

### 3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié une impureté de type donneur dans un puits quantique en présence de champs extérieurs appliqués parallèlement à l'axe de croissance, et tenant compte du couplage électron-phonon.

L'énergie de corrélation du donneur a été calculée dans le cadre de l'approximation de la masse effective en utilisant une méthode variationnelle avec un choix judicieux de la fonction d'onde d'essai pour chaque cas.

Dans un premier temps, nous avons mis en évidence l'effet de la position de l'impureté sur l'énergie de corrélation en l'absence de champs extérieurs. Ainsi, elle diminue lorsque l'impureté s'éloigne du centre du puits.

L'application du champ magnétique réduit l'orbitale de l'électron dans le plan des couches à cause de l'effet diamagnétique quadratique en champ, ce qui conduit à un renforcement de la liaison du donneur. A contrario, le champ électrique tend à réduire l'énergie de corrélation. Cette réduction est d'autant plus importante que la largeur du puits augmente.

Nous avons développé une nouvelle méthode afin de tenir compte de l'effet du couplage électron-phonon dans un puits quantique. Cette dernière a la particularité d'être applicable dans les cas du couplage faible, intermédiaire et fort. Les effets polaroniques sont très importants dans les puits quantiques, ainsi que dans les semiconducteurs massifs, à cause du confinement spatial dans la direction de l'axe de croissance. Ce qui conduit, dans le cas des puits quantiques ioniques à une augmentation considérable de l'énergie de liaison de l'état fondamental.

Cette étude des impuretés neutres va nous servir dans les chapitres qui suivent pour discuter stabilité du complexe exciton-donneur ionisé dans un puits quantique.



## Chapitre 4

# ENERGIE DE L'ETAT FONDAMENTAL DU COMPLEXE ( $D^+$ ,X) A CHAMP NUL

### 4.1 Introduction

Ce chapitre constitue une extension de l'étude menée par Stébé et al. (1993) sur le complexe exciton-donneur ionisé dans un puits quantique. En effet, nous étudions l'influence de la position de l'impureté et du confinement quantique sur l'énergie de corrélation et la stabilité du système.

Dans un premier temps, nous donnons l'Hamiltonien du complexe dans le cadre de l'approximation de la fonction enveloppe. Nous résolvons ensuite l'équation de Schrödinger correspondante en utilisant l'approche variationnelle de Ritz. Nous justifions le choix de notre fonction d'onde d'essai. Nous étudions les variations de l'énergie de corrélation du système en fonction de la largeur du puits et de la position du donneur. Nous présentons les mécanismes de dissociation du complexe dans un puits quantique. Enfin, nous comparons l'énergie de corrélation à celle d'une impureté de type donneur et d'un exciton afin de déterminer les domaines de stabilité du complexe.

## 4.2 Calcul variationnel de l'énergie de l'état fondamental

Considérons un exciton lié à une impureté ionisée de type donneur dans un puits quantique de largeur  $L$ . Le centre donneur est placé au point  $\mathbf{r}_i$  de coordonnées  $(0,0,z_i)$  [figure (4.1)].

Nous supposons que les matériaux puits et barrières sont caractérisés par des masses effectives de l'électron  $m_e^*$  et du trou  $m_h^*$  isotropes et égales. Nous négligeons les effets dus à l'interaction d'échange électron-trou, ainsi que le couplage électron-phonon. Dans le cas du modèle à deux bandes paraboliques simples non dégénérées et dans le cadre de l'approximation de la masse effective, l'Hamiltonien du complexe en l'absence des champs extérieurs est donné par :

$$\begin{aligned}
 H_{(D^+,X)} = & -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_{\rho_e}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_{\rho_h}^2 \\
 & -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_{z_e}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_{z_h}^2 + V_e \Theta \left( \frac{L}{2} - |z_e| \right) + V_h \Theta \left( \frac{L}{2} - |z_h| \right) \\
 & -\frac{e^2}{\kappa_\infty} \left( \frac{1}{\sqrt{\rho_e^2 + (z_e - z_i)^2}} - \frac{1}{\sqrt{\rho_h^2 + (z_h - z_i)^2}} + \frac{1}{\sqrt{\rho_{eh}^2 + (z_e - z_h)^2}} \right),
 \end{aligned} \quad (4.1)$$

où  $V_e$  et  $V_h$  sont respectivement les hauteurs des barrières de potentiel de confinement pour l'électron et le trou, et  $\Theta(z)$  est la fonction de Heaviside déjà définie au chapitre précédent.

$z_e$  et  $z_h$  sont les coordonnées de l'électron et du trou le long de l'axe de croissance  $z$ , tandis que  $\rho_e$ ,  $\rho_h$  et  $\rho_{eh}$  sont les projections sur le plan des couches des distances respectives de l'électron, du trou et de la paire électron-trou.

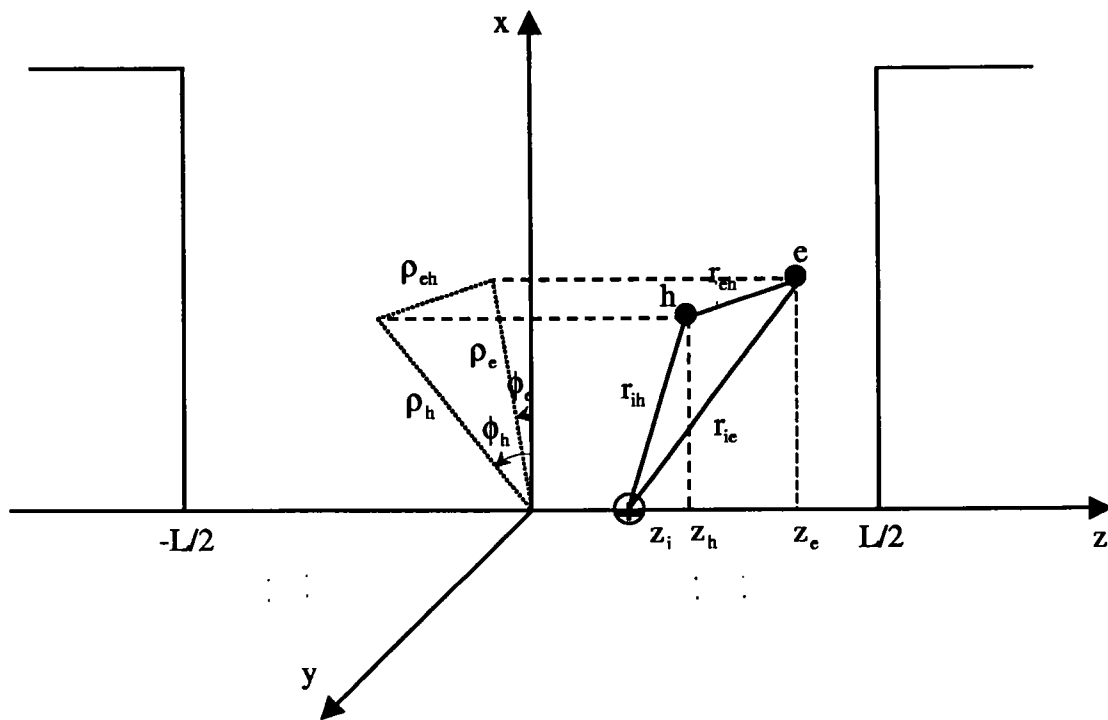


Figure (4.1) : Schéma représentant le complexe exciton donneur ionisé dans un puits quantique.

Notre étude sera consacrée seulement à la détermination de l'énergie de l'état fondamental, qui correspond à l'énergie la plus basse du système.

La présence des termes d'interaction coulombienne entre les trois particules rend la résolution analytique de l'équation de Schrödinger impossible. Par conséquent, nous nous contentons d'une résolution numérique moyennant la méthode variationnelle de Ritz.

Dans les semiconducteurs massifs et bidimensionnels, Stauffer et Stébé (1989) ont remarqué que les interactions coulombiennes électron-trou et électron-centre donneur donnent lieu à une contribution importante à l'énergie du complexe. Par conséquent, nous devons tenir compte des distances  $r_e$  et  $r_{eh}$  dans le choix de notre fonction d'onde d'essai. Vu la symétrie du problème, nous choisissons la fonction d'onde d'essai suivante :

$$\psi(s, t, u, z_e, z_h) = \mathcal{N} \sum_{lmnpr} C_{lmnpr} \phi_{lmn} \theta_{pr}. \quad (4.2)$$

Les indices  $l, m, n, p$  et  $r$  sont des entiers positifs ou nuls.  $\mathcal{N}$  représente une constante de normation.  $C_{lmnpr}$  sont des paramètres variationnels linéaires. Les fonctions de base sont choisies comme étant le produit des fonctions  $\phi_{lmn}$  dépendant seulement des coordonnées dans le plan et des fonctions  $\theta_{pr}$  dépendant des coordonnées  $z$ . La présence des fonctions  $\theta_{pr}$  tient compte de l'importance du confinement quantique dans la direction de l'axe de croissance, alors que  $\phi_{lmn}$  traduit la corrélation coulombienne existant au sein du complexe dans le plan des couches.

Pour la fonction d'onde  $\phi_{lmn}$  nous avons opté pour le système de coordonnées introduit par Hylleraas(1929) pour l'atome d'Hélium :

$$\phi_{lmn} = e^{-\frac{k s}{2}} s^l u^m t^n. \quad (4.3)$$

Les nouvelles coordonnées  $(s, t, u)$  sont reliées aux distances entre particules  $\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}$  par :

$$\begin{aligned} s &= \rho_e + \rho_{eh}, & t &= \rho_e - \rho_{eh}, & u &= \rho_h. \\ s &\geq 0, & -s &\leq t \leq s, & |t| &\leq u \leq s \end{aligned} \quad (4.4)$$

La partie dépendant de  $z$  est choisie telle que :

$$\theta_{pr}(z_e, z_h) = f_e(z_e) f_h(z_h) a_p(z_e - z_i) b_r(z_h - z_i). \quad (4.5)$$

Dans la fonction  $\theta_{pr}$ , on voit apparaître la coordonnée  $z_i$  qui décrit la position du centre d'impureté.  $f_e$  et  $f_h$  sont les fonctions propres exactes de l'état fondamental de l'électron et du trou dans le puits quantique et ont les expressions suivantes :

$$f_e(z_e) = \begin{cases} A_e \cos\left(\sqrt{2E_e^0}z_e\right) & \text{if } |z_e| \leq \frac{L}{2} \\ B_e \exp\left[\sqrt{2(V_e - E_e^0)}|z_e|\right] & \text{if } |z_e| > \frac{L}{2}, \end{cases} \quad (4.6)$$

$$f_h(z_h) = \begin{cases} A_h \cos\left(\sqrt{\frac{2}{\sigma}E_h^0}z_h\right) & \text{if } |z_h| \leq \frac{L}{2} \\ B_h \exp\left[\sqrt{\frac{2}{\sigma}(V_h - E_h^0)}|z_h|\right] & \text{if } |z_h| > \frac{L}{2}, \end{cases} \quad (4.7)$$

avec :

$$a_p(z_e) = z_e^p \exp(-\alpha_e z_e^2), \quad (4.8)$$

$$b_r(z_h) = z_h^r \exp(-\alpha_h z_h^2). \quad (4.9)$$

$E_e^0$  et  $E_h^0$  sont les énergies de l'état fondamental de l'électron et du trou dans un puits quantique et  $\sigma$  représente le rapport des masses  $m_e^*$  et  $m_h^*$ .

$A_e$ ,  $B_e$ ,  $A_h$  et  $B_h$  sont des constantes de normation déterminées en écrivant les conditions de continuité aux interfaces des fonctions  $f_e(z_e)$  et  $f_h(z_h)$  ainsi que de leurs dérivées premières.

Afin de simplifier nos calculs, nous introduisons les unités atomiques de longueur :  $a_D = \kappa\hbar^2/m_e^*e^2$ , et d'énergie  $2R_D = \hbar^2/m_e^*a_D^2$ . Dans ce cas, dans l'expression de l'Hamiltonien précédent  $\hbar^2/m_e^*$  et  $e^2/\kappa$  sont remplacés par l'unité, tandis que  $\hbar^2/m_h^*$  est remplacé par  $\sigma$ . Vu la symétrie du problème suivant l'axe  $z$ , il est commode de séparer le mouvement dans le plan de celui suivant  $z$ . En utilisant le nouveau système de coordonnées, l'Hamiltonien (4.1) devient :

$$H_{(D^+,X)} = (H_{(D^+,X)})_{\parallel} + (H_{(D^+,X)})_{\perp} + V_c, \quad (4.10)$$

avec

$$(H_{(D^+,X)})_{\parallel} = -2\frac{s^2 - u^2}{s^2 - t^2}\partial_s^2 - 2\frac{u^2 - t^2}{s^2 - t^2}\partial_t^2 - \frac{2s}{s^2 - t^2}\partial_s + \frac{2t}{s^2 - t^2}\partial_t - \frac{\sigma}{2}\left[\partial_s^2 + \partial_t^2 + \partial_u^2 + \partial_v^2 - 2\partial_{st}^2 + \frac{2}{s-t}(\partial_s + \partial_t) + \frac{1}{u}\partial_u + 2\frac{u^2 - st}{u(s-t)}(\partial_{us}^2 - \partial_{ut}^2)\right], \quad (4.11)$$

$$(H_{(D^+,X)})_{\perp} = -\frac{1}{2}\partial_{z_e^2}^2 - \frac{\sigma}{2}\partial_{z_h^2}^2 + V_e\Theta\left(\frac{L}{2} - |z_e|\right) + V_h\Theta\left(\frac{L}{2} - |z_h|\right), \quad (4.12)$$

$$V_c = \frac{1}{\sqrt{u^2 + (z_h - z_i)^2}} - \frac{2}{\sqrt{(s+t)^2 + 4(z_e - z_i)^2}} - \frac{2}{\sqrt{(s-t)^2 + 4(z_e - z_h)^2}}. \quad (4.13)$$

Nous remarquons que cette séparation n'est pas possible dans le terme d'interaction coulombienne.

La résolution de l'équation de Schrödinger revient à chercher les valeurs et vecteurs propres du système matriciel suivant :

$$(\mathbf{H} - E_{(D^+, X)}\mathbf{S})\mathbf{C} = \mathbf{0}, \quad (4.14)$$

avec les éléments de matrices correspondant à  $\mathbf{H}$  et  $\mathbf{S}$  qui s'écrivent comme suit :

$$S_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'} = \langle \phi_{l'm'n'} \theta_{p'r'} | \mathbf{S} | \phi_{lmn} \theta_{pr} \rangle, \quad (4.15)$$

$$(H_{(D^+, X)})_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'} = \langle \phi_{l'm'n'} \theta_{p'r'} | \mathbf{H} | \phi_{lmn} \theta_{pr} \rangle. \quad (4.16)$$

Tous les éléments de matrices dépendent d'une intégrale notée  $J_{lmn}^{l'm'n'}$  définie par :

$$\begin{aligned} J_{lmn}^{l'm'n'}(\lambda, \mu, \nu) &= 2\pi \int_0^\infty e^{-ks} s^{l+l'+\lambda} ds \int_0^s \frac{u^{m+m'+\mu}}{\sqrt{s^2 - u^2}} du \int_0^u \frac{t^{n+n'+\nu}}{\sqrt{u^2 - t^2}} dt \\ &= \frac{2\pi [l+l'+\lambda+m+m'+\mu+n+n'+\nu]!}{k^{(l+l'+\lambda+m+m'+\mu+n+n'+\nu+1)}} I_{m+m'+\mu+n+n'+\nu} I_{n+n'+\nu}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

avec,

$$I_{2n+2} = \frac{\pi (2n)!}{(n!)^2 2^{2n+1}} \quad \text{et} \quad I_{2n+1} = \frac{(n!)^2 2^{2n}}{(2n+1)!}. \quad (4.18)$$

La partie plane de l'élément  $S$  s'écrit alors :

$$S_{lmn}^{l'm'n'} = \omega_{n+n'} \left[ J_i^{i'}(2, 1, 0) - J_i^{i'}(0, 1, 2) \right], \quad (4.19)$$

avec  $\omega_n = 0$  si  $n$  est impair, et 1 si  $n$  est pair, alors que la contribution dépendant de la coordonnée  $z$  est donnée par :

$$S_{pr}^{p'r'} = W Z_e^0(p', p) W Z_h^0(r', r), \quad (4.20)$$

où,

$$W Z_e^0(p', p) = \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e - z_i) | f_e(z_e) a_p(z_e - z_i) \rangle, \quad (4.21)$$

$$W Z_h^0(r', r) = \langle f_h(z_h) b_{r'}(z_h - z_i) | f_h(z_h) b_r(z_h - z_i) \rangle. \quad (4.22)$$

Les éléments de l'Hamiltonien  $\mathbf{H}$  ont pour expression :

$$\begin{aligned}
(H_{\parallel})_{lmnp'r'}^{l'm'n'p'r'} &= \omega_{n+n'} S_{pr}^{p'r'} \left\{ -2(l^2 - n^2) J_i^{i'}(0, 1, 0) + k(2l + 1) J_i^{i'}(1, 1, 0) \right. \\
&\quad - \frac{k^2}{2} J_i^{i'}(2, 1, 0) + \frac{k^2}{2} J_i^{i'}(0, 3, 0) - 2kl J_i^{i'}(-1, 3, 0) \\
&\quad + 2l(l - 1) J_i^{i'}(-2, 3, 0) - 2n(n - 1) J_i^{i'}(0, 3, -2) \\
&\quad + \sigma \left[ -\frac{k^2}{8} J_i^{i'}(2, 1, 0) + \frac{k^2}{8} J_i^{i'}(0, 1, 2) - \frac{m}{2}(m + 2n) J_i^{i'}(2, -1, 0) \right. \\
&\quad + \frac{k}{2}(l + m + 1) J_i^{i'}(1, 1, 0) - \frac{1}{2}(l - n)(l + n + 2m + 1) J_i^{i'}(0, 1, 0) \\
&\quad + \frac{m}{2}(m + 2l) J_i^{i'}(0, -1, 2) - \frac{kl}{2} J_i^{i'}(-1, 1, 2) + \frac{l(l - 1)}{2} J_i^{i'}(-2, 1, 2) \\
&\quad \left. - \frac{n(n - 1)}{2} J_i^{i'}(2, 1, -2) - \frac{km}{2} J_i^{i'}(1, -1, 2) \right\} \\
&\quad + \omega_{n+n'+1} \sigma S_{pr}^{p'r'} \left\{ -\frac{kn}{2} J_i^{i'}(2, 1, -1) + \frac{k}{2}(m + n + 1) J_i^{i'}(0, 1, 1) \right. \\
&\quad + m(l - n) J_i^{i'}(1, -1, 1) + n(l + m + 1) J_i^{i'}(1, 1, -1) \\
&\quad \left. - l(m + n + 1) J_i^{i'}(-1, 1, 1) - \frac{km}{2} J_i^{i'}(2, -1, 1) \right\}, \quad (4.23)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(H_{\perp})_{lmnp'r'}^{l'm'n'p'r'} &= S_{lmn}^{l'm'n'} [(E_e^0 + E_h^0) W Z_e^0(p', p) W Z_h^0(r', r) \\
&\quad - W Z_e^1(p', p) W Z_h^0(r', r) - \sigma W Z_e^0(p', p) W Z_h^1(r', r) \\
&\quad - \frac{1}{2} W Z_e^2(p', p) W Z_h^0(r', r) - \frac{\sigma}{2} W_e^0(p', p) W Z_h^2(r', r)], \quad (4.24)
\end{aligned}$$

avec ,

$$W Z_e^1(p', p) = \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e - z_i) | f'_e(z_e) a'_p(z_e - z_i) \rangle \quad (4.25)$$

$$W Z_e^2(p', p) = \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e - z_i) | f_e(z_e) a''_p(z_e - z_i) \rangle \quad (4.26)$$

$$W Z_h^1(r', r) = \langle f_h(z_h) b_{r'}(z_h - z_i) | f'_h(z_h) b'_r(z_h - z_i) \rangle \quad (4.27)$$

$$W Z_h^2(r', r) = \langle f_h(z_h) b_{r'}(z_h - z_i) | f_h(z_h) b''_r(z_h - z_i) \rangle. \quad (4.28)$$

Afin de ne pas perdre le bénéfice d'une fonction d'onde séparable dans les simplifications des calculs numériques, nous déterminons l'élément de matrice d'interaction coulombienne en s'appuyant sur la méthode approchée utilisée par Stébé et al. (1997) dans le cas du trion négatif dans un puits quantique (voir Appendice C) :

$$(V_c)_{lmnp'r'}^{l'm'n'p'r'} \simeq S_{lmn}^{l'm'n'} [W Z_h^0(r', r) Z_e(p', p) + W Z_e^0(p', p) Z_h(r', r) + Z_{eh}(p', r', p, r)], \quad (4.29)$$

avec,

$$Z_e(p', p) = \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e - z_i) | - \frac{1}{\alpha_{lmn}^{l'm'n'} + |z_e - z_i|} | f_e(z_e) a_p(z_e - z_i) \rangle, \quad (4.30)$$

$$Z_h(r', r) = \langle f_h(z_h) b_{r'}(z_h - z_i) | \frac{1}{\beta_{lmn}^{l'm'n'} + |z_h - z_i|} | f_h(z_h) b_r(z_h - z_i) \rangle, \quad (4.31)$$

$$Z_{eh}(p', r', p, r) = \langle f_e(z_e) f_h(z_h) a_{p'}(z_e - z_i) b_{r'}(z_h - z_i) | - \frac{1}{\gamma_{lmn}^{l'm'n'} + |z_e - z_h|} | f_e(z_e) f_h(z_h) a_p(z_e - z_i) b_r(z_h - z_i) \rangle, \quad (4.32)$$

et

$$\alpha_{lmn}^{l'm'n'} = \frac{\omega_{n+n'} (J_i^{i'}(2, 1, 0) - J_i^{i'}(0, 1, 2))}{2 [\omega_{n+n'} J_i^{i'}(1, 1, 0) - \omega_{n+n'+1} J_i^{i'}(0, 1, 1)]}, \quad (4.33)$$

$$\beta_{lmn}^{l'm'n'} = \frac{J_i^{i'}(2, 1, 0) - J_i^{i'}(0, 1, 2)}{J_i^{i'}(2, 0, 0) - J_i^{i'}(0, 0, 2)}, \quad (4.34)$$

$$\gamma_{lmn}^{l'm'n'} = \frac{\omega_{n+n'} (J_i^{i'}(2, 1, 0) - J_i^{i'}(0, 1, 2))}{2 [\omega_{n+n'} J_i^{i'}(1, 1, 0) + \omega_{n+n'+1} J_i^{i'}(0, 1, 1)]}. \quad (4.35)$$

### 4.3 Stabilité du complexe

La stabilité du complexe doit être étudiée par rapport aux produits de dissociation les plus stables. En effet, comme nous l'avons signalé au chapitre 2, l'exciton-donneur ionisé se dissocie suivant deux processus distincts :



Les conditions de stabilité correspondantes s'écrivent :

$$E_{(D^+, X)}^c \leq E_{D^0}^c. \quad (4.38)$$

$$E_{(D^+, X)}^c \leq E_X^c, \quad (4.39)$$

où  $E_{(D^+, X)}^c$ ,  $E_{D^0}^c$ ,  $E_X^c$  désignent, respectivement, les énergies de corrélation du complexe, du donneur et de l'exciton. Elles s'expriment en fonction des énergies de l'état fondamental par :

$$E_{(D^+, X)}^c = E_{(D^+, X)} - E_e^0 - E_h^0 \quad (4.40)$$

$$E_{D^0}^c = E_{D^0} - E_e^0 \quad (4.41)$$

$$E_X^c = E_X - E_e^0 - E_h^0. \quad (4.42)$$



Nous avons calculé l'énergie de corrélation du donneur et de l'exciton en utilisant la méthode variationnelle de Ritz. Pour  $D^0$ , nous avons pris la fonction d'onde utilisée au chapitre 3 en l'absence de champs extérieurs. Pour l'exciton, nous avons choisi la fonction d'essai suivante :

$$\psi_X = f_e(z_e) f_h(z_h) \sum_{pr} C_{pr} z_e^p z_h^r \exp(-\alpha_e z_e^2) \exp(-\alpha_h z_h^2) \exp(-k\rho), \quad (4.43)$$

où  $\rho$  représente la projection de la coordonnée relative  $\mathbf{r}$  dans le plan.  $a_p(z_e)$  et  $b_r(z_h)$  ont été définis au paragraphe précédent;  $\alpha_e$ ,  $\alpha_h$ , et  $k$  sont des paramètres variationnels linéaires alors que  $C_{pr}$  sont non linéaires. Dans le cas de l'exciton, nous avons utilisé neuf termes dans la fonction d'onde définis par l'inégalité  $p+q \leq 3$ . En vue d'estimer la position des raies du complexe, il est nécessaire de faire une hypothèse sur le processus radiatif impliqué dans la transition. Le plus simple consiste en une transition entre un état initial où il n'y a que l'impureté ionisée  $D^+$  et un état final correspondant à la formation de  $(D^+, X)$ . Le bilan énergétique correspondant aux transitions directes s'écrit [voir figure (3.2)] :

$$h\nu_{(D^+, X)} = h\nu_X + E_{(D^+, X)}^c - E_X^c, \quad (4.44)$$

où  $h\nu_{(D^+, X)}$  et  $h\nu_X$  désignent, respectivement, les énergies des transitions associées au complexe et à l'exciton.

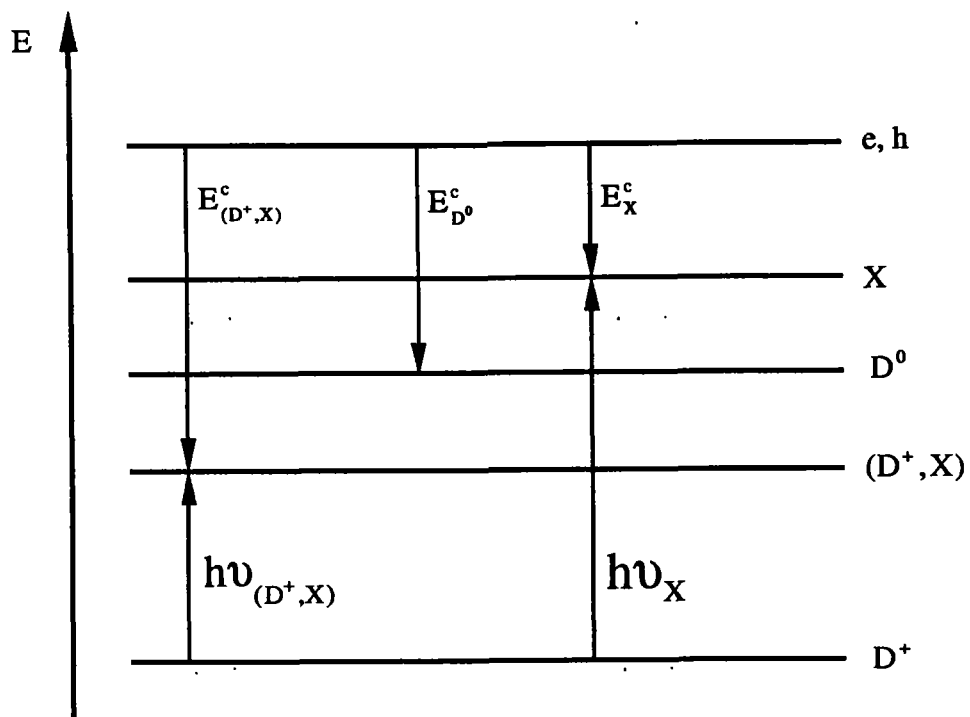


Figure (4.2) : Diagramme des transitions qui peuvent avoir lieu dans un puits quantique de semiconducteur contenant une impureté ionisée de type donneur.

## 4.4 Résultats numériques et discussion

Notre méthode de calcul consiste, dans un premier temps, à minimiser l'énergie totale du système par rapport aux paramètres variationnels non linéaires  $\alpha_e$ ,  $\alpha_h$  et  $k$ . Le nombre de termes dans la fonction d'onde est choisi au début égal à sept, déterminé par la condition  $l + m + n \leq 2$  et  $\{pr\} = \{00\}$ . Puis, nous fixons les valeurs des paramètres  $\alpha_e$ ,  $\alpha_h$  et  $k$  à celles trouvées dans le cas de sept termes et nous déterminons l'énergie de l'état fondamental en choisissant 68 termes dans la fonction d'onde déterminés par la condition  $l + m + n \leq 5$  et  $\{pr\} = \{00, 11\}$ . Notons que dans le cas où le donneur est localisé au centre du puits, l'Hamiltonien est à parité définie. Donc on se restreint aux valeurs paires de  $n$ , alors que dans le cas d'une impureté décentrée,  $n$  peut être pair ou impair.

Nos résultats sont appliqués aux puits quantiques de type  $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$  et  $CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe$ . Dans le cas de  $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ , nous utilisons les données suivantes :  $m_e^*/m_0 = 0.0665$ ,  $m_{hh}^*/m_0 = 0.34$  pour les masses effectives de l'électron et du trou lourd [Miller(1984)] et  $\kappa = 12.5$  pour la constante diélectrique [Green (1983)], ce qui donne un rapport des masses  $\sigma = 0.196$ . Les hauteurs de barrières de potentiel de confinement sont données par  $V_e = Q_e \Delta\epsilon_g$  et  $V_h = Q_h \Delta\epsilon_g$ , avec  $Q_e = 0.57 = 1 - Q_h$ . Nous supposons que la différence de la bande interdite  $\Delta\epsilon_g$  et le pourcentage  $x$  d'Aluminium sont reliés par la relation :  $\Delta\epsilon_g = 1.155x + 0.37x^2$  eV [Lee (1980)]. Pour  $x = 0.15$ , nous obtenons  $V_e = 103.5$  meV et  $V_h = 78.1$  meV et pour  $x = 0.30$ ,  $V_e = 216.5$  meV et  $V_h = 163.3$  meV

Dans le cas de  $CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe$ , nous utilisons comme masse d'électron  $m_e^*/m_0 = 0.096$ , résultant des mesures de la résonance cyclotronique dans CdTe [Romestain (1980)], et comme masse du trou lourd dans le plan,  $m_{hh}^*/m_0 = 0.19$ , déduite des paramètres de Luttinger  $\gamma_1 = 4.11$ ,  $\gamma_2 = 1.08$  et  $\gamma_3 = 1.95$  obtenus par la magnéto-absorption à deux photons dans CdTe [Neuman (1988)]. Le rapport des masses effectives de l'électron et du trou est donné par  $\sigma = 0.505$ , le rayon de Bohr est  $a_D = 5.4$  nm et  $2Ry = 27.6$  meV. Pour  $x = 0.08, 0.16$  et  $0.30$ , les bandes offsets de conduction et de valence sont respectivement  $V_e = 34.1, 71.4$  et  $146.4$  meV et  $V_h = 12, 24.1$  et  $42$  meV [Kheng (1993)].

La figure (4.3) traduit les variations d'énergies de corrélation du complexe, du don-

neur et de l'exciton en fonction de la largeur d'un puits quantique de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As, pour le trou lourd et pour deux concentrations d'Aluminium  $x = 0.15$  et  $x = 0.30$ . Nous particularisons nos résultats au cas d'une impureté localisée au centre du puits ( $z_i = 0$ ). Pour le complexe, nous obtenons les mêmes résultats que ceux trouvés par Stébé et al. [Stébé(1993)]. Nous observons que l'énergie de  $(D^+, X)$  présente un minimum pour  $L_m \simeq 3.5$  nm; c'est dans ce domaine que la liaison coulombienne est maximale. Pour  $L > L_m$ ,  $E_{(D^+, X)}^c$  est une fonction croissante de  $L$ . Quand  $L$  tend vers l'infini,  $E_{(D^+, X)}^c$  tend vers le cas limite (3D) [Stauffer(1989)] correspondant au rapport des masses de l'électron et du trou associé, indépendamment de la hauteur de la barrière. Néanmoins, nos résultats sont légèrement supérieurs que ceux du cas massif car notre fonction d'onde est mal adaptée à cette limite. Nous pouvons améliorer nos résultats en introduisant plus de termes contenant  $z_e^p$  et  $z_h^r$  dans le développement de la fonction d'onde  $\psi_{(D^+, X)}$ . Pour  $L < L_m$ ,  $E_{(D^+, X)}^c$  est une fonction décroissante, en valeur absolue, de  $L$ . Dans ce cas, la probabilité de formation du complexe devient de plus en plus faible. En effet, le puits quantique se comporte comme un potentiel répulsif. Quand  $L$  tend vers zéro, on retrouve les résultats du cas massif. Afin d'étudier la stabilité du complexe, nous avons présenté sur la même figure les variations des énergies de corrélation du donneur et de l'exciton. Nous remarquons que l'énergie du complexe est toujours plus basse que celles du donneur et de l'exciton. Nous concluons que le complexe exciton-donneur ionisé est toujours stable dans la gamme des largeurs de puits exploitées.

Dans la figure (4.4) nous présentons les variations de l'énergie de corrélation de  $(D^+, X)$  et de  $D^0$  dans le cas d'un puits de type CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te avec  $x = 0.08$  et 0.16. Nos résultats sont essentiellement les mêmes que ceux présentés sur la figure (4.3) dans le cas d'un puits de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As.

Afin de mettre en évidence l'effet de la position du donneur sur la stabilité du complexe, nous présentons sur la figure (4.5) les variations des énergies de corrélation du donneur, de l'exciton et du complexe en fonction de la position d'impureté  $z_i$  pour une largeur de puits de 10 nm. Nous remarquons que les énergies de corrélation, pour le donneur et le complexe, diminuent en valeur absolue quand on s'éloigne du centre du puits. Cependant, l'énergie de corrélation de l'exciton n'est pas affectée. Pour  $z_i \lesssim 3$  nm, l'impureté est plus stable que l'exciton. Ainsi, la stabilité du complexe

doit être étudiée par rapport au donneur. Pour  $3 \text{ nm} \lesssim z_i \lesssim 8 \text{ nm}$  sa stabilité doit être étudiée par rapport à l'exciton. Toutefois nous ne pouvons pas prouver sa stabilité au delà de 8 nm.

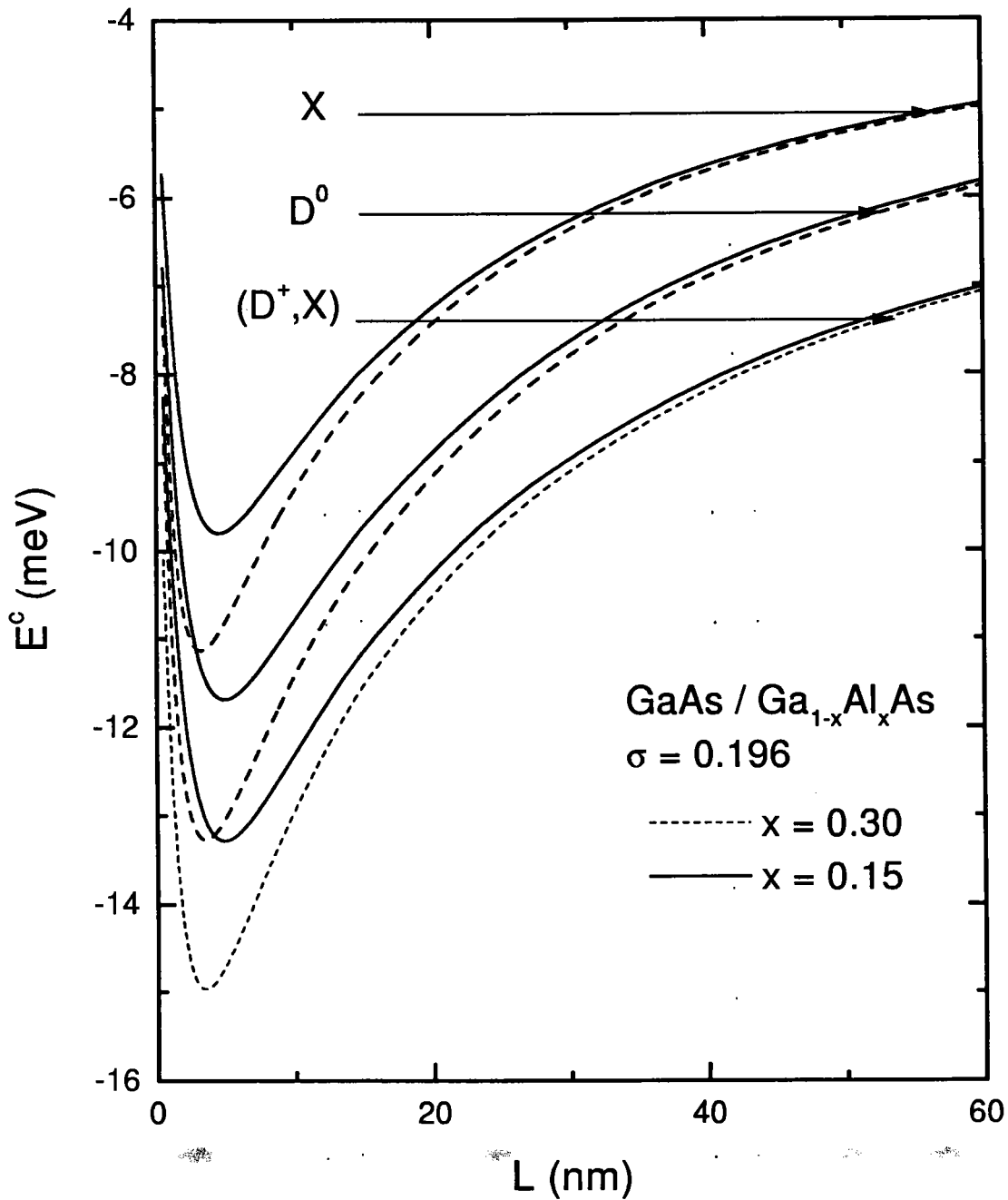


Figure (4.3) : Variation de l'énergie de corrélation du complexe, de l'exciton-trou lourd et du donneur en fonction de la largeur  $L$  d'un puits quantique de type GaAs/GaAlAs pour deux concentrations d'Aluminium  $x = 0.15$  et  $0.30$ .

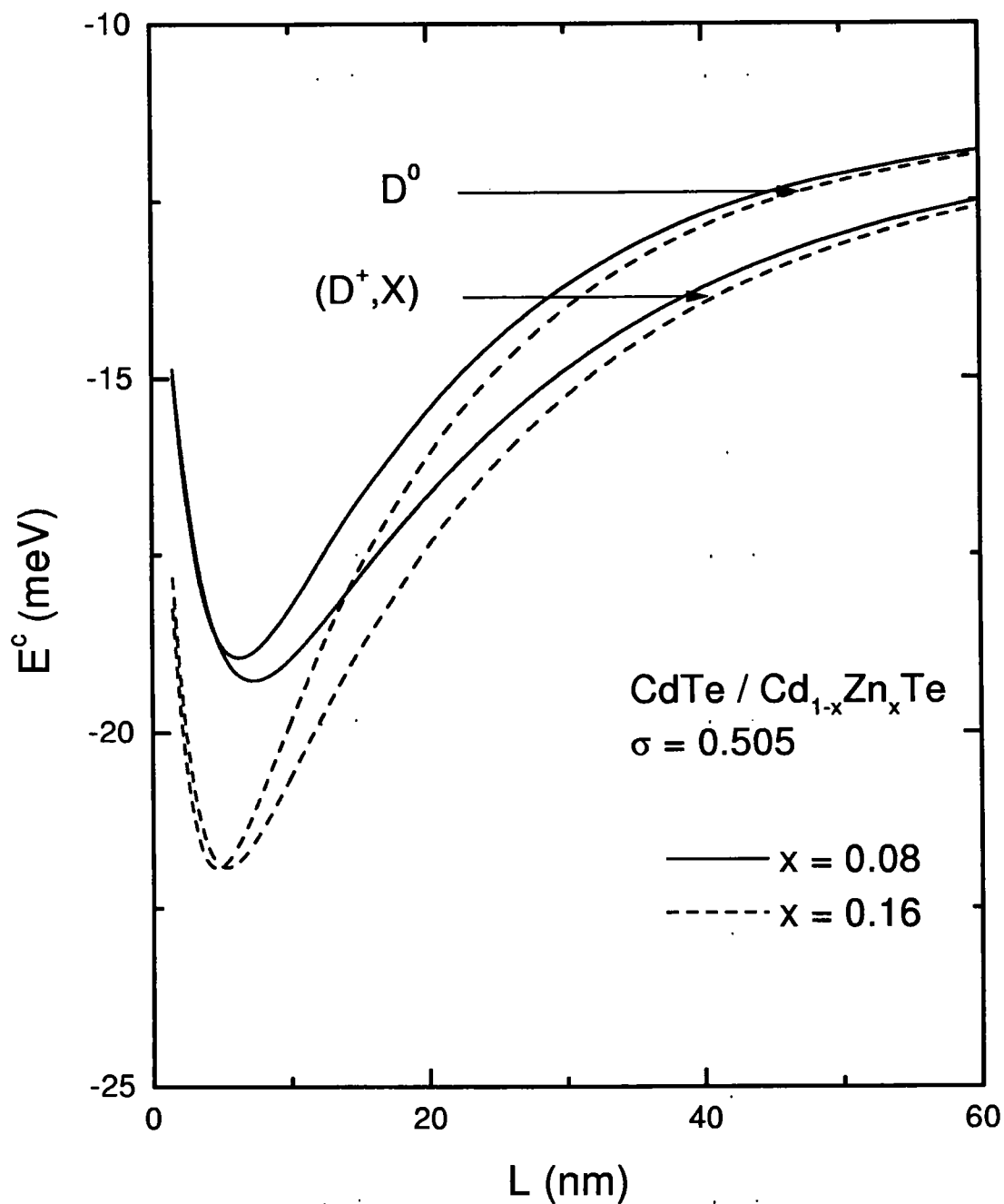


Figure (4.4) : Variation de l'énergie de corrélation du complexe, et du donneur en fonction de la largeur  $L$  d'un puits quantique de type CdTe/CdZnTe pour deux concentrations de Zn  $x = 0.08$  et  $0.16$ .

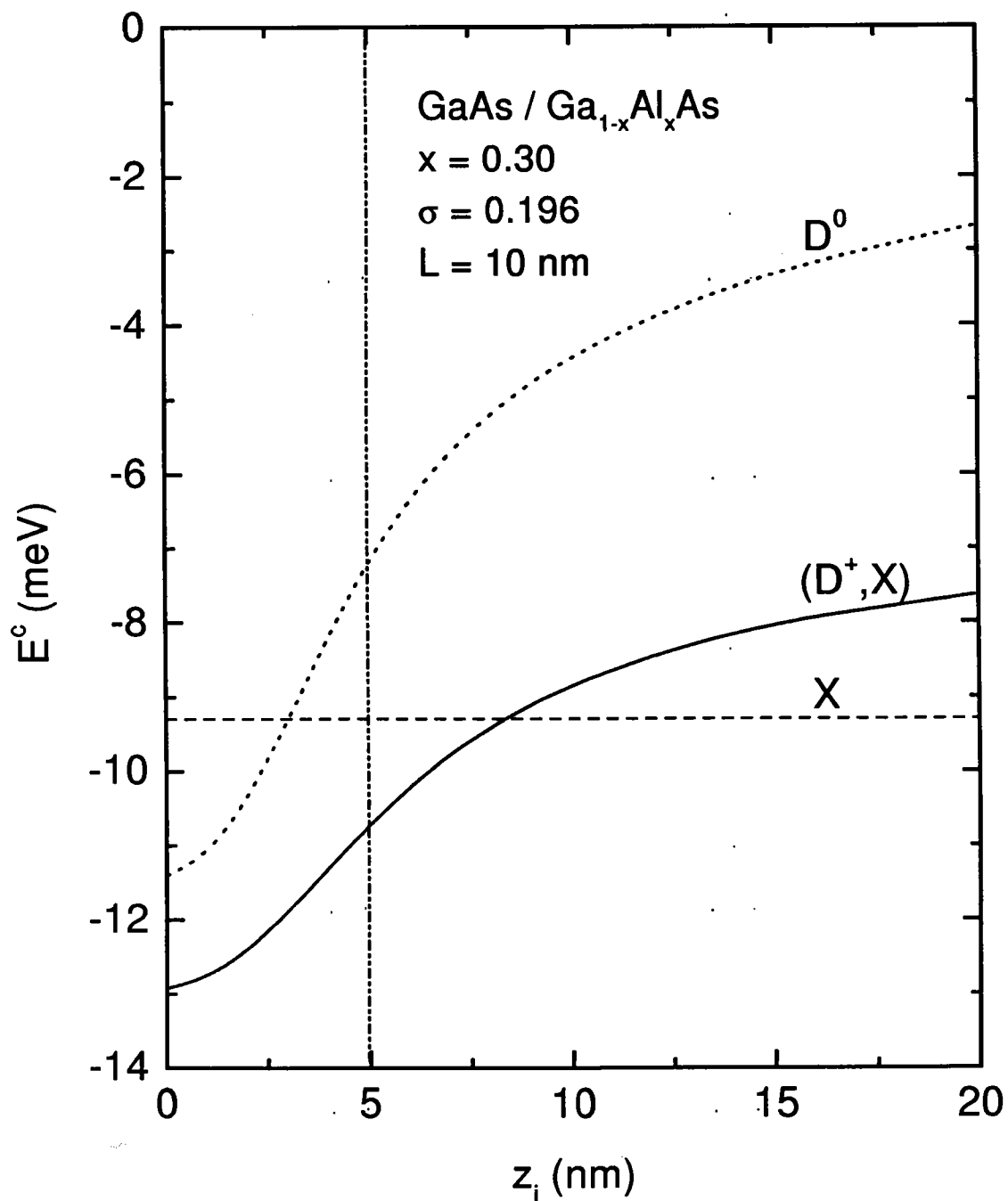


Figure (4.5) : Variation de l'énergie de corrélation du complexe, de l'exciton-trou lourd et du donneur en fonction de la position du centre donneur, pour une largeur  $L = 10$  nm.



## 4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié l'influence de la position de l'impureté et du confinement quantique sur la stabilité du complexe exciton-donneur ionisé dans un puits quantique. Nous avons utilisé une fonction d'onde d'essai à 68 termes qui tient compte de l'emplacement du centre donneur. Nous avons calculé son énergie de corrélation par comparaison avec celles du donneur neutre et de l'exciton libre. Il résulte que le complexe demeure stable par rapport à la dissociation pour une impureté ionisée ( $D^+$ ) placée au centre du puits; la stabilité est étudiée par rapport au donneur plutôt qu'à l'exciton. L'effet de confinement, lui, ne fait qu'augmenter la corrélation entre les particules. Cependant, quand l'impureté se déplace du centre vers la barrière, l'étude de la stabilité est faite par région. En effet, dans le cas d'un puits quantique de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As de 10 nm de largeur, et pour  $z_i \lesssim 3$  nm, la stabilité est discutée par rapport à  $D^0$ , alors que pour  $3 \text{ nm} \lesssim z_i \lesssim 8$  nm la stabilité est étudiée par rapport à l'exciton. Pour  $z_i \gtrsim 8$  nm le complexe devient instable.



# Chapitre 5

## ACTION DES CHAMPS EXTERIEURS SUR L'ENERGIE DE L'ETAT FONDAMENTAL DU COMPLEXE

### 5.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous nous proposons d'étudier l'influence des champs extérieurs (magnétique et électrique) sur l'énergie de l'état fondamental et sur la stabilité du complexe exciton-donneur ionisé dans un puits quantique.

Dans la première partie, nous ne nous intéressons qu'à l'effet du champ magnétique. En effet, nous précisons les expressions des termes qui s'ajoutent à l'Hamiltonien du complexe lorsqu'on applique un champ magnétique, en tenant compte du choix de la jauge. Pour le calcul de l'état fondamental, nous procédons à l'aide d'une méthode variationnelle en choisissant une fonction d'onde d'essai analogue à celle utilisée au chapitre précédent. Nous appliquons nos calculs aux puits quantiques de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As et CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te. Nous comparons ensuite l'énergie du complexe à celle d'un donneur neutre et d'un exciton libre afin de prouver sa stabilité et de montrer le mécanisme de dissociation le plus probable.

Dans la deuxième partie, nous examinons l'effet du champ électrique. Avec un choix approprié de la fonction d'onde d'essai qui tient compte de la présence du champ électrique, nous résolvons l'équation de Schrödinger du complexe. Pour le calcul le

l'état fondamental, nous utilisons 112 termes dans la fonction d'onde. Enfin, nous montrons que dans le cas des puits de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As, le champ électrique a pour effet d'éloigner l'électron du trou. Ce qui conduit à une diminution de l'énergie de corrélation du complexe. Une discussion de la stabilité sera donnée à la fin de cette partie.

## 5.2 Action du champ magnétique

En se plaçant dans les mêmes conditions qu'au chapitre précédent, l'Hamiltonien du complexe  $(D^+, X)$  dans un puits quantique en présence d'un champ magnétique  $\mathbf{B}$  appliqué parallèlement au plan des couches s'écrit :

$$\begin{aligned}
 H_{(D^+, X)} = & \frac{1}{2m_e^*} \left[ \mathbf{p}_e + \frac{e}{c} \mathbf{A}_e \right]^2 + \frac{1}{2m_h^*} \left[ \mathbf{p}_h - \frac{e}{c} \mathbf{A}_h \right]^2 \\
 & + V_e \Theta \left( \frac{L}{2} - |z_e| \right) + V_h \Theta \left( \frac{L}{2} - |z_h| \right) \\
 & - \frac{e^2}{\kappa_\infty} \left( \frac{1}{\mathbf{r}_e} - \frac{1}{\mathbf{r}_h} + \frac{1}{\mathbf{r}_{eh}} \right).
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

Par raison de simplicité, nous avons supposé que le centre donneur est placé au centre du puits, et que le milieu est non magnétique. Aussi nous n'avons pas tenu compte des effets spécifiques dus au spin.

En utilisant la jauge symétrique de Coulomb :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}, \tag{5.2}$$

l'Hamiltonien peut s'écrire sous la forme d'une somme de trois termes :

$$H_{(D^+, X)} = H_{(D^+, X)}^0 + H_{dia} + H_Z. \tag{5.3}$$

Le premier désigne l'Hamiltonien du complexe en l'absence du champ magnétique.

Le second décrit l'effet diamagnétique quadratique en champ :

$$H_{dia} = \left( \frac{eB}{2c} \right)^2 \left( \frac{\rho_e^2}{2m_e^*} + \frac{\rho_h^2}{2m_h^*} \right). \tag{5.4}$$

Alors que le dernier traduit la contribution due à l'effet Zeeman linéaire en champ :

$$H_Z = \frac{e}{c} \left( \frac{L_{ez} B}{m_e^*} - \frac{L_{hz} B}{m_h^*} \right), \tag{5.5}$$

où  $L_{ez}$  et  $L_{hz}$  traduisent, respectivement, la projection suivant l'axe de croissance du moment cinétique orbital de l'électron et du trou.

Comme la fonction d'onde d'essai choisie est indépendante des angles orientant le complexe, ce terme de Zeeman ne donnera lieu à aucune contribution à l'énergie de l'état fondamental. Donc, dans la présente étude, nous nous restreignons à la contribution diamagnétique, et nos résultats seront interprétés comme étant une valeur moyenne du spectre d'énergie réel.

Afin d'alléger l'écriture nous utilisons les unités atomiques déjà définies au chapitre précédent et le terme diamagnétique devient alors :

$$H_{dia} = \frac{\gamma^2}{8} (\rho_e^2 + \sigma \rho_h^2), \quad (5.6)$$

où  $\gamma$  traduit l'intensité du champ magnétique ou encore l'énergie de résonance cyclotronique  $\hbar\omega_c$  en unités atomiques ( $\gamma = ea_D^2 B/\hbar c = \hbar\omega_c/2Ry$ ).

### 5.2.1 Calcul variationnel de l'énergie de l'état fondamental

Nous avons calculé l'énergie de l'état fondamental en utilisant une approche variationnelle. Pour cela, nous avons choisi une fonction d'onde similaire à celle utilisée au chapitre précédent en l'absence de champs extérieurs :

$$\psi(r) = \mathcal{N} f_e(z_e) f_h(z_h) \sum_{lmnpr} C_{lmnpr} a_p(z_e) b_r(z_h) \exp(-ks/2) s^l u^m t^n \quad (5.7)$$

$$a_p(z) = z^p \exp(-\alpha_e z^2) \text{ et } b_r(z) = z^r \exp(-\alpha_h z^2). \quad (5.8)$$

Vu le choix de la fonction d'onde, nous sommes amenés à transformer notre Hamiltonien dans le nouveau système de coordonnées  $(s, t, u, z_e, z_h)$  :

$$H_{dia} = \frac{\gamma^2}{8} \left[ \frac{(s+t)^2}{4} + \sigma u^2 \right]. \quad (5.9)$$

Les paramètres variationnels linéaires  $C_{lmnpr}$  ainsi que les paramètres non-linéaires  $k$ ,  $\alpha_e$  et  $\alpha_h$  sont déterminés, de la même manière que dans le cas sans champ magnétique, en minimisant l'énergie totale de l'état fondamental. Nous aboutissons ainsi à une équation aux valeurs propres de la forme :

$$\left( \mathbf{H}_{(D^+, X)}^0 + \mathbf{H}_{dia} - E_{(D^+, X)} \mathbf{S} \right) \mathbf{C} = 0, \quad (5.10)$$

où  $(\mathbf{H}_{(D^+, X)}^0 + \mathbf{H}_{dia})$  et  $\mathbf{S}$  sont les matrices de l'Hamiltonien et de normation, respectivement.  $\mathbf{C}$  est la matrice colonne des coefficients linéaires  $C_{lmnpr}$ . Les éléments de matrices correspondant à  $\mathbf{H}_{(D^+, X)}^0$  et  $\mathbf{S}$  sont analogues à ceux en l'absence de champs à condition de positionner le donneur au centre du puits (i.e.  $z_i = 0$ ), tandis que ceux correspondant à  $\mathbf{H}_{dia}$  ont pour expression :

$$\begin{aligned} (H_{dia})_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'} &= \frac{\gamma^2}{8} S_{pr}^{p'r'} \left\{ \omega_{n+n'} \left[ \frac{1}{4} \left( J_i^{i'}(4, 1, 0) - J_i^{i'}(0, 1, 4) \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \sigma \left( J_i^{i'}(2, 3, 0) - J_i^{i'}(0, 3, 2) \right) \right] \right. \\ &\quad \left. + \omega_{n+n'+1} \left[ \frac{1}{2} \left( J_i^{i'}(3, 1, 1) - J_i^{i'}(1, 1, 3) \right) \right] \right\}. \quad (5.11) \end{aligned}$$

## 5.2.2 Résultats numériques et discussion

Dans nos calculs numérique, nous avons utilisé, dans un premier temps, une fonction d'onde d'essai dont le développement ne contient que sept termes caractérisés par les deux conditions  $l + m + n \leq 2$  et  $\{pq\} = \{00, 11\}$ . Nous minimisons l'énergie totale du système par rapport à l'ensemble des paramètres variationnels linéaires et non linéaires, puis nous conservons les valeurs finales trouvées de  $\alpha_e$ ,  $\alpha_h$ , et  $k$ . Afin d'obtenir une bonne précision sur l'énergie, nous figeons les valeurs trouvées, dans le cas de sept termes, des paramètres non linéaires dans la fonction d'onde et nous diagonalisons à nouveau le système (5.10) en augmentant le nombre de termes dans la fonction d'onde à 68, déterminés par les relations  $l + m + n \leq 5$  et  $\{pq\} = \{00, 11\}$ .

Nos résultats sont particularisés aux cas des systèmes à puits quantiques de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As et CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te. Les valeurs des paramètres physiques, utilisées dans les deux cas, sont similaires à celles prises au chapitre précédent.

En vue de mettre en évidence l'aspect quadratique de l'effet diamagnétique, nous présentons sur la figure (5.1) les variations de l'énergie totale  $E_{(D^+,X)}^{tot}$  du complexe en fonction de l'intensité du champ magnétique. Dans un puits quantique de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As (avec  $x = 0.30$ ), et pour différentes largeurs du puits, nous constatons que l'énergie totale augmente par suite du confinement uni-dimensionnel. Dans tous les cas l'énergie croît aussi avec l'intensité du champ magnétique.

Dans le but d'estimer l'influence du confinement quantique, ainsi que l'effet du champ magnétique sur la corrélation coulombienne, nous définissons "l'énergie de corrélation" en retranchant de l'énergie totale l'énergie de l'électron et du trou non interagissants, dans un puits quantique soumis à l'action d'un champ magnétique parallèle au plan des couches :

$$E_{(D^+,X)}^c = E_{(D^+,X)}^{tot} - E_e - E_h. \quad (5.12)$$

Les figures (5.2) et (5.3) traduisent les variations de l'énergie de corrélation du complexe en fonction de la largeur du puits pour trois valeurs de l'intensité du champ magnétique ( $B = 0, 5$  et  $10$  T). Comme prévu, et dans les deux matériaux GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As (avec  $x = 0.15$  et  $0.30$ ) et CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te (avec  $x = 0.08, 0.16$  et  $0.30$ ), le champ magnétique augmente la corrélation coulombienne, tandis que sa

dépendance en fonction de la profondeur du puits est accentuée au voisinage du minimum.

Afin d'étudier la stabilité du complexe par rapport aux produits de dissociation les plus probables [processus (4.36) et (4.37)], il est nécessaire de comparer l'énergie du complexe à celle du donneur neutre et de l'exciton libre. A cet effet, nous procédons à un calcul variationnel de l'énergie de corrélation de ces deux derniers systèmes.

Pour l'impureté ( $D^0$ ), nous utilisons les résultats du chapitre 3, alors que pour l'exciton nous utilisons la fonction d'onde d'essai suivante :

$$\psi_X = f_e(z_e) f_h(z_h) \sum_{pr} C_{pr} z_e^p z_h^r \exp(-\alpha_e z_e^2) \exp(-\alpha_h z_h^2) \exp(-k\rho), \quad (5.13)$$

où  $\alpha_e$ ,  $\alpha_h$ ,  $k$  et  $C_{pr}$  sont des paramètres variationnels,  $p$  et  $r$  sont des entiers positifs ou nuls choisis tels que  $p + r$  soit pair. Nous utilisons une fonction d'onde à neuf termes déterminés par  $p + r \leq 3$  pour obtenir la même précision que celle obtenue pour le complexe.

Nous rappelons que les deux conditions de stabilité de ( $D^+$ ,  $X$ ) sont :

$$E_{(D^+,X)}^c \leq E_{D^0}^c \quad (5.14)$$

$$E_{(D^+,X)}^c \leq E_X^c. \quad (5.15)$$

Sur la figure (5.4), nous montrons les variations de l'énergie de corrélation d'une impureté neutre, d'un exciton libre et du complexe en fonction du champ magnétique pour deux largeurs du puits ( $L = 10$  et  $20$  nm). Dans le cas d'un puits de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As (avec  $x = 0.30$ ), nous remarquons que l'exciton libre devient plus stable que le donneur lorsque l'intensité du champ magnétique dépasse une certaine valeur critique  $B_c$  : en effet, pour une largeur  $L = 10$  nm, l'impureté est plus stable que l'exciton pour des champs  $0 \leq B \leq B_c \simeq 2$  T, donc l'énergie du complexe doit être comparée à celle du donneur. En revanche, pour les champs supérieurs ou égaux à 2 T la situation est inversée. Pour  $L = 20$  nm,  $B_c \simeq 1.5$  T, nous pouvons conclure que la valeur critique du champ magnétique diminue quand  $L$  augmente. Cependant, la stabilité du complexe est vérifiée dans tous les cas.

Ce résultat est important dans la mesure où nous montrons que ce comportement est différent de celui observé en l'absence de champ où l'impureté est plus stable qu'un



exciton. Dans le but de trouver une explication à ce comportement, nous présentons sur la figure (5.5) les variations de l'énergie de corrélation des trois systèmes en fonction de la largeur du puits et pour deux valeurs du champ magnétique ( $B = 0$  et  $5$  T). On constate qu'au voisinage du minimum ( $L = 3.5$  nm), l'énergie de corrélation de l'exciton passe de  $-11.14$  meV quand  $B = 0$  T à  $-20.32$  meV quand  $B = 5$  T. Par ailleurs, dans le cas d'une impureté, l'énergie de corrélation passe de  $-13.24$  meV en l'absence de champ à  $-16.84$  meV quand  $B = 5$  T. Cela s'explique par le fait que l'application du champ magnétique conduit à un rétrécissement des orbitales de l'électron et du trou, ce qui entraîne un renforcement de la corrélation des deux particules. En revanche, pour une impureté, le champ n'influe que sur l'électron alors que le centre donneur est supposé très lourd et fixé au centre du puits de telle sorte qu'il n'est pas sensible au champ.

Les mêmes remarques peuvent être formulées dans le cas d'un puits quantique de type CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te [figure (5.6)], où nous comparons l'énergie de corrélation des trois systèmes en faisant varier le champ et pour deux valeurs de  $L$ .

Sur la figure (5.7), nous comparons l'énergie de corrélation du complexe à celle d'un exciton libre tout en variant la concentration  $x$  de l'Aluminium dans un puits quantique de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As, pour différentes largeurs du puits et pour un champ magnétique égale à  $2$  T. Cette figure nous permet d'estimer la position de la raie du complexe par rapport à celle d'un exciton libre :

$$hv_{(D^+,X)} = hv_X + E_{(D^+,X)}^c - E_X^c. \quad (5.16)$$

Nous remarquons que la différence  $(hv_X - hv_{(D^+,X)})$  diminue au fur et à mesure que la largeur du puits augmente, alors qu'elle n'est pas sensible à la profondeur du puits.

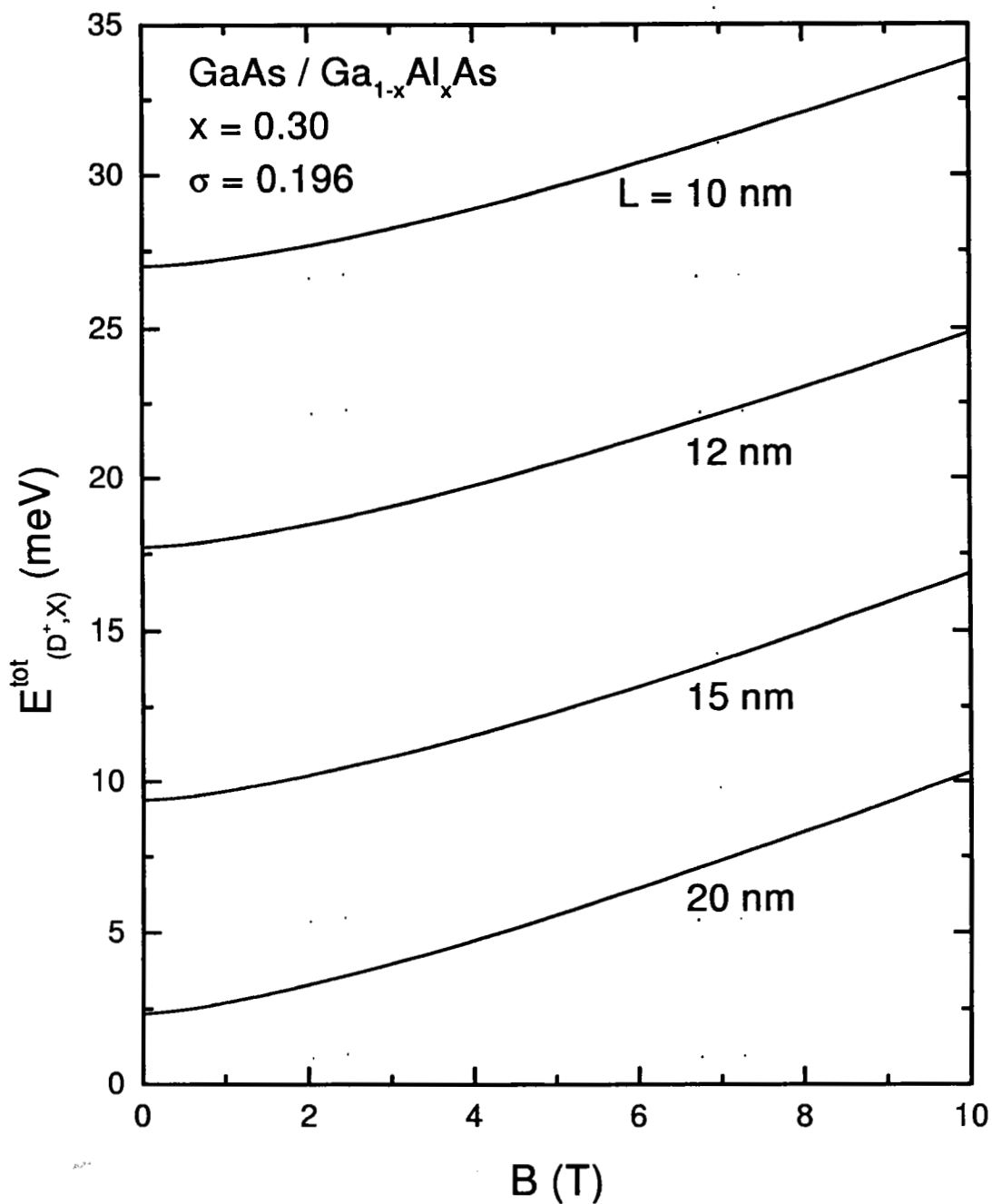


Figure (5.1) : Variation de l'énergie totale de l'état fondamental du complexe en fonction de l'intensité champ magnétique, pour différentes largeurs du puits de type GaAs/GaAlAs et pour une concentration  $x = 0.30$ .

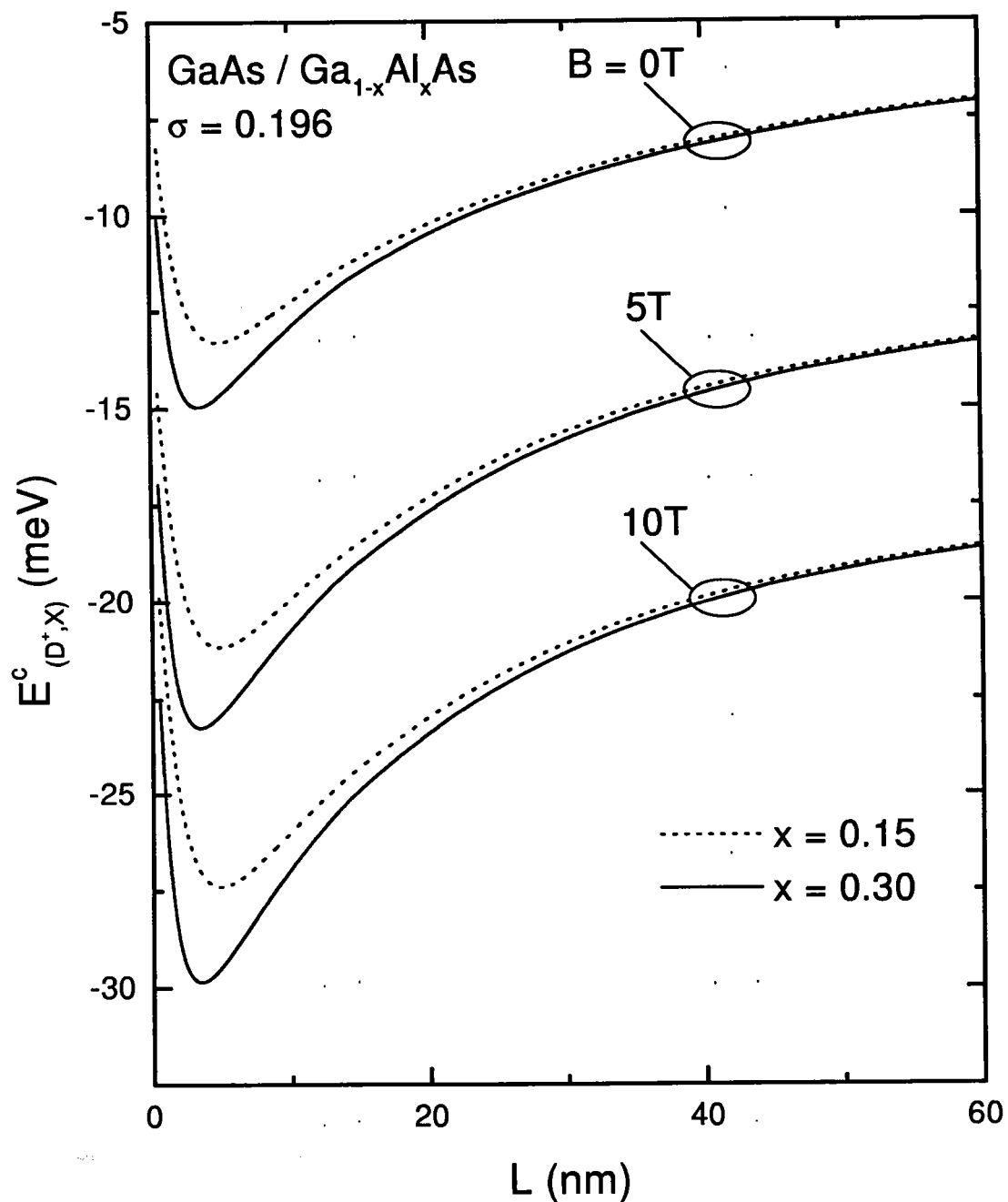


Figure (5.2) : Variation de l'énergie de corrélation du complexe en fonction de la largeur du puits quantique de type GaAs/GaAlAs pour différentes intensités du champ magnétique et pour deux concentrations  $x = 0.15$  et  $0.30$ .

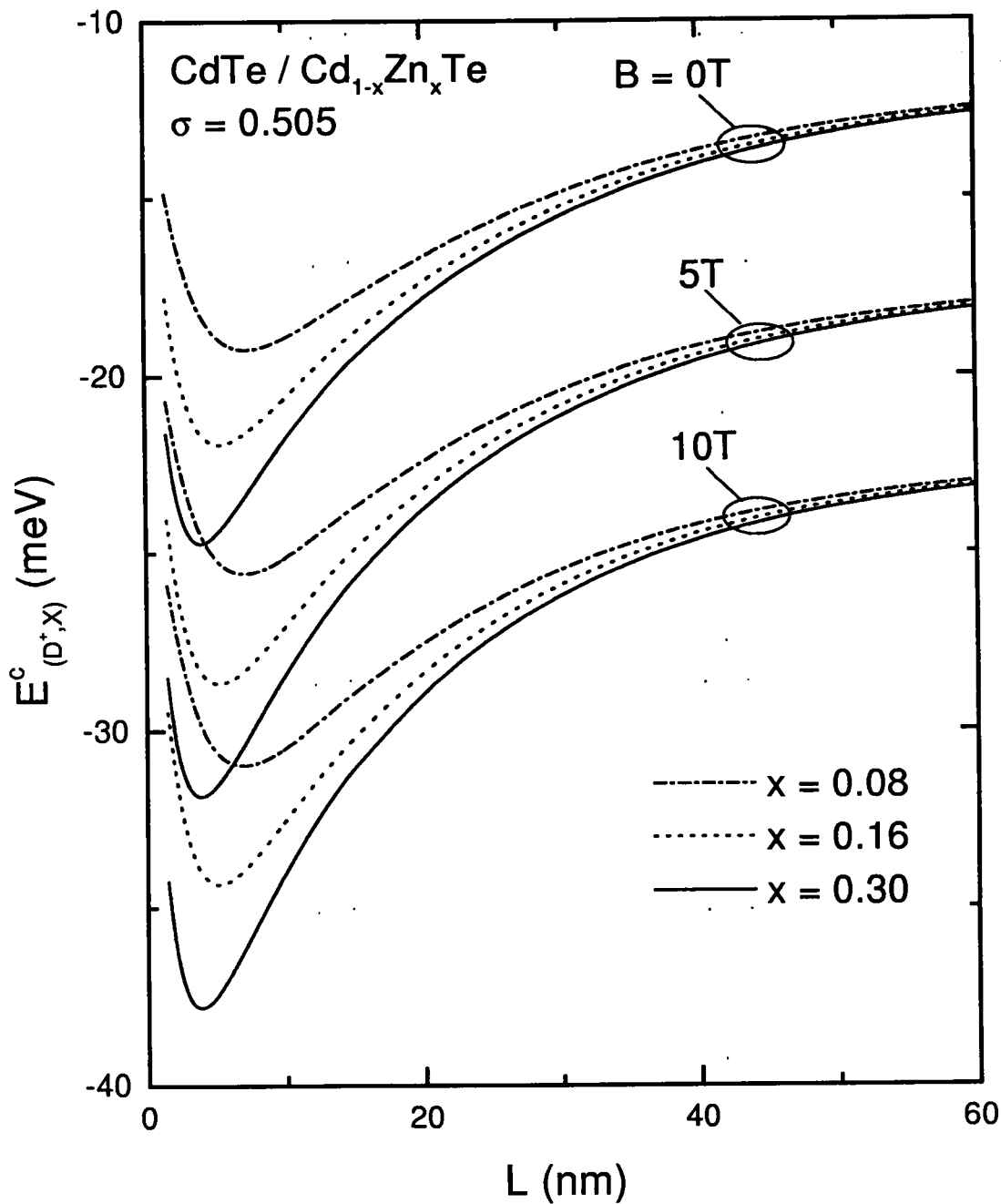


Figure (5.3) : Variation de l'énergie de corrélation du complexe en fonction de la largeur du puits quantique de type CdTe/CdZnTe pour différentes intensités du champ magnétique et pour trois concentrations  $x = 0.08, 0.16$  et  $0.30$ .

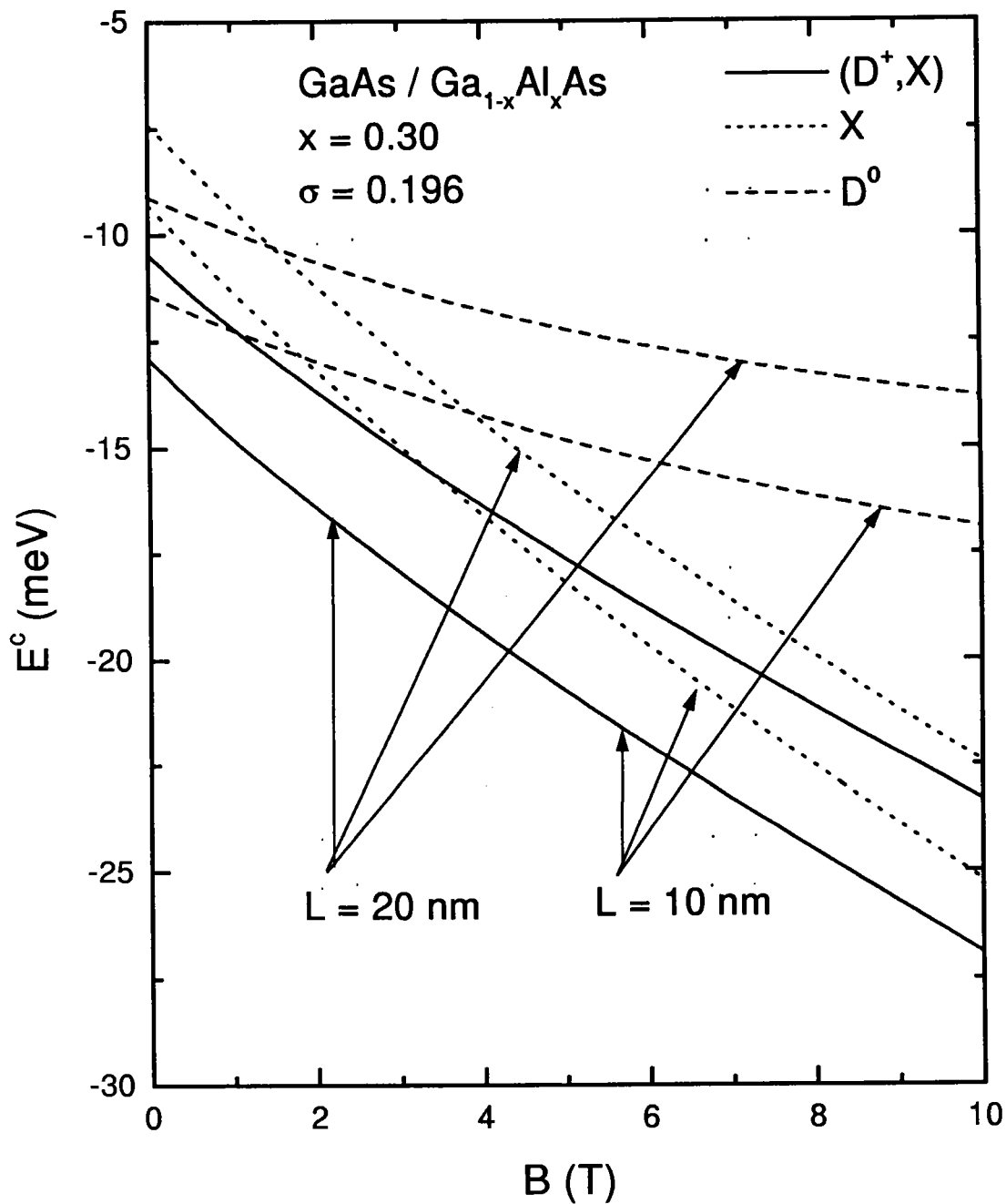


Figure (5.4) : Variation de l'énergie de corrélation du complexe, de l'exciton et du donneur neutre en fonction de l'intensité du champ magnétique, pour deux largeurs de puits de type GaAs/GaAlAs ( $L = 10$  et  $20$  nm) et pour une concentration  $x = 0.30$ .

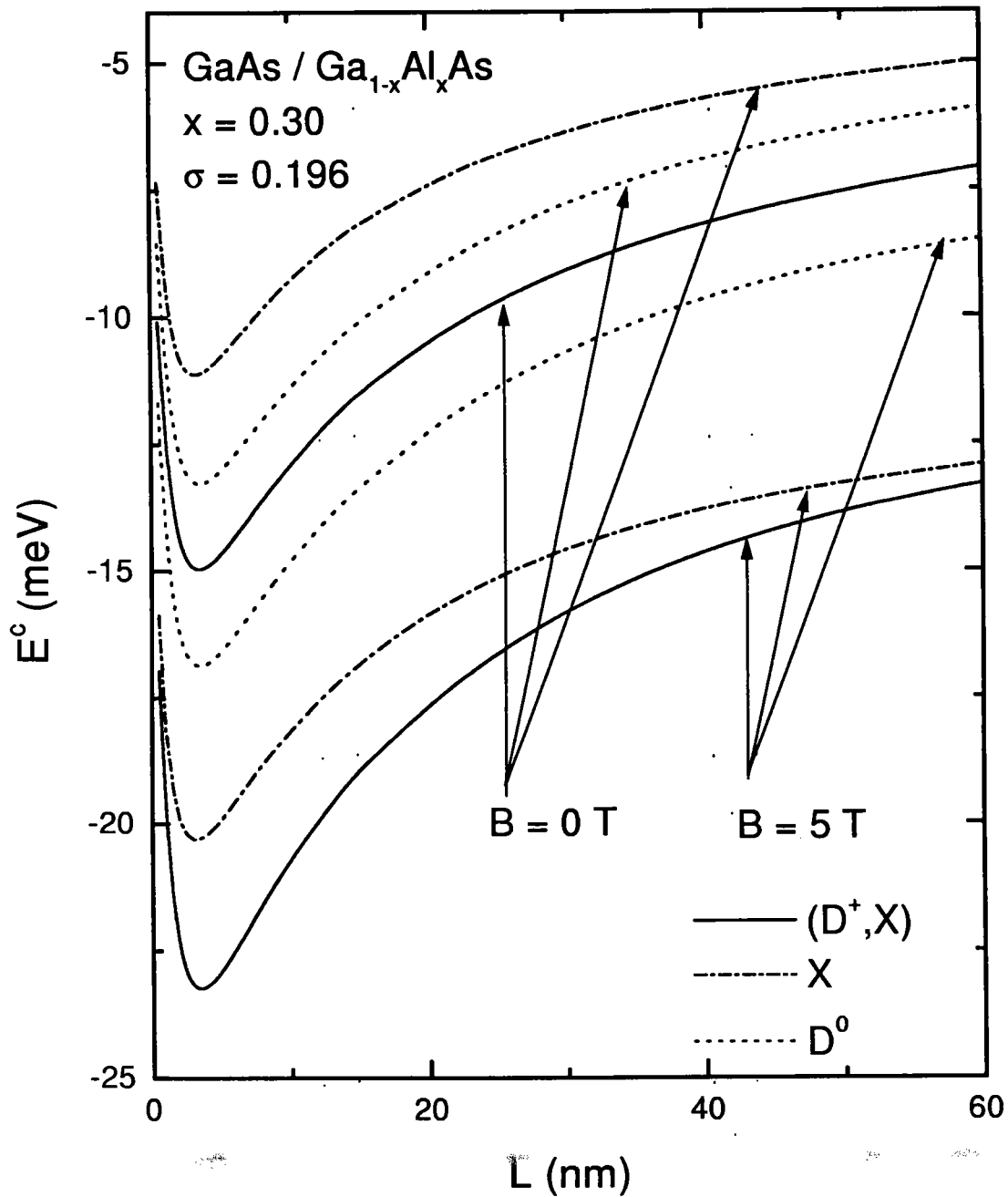


Figure (5.5) : Variation de l'énergie de corrélation du complexe, de l'exciton et du donneur neutre en fonction de la largeur du puits de type GaAs/GaAlAs, pour deux intensités du champ magnétique ( $B = 0$  et  $5$  T) et pour une concentration  $x = 0.30$ .

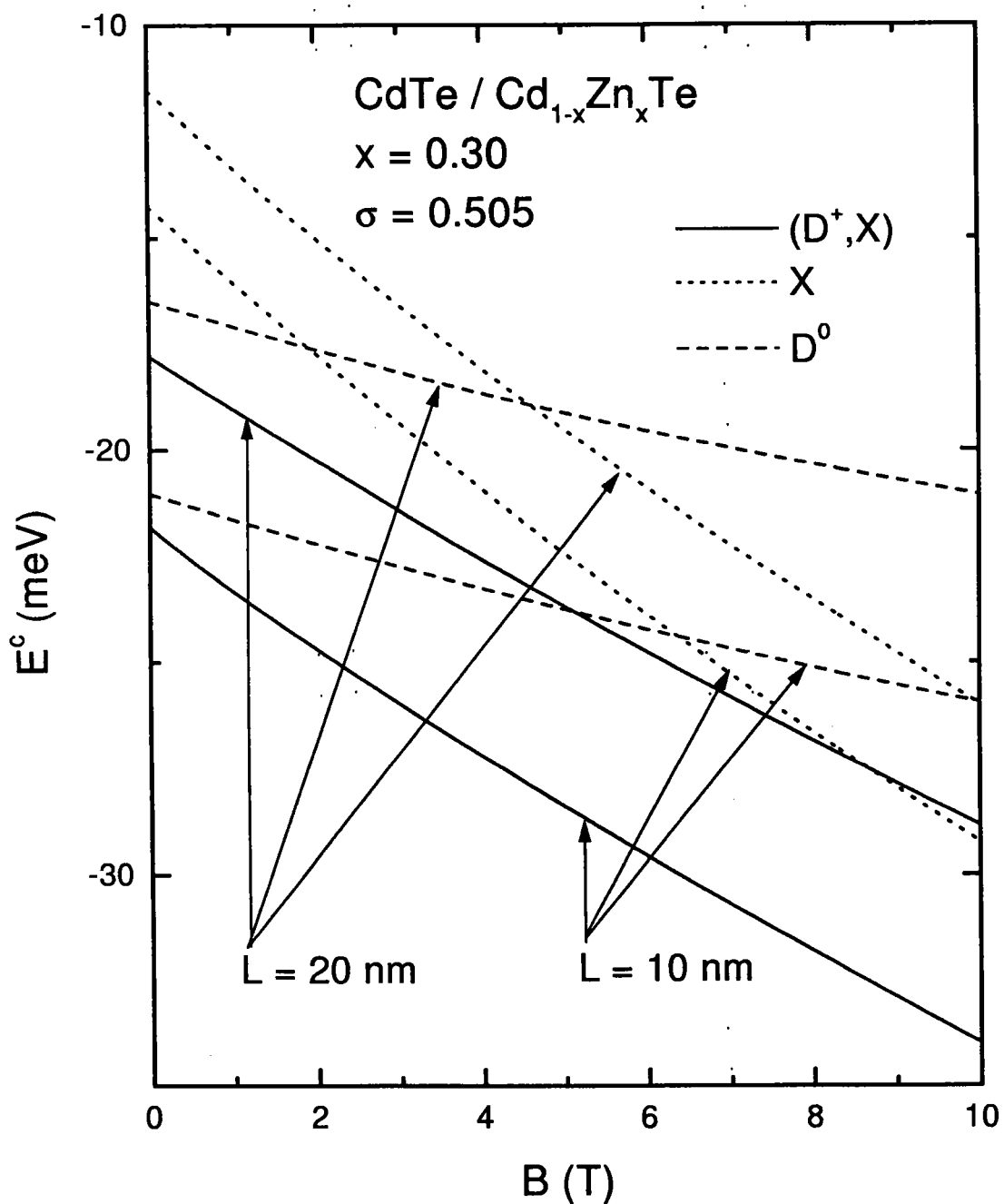


Figure (5.6) : Variation de l'énergie de corrélation du complexe, de l'exciton et du donneur neutre en fonction de l'intensité du champ magnétique, pour deux largeurs de puits de type CdTe/CdZnTe ( $L = 10$  et  $20$  nm) et pour une concentration  $x = 0.30$ .

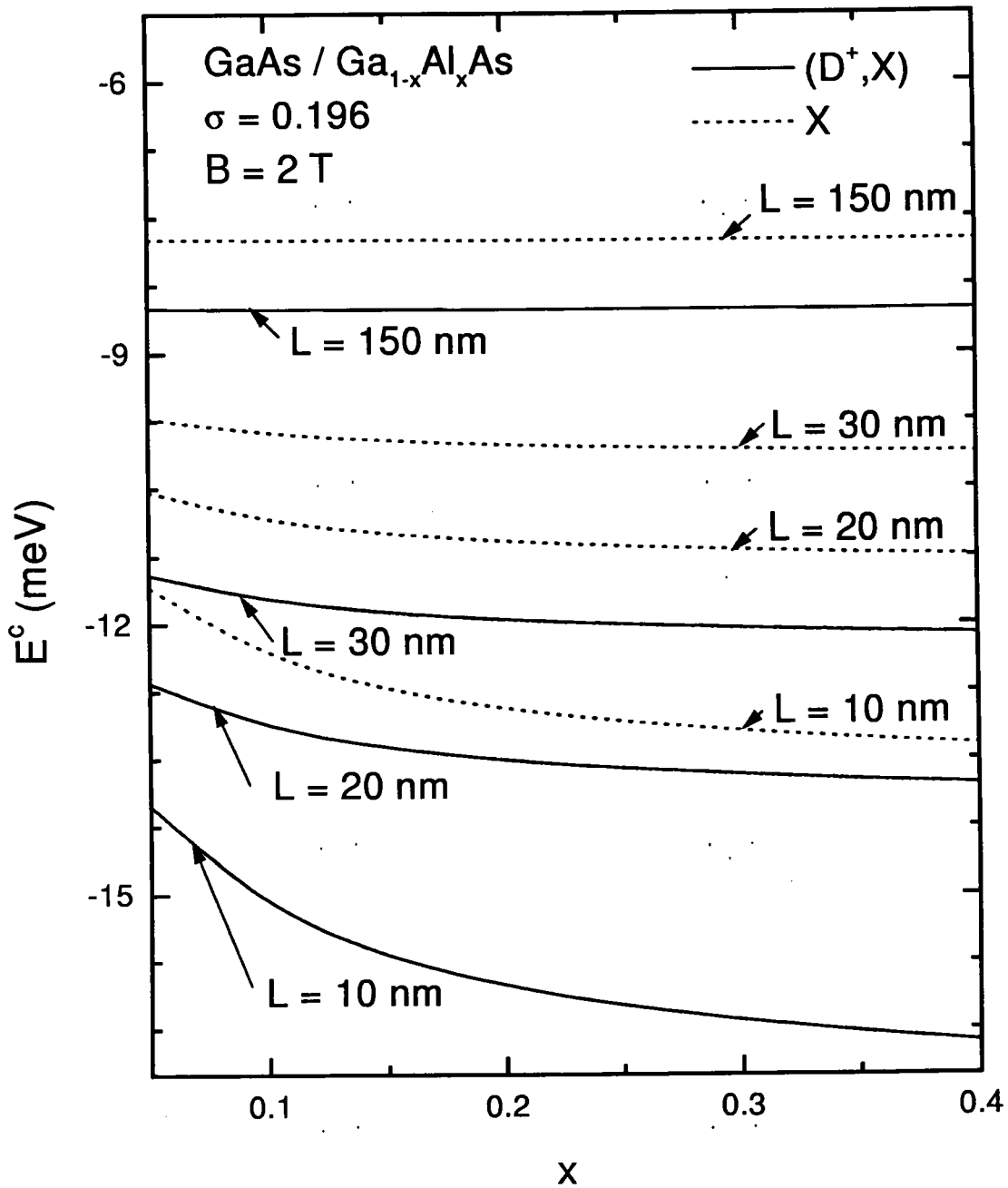


Figure (5.7) : Variation de l'énergie de corrélation du complexe et celle d'un exciton libre en fonction de la concentration  $x$  dans un puits quantique de type GaAs/GaAlAs, pour différentes largeurs du puits et pour un champ magnétique égale à 2 T.



### 5.3 Action du champ électrique

L'application d'un champ électrique uniforme aux structures à puits quantique de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As a fait l'objet de plusieurs études tant théoriques qu'expérimentales. Mendez et al. (1982) et Miller et al. (1983) ont étudié la photoluminescence d'une structure à puits quantiques simples et multiples exposés à un champ électrique parallèle à l'axe de croissance. Ils ont observé une diminution brutale du signal de luminescence, et du pic de photoluminescence avec l'augmentation de l'intensité du champ électrique. Ce résultat a été interprété par le fait que le champ électrique induit une dissociation de la paire électron-trou. En utilisant une procédure variationnelle, Bastard et al. (1983) ont pu trouver un accord qualitatif avec les observations expérimentales. A température ambiante, Wood et al. (1984) ont montré que le spectre d'absorption excitonique se déplace vers le rouge (effet Stark) quand le champ électrique est appliqué via une jonction p-i-n sur une structure à puits quantiques multiples de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As (avec  $x = 0.32$ ). Ce décalage est attribué aux modifications de l'énergie des particules libres et, par la suite, de l'énergie excitonique en fonction du champ électrique.

Comme nous l'avons évoqué au chapitre 3, en présence d'un champ électrique longitudinal  $\vec{F}$ , un puits quantique de barrières finies ne possède des états liés que si la condition  $eF / \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}(V_e - E_e^0)} \ll V_w^e - E_e^0$  est vérifiée.

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, et en négligeant les effets dus aux structures de bandes, l'Hamiltonien d'un exciton lié à une impureté ionisée dans un puits quantique en présence d'un champ électrique parallèle au plan des couches, s'écrit :

$$H_{(D^+,X)} = H_{(D^+,X)}^0 + eF(z_e - z_h), \quad (5.17)$$

Le premier terme  $H_{(D^+,X)}^0$  traduit l'Hamiltonien du complexe en l'absence de champ extérieur, alors que le second correspond au potentiel dû à l'application du champ électrique. L'origine des coordonnées et le zéro du potentiel électrostatique associé à  $\vec{F}$  sont pris au centre du puits aussi bien pour l'électron que pour le trou.

L'Hamiltonien précédent peut se réécrire sous la forme :

$$H_{(D^+,X)} = (H_{(D^+,X)})_{\parallel}^0 + (H_{(D^+,X)})_{\perp} + V_c, \quad (5.18)$$

où  $(H_{(D^+,X)})_{\parallel}^0$  représente l'opérateur énergie cinétique dans le plan, son expression est analogue à celle de l'équation (4.11).  $(H_{(D^+,X)})_{\perp}$  décrit l'Hamiltonien de l'électron et du trou non corrélés dans un puits quantique en présence du champ électrique et  $V_c$  l'opérateur énergie potentielle.

$$(H_{(D^+,X)})_{\perp} = -\frac{1}{2}\partial_{z_e}^2 - \frac{\sigma}{2}\partial_{z_h}^2 + V_e\Theta\left(\frac{L}{2} - |z_e|\right) + V_h\Theta\left(\frac{L}{2} - |z_h|\right) + eF(z_e - z_h). \quad (5.19)$$

### 5.3.1 Choix de la fonction d'onde d'essai

Nous focalisons notre étude sur la détermination de l'énergie de l'état fondamental. Pour cela, nous procédons par la méthode variationnelle. La fonction d'onde d'essai choisie est inspirée de celle utilisée par Dujardin et al. (1997) dans l'étude de l'effet du champ électrique sur le trion dans un puits quantique de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As :

$$\psi(r) = \mathcal{N} \zeta_e(z_e)\zeta_h(z_h) \sum_{lmnpr} C_{lmnpr} a_p(z_e) b_r(z_h) \exp(-ks/2) s^l u^m t^n \quad (5.20)$$

$$a_p(z) = z^p \exp(-\alpha_e z^2) \text{ et } b_r(z) = z^r \exp(-\alpha_h z^2). \quad (5.21)$$

$\zeta_e(z_e)$  et  $\zeta_h(z_h)$  présentent les fonctions d'onde de l'électron et du trou. Chacune de ces fonctions s'écrit comme le produit de la fonction d'onde de l'état fondamental d'une particule dans un puits quantique à champ nul par un terme en exponentielle décrivant le déplacement de la particule dans le même sens (ou dans le sens opposé) du champ électrique :

$$\zeta_e(z_e) = \begin{cases} A_e \exp(-\beta_e z_e) \cos\left(\sqrt{2E_e^0} z_e\right) & \text{si } |z_e| \leq \frac{L}{2} \\ B_e \exp(-\beta_e z_e) \exp\left(-\sqrt{2(V_e - E_e^0)} \cdot |z_e|\right) & \text{si } |z_e| > \frac{L}{2} \end{cases}, \quad (5.22)$$

$$\zeta_h(z_h) = \begin{cases} A_h \exp(-\beta_h z_h) \cos\left(\sqrt{\frac{2}{\sigma} E_h^0} z_h\right) & \text{si } |z_h| \leq \frac{L}{2} \\ B_h \exp(-\beta_h z_h) \exp\left(-\sqrt{\frac{2}{\sigma}(V_h - E_h^0)} \cdot |z_h|\right) & \text{si } |z_h| > \frac{L}{2} \end{cases}. \quad (5.23)$$

Les  $A_i, B_i$  (avec  $i = e$  ou  $h$ ) sont des constantes de normation déterminées par les conditions aux limites en  $z = \pm L/2$ .

Les paramètres linéaires  $C_{lmnpr}$  et non linéaires  $\alpha_e, \alpha_h$  et  $k$  sont déterminés de façon à minimiser l'énergie totale du complexe :

$$E_{(D^+,X)} = \min_{C, \alpha_e, \alpha_h, k} \frac{\langle \psi | H_{(D^+,X)} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (5.24)$$

Donc, ils doivent satisfaire aux conditions :  $\frac{\partial \langle H_{(D^+,X)} \rangle}{\partial k} = \frac{\partial \langle H_{(D^+,X)} \rangle}{\partial \alpha_e} = \frac{\partial \langle H_{(D^+,X)} \rangle}{\partial \alpha_h} = \frac{\partial \langle H_{(D^+,X)} \rangle}{\partial C_{lmnp}} = 0$ , pour toutes les valeurs possibles des indices  $l, m, n, p, r$ . La dernière équation est équivalente à une équation aux valeurs propres :

$$(\mathbf{H}_{(D^+,X)} - E_{(D^+,X)}\mathbf{S})\mathbf{C} = 0 \quad (5.25)$$

Les expressions des éléments de matrices des opérateurs  $\mathbf{H}_{(D^+,X)}$  et  $\mathbf{S}$  sont identiques à celles du cas à champ nul, à condition de remplacer  $f_e(z_e)$ ,  $f_h(z_h)$ ,  $E_e^0$  et  $E_h^0$  par  $\zeta_e(z_e)$ ,  $\zeta_h(z_h)$ ,  $E_e$  et  $E_h$ , respectivement.  $E_e$  et  $E_h$  représentent les énergies de l'état fondamental de l'électron et du trou dans un puits quantique en présence du champ électrique.

### 5.3.2 Résultats numériques et discussion

Nous calculons l'énergie de l'état fondamental du complexe en fonction de la largeur du puits, du rapport des masses  $\sigma$ , du champ électrique  $F$  et des bandes offsets  $V_e$  et  $V_h$  en utilisant une fonction d'onde d'essai à 112 termes. En présence du champ électrique, et contrairement à ce qui se passe en présence du champ magnétique, il est nécessaire de tenir compte des termes d'ordres impairs. Dans la présente étude, nous avons procédé de la même manière que dans le cas à champ nul. En effet, nous avons, tout d'abord, déterminé les paramètres variationnels non linéaires  $\alpha_e$ ,  $\alpha_h$  et  $k$  en utilisant dix termes dans la fonction d'onde, fixés par les deux relations  $l + m + n \leq 2$  et  $p + r = 0$ . Puis, nous avons inséré les valeurs trouvées dans l'équation aux valeurs propres, et nous avons déterminé l'énergie minimale et les paramètres non linéaires en prenant dans la fonction d'onde 112 termes, définis par les relations  $l + m + n \leq 5$  et  $\{pr\} = \{00, 11\}$ . Le nombre de termes dans la fonction d'onde, n'est pas choisi d'une manière aléatoire. En effet, nous avons essayé de chercher un bon compromis entre la précision de nos résultats et le temps de calcul. Nos calculs sont appliqués aux puits quantiques de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As, nous utilisons les paramètres du chapitre 4.

Nous définissons l'énergie de corrélation de  $(D^+,X)$  dans un puits quantique en présence du champ électrique par la relation suivante :

$$E_{(D^+,X)}^c = E_{(D^+,X)} - E_e - E_h. \quad (5.26)$$

Sur la figure (5.8), nous présentons les variations de l'énergie de corrélation du complexe en fonction de l'intensité du champ électrique, pour différentes largeurs du puits

( $L = 10, 15, 20, 25$  et  $30$  nm) et pour deux concentrations d'Aluminium ( $x = 0.15$  et  $0.30$ ). Nous remarquons que, pour une concentration donnée, l'énergie de corrélation décroît, en valeur absolue, avec l'intensité du champ. Cette décroissance est faible pour des puits étroits ( $L = 10$  nm), et devient significative pour des grandes largeurs de puits ( $L \gtrsim 20$  nm). Notons aussi que les courbures de  $E_{(D^+,X)}^c(F)$  changent de signe : pour des puits étroits ( $L = 10$  nm), la courbure est positive, tandis qu'elle est négative pour des puits épais. Pour les largeurs moyennes, la courbure est positive pour des faibles intensités de champ et négative pour des champs forts. Les résultats ainsi obtenus sont interprétés par l'existence d'une compétition entre le champ électrique, qui induit une séparation spatiale de l'électron et du trou, et le confinement quantique, dû aux barrières du puits, qui oblige les particules à être emprisonnées à l'intérieur. Pour une largeur de puits entre  $20$  et  $30$  nm, l'énergie de corrélation décroît, en valeur absolue, très rapidement aussi bien pour des champs faibles que pour des champs forts, cela s'explique par une localisation de l'électron et du trou de chaque côté du puits quantique, pour des champs élevés. L'inversion de courbures met en évidence la transition progressive du régime de l'effet Stark quadratique (champs faibles), au régime d'accumulation des porteurs tout près des barrières (champs forts).

La figure (5.9) illustre les variations de  $\langle |z_{eh}| \rangle$ , la moyenne de la distance séparant l'électron du trou dans la direction de l'axe de croissance, en fonction de l'intensité du champ électrique et pour une largeur de puits de  $30$  nm. Nous observons que cette moyenne augmente avec le champ.

Sur la figure (5.10), nous montrons les variations des énergies de corrélation du complexe, de l'exciton et du donneur neutre, en fonction de la largeur du puits pour trois valeurs du champ électrique ( $F = 0, 10$  et  $20$  kV/cm). A champ nul, nous retrouvons les résultats du chapitre 4, ce qui justifie le choix de notre fonction d'onde. Nous remarquons qu'au voisinage du minimum (i.e., faibles largeurs de puits), l'énergie de corrélation varie très légèrement avec l'intensité du champ, alors que son effet est prononcé pour des puits larges. Ce qui est en accord avec les résultats de la figure (5.8).

Les courbes correspondant aux variations de l'énergie de corrélation de l'exciton et du donneur sont présentées afin de discuter la stabilité du complexe face à la dissociation

aux produits les plus probables :

$$(D^+, X) \longrightarrow D^0 + h \quad (5.27)$$

$$(D^+, X) \longrightarrow X + D^+. \quad (5.28)$$

Nous constatons que  $E_{(D^+, X)}/E_{D^0} > 1$  et  $E_{(D^+, X)}/E_X > 1$ , quelque soit l'intensité du champ dans l'intervalle  $[0, 20 \text{ kV/cm}]$  et pour des largeurs de puits inférieures à 30 nm. Par conséquent, la stabilité de  $(D^+, X)$  est assurée dans cet intervalle.

Les figures (5.11) et (5.12) nous donnent une idée de la position de la raie du complexe par rapport à celle de l'exciton. En effet, sur la figure (5.11) nous reproduisons les variations de l'énergie de corrélation du complexe et de l'exciton libre en fonction de la concentration  $x$  d'Aluminium, pour différentes largeurs de puits et pour une intensité de champ égale à 20 kV/cm. Nous remarquons que l'énergie de corrélation augmente, en valeur absolue, avec  $x$  aussi bien pour l'exciton que pour le complexe et que cette augmentation est notable tant pour des puits étroits que pour des puits larges. L'écart énergétique ( $\Delta h\nu = E_X^c - E_{(D^+, X)}^c$ ) n'est pas affecté par la concentration, alors qu'il diminue quand la largeur du puits augmente.

La figure (5.12) traduit les variations de l'énergie de corrélation du complexe et de l'exciton en fonction l'intensité du champ électrique, pour deux largeurs de puits ( $L = 10$  et  $20 \text{ nm}$ ). Nous constatons que  $\Delta h\nu$  est peu affecté par le champ électrique.

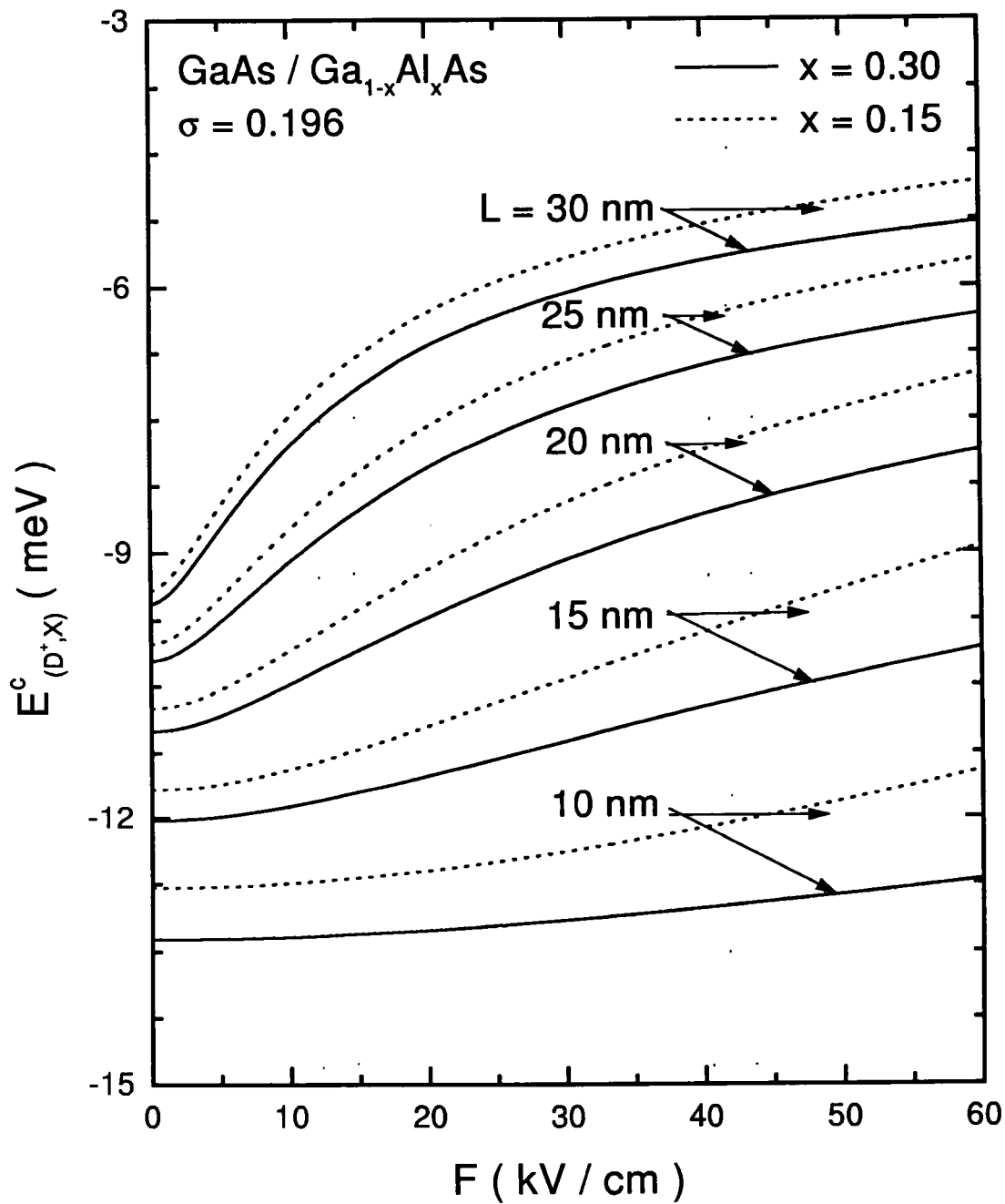


Figure (5.8) : Variation de l'énergie de corrélation du complexe en fonction de l'intensité du champ électrique, pour différentes largeurs de puits de type GaAs/GaAlAs et pour deux concentrations d'Aluminium  $x = 0.15$  et  $0.30$ .

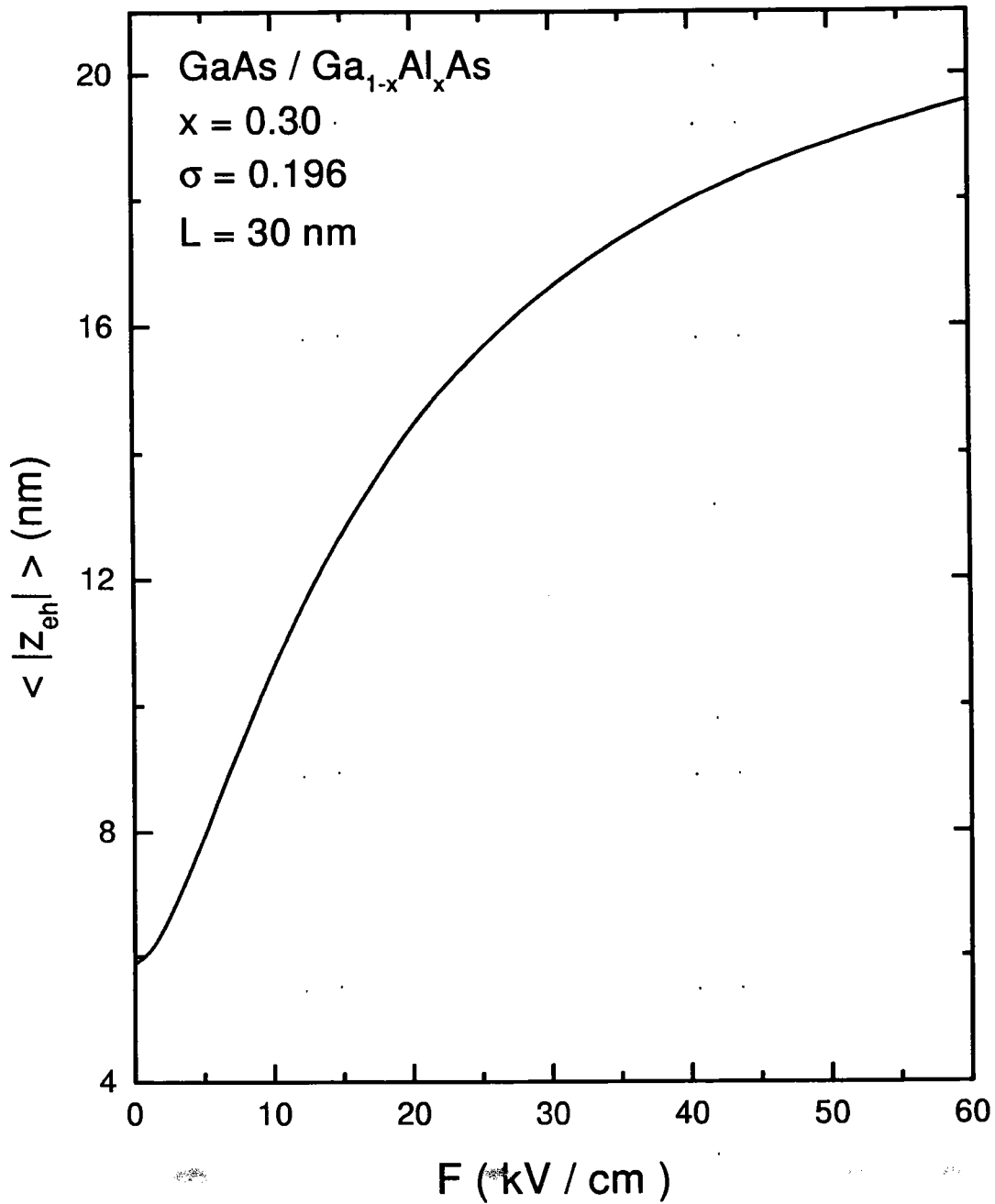


Figure (5.9) : Variation de la distance moyenne séparant l'électron du trou suivant la direction de l'axe de croissance en fonction du champ électrique, pour une largeur de puits de type GaAs/GaAlAs de 30 nm et pour une concentration  $x = 0.30$ .

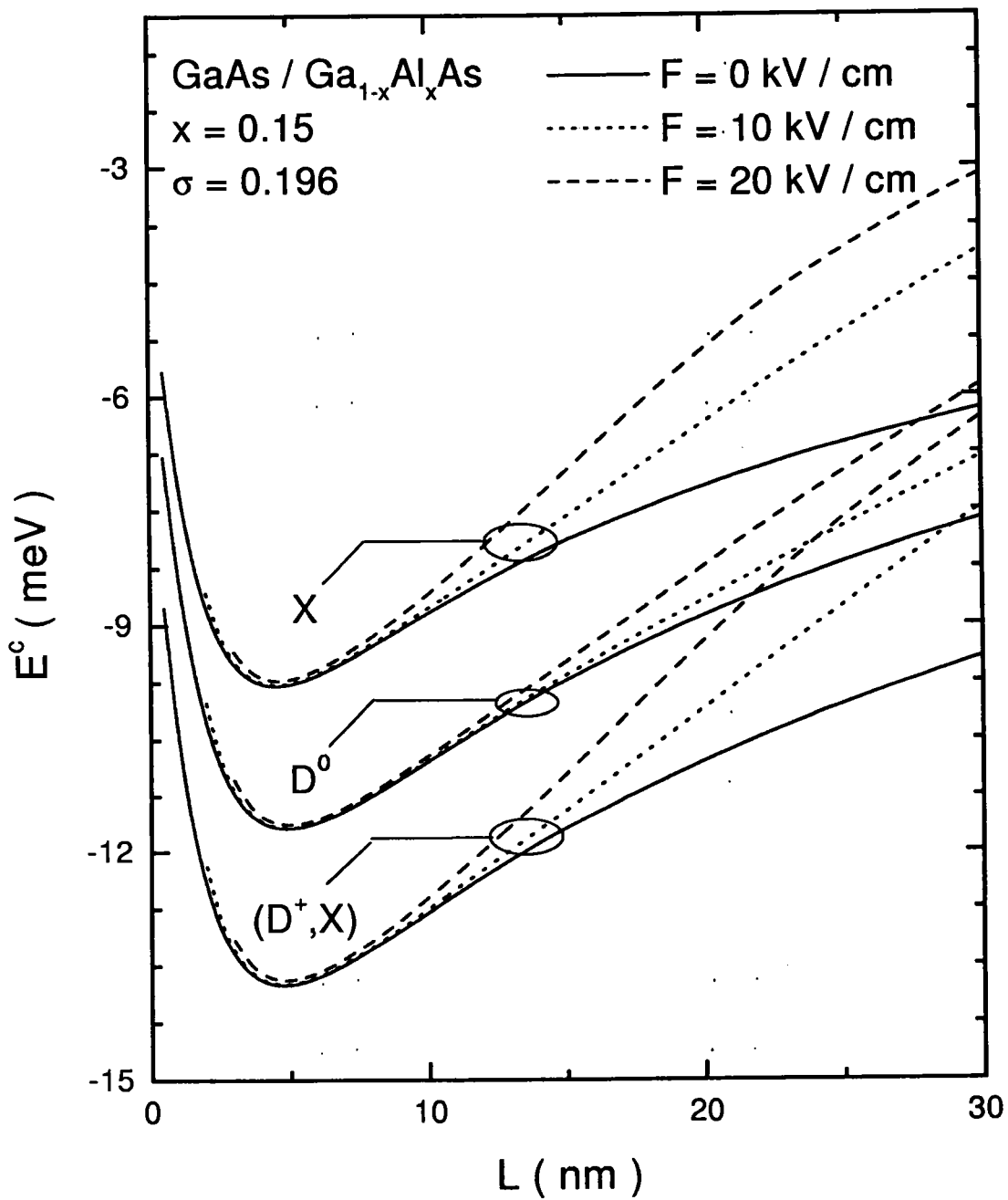


Figure (5.10) : Variation de l'énergie de corrélation du complexe, exciton et du donneur en fonction de la largeur du puits quantique de type GaAs/GaAlAs pour différentes intensités du champ électrique et pour une concentration  $x = 0.15$ .



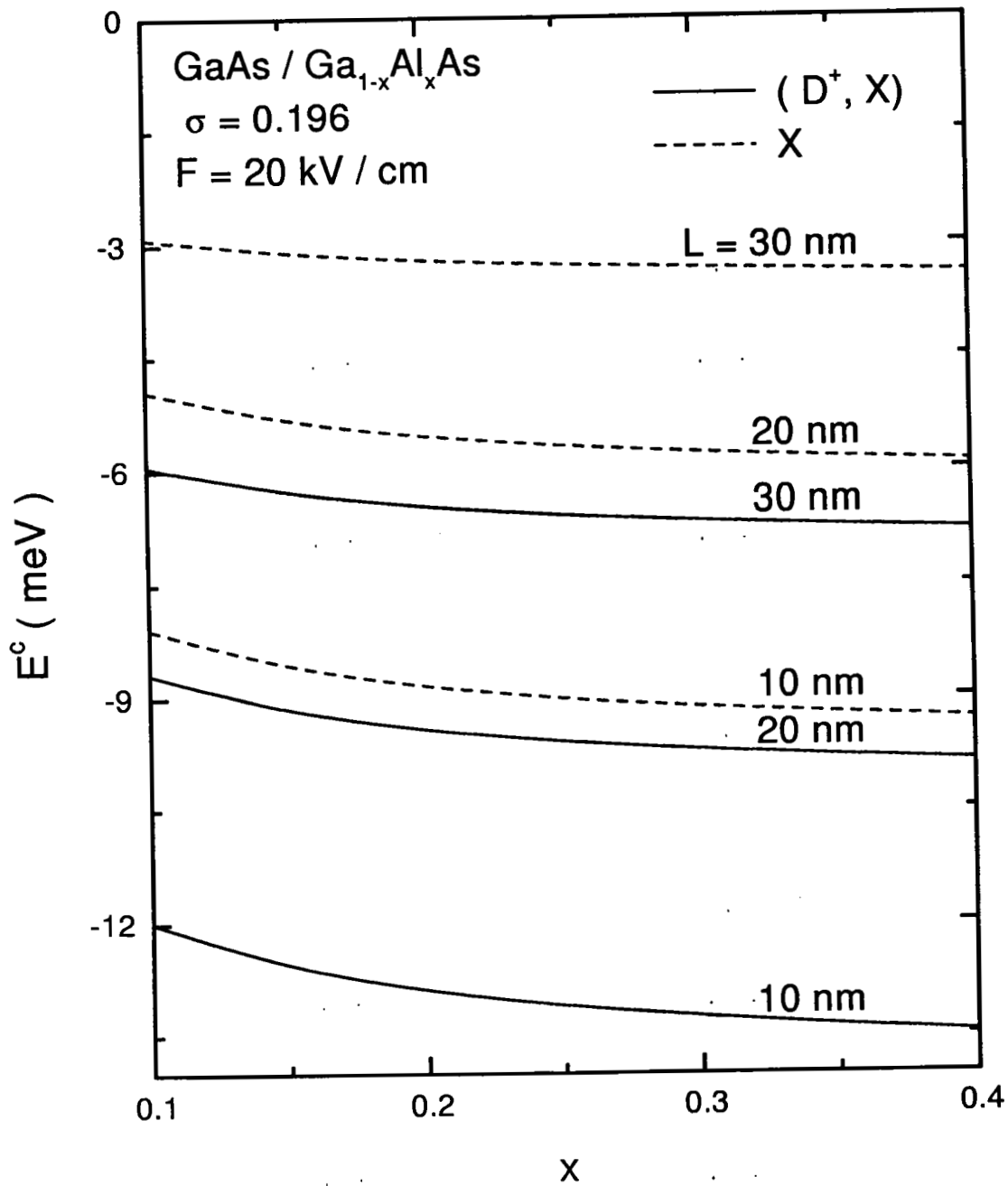


Figure (5.11) : Variation de l'énergie de corrélation du complexe et celle d'un exciton libre en fonction de la concentration  $x$  dans un puits quantique de type GaAs/GaAlAs, pour différentes largeurs du puits et pour un champ électrique égal à 20 kV/cm.

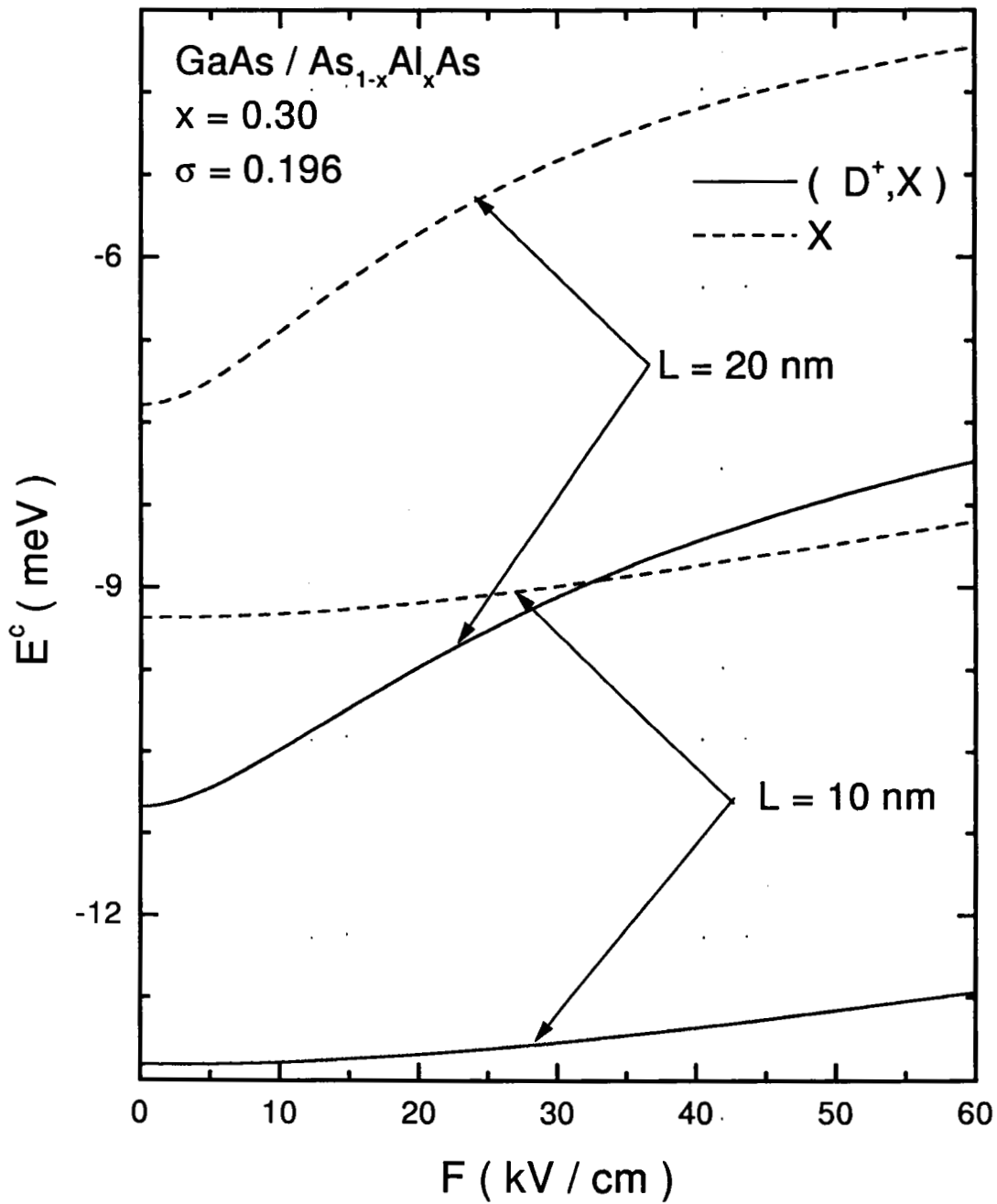


Figure (5.12) : Variation de l'énergie de corrélation du complexe et celle de l'exciton en fonction de l'intensité du champ électrique, pour deux largeurs de puits de type GaAs/GaAlAs ( $L = 10$  et  $20 \text{ nm}$ ) et pour une concentration  $x = 0.30$ .

## 5.4 Conclusion

Nous avons étudié l'effet des champs extérieurs ( magnétique et électrique), appliqués parallèlement à l'axe de croissance d'un puits quantique, sur l'énergie de corrélation et sur la stabilité de l'exciton lié à un donneur ionisé.

Nous avons mis en évidence l'effet diamagnétique qui ne fait qu'augmenter l'énergie de corrélation du complexe. Contrairement à ce qui se passe en l'absence de champ magnétique, où l'énergie d'une impureté neutre est toujours plus grande que celle d'un exciton, nous remarquons l'existence d'une valeur de champ critique  $B_c$  à partir de laquelle la situation est renversée. Cette valeur critique diminue quand la largeur du puits augmente. Par conséquent, la stabilité du complexe doit être tantôt étudiée par rapport à l'impureté, tantôt par rapport à l'exciton.

La stabilité du complexe est vérifiée, à la fois dans les puits quantiques de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As et CdTe/cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te, quelques soient les dimensions du puits et dans la gamme des champs exploitée.

En présence d'un champ électrique, nous avons constaté que l'énergie de corrélation du complexe est peu modifiée par l'intensité du champ pour des puits étroits, alors qu'une réduction significative de l'énergie a lieu pour des puits larges. Ceci est expliqué par l'existence d'une compétition entre le champ électrique qui tend à éloigner l'électron du trou et le confinement quantique qui tend à les piéger à l'intérieur du puits.

L'énergie de l'état fondamental du complexe est supérieure, en valeur absolue, à celles du donneur et de l'exciton, d'où la stabilité du complexe dans les gammes de champs et de largeurs de puits exploitées.





## Chapitre 6

# CONCLUSION GENERALE

L'essentiel de notre travail a été consacré à l'étude de l'état fondamental d'une impureté de type donneur ( $D^0$ ) et d'un exciton lié à une impureté ionisée ( $D^+, X$ ) dans un puits quantique fini en présence de champs magnétique et électrique et en tenant compte du couplage électron-phonon.

Dans le second chapitre, nous avons rappelé l'approximation de la fonction enveloppe d'un électron dans un semi-conducteur, en présence d'une perturbation extérieure lentement variable. Puis, nous avons établi l'équation de la masse effective du complexe exciton-donneur ionisé dans un puits quantique. Enfin, nous avons fait une étude bibliographique sur le complexe dans les semi-conducteurs massifs et confinés.

Dans le troisième chapitre, nous avons examiné, dans le cadre de l'approximation de la masse effective, l'effet de la position du centre donneur, des champs extérieurs et du couplage électron-phonon sur l'énergie de l'état fondamental d'une impureté neutre dans un puits quantique. Nous avons utilisé une procédure variationnelle afin de calculer l'énergie de corrélation du donneur, avec un choix approprié de la fonction d'onde d'essai dans chaque cas. L'énergie de corrélation diminue lorsque le centre d'impureté s'éloigne du centre du puits. Lorsqu'on applique un champ magnétique, nous remarquons un renforcement de la liaison de l'électron au centre ( $D^+$ ) à cause du rétrécissement des orbitales de l'électron. Quant au champ électrique, il tend à réduire cette liaison : cette réduction est d'autant plus importante que la largeur du

puits augmente. Enfin, nous avons abordé le problème du couplage électron-phonon en utilisant une nouvelle méthode qui présente l'avantage d'être applicable dans le cas du couplage faible, intermédiaire et fort. Les résultats montrent que la contribution polaronique à l'énergie de liaison du donneur est très importante pour les largeurs de puits où la localisation de l'électron est importante.

L'étude de l'effet de la position du centre donneur à l'intérieur du puits sur la stabilité du complexe exciton-donneur ionisé a été l'objet du quatrième chapitre. Nous avons construit une fonction d'onde qui tient compte de la position du centre donneur, et nous avons calculé, par une approche variationnelle, l'énergie de l'état fondamental du complexe en utilisant 68 termes dans la fonction d'onde. Nous avons appliqué nos résultats aux puits quantiques de type GaAs/GaAlAs et CdTe/CdZnTe.

Pour une impureté placée au centre, nous avons comparé l'énergie de corrélation du complexe à celle du donneur neutre et d'un exciton libre. Cette étude nous a permis de conclure que le processus de dissociation le plus favorable est celui qui donne lieu à une impureté neutre et un trou. L'effet de confinement quantique ne fait qu'augmenter la corrélation entre les particules. Toutefois, l'étude de la stabilité du complexe dépend de la position du centre donneur. En effet, pour une impureté proche du centre du puits la stabilité est assurée et discutée par rapport au donneur. Pour une impureté peu éloignée de la barrière du puits, la stabilité est assurée également, mais elle est étudiée par rapport à l'exciton. Enfin pour un centre donneur placé dans le matériau barrière et loin de l'interface, le complexe devient instable.

Dans le dernier chapitre, nous avons étudié l'effet des champs extérieurs sur l'énergie de corrélation et la stabilité du complexe. Nous avons montré que le champ magnétique conduit à un renforcement de l'énergie de l'état fondamental, via le terme diamagnétique, tandis que le champ électrique tend à l'affaiblir. Le résultat essentiel est que pour une largeur donnée de puits, il existe une intensité critique du champ magnétique  $B_c$  à partir de laquelle l'exciton devient plus stable que le donneur. Par conséquent, le processus de dissociation le plus favorable du complexe est celui qui donne lieu à un exciton et un centre donneur. Cette valeur critique diminue quand la largeur du puits augmente.

En présence du champ électrique, nous avons constaté que la dépendance en champ

de l'énergie de corrélation est plus importante pour des puits larges que pour des puits étroits. La stabilité du complexe est bien assurée pour les champs (électrique ou magnétique) ainsi que pour les largeurs de puits exploitées.

Dans un avenir proche, nous envisageons de poursuivre ce travail par l'étude des propriétés optiques du complexe dans un puits quantique en présence de champs extérieurs. Nous nous attendons à ce que le confinement quantique augmente l'intensité d'oscillateur du complexe par rapport à celle d'un exciton libre. Ensuite, nous étudierons l'effet des phonons optiques longitudinaux sur le complexe dans les semi-conducteurs massifs et puits quantiques. Nous chercherons une fonction d'onde simple contenant moins de paramètres variationnels et qui nous permette de trouver de bons résultats.





# Appendice A

## Particule dans un puits quantique en présence des champs extérieurs

Dans cet appendice, nous étudions l'effet d'un champ magnétique et d'un champ électrique sur l'énergie d'un électron dans un puits quantique de semi-conducteur. Cette étude nous a servi pour le calcul de l'énergie de corrélation du complexe.

### A.1 Action du champ magnétique

L'état d'un électron dans un puits quantique en présence d'un champ magnétique, appliqué parallèlement au plan des couches, peut être décrit à partir de la fonction d'onde  $\psi_e(\mathbf{r})$  qui est solution de l'équation de Schrödinger suivante :

$$\left[ \frac{1}{2m_e^*} (\mathbf{p}_e + \frac{e}{c} \mathbf{A})^2 + V_e(z) \right] \psi_e(\mathbf{r}) = E_e \psi_e(\mathbf{r}), \quad (\text{A.1})$$

où  $m_e^*$  est la masse effective de l'électron,  $V_e(z)$  représente la profondeur du puits vue par l'électron.  $\mathbf{p}_e$  est le vecteur d'impulsion, alors que  $(\mathbf{p}_e + \frac{e}{c} \mathbf{A})$  est la quantité de mouvement généralisée.

Pour un champ magnétique  $\mathbf{B}$  dirigé suivant l'axe ( $z$ ), le potentiel vecteur  $\mathbf{A}$  s'écrit, dans la jauge de coulomb, comme suit :

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} = \frac{B}{2} (-y, x, 0). \quad (\text{A.2})$$

Par conséquent, le mouvement de l'électron peut être séparé en un mouvement dans

le plan  $(x, y)$  et l'autre suivant la direction  $z$  :

$$\left[ \frac{1}{2m_e^*} \left( p_{ex} - \frac{eB}{2c} y \right)^2 + \frac{1}{2m_e^*} \left( p_{ey} + \frac{eB}{2c} x \right)^2 \right] \chi_e(x, y) = E_{ep} \chi_e(x, y), \quad (\text{A.3})$$

$$\left( \frac{p_{ez}^2}{2m_e^*} + V_e(z) \right) f_e(z) = E_e^0 f_e(z), \quad (\text{A.4})$$

avec  $\psi_e(\mathbf{r}) = \chi_e(x, y) f_e(z)$  et  $E_e = E_e^0 + E_{ep}$ .

Les solutions de l'équation (A.4) sont exactes :

$$f_e(z) = \begin{cases} A_e \cos(\sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2} E_e^0} z) & \text{si } |z| \leq \frac{L}{2} \\ B_e \exp(-\sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2} (V_e - E_e^0)} |z|) & \text{si } |z| > \frac{L}{2} \end{cases}, \quad (\text{A.5})$$

où  $A_e$  et  $B_e$  sont des constantes de normations qui satisfont les conditions de continuité de  $f_e(z)$  et de sa dérivée aux interfaces.

Afin de déterminer les états propres de la particule dans le plan  $(x, y)$ , nous définissons l'opérateur  $\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p}_{exy} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$ , dont les composantes sont :

$$\boldsymbol{\pi} = \begin{cases} \pi_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \frac{eB}{2c} y \\ \pi_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - \frac{eB}{2c} x \end{cases}. \quad (\text{A.6})$$

Les composantes  $\pi_x$  et  $\pi_y$  commutent avec l'Hamiltonien  $H$  de l'électron, par contre elles ne commutent pas mutuellement. Par conséquent, seul  $\pi_x$  et  $H$  ou  $\pi_y$  et  $H$  peuvent être diagonalisés dans une même base de fonctions propres.

Nous avons :

$$\left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \frac{eB}{2c} y \right) \chi_e(x, y) = \hbar k_x \chi_e(x, y). \quad (\text{A.7})$$

Les solutions de cette équation sont des fonctions de la forme :

$$\chi_e(x, y) = \mathcal{N} \exp(ik_x x) \exp\left(-i \frac{eB}{2c\hbar} xy\right) \varphi(y), \quad (\text{A.8})$$

où  $\mathcal{N}$  est une constante de normation.

En introduisant cette solution dans l'équation (A.3), on trouve que  $\varphi(y)$  vérifie l'équation différentielle suivante :

$$\frac{\partial^2 \varphi(y)}{\partial y^2} + \frac{2m_e^*}{\hbar^2} \left[ E_{ep} - \frac{m_e^*}{2} \left( \frac{eB}{m_e^* c} \right)^2 \left( y - \frac{c\hbar}{eB} k_x \right)^2 \right] \varphi(y) = 0. \quad (\text{A.9})$$

De cette équation, nous remarquons que l'électron effectue un mouvement circulaire dans le plan perpendiculaire à la direction du champ autour du point  $y_0 = \frac{c\hbar}{eB}k_x$ . La pulsation circulaire  $\omega_e$ , appelée fréquence cyclotronique, dépend du champ magnétique et de la masse effective  $m_e^*$  :  $\omega_e = \frac{eB}{m_e^*c}$ .

L'énergie de l'électron dans le plan (x,y) est quantifiée, et prend les valeurs suivantes :

$$E_{ep} = \hbar\omega_e(N + \frac{1}{2}) \quad \text{où } N \geq 0. \quad (\text{A.10})$$

L'expression de la fonction d'onde  $\varphi(y)$  est donnée par :

$$\varphi(y) = \exp\left[-\frac{eB}{2\hbar c}(y - y_0)^2\right] H_n\left[\left(\frac{eB}{\hbar c}\right)^{\frac{1}{2}}(y - y_0)\right], \quad (\text{A.11})$$

où  $H_n$  sont les polynômes d'Hermite :

$$H_n = (-1)^n \exp(x^2) \frac{\partial^n}{\partial x^n} \exp(-x^2). \quad (\text{A.12})$$

En conclusion, le mouvement d'un électron dans un puits quantique en présence d'un champ magnétique parallèle au plan des couches est totalement quantifié : dans la direction  $z$ , la quantification est due au confinement quantique, tandis que dans le plan, la quantification est due à la présence du champ magnétique. Cette dernière quantification est à l'origine d'une série de phénomènes magnéto-oscillatoires.

## A.2 Action du champ électrique

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, l'Hamiltonien d'un électron dans un puits quantique en présence d'un champ électrique  $\vec{F}$ , appliqué parallèlement au plan des couches, s'écrit :

$$H_e = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_{\mathbf{r}}^2 + V_e(z) + eFz. \quad (\text{A.13})$$

L'origine des distances et du potentiel électrostatique est choisi au centre du puits quantique.

Puisque le mouvement de l'électron est libre dans le plan, alors la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger correspondant à l'Hamiltonien précédent s'écrit comme suit :

$$\psi_e(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\mathbf{k}_{e\parallel}\rho) \chi_e(z), \quad (\text{A.14})$$

où  $\chi_e(z)$  vérifie l'équation de Schrödinger suivante :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \partial_{z^2}^2 + V_e(z) + eFz \right] \chi_e(z) = E_e \chi_e(z). \quad (\text{A.15})$$

Nous supposons que la condition d'existence d'un état lié en présence d'un champ électrique est bien vérifiée (voir chapitre 3) :

$$eFL / \sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2} (V_e - E_e^0)} \ll V_e - E_e^0. \quad (\text{A.16})$$

Lorsque cette condition est satisfaite, la fonction d'onde de l'électron décroît très rapidement à l'intérieur de la barrière de sorte que son amplitude devienne négligeable quand la hauteur de la barrière est abaissée par le champ électrique.

Afin de simplifier les calculs, nous utilisons les unités atomiques. Nous prenons le rayon de Bohr effectif  $a_D = \kappa \hbar^2 / m_e^* e^2$  comme unité de longueur,  $2Ry = \hbar^2 / m_e^* a_D^2$  comme unité d'énergie et  $F_0 = e / \kappa a_D^2$  comme unité de champ. L'équation de Schrödinger (A.15) s'écrit alors :

$$\left[ -\frac{1}{2} \partial_{z^2}^2 + V_e(z) + f z \right] \chi_e(z) = E_e \chi_e(z). \quad (\text{A.17})$$

Pour déterminer l'énergie de l'état fondamental, nous procédons par la méthode variationnelle de Ritz. Nous choisissons la fonction d'onde suivante [Bastard(1983)] :

$$\zeta_e(z_e) = \begin{cases} A_e \exp(-\beta_e z_e) \cos(\sqrt{2E_e^0} z_e) & \text{si } |z_e| \leq \frac{L}{2} \\ B_e \exp(-\beta_e z_e) \exp(-\sqrt{2(V_e - E_e^0)} |z_e|) & \text{si } |z_e| > \frac{L}{2} \end{cases}, \quad (\text{A.18})$$

où  $\beta_e$  est un paramètre variationnel. Il est introduit afin de tenir compte de la présence du champ électrique.

Cette fonction d'onde peut se réécrire sous la forme :

$$\zeta_e(z_e) = \exp(-\beta_e z_e) f_e(z_e) \quad (\text{A.19})$$

où  $f_e(z_e)$  représente la fonction d'onde d'un électron dans un puits quantique en absence du champ électrique.

L'énergie minimale s'écrit alors :

$$E_e = \min_{\beta_e} \frac{\langle \zeta_e(z_e) | H_e | \zeta_e(z_e) \rangle}{\langle \zeta_e(z_e) | \zeta_e(z_e) \rangle}$$

$$\begin{aligned}
&= \min_{\beta_e} \left[ \frac{\left( E_e^0 - \frac{\beta_e^2}{2} \right) \langle \zeta_e(z_e) | \zeta_e(z_e) \rangle + \beta_e \langle \zeta_e(z_e) | \exp(-\beta_e z_e) \partial_{z_e} f_e(z_e) \rangle}{\langle \zeta_e(z_e) | \zeta_e(z_e) \rangle} \right. \\
&\quad \left. + f \frac{\langle \zeta_e(z_e) | z_e | \zeta_e(z_e) \rangle}{\langle \zeta_e(z_e) | \zeta_e(z_e) \rangle} \right], \tag{A.20}
\end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}
\langle \zeta_e(z_e) | \zeta_e(z_e) \rangle &= \frac{B_e^2}{2} \left\{ \frac{e^{-(\sqrt{2(V_e - E_e^0)} - \beta_e)L}}{\sqrt{2(V_e - E_e^0)} - \beta_e} + \frac{e^{-(\sqrt{2(V_e - E_e^0)} + \beta_e)L}}{\sqrt{2(V_e - E_e^0)} + \beta_e} \right\} \\
&\quad + \frac{A_e^2}{2} \left\{ \frac{1}{\beta_e} \sinh(\beta_e L) + \frac{\beta_e}{\beta_e^2 + 2E_e^0} \cos(\sqrt{2E_e^0}L) \sinh(\beta_e L) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\sqrt{2E_e^0}}{\beta_e^2 + 2E_e^0} \sin(\sqrt{2E_e^0}L) \cosh(\beta_e L) \right\}, \tag{A.21}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \zeta_e(z_e) | \exp(-\beta_e z_e) \partial_{z_e} f_e(z_e) \rangle &= \frac{B_e^2 \sqrt{2(V_e - E_e^0)}}{2} \\
&\quad \cdot \left\{ \frac{e^{-(\sqrt{2(V_e - E_e^0)} - \beta_e)L}}{\sqrt{2(V_e - E_e^0)} - \beta_e} - \frac{e^{-(\sqrt{2(V_e - E_e^0)} + \beta_e)L}}{\sqrt{2(V_e - E_e^0)} + \beta_e} \right\} \\
&\quad + \frac{A_e^2 \sqrt{2E_e^0}}{2} \left\{ \frac{\sqrt{2E_e^0}}{\beta_e^2 + 2E_e^0} \cos(\sqrt{2E_e^0}L) \sinh(\beta_e L) \right. \\
&\quad \left. - \frac{\beta_e}{\beta_e^2 + 2E_e^0} \sin(\sqrt{2E_e^0}L) \cosh(\beta_e L) \right\}, \tag{A.22}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \zeta_e(z_e) | z_e | \zeta_e(z_e) \rangle &= \frac{B_e^2}{4} \left\{ \left[ \frac{1 + \left( \sqrt{2(V_e - E_e^0)} + \beta_e \right) e^{-(\sqrt{2(V_e - E_e^0)} + \beta_e)L}}{\left( \sqrt{2(V_e - E_e^0)} + \beta_e \right)^2} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{1 + \left( \sqrt{2(V_e - E_e^0)} + \beta_e \right) e^{-(\sqrt{2(V_e - E_e^0)} - \beta_e)L}}{\left( \sqrt{2(V_e - E_e^0)} - \beta_e \right)^2} \right] \right. \\
&\quad + \frac{A_e^2}{4} \left[ \frac{1}{\beta_e^2} \sinh(\beta_e L) - \frac{L}{\beta_e} \cosh(\beta_e L) \right. \\
&\quad - \frac{\sqrt{2E_e^0}L}{2E_e^0 + \beta_e^2} \sin(\sqrt{2E_e^0}L) \sinh(\beta_e L) \\
&\quad - \frac{\sqrt{2E_e^0}L}{2E_e^0 + \beta_e^2} \cos(\sqrt{2E_e^0}L) \cosh(\beta_e L) \\
&\quad \left. \left. - \frac{2E_e^0 - \beta_e^2}{(2E_e^0 + \beta_e^2)^2} \cos(\sqrt{2E_e^0}L) \sinh(\beta_e L) \right] \right\}
\end{aligned}$$

$$+ \frac{\sqrt{2E_e^0}\beta_e}{(2E_e^0 + \beta_e^2)^2} \sin(\sqrt{2E_e^0}L) \cosh(\beta_e L) \Big] \Big\}. \quad (\text{A.23})$$

Une étude similaire peut être faite pour étudier l'effet d'un champ électrique sur un trou dans un puits quantique. En effet, pour le choix de la fonction d'onde, il suffit de prendre une fonction semblable à celle de l'électron :

$$\zeta_h(z_h) = \begin{cases} A_h \exp(\beta_h z_h) \cos\left(\sqrt{\frac{2}{\sigma} E_h^0} z_h\right) & \text{si } |z_h| \leq \frac{L}{2} \\ B_h \exp(\beta_h z_h) \exp\left(-\sqrt{\frac{2}{\sigma} (V_h - E_h^0)} |z_h|\right) & \text{si } |z_h| > \frac{L}{2} \end{cases}. \quad (\text{A.24})$$

Sur la figure (A.1), nous présentons le déplacement d'énergie  $\Delta E$  de l'électron et du trou lourd en fonction du champ électrique dans un puits quantique de largeur égale à 10 nm. Nous remarquons que  $\Delta E$  est important dans le cas du trou en comparaison avec l'électron. Cela est dû à la faible hauteur de la barrière de la bande de valence et à la masse effective lourde du trou. Par conséquent, le décalage de la bande de valence est plus important que celui de conduction. La fonction d'onde du trou sera donc plus affectée par le champ que celle de l'électron. Sur la figure (A.2) nous présentons les fonctions d'ondes de conduction et de valence, calculées pour un champ égal à 50 kV/cm et deux largeurs de puits ( $L = 5$  et 10 nm). Pour  $L = 10$  nm, l'effet de la polarisation est plus prononcé; la fonction d'onde s'accroît tout près de la barrière.

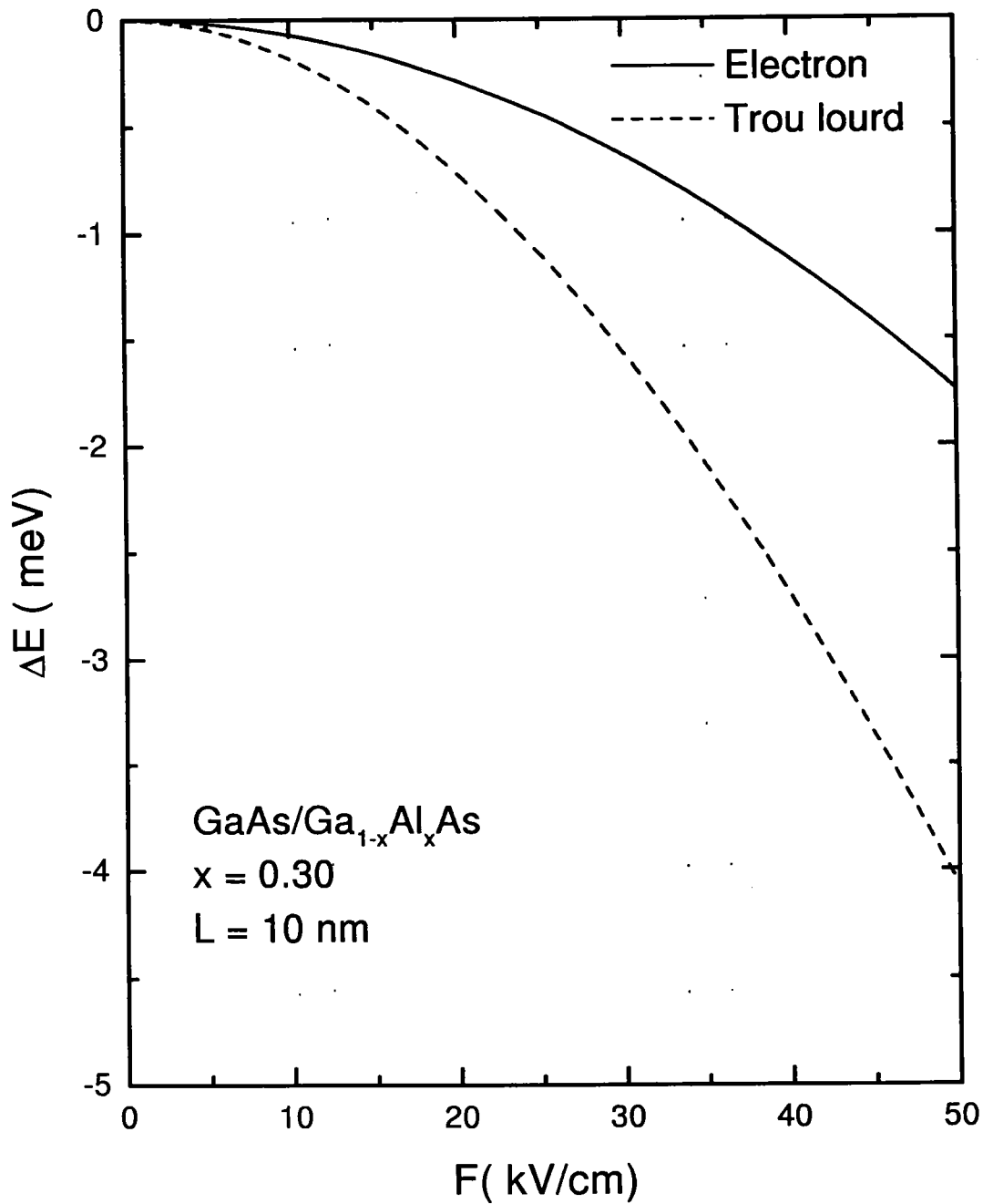


Figure (A.1) : Variation du déplacement de l'énergie de l'électron et du trou en fonction de l'intensité du champ électrique.

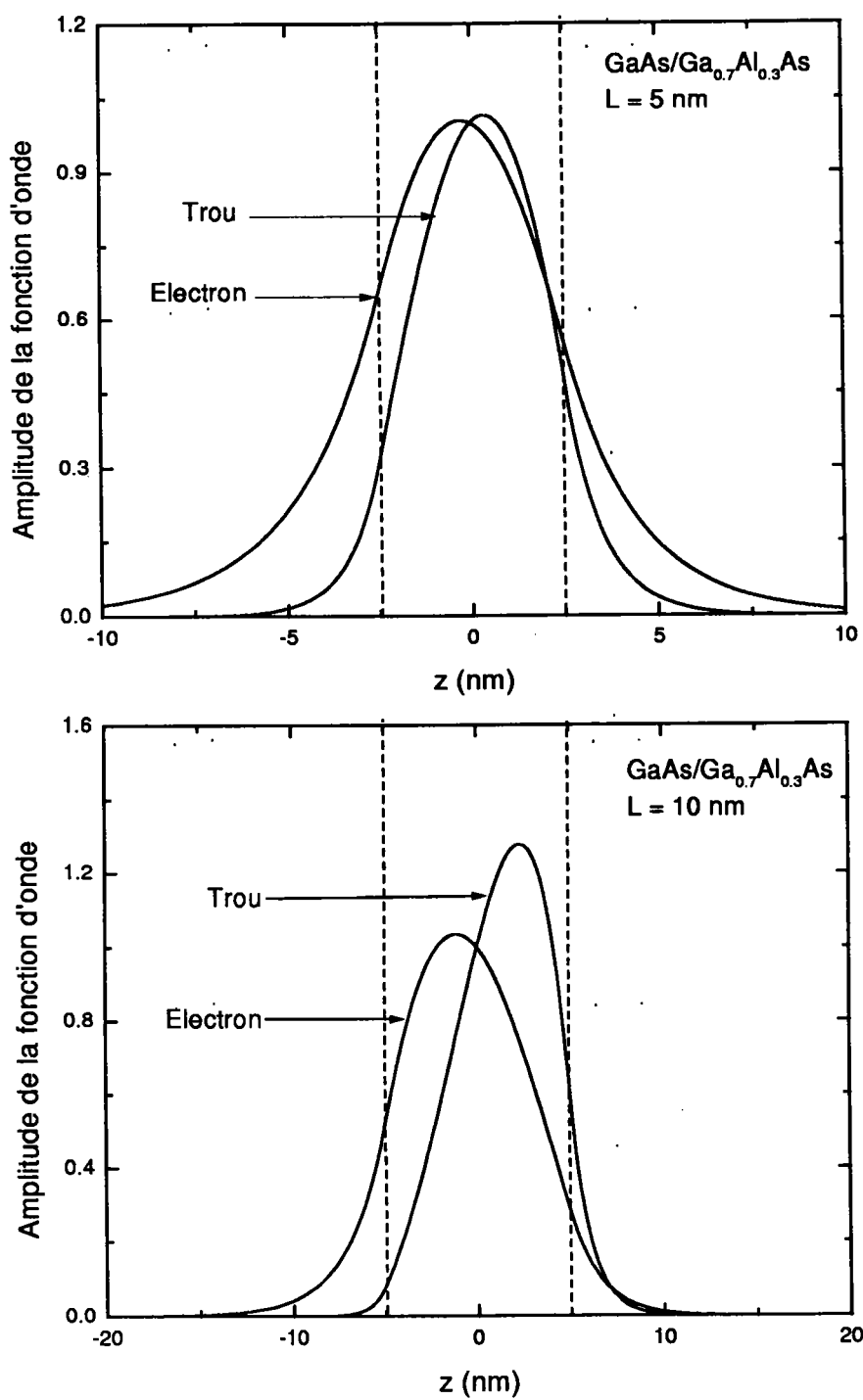


Figure (A.2) : Influence du champ électrique sur le profil de la distribution de la fonction d'onde associé à l'électron et au trou lourd confiné dans un puits quantique.



## Appendice B

# Energie de liaison d'un exciton en présence des champs extérieurs

Un cristal semi-conducteur possède une bande de valence et une bande de conduction séparées par une bande interdite, le gap, dont la largeur en énergie est de quelques eV; le gap correspond donc à l'énergie minimale nécessaire à la création d'une paire électron-trou. Ces deux porteurs peuvent se déplacer indépendamment dans le cristal, contribuant ainsi à la conductivité électrique. Ils peuvent également être liés par l'interaction coulombienne; la paire électron-trou est alors appelée exciton, elle représente une excitation élémentaire du cristal. Cet exciton peut être considéré comme un système hydrogénoïde décrit par le modèle de Bohr, et possédant donc des niveaux d'énergie quantifiés.

Le but de cet appendice est d'étudier l'effet d'un champ magnétique et d'un champ électrique sur l'énergie de l'état fondamental d'un exciton dans un puits quantique de semi-conducteurs. Nous décrivons, tout d'abord l'Hamiltonien du système dans le cadre de l'approximation de masse effective et dans un modèle à deux bandes simples, isotropes et parabolique, puis nous calculons par une méthode variationnelle l'énergie de l'état fondamental. Une discussion des résultats fera l'objet du dernier paragraphe.

## B.1 Action d'un champ magnétique

Dans un puits quantique, l'Hamiltonien d'un exciton en présence d'un champ magnétique, appliqué parallèlement à l'axe de croissance, est donné par :

$$H_X = E_g + \frac{1}{2m_e^*} \left( \mathbf{p}_e + \frac{e}{c} \mathbf{A}_e \right)^2 + \frac{1}{2m_h^*} \left( \mathbf{p}_h + \frac{e}{c} \mathbf{A}_h \right)^2 + V_e(z_e) + V_h(z_h) + V_c, \quad (\text{B.1})$$

Les différents termes de cet Hamiltonien correspondent respectivement à l'énergie de gap, opérateurs énergie cinétique de l'électron et du trou en présence du champ magnétique et aux opérateurs de confinement quantique et d'interaction coulombienne. les potentiels vecteurs  $\mathbf{A}_i$  de l'électron et du trou s'expriment dans la jauge de coulomb comme suit :

$$\mathbf{A}_i = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}_i \text{ où } i = e, h \quad (\text{B.2})$$

Vu la présence des potentiels de confinement, seul le mouvement total de centre de masse dans le plan des couches peut être séparé du mouvement relatif. En effet, en utilisant les coordonnées relatives et du centre de masse planes suivantes :

$$\boldsymbol{\rho} = \boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h \quad \text{et} \quad \mathbf{R}_{\parallel} = \frac{m_e^* \boldsymbol{\rho}_e + m_h^* \boldsymbol{\rho}_h}{m_e^* + m_h^*}, \quad (\text{B.3})$$

l'Hamiltonien précédent se décompose en trois termes :

$$H_X = H_X^0 + H_1 + H_2, \quad (\text{B.4})$$

où :

$$H_X^0 = E_g - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}_{\parallel}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\boldsymbol{\rho}} - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_{z_e} - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \Delta_{z_h} + V_e(z_e) + V_h(z_h) + V_c, \quad (\text{B.5})$$

$$H_1 = -\frac{ie\hbar}{m_e^* c} \left[ (1 - \sigma) \mathbf{A}(\boldsymbol{\rho}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{\rho}} + (1 + \sigma) \mathbf{A}(\mathbf{R}_{\parallel}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{\rho}} + \frac{\sigma}{1 + \sigma} \mathbf{A}(\boldsymbol{\rho}) \cdot \nabla_{\mathbf{R}_{\parallel}} \right], \quad (\text{B.6})$$

et

$$H_2 = \frac{e^2}{2m_e^* c^2} \left[ (1 + \sigma) A^2(\mathbf{R}_{\parallel}) + \frac{1 + \sigma^3}{(1 + \sigma)^2} A^2(\boldsymbol{\rho}) + 2(1 - \sigma) \mathbf{A}(\mathbf{R}_{\parallel}) \cdot \mathbf{A}(\boldsymbol{\rho}) \right]. \quad (\text{B.7})$$

Avec  $M$  et  $\mu$  correspondent aux masses totale et réduite du système :

$$M = m_e^* + m_h^*, \quad \mu = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*} \text{ et } \sigma = \frac{m_e^*}{m_h^*}. \quad (\text{B.8})$$

Afin d'éliminer les termes couplant la coordonné de centre de masse et le champ magnétique, nous considérons l'opérateur  $\pi$  défini dans le plan des couches comme suit :

$$\begin{aligned}\pi &= \left(-i\hbar\nabla_{\rho_e} - \frac{e}{c}\mathbf{A}_e(\rho_e)\right) + \left(-i\hbar\nabla_{\rho_h} + \frac{e}{c}\mathbf{A}_h(\rho_h)\right) \\ &= -i\hbar\nabla_{\mathbf{R}_{\parallel}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\rho).\end{aligned}\quad (\text{B.9})$$

Cet opérateur commute avec l'Hamiltonien total  $H_X$ , par conséquent nous pouvons déterminer une base de fonctions propres commune à  $H_X$  et  $\pi$ . Soit  $\Psi_X(\rho, \mathbf{R}_{\parallel}, z_e, z_h)$  une fonction propre de  $\pi$ , alors elle est solution de l'équation différentielle suivante :

$$\pi\Psi_X(\rho, \mathbf{R}_{\parallel}, z_e, z_h) = \hbar\mathbf{K}_{\parallel}\Psi_X(\rho, \mathbf{R}_{\parallel}, z_e, z_h).\quad (\text{B.10})$$

La fonction  $\Psi_X$  peut s'écrire sous la forme :

$$\Psi_X(\rho, \mathbf{R}_{\parallel}, z_e, z_h) = U(\mathbf{R}_{\parallel})\psi_X(\rho, z_e, z_h).\quad (\text{B.11})$$

où  $U(\mathbf{R}_{\parallel})$  est un opérateur unitaire qui a pour expression :

$$U(\mathbf{R}_{\parallel}) = \exp\left[i\left(\mathbf{K}_{\parallel} + \frac{e}{c\hbar}\mathbf{A}(\rho)\right) \cdot \mathbf{R}_{\parallel}\right].\quad (\text{B.12})$$

Cet opérateur peut être considéré comme une transformation canonique que nous pouvons appliquer sur l'Hamiltonien total de l'exciton et qui conduit à :

$$\tilde{H}_X = U^{-1}H_XU = \tilde{H}_1 + \tilde{H}_2 + \tilde{H}_3,\quad (\text{B.13})$$

où le premier terme représente l'Hamiltonien d'un exciton dans un puits quantique en absence du champ magnétique :

$$\tilde{H}_1 = E_g - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}_{\parallel}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\rho} - \frac{\hbar^2}{2m_e^*}\Delta_{z_e} - \frac{\hbar^2}{2m_h^*}\Delta_{z_h} + V_c + V_w^e(z_e) + V_w^h(z_h).\quad (\text{B.14})$$

le terme  $\tilde{H}_2$  correspond à l'effet diamagnétique quadratique, il a pour expression :

$$\tilde{H}_2 = \frac{e^2}{2\mu c^2}A^2(\rho).\quad (\text{B.15})$$

Alors que le troisième terme :

$$\tilde{H}_3 = -\frac{ie\hbar}{m_e^*c}(1-\sigma)\mathbf{A}(\rho) \cdot \nabla_{\rho} + \frac{2e\hbar}{Mc}\mathbf{K}_{\parallel} \cdot \mathbf{A}(\rho)\quad (\text{B.16})$$

traduit l'effet Zeeman linéaire en champ et l'effet du champ électrique induit par le champ magnétique, qu'on peut réécrire sous la forme :

$$\tilde{H}_3 = -\frac{ie\hbar}{m_e^*c} (1 - \sigma) \mathbf{A}(\boldsymbol{\rho}) \cdot \nabla_{\boldsymbol{\rho}} + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}, \quad (\text{B.17})$$

avec  $\mathbf{E} = \frac{1}{c} \mathbf{V}_{\parallel} \times \mathbf{B}$  désigne le champ électrique induit, et  $\mathbf{V}_{\parallel}$  représente la vitesse du centre de masse dans le plan des couches.

### B.1.1 Calcul variationnel de l'énergie de corrélation

Nous nous intéressons ici à l'exciton dans l'état fondamental, auquel correspond un vecteur d'onde du centre de masse nul. Nous nous limitons à la contribution diamagnétique, négligeons ainsi l'effet Zeeman. Si nous admettons que l'exciton a été obtenu par absorption optique directes, les règles de conservation de la quantité de mouvement imposent que la quantité de mouvement du centre de masse soit nulle. Par conséquent, la contribution de  $\tilde{H}_3$  à l'énergie de l'exciton est nulle. En utilisant les unités atomiques de longueur et d'énergie, l'Hamiltonien  $\tilde{H}$  se simplifie à :

$$\tilde{H} = \tilde{H}_{\parallel} + \tilde{H}_{\perp} + V_c, \quad (\text{B.18})$$

où :

$$\tilde{H}_{\parallel} = -\frac{1}{2} (1 + \sigma) \Delta_{\boldsymbol{\rho}} + \frac{\gamma^2}{8} (1 + \sigma) \rho^2, \quad (\text{B.19})$$

$$\tilde{H}_{\perp} = -\frac{1}{2} \Delta_{z_e} - \frac{\sigma}{2} \Delta_{z_h} + V_e(z_1) + V_h(z_h), \quad (\text{B.20})$$

et

$$V_c = -\frac{1}{\sqrt{\rho^2 + |z_e - z_h|^2}}.$$

Afin d'étudier l'exciton dans l'état fondamental, nous décrivons le système à l'aide de la fonction d'onde d'essai suivante :

$$\begin{aligned} \psi(\rho, z_e, z_h) &= \sum_{pr} C_{pr} \chi_{pr}(\rho, z_e, z_h) \\ &= \sum_{pr} C_{pr} f_e(z_e) f_h(z_h) a_p(z_e) b_r(z_h) \exp(-k\rho), \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

où  $f_e(z_e)$  et  $f_h(z_h)$  représentent les fonctions d'ondes exactes de l'électron et du trou dans un puits quantique, alors que  $a_p(z_e)$  et  $b_r(z_h)$  ont les expressions suivantes :

$$a_p(z_e) = z_e^p \exp(-\alpha_e z_e^2), \quad (\text{B.22})$$

$$b_r(z_h) = z_h^r \exp(-\alpha_h z_h^2). \quad (\text{B.23})$$

Nous déterminons l'énergie de l'état fondamental en minimisant l'énergie moyenne :

$$E = \frac{\langle \psi(\rho, z_e, z_h) | \tilde{H} | \psi(\rho, z_e, z_h) \rangle}{\langle \psi(\rho, z_e, z_h) | \psi(\rho, z_e, z_h) \rangle}, \quad (\text{B.24})$$

par rapport aux paramètres variationnels linéaires  $C_{pr}$  et non linéaires  $\alpha_e$ ,  $\alpha_h$  et  $k$ .

Ce qui revient à résoudre l'équation matricielle aux valeurs propres suivante :

$$(\tilde{\mathbf{H}} - E_X \mathbf{S}) \mathbf{C} = 0, \quad (\text{B.25})$$

où la matrice  $\tilde{\mathbf{H}}$  correspond à l'Hamiltonien  $\tilde{H}$ , et  $\mathbf{S}$  désigne la matrice de normation.

Leurs éléments sont donnés par :

$$S_{pr}^{p'r'} = \langle \chi_{p'r'} | \chi_{pr} \rangle, \quad (\text{B.26})$$

$$= \frac{\pi}{2k^2} W_e^0(p, p') W_h^0(r, r') \quad (\text{B.27})$$

avec,

$$W_e^0(p, p') = \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f_e(z_e) a_p(z_e) \rangle \quad (\text{B.28})$$

$$W_h^0(r, r') = \langle f_h(z_h) b_{r'}(z_h) | f_h(z_h) b_r(z_h) \rangle \quad (\text{B.29})$$

Les éléments de matrice de l'opérateur  $\tilde{\mathbf{H}}$  sont donnés par :

$$(\tilde{H}_{\parallel})_{pr}^{p'r'} = \frac{\pi}{4} (1 + \sigma) \left( 1 + \frac{3\gamma^2}{8k^4} \right) W_e^0(p, p') W_h^0(r, r'), \quad (\text{B.30})$$

$$\begin{aligned} (\tilde{H}_{\perp})_{pr}^{p'r'} &= \frac{\pi}{2k^2} \left\{ (E_e^0 + E_h^0) W_e^0(p, p') W_h^0(r, r') - W_e^1(p, p') W_h^0(r, r') \right. \\ &\quad - \frac{1}{2} W_e^2(p, p') W_h^0(r, r') - \sigma W_e^0(p, p') W_h^1(r, r') \\ &\quad \left. - \frac{\sigma}{2} W_e^0(p, p') W_h^2(r, r') \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

où :

$$W_e^1(p, p') = \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f'_e(z_e) a'_p(z_e) \rangle \quad (\text{B.32})$$

$$W_h^1(r, r') = \langle f_h(z_h) b_{r'}(z_h) | f'_h(z_h) b'_r(z_h) \rangle \quad (\text{B.33})$$

$$W_e^2(p, p') = \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f_e(z_e) a''_p(z_e) \rangle \quad (\text{B.34})$$

$$W_h^2(r, r') = \langle f_h(z_h) b_{r'}(z_h) | f_h(z_h) b''_r(z_h) \rangle \quad (\text{B.35})$$

Le calcul directe du terme de l'interaction coulombienne s'avère difficile à cause de la racine du dénominateur qui ne nous permet pas une séparation des intégrales en deux parties; suivant la coordonnée latérale  $\rho$  et suivant les coordonnées axiales  $(z_e, z_h)$ . A cet effet, nous utilisons l'expression approchée suivante :

$$(V_c)_{pr}^{p'r'} \simeq \langle \theta_{p'r'} | \frac{\lambda}{\tau + |z_e - z_h|} | \theta_{pr} \rangle, \quad (\text{B.36})$$

avec,

$$\theta_{pr}(z_e, z_h) = f_e(z_e) f_h(z_h) a_p(z_e) b_r(z_h). \quad (\text{B.37})$$

$\lambda$  et  $\tau$  sont des constantes déterminées aux limites  $|z_e - z_h| \rightarrow 0$  et  $|z_e - z_h| \rightarrow \infty$  :

Quand  $|z_e - z_h| \rightarrow \infty$ , nous avons :

$$\begin{aligned} \frac{\lambda}{|z_e - z_h|} &\simeq \lim_{|z_e - z_h| \rightarrow \infty} \int_0^\infty -2\pi \frac{\rho \exp(-2\lambda\rho)}{\sqrt{\rho^2 + |z_e - z_h|^2}} d\rho \\ &\simeq -\frac{\pi}{2k^2} \frac{1}{|z_e - z_h|}. \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

Par conséquent,  $\lambda = -\frac{\pi}{2k^2}$ .

D'autre part, pour des petites valeurs de  $|z_e - z_h|$  nous avons :

$$\begin{aligned} \frac{\lambda}{\tau} &\simeq \lim_{|z_e - z_h| \rightarrow 0} \int_0^\infty -2\pi \frac{\rho \exp(-2\lambda\rho)}{\sqrt{\rho^2 + |z_e - z_h|^2}} d\rho \\ &\simeq -\frac{\pi}{k}. \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

Ce qui donne  $\tau = \frac{1}{2k}$ .

Ainsi l'expression approchée de  $(V_c)_{pr}^{p'r'}$  s'écrit :

$$\begin{aligned} (V_c)_{pr}^{p'r'} &\simeq -\frac{\pi}{2k^2} \langle \theta_{p'r'} | \frac{1}{\frac{1}{2k} + |z_e - z_h|} | \theta_{pr} \rangle. \\ &\simeq -\frac{\pi}{2k^2} Z_{eh} \end{aligned} \quad (\text{B.40})$$

Les intégrales  $W_i^j$  (avec  $i = e$  ou  $h$  et  $j = 0, 1$  ou  $2$ ) et  $Z_{eh}$  sont calculées numériquement à l'aide des quadratures de Gauss- Laguerre et Gauss- Legendre.

## B.2 Action du champ électrique

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, l'Hamiltonien d'un exciton dans un puits quantique de semiconducteur en présence d'un champ électrique  $\vec{F}$  appliqué suivant la direction (oz) s'écrit :

$$H_X = E_g - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_{\mathbf{r}_e}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_{\mathbf{r}_h}^2 + V_e(z_e) + V_h(z_h) + V_c + e(z_e - z_h)F. \quad (\text{B.41})$$

En séparant le mouvement relatif plan de celui de centre de masse, l'Hamiltonien précédent devient :

$$H_X = E_g - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\rho} - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_{z_e} - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \Delta_{z_h} + V_e(z_e) + V_h(z_h) + V_c + e(z_e - z_h)F - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}_1}, \quad (\text{B.42})$$

Nous remarquons que le mouvement de centre de masse n'est pas affecté par le champ électrique. Son énergie s'écrit alors :

$$E_{c.m} = \frac{\hbar^2 \mathbf{K}_{\parallel}^2}{2M}, \quad (\text{B.43})$$

où  $\mathbf{K}_{\parallel}$  représente la projection du vecteur d'onde de centre masse sur le plan des couches. La fonction d'onde de centre de masse  $\exp(i\mathbf{K}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_{\parallel})$  sera donc mise en facteur dans la fonction d'onde totale de l'exciton :

$$\Psi_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \exp(i\mathbf{K}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_{\parallel}) \psi_X(\rho, z_e, z_h). \quad (\text{B.44})$$

avec  $\psi_X(\rho, z_e, z_h)$  fonction enveloppe relative solution de l'équation suivante :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\rho} - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_{z_e} - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \Delta_{z_h} + V_e(z_e) + V_h(z_h) + V_c + e(z_e - z_h)F \right\} \psi_X = E_X \psi_X \quad (\text{B.45})$$

### B.2.1 Calcul variationnel de l'énergie de corrélation

l'existence du terme de l'interaction coulombienne rend l'équation précédente non résolvable analytiquement. Pour cela, nous nous contentons à une solution approchée à l'aide de la méthode variationnelle. Nous choisissons la fonction d'onde d'essai suivante :

$$\psi_X = \zeta_e(z_e) \zeta_h(z_h) \sum_{pr} C_{pr} a_p(z_e) b_r(z_h) \exp(-k\rho), \quad (\text{B.46})$$

où  $\zeta_e(z_e)$  et  $\zeta_h(z_h)$  représentent respectivement les fonctions d'onde de l'état fondamental de l'électron et trou dans un puits quantique en présence du champ électrique.  $a_p(z_e)$  et  $b_r(z_h)$  sont similaires à ceux pris dans le cas du champ magnétique. Le terme en exponentiel décrit la fonction de l'exciton dans le plan.

L'énergie de l'état fondamental est déterminée en minimisant l'énergie moyenne de l'exciton par rapport aux paramètres variationnels  $\alpha_e$ ,  $\alpha_h$ ,  $k$  et  $C_{pr}$ .

Tout les éléments de matrices de  $H$  et  $S$  s'expriment en fonction des intégrales suivantes :

$$\begin{aligned}
WE_e^0(p, p') &= \langle \zeta_e(z_e) a_{p'}(z_e) | \zeta_e(z_e) a_p(z_e) \rangle \\
WE_h^0(r, r') &= \langle \zeta_h(z_h) b_{r'}(z_h) | \zeta_h(z_h) b_r(z_h) \rangle \\
WE_e^1(p, p') &= \langle \zeta_e(z_e) a_{p'}(z_e) | \zeta_e'(z_e) a_p'(z_e) \rangle \\
WE_h^1(r, r') &= \langle \zeta_h(z_h) b_{r'}(z_h) | \zeta_h'(z_h) b_r'(z_h) \rangle \\
WE_e^2(p, p') &= \langle \zeta_e(z_e) a_{p'}(z_e) | \zeta_e''(z_e) a_p''(z_e) \rangle \\
WE_h^2(r, r') &= \langle \zeta_h(z_h) b_{r'}(z_h) | \zeta_h''(z_h) b_r''(z_h) \rangle
\end{aligned} \tag{B.47}$$

Comme dans le cas du champ magnétique, les éléments de matrice de  $H$  peuvent s'écrire :

$$H_{pr}^{p'r'} = (H_{\parallel})_{pr}^{p'r'} + (H_{\perp})_{pr}^{p'r'} + (V_c)_{pr}^{p'r'} . \tag{B.48}$$

avec :

$$(H_{\parallel})_{pr}^{p'r'} = \frac{\pi}{4} (1 + \sigma) WE_e^0(p, p') WE_h^0(r, r') , \tag{B.49}$$

$$\begin{aligned}
(H_{\perp})_{pr}^{p'r'} &= \frac{\pi}{2k^2} \left\{ (E_e + E_h) WE_e^0(p, p') WE_h^0(r, r') - WE_e^1(p, p') WE_h^0(r, r') \right. \\
&\quad - \frac{1}{2} WE_e^2(p, p') WE_h^0(r, r') - \sigma WE_e^0(p, p') WE_h^1(r, r') \\
&\quad \left. - \frac{\sigma}{2} WE_e^0(p, p') WE_h^2(r, r') \right\} ,
\end{aligned} \tag{B.50}$$

$$\begin{aligned}
(V_c)_{pr}^{p'r'} &\simeq -\frac{\pi}{2k^2} \langle \zeta_e(z_e) \zeta_h(z_h) a_{p'}(z_e) b_{r'}(z_h) | \\
&\quad \frac{1}{\frac{1}{2k} + |z_e - z_h|} | \zeta_e(z_e) \zeta_h(z_h) a_p(z_e) b_r(z_h) \rangle ,
\end{aligned} \tag{B.51}$$

où nous avons utilisé la même approximation utilisée dans l'étude de l'exciton en présence du champ magnétique.



Les éléments de matrices de  $S_{pr}^{p'r'}$  sont donnés par :

$$S_{pr}^{p'r'} = \frac{\pi}{2k^2} W E_e^0(p, p') W E_h^0(r, r'). \quad (\text{B.52})$$

### B.3 Résultats du calcul variationnel

Sur La figure (B.1) nous présentons les variations de l'énergie de corrélation de l'exciton en fonction de la largeur du puits de type  $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$  pour une concentration  $x = 0.30$  et pour deux valeurs du champ magnétique  $B = 0$  et  $5$  T. Nous remarquons que plus les dimensions du puits sont petites, plus l'énergie de corrélation est renforcée et on obtient un confinement maximal pour une largeur de puits voisine de  $5$  nm. D'autre part l'influence du champ magnétique a pour conséquence un renforcement de l'énergie de liaison suite à un rétrécissement des orbitales traduisant ainsi le renforcement de la liaison entre électron et trou.

Sur la figure (B.2) nous montrons les variations de l'énergie totale de l'exciton en fonction du champ magnétique pour deux largeurs du puits  $L = 10$  et  $20$  nm. Cette figure traduit l'effet diamagnétique quadratique en champ.

Sur les figures (B.3) et (B.4) nous montrons l'effet du champ électrique sur l'énergie de corrélation de l'exciton dans un puits quantique de type  $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ . Nous remarquons que l'énergie de corrélation est peu affecté par le champ dans le cas des puits étroits, alors qu'une réduction significative a lieu pour les largeurs supérieures à  $10$  nm. Ceci s'explique par une compétition entre le champ électrique qui tend à séparer l'électron du trou et le confinement quantique dû au barrières du puits qui oblige les particules d'être emprisonnées à l'intérieur.

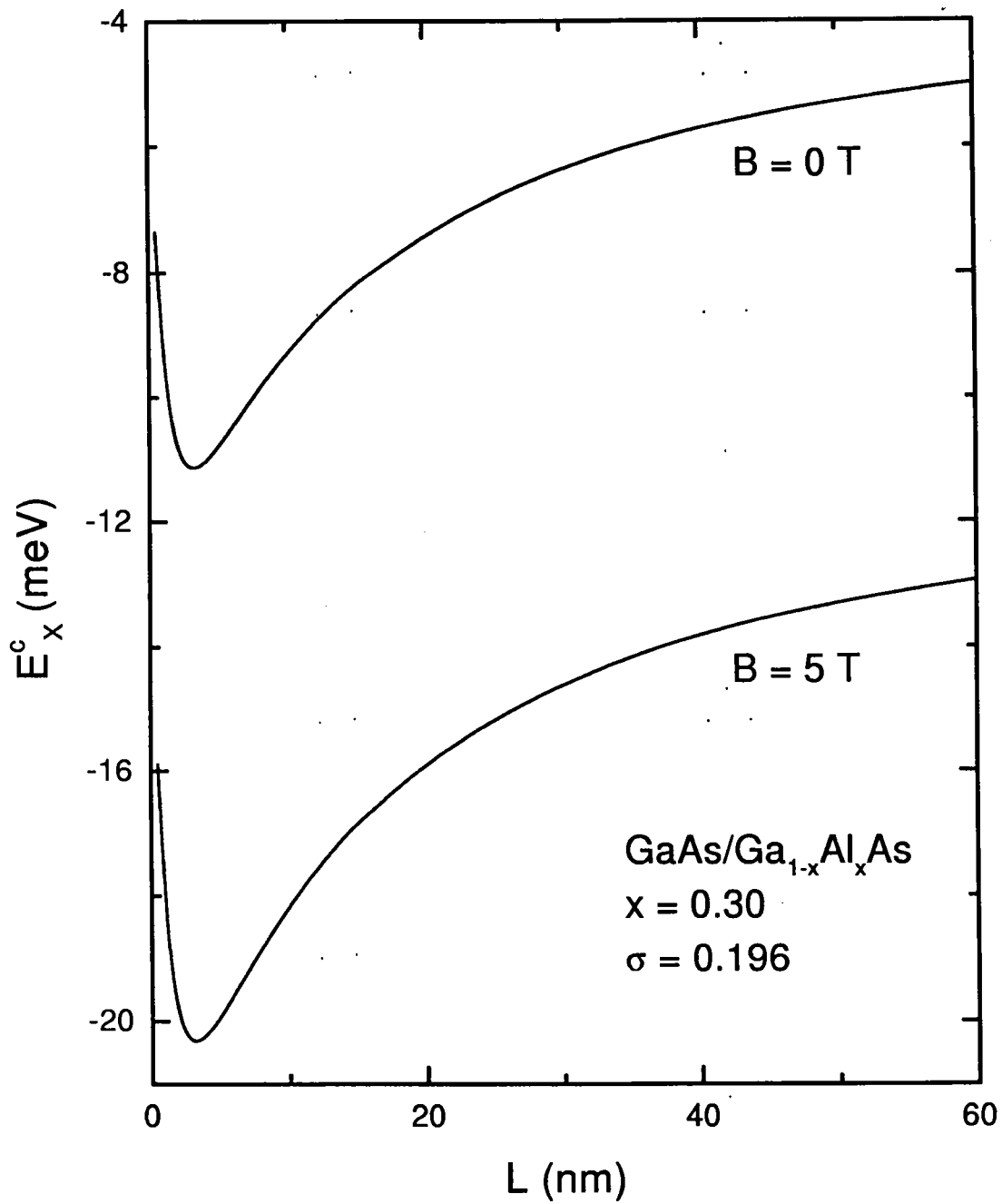


Figure (B.1) : Variation de l'énergie de corrélation de l'exciton en fonction de la largeur du puits pour deux intensités du champ magnétique.

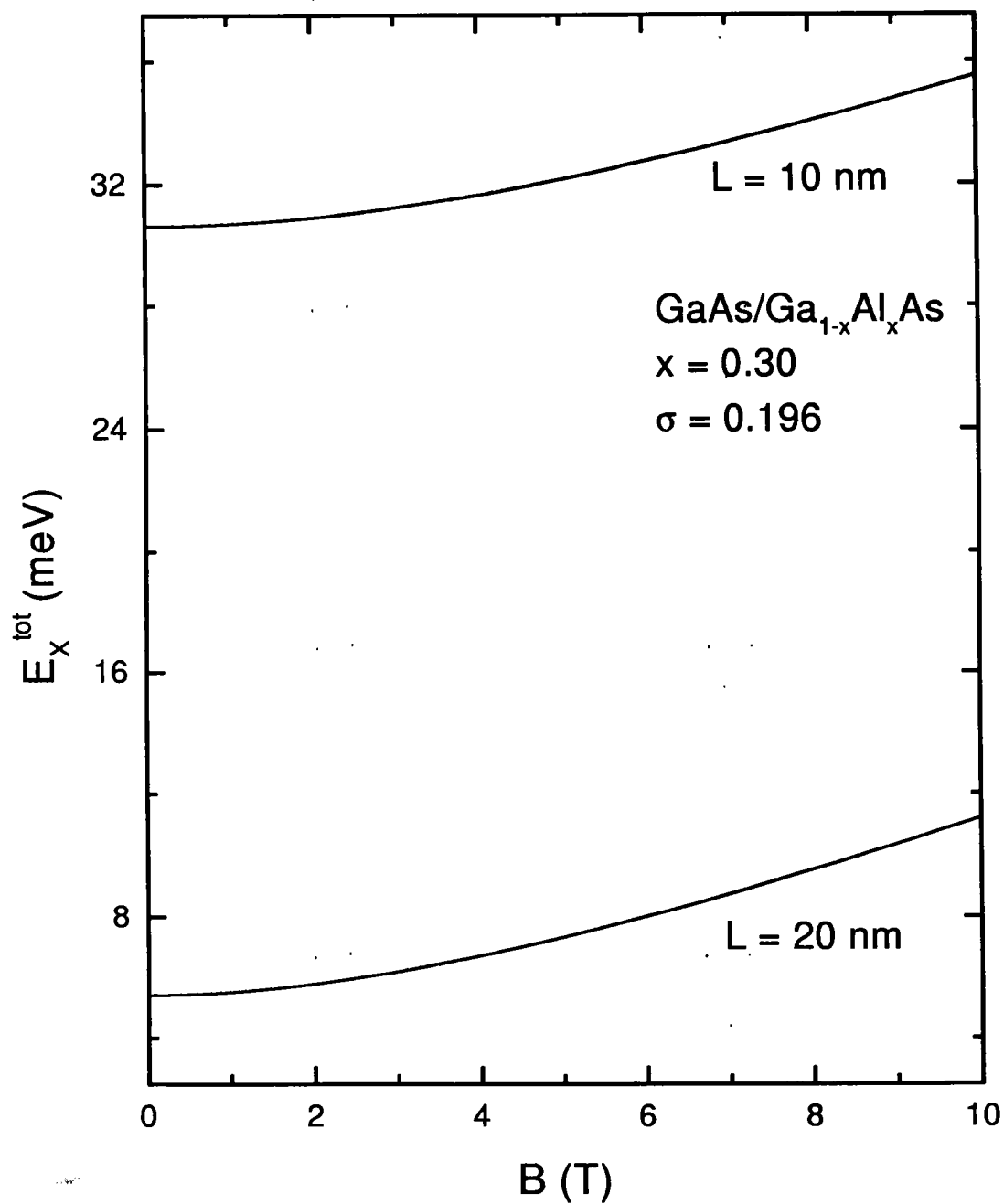


Figure (B.2) : Variation de l'énergie totale de l'exciton en fonction de l'intensité du champ magnétique, pour deux largeurs de puits de type GaAs/GaAlAs ( $L = 10$  et  $20 \text{ nm}$ ) et pour une concentration  $x = 0.30$ .

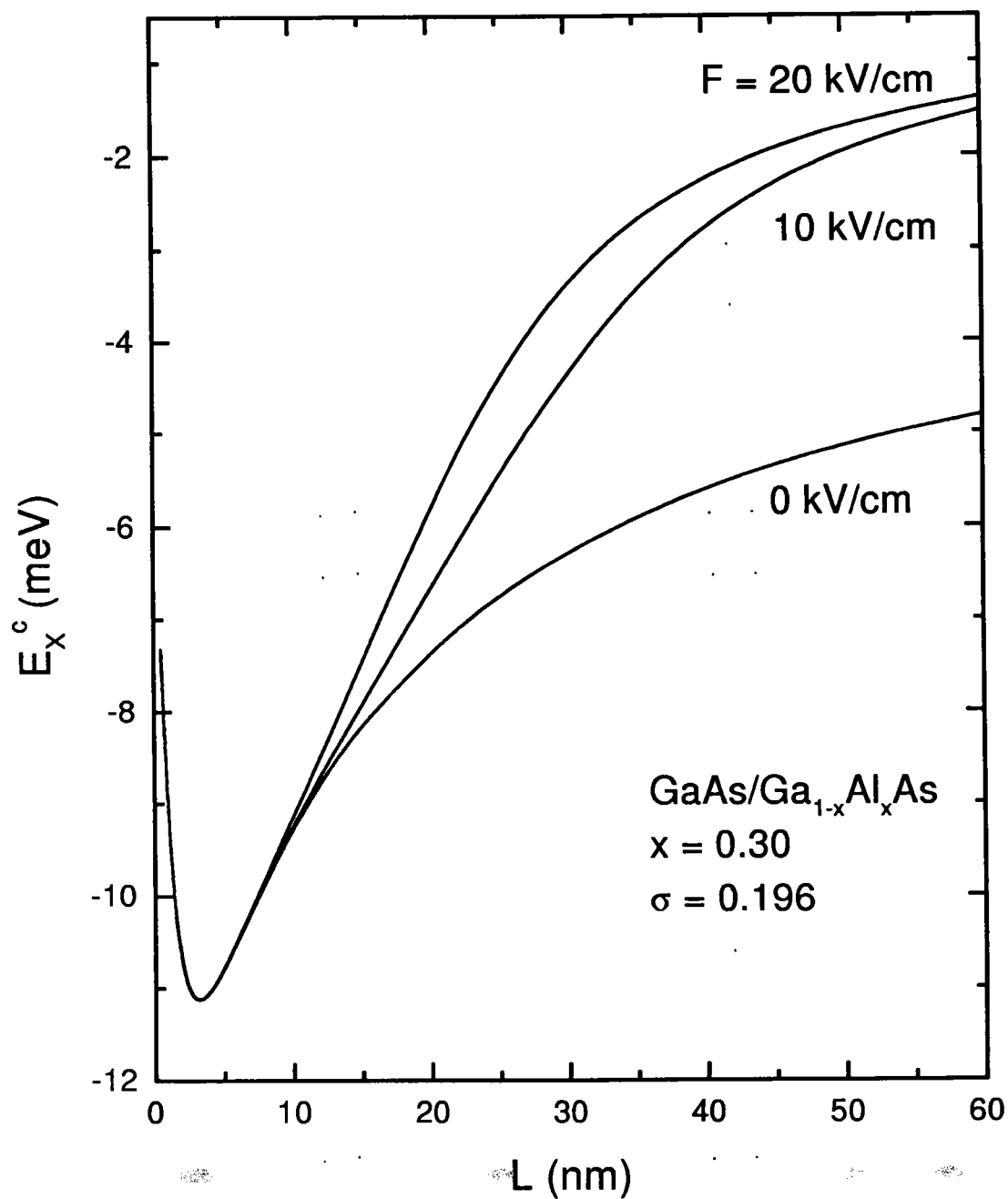


Figure (B.3) : Variation de l'énergie de corrélation de l'exciton en fonction de la largeur du puits pour différentes intensités du champ électrique.

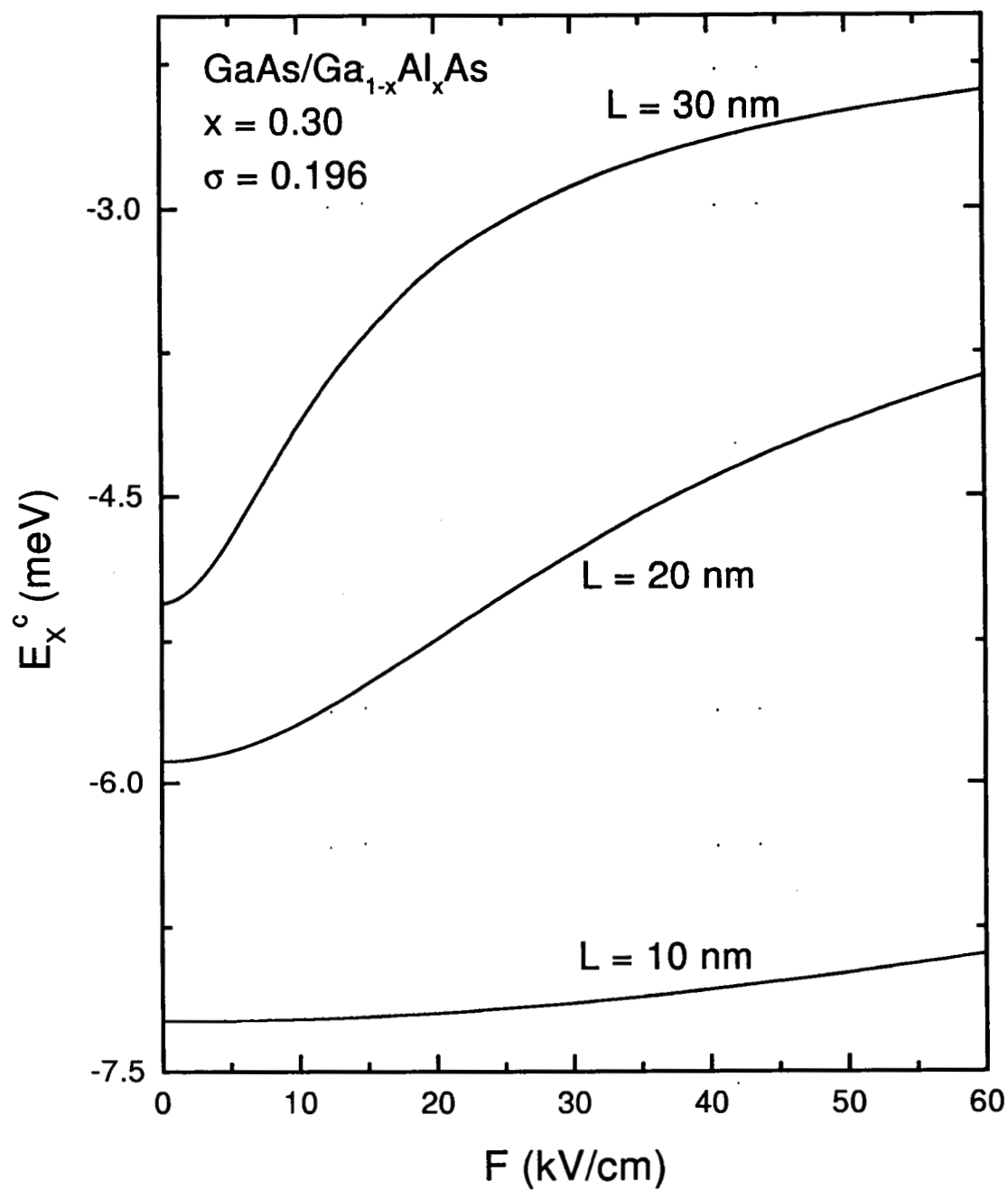


Figure (B.4) : Variation de l'énergie de corrélation de l'exciton en fonction de l'intensité du champ électrique, pour différentes largeurs de puits et pour une concentration  $x = 0.30$ .



# Appendice C

## Calcul du terme de l'interaction coulombienne

Dans cet appendice nous donnons le détail de calcul du terme de l'interaction coulombienne du complexe .

L'élément de matrice du potentiel coulombien s'écrit :

$$\begin{aligned}
 (V_c)_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'} &= \left[ -\frac{1}{|r_e - r_i|} + \frac{1}{|r_h - r_i|} - \frac{1}{r_{eh}} \right]_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'} \\
 &= \left[ -\frac{1}{\sqrt{\rho_e^2 + (z_e - z_i)^2}} \right]_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'} + \left[ \frac{1}{\sqrt{\rho_h^2 + (z_h - z_i)^2}} \right]_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'} \\
 &\quad + \left[ -\frac{1}{\sqrt{\rho_{eh}^2 + (z_e - z_h)^2}} \right]_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'} .
 \end{aligned} \tag{C.1}$$

Le calcul de ces éléments de matrice est très compliqué, pour cela nous les linéarisons en utilisant l'approximation suivante [Stébé (1997)] :

$$\left[ -\frac{1}{\sqrt{\rho_e^2 + (z_e - z_i)^2}} \right]_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'} \simeq \left[ \frac{\lambda}{\alpha + |z_e - z_i|} \right]_{pr}^{p'r'} , \tag{C.2}$$

où les constantes  $\lambda$  et  $\alpha$  sont déterminés de telle façon que les limites quand  $|z_e - z_i| \rightarrow$

0 et  $\infty$  de  $\frac{\lambda}{\alpha + |z_e - z_i|}$  et  $\left[ -\frac{1}{\sqrt{\rho_e^2 + (z_e - z_i)^2}} \right]_{lmn}^{l'm'n''}$  soient égales.

- Pour de grandes valeurs de  $|z_e - z_i|$ , nous aurons :

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{1}{\sqrt{\rho_e^2 + (z_e - z_i)^2}} \right]_{lmn}^{l'm'n'} &\simeq \langle \phi_{l'm'n'} | \frac{1}{|z_e - z_i|} | \phi_{lmn} \rangle \\ &\simeq \frac{\lambda}{|z_e - z_i|}, \end{aligned} \quad (C.3)$$

ce qui conduit à :

$$\lambda_e = - \langle \phi_{l'm'n'} | \phi_{lmn} \rangle, \quad (C.4)$$

où  $|\phi_{lmn}\rangle = \exp(-ks/2) s^l u^m t^n$ .

- Pour des petites valeurs de  $|z_e|$ , nous aurons :

$$\begin{aligned} \left[ -\frac{1}{\sqrt{\rho_e^2 + (z_e - z_i)^2}} \right]_{lmn}^{l'm'n'} &\simeq \langle \phi_{l'm'n'} | \frac{-1}{|\rho_e|} | \phi_{lmn} \rangle \\ &\simeq \frac{\lambda}{\alpha} \end{aligned} \quad (C.5)$$

ce qui permet de déterminer  $\alpha$  :

$$\alpha = \frac{- \langle \phi_{l'm'n'} | \phi_{lmn} \rangle}{\langle \phi_{l'm'n'} | \frac{1}{|\rho_e|} | \phi_{lmn} \rangle}. \quad (C.6)$$

En utilisant les coordonnées elliptiques, il se réécrit :

$$\alpha_{lmn}^{l'm'n'} = \frac{\langle \phi_{l'm'n'} | \phi_{lmn} \rangle}{\langle \phi_{l'm'n'} | \frac{2}{s+t} | \phi_{lmn} \rangle}, \quad (C.7)$$

Nous avons vu dans le chapitre 3 que  $\langle \phi_{l'm'n'} | \phi_{lmn} \rangle$  s'écrit en fonction de l'intégrale généralisée  $J_i^{i'}$  comme suit :

$$\langle \phi_{l'm'n'} | \phi_{lmn} \rangle = \omega_{n+n'} \left( J_i^{i'}(2, 1, 0) - J_i^{i'}(0, 1, 2) \right), \quad (C.8)$$

où  $\omega_n = 0$  si  $n$  est impair, et 1 si  $n$  est pair.

De même, on peut exprimer  $\langle \phi_{l'm'n'} | \frac{2}{s+t} | \phi_{lmn} \rangle$  en fonction de  $J_i^{i'}$  comme suit :

$$\langle \phi_{l'm'n'} | \frac{2}{s+t} | \phi_{lmn} \rangle = 2 \left[ \omega_{n+n'} J_i^{i'}(1, 1, 0) - \omega_{n+n'+1} J_i^{i'}(0, 1, 1) \right].$$

Par conséquent  $\alpha_{lmn}^{l'm'n'}$  se réécrit sous la forme générale suivante :

$$\alpha_{lmn}^{l'm'n'} = \frac{\omega_{n+n'} \left( J_i^{i'}(2, 1, 0) - J_i^{i'}(0, 1, 2) \right)}{2 \left[ \omega_{n+n'} J_i^{i'}(1, 1, 0) - \omega_{n+n'+1} J_i^{i'}(0, 1, 1) \right]} \quad (C.9)$$



l'expression de  $\left[ -\frac{1}{\sqrt{\rho_e^2 + (z_e - z_i)^2}} \right]_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'}$  s'écrit alors :

$$\left[ -\frac{1}{\sqrt{\rho_e^2 + (z_e - z_i)^2}} \right]_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'} = -\langle \phi_{l'm'n'} | \phi_{lmn} \rangle \langle \theta_{p'r'} | \frac{1}{\alpha_{lmn}^{l'm'n'} + |z_e - z_i|} | \theta_{pr} \rangle \quad (\text{C.10})$$

En suivant le même raisonnement nous obtenons:

$$\left[ \frac{1}{\sqrt{\rho_h^2 + (z_e - z_i)^2}} \right]_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'} = \langle \phi_{l'm'n'} | \phi_{lmn} \rangle \langle \theta_{p'r'} | \frac{1}{\beta_{lmn}^{l'm'n'} + |z_h - z_i|} | \theta_{pr} \rangle \quad (\text{C.11})$$

avec,

$$\beta_{lmn}^{l'm'n'} = \frac{J_i^{i'}(2, 1, 0) - J_i^{i'}(0, 1, 2)}{J_i^{i'}(2, 0, 0) - J_i^{i'}(0, 0, 2)}, \quad (\text{C.12})$$

et

$$\left[ -\frac{1}{\sqrt{\rho_{eh}^2 + (z_e - z_h)^2}} \right]_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'} = -\langle \phi_{l'm'n'} | \phi_{lmn} \rangle \langle \theta_{p'r'} | \frac{1}{\gamma_{lmn}^{l'm'n'} + |z_e - z_h|} | \theta_{pr} \rangle, \quad (\text{C.13})$$

où

$$\gamma_{lmn}^{l'm'n'} = \frac{\omega_{n+n'} (J_i^{i'}(2, 1, 0) - J_i^{i'}(0, 1, 2))}{2 [\omega_{n+n'} J_i^{i'}(1, 1, 0) + \omega_{n+n'+1} J_i^{i'}(0, 1, 1)]}. \quad (\text{C.14})$$

L'expression globale de  $(V_c)_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'}$  s'écrit comme suit :

$$(V_c)_{lmnpr}^{l'm'n'p'r'} \simeq S_{lmn}^{l'm'n'} [W Z_h^0(r', r) Z_e(p', p) + W Z_e^0(p', p) Z_h(r', r) + Z_{eh}(p', r', p, r)], \quad (\text{C.15})$$

avec :

$$Z_e(p', p) = \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | -\frac{1}{\alpha_{lmn}^{l'm'n'} + |z_e - z_i|} | f_e(z_e) a_p(z_e) \rangle, \quad (\text{C.16})$$

$$Z_h(r', r) = \langle f_h(z_e) b_{r'}(z_e) | \frac{1}{\beta_{lmn}^{l'm'n'} + |z_h - z_i|} | f_h(z_h) b_r(z_h) \rangle, \quad (\text{C.17})$$

$$Z_{eh}(p', r', p, r) = \langle f_e(z_e) f_h(z_h) a_{p'}(z_e) b_{r'}(z_h) | -\frac{1}{\gamma_{lmn}^{l'm'n'} + |z_e - z_h|} | f_e(z_e) f_h(z_h) a_p(z_e) b_r(z_h) \rangle. \quad (\text{C.18})$$

# BIBLIOGRAPHIE

- M. Abramovitz and I. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, Dover (1970).
- J. Adamowski, Phys. Rev. B **32**, 2588 (1985).
- M. Altarelli, Phys. Rev. B **28**, 842 (1983).
- E. Assaid, F. Dujardin, and B. Stébé, Solid State Commun. **90**, 651 (1994).
- E. J. Austin and M. Jaros, Phys. Rev. B **31**, 5569 (1985).
- G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 4714 (1981).
- G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang, and L. Esaki, Phys. Rev. B **28**, 3241 (1983).
- G. Bastard et J. A. Brum, Quantum well Structures, Physics and applications, IEEE J. Quant. Electr. DE 22, (1986).
- S. Bednarek, J. Adamowski, and M. Suffczynski, Solid State Commun. **21**, 1 (1977).
- S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, I. Essaoudi and B. Stébé, Physica B **274**, 947 (1999).
- S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, I. Essaoudi et B. Stébé, NATO Advanced Research Workshop, Jaszowiec Poland June 12-16, 77 (1999).
- A. Bouchalkha, D. S. Kim, J. J. Song and J. F. Klein Quantum well and superlattice, Phys. IV **1675**, 74 (1992).
- J. A. Brum and G. Bastard, Phys. Rev. B **31**, 3893 (1985).
- J. A. Brum, G. Priester, and G. Allan, Phys. Rev. B **32**, 2378 (1985).
- H. Buhmann, R. Stepniewski, G. Martinez, and B. Etienne, Helv. Phys. Acta **65**, 323 (1992).
- Y. C. Chang and J. N. Schulman, J. Vac. Sci. Technol. **21**, 540 (1982).
- R. Chen, J. P. Lin and B. D. McCombe, Phys. Rev. B **44**, 8315 (1991).
- I. C. da Cunha Lima, A. Ghazali, and P. D. Emmel, Phys. Rev. B **54**, 13996 (1996).
- P. J. Dean and D. C. Herbert, in *Excitons*, Vol. 14 of *Topics in Current Physics*, edited by K. Cho (Springer-Verlag, Berlin, 1979), p.55.

- M. H. Degani and O. Hipolito, Phys. Rev. B **33**, 4090 (1986).
- F. Dujardin, M. Azaitouni and B. Stébé, Solid State Commun. **102**, 579 (1997).
- S. G. Elkomoss, Phys. Rev. B **6**, 3913 (1972).
- S. G. Elkomoss and A. S. Amer, Phys. Rev. B **11**, 2222 (1975).
- S. G. Elkomoss and A. S. Amer, Phys. Rev. B **11**, 2925 (1975).
- S. G. Elkomoss and J. Biellmann, Phys. Rev. B **29**, 4697 (1984).
- A. Erçelebi and Tamak, Solid State Commun. **54**, 883 (1985).
- G. Erzhen, S. W. Gu and B. Li, Phys. Rev. B **42**, 1258 (1990).
- L. Esaki and R. Tsu, IBM J. Res. Develop. **14**, 61 (1970).
- I. Essaoudi, A. Saber, A. Ainane et M. Saber, Physica Scripta. **59**, 168 (1999).
- W. Franz, Z. Naturforsch. **13 a**, 484 (1958).
- A. A. Frost, M. Inokuti, and J. P. Lows, J. Chem. Phys. **41**, 482 (1964).
- W. Gorzkowski, Acta Physica Polonica, **A46**, 209 (1976).
- W. Gorzkowski, Acta Physica Polonica, **A50**, 159 (1976).
- R. L. Greene and K. K. Bajaj, Solid State Commun. **45**, 825 (1983).
- R. L. Greene and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B **37**, 4604 (1988).
- H. Haken, Nuovo Cimento. **10**, 1230 (1956).
- H. Haken, *Quantum Field Theory of Solids*, North Holland (1976).
- A. Haufe, Solid State Commun. **67**, 899 (1988).
- J. R. Haynes, Phys. Rev. Lett. **4**, 361 (1960).
- E. A. Hylleraas, Z. Physik. **54**, 347 (1929).
- E. A. Hylleraas, Z. Physik. **83**, 739 (1933).
- M. Jaros and K. B. Wong, J. Phys. C**17**, L 765 (1984).
- M. Jaros, K. B. Wong and M. A. Gell, Phys. Rev. B **31**, 1205 (1985).
- K. Kheng, R. T. Cox, M. Mamor, K. Saminadayar, and S. Tatarenko, J. Physique C5, Suppl. J. Physique II, **3**, 95 (1993).



- W. Kohn and J. M. Luttinger, *Phys Rev.* **97**, 1721 (1955).
- W. Kohn and L. J. Sham, *Phys Rev.* **140**, A1133 (1965).
- M. A. Lampert, *Phys. Rev. Lett.* **1**, 450 (1958).
- J. M. L. Leblond, *Phys. Rev* **178**, 1526 (1969).
- H. J. Lee, L. Y. Juravel, J. C. Wolley, and A. C. Springthorpe, *Phys. Rev. B* **21**, 659 (1980).
- X. Liu, A. Petrou, B. D. McCombe, J. Ralston, and G. Wicks, *Phys. Rev. B* **38**, 8522 (1988).
- B. A. Mason and S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **33**, 8379 (1986).
- E. E. Mendez, G. Bastard, L. L. Chang, L. Esaki, H. Morkoc and R. Fischer, *Phys. Rev. B* **26**, 7101, (1982).
- R. C. Miller, D. A. Kleinman and A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* **29**, 7085 (1984).
- D. B. A. Miller, D. S. Chemla, T. C. Damen, A. C. Gossard, W. W. Wiegmann, T. H. Wood, and C. A. Burrus, *Phys. Rev. B* **32**, 1043 (1985).
- B. Monemar, *CRC Critical Reviews in solid state and Material Sciences*, **15**, 111 (1988).
- N. Mori and T. Ando, *Phys. Rev. B* **40**, 6175 (1989).
- G. Munschy and L. Stauffer, *Phys. Stat. Sol. (b)* **91**, 633 (1979).
- C. Neuman, A. Nöthe, and N. O. Lipari, *Phys. Rev. B* **37**, 922 (1988).
- Y. Nomura, K. Shinozaki, and M. Ishii, *J. Appl. Phys.* **58**, 1864 (1985).
- G. C. Osborn and D. L. Smith, *Phys. Rev. B* **19**, 2124 (1979).
- P. Petelenz and H. V. Smith, *Journal of Low temperature Physics*, **38**, 413 (1980).
- P. Petelenz and H. V. Smith, *J. Phys. C* **13**, 47 (1980).
- P. Petelenz and H. V. Smith, *Phys. Rev. B* **23**, 3066 (1981).
- P. Petelenz and H. V. Smith, *J. Phys. C* **15**, 3721 (1982).
- P. M. Platzman, *Phys. Rev.* **125**, 1961 (1962).
- C. Priester, G. Allan and M. Lannoo, *Phys. Rev. B* **28**, 7194 (1983).

- C. Priester, G. Allan and M. Lannoo, Phys. Rev. B **29**, 3408 (1984).
- D. C. Reynolds, C. W. Litton and T. C. Collins, Phys. Rev. **156**, 881 (1965).
- D. C. Reynolds, C. E. Leak, K. K. Bajaj, C. E. Stutz, R. L. Jones, K. R. Evans, P. W. Yu, and W. M. Theis, Phys. Rev. B **40**, 6210 (1989).
- C. Reynolds and T. C. Collins, *Excitons: Their Properties and Uses* (Academic, New York, 1981).
- R. Romestain and C. Weisbuch, Phys. Rev. Lett. **45**, 2067 (1980).
- M. Rotenberg and J. Stein, Phys. Rev. **182**, 1 (1969).
- A. Saber, I. Essaoudi, A. Ainane et M. Saber Physica Status Solidi B **209**, 161 (1998).
- A. Saber, A. Ainane, M. Saber, I. Essaoudi, F. Dujardin et B. Stébé, Phys. Rev. B **60**, 4149 (1999).
- S. Das Sarma, Phys. Rev. B **27**, 2590 (1983).
- B. V. Shanabrook and J. Comas, Surf. Sci. **142**, 504 (1984).
- R. R. Sharma and S. Rodriguez, Phys. Rev. **153**, 823 (1967).
- U. Schröder and J. L. Birman, Journal of Luminescence, **1-2**, 174 (1970).
- J. N. Schulman and Y. C. Chang, Phys. Rev. B **24**, 4445 (1981).
- J. N. Schulman and Y. C. Chang, Phys. Rev. B **31**, 2056 (1985).
- T. Skettrup, M. Suffczynski, and W. Gorzkowski, Phys. Rev. B **4**, 512 (1971).
- L. Stauffer and G. Munschy, Phys. Stat. Sol. (b) **112**, 501 (1982).
- L. Stauffer, B. Stébé, and G. Munschy, Phys. Stat. Sol. (b), **119**, 193 (1983).
- L. Stauffer, *Thèse d'Etat*, Mulhouse (1984).
- L. Stauffer and B. Stébé, Phys. Rev. B **39**, 5345 (1989).
- L. Stauffer and B. Stébé, Solid State Commun. **80**, 983 (1991).
- B. Stébé, *Thèse d'Etat*, Metz (1977).
- B. Stébé and L. Stauffer, Superlattices and Microstructures **5**, 451 (1989).
- B. Stébé, L. Stauffer, and D. Fristot, J. Physique IV C5 **3**, 417 (1993).

- B. Stébé, E. Assaid, F. Dujardin et S. Le Goff, *Phys. Rev. B* **54**, 17785 (1996).
- B. Stébé, G. Munsch, L. Stauffer, F. Dujardin, and J. Murat, *Phys. Rev. B* **56**, 12454 (1997).
- B. Stébé, I. Essaoudi, A. Ainane, and M. Saber, *Phys. Rev. B* (à paraître).
- M. Suffczynski, W. Gorzkowski, and R. Kowalczyk, *Phys. Lett.* **24A**, 453 (1967).
- M. Suffczynski and W. Gorzkowski, *Acta Physica Polonica*, **A38**, 441 (1970).
- D. G. Thomas and J. J. Hopfield, *Phys. Rev. B* **128**, 2135 (1962).
- V. H. Smith, Jr. and P. Petelenz, *Phys. Rev. B* **17**, 3253 (1978).
- T. H. Wood, C.A. Burrus, D.A.B. Miller, A.C. Gossard and W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* **44**, 16 (1984).



## RESUME

Le travail présenté dans ce mémoire de thèse est consacré à l'étude des propriétés électroniques d'un exciton lié à une impureté ionisée de type donneur ( $D^+, X$ ), dans les puits quantiques de semi-conducteurs de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As et CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te, en présence des champs magnétique et électrique. Cette étude s'inscrit dans un contexte de recherche en plein développement, en raison des applications potentielles des nanostructures dans le domaine de l'optoélectronique.

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective et dans un modèle à deux bandes paraboliques simples et non dégénérées, nous avons comparé l'énergie de corrélation du complexe ( $D^+, X$ ), du donneur neutre ( $D^0$ ) et de l'exciton libre ( $X$ ) dans un puits quantique. Nous avons déduit que le complexe est toujours stable dans le domaine de variation de la largeur  $L$  du puits étudié. Nous avons discuté également l'effet de la position du donneur dans un puits quantique sur la stabilité du complexe pour une largeur du puits donnée. Enfin nous avons examiné l'influence d'un champ magnétique et d'un champ électrique sur l'énergie de l'état fondamental et sur la stabilité du complexe dans un puits quantique. Dans le cas d'un puits quantique de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As, l'application d'un champ magnétique conduit à une augmentation de l'énergie du complexe. La stabilité du complexe doit être étudiée soit par rapport au donneur, soit par rapport à l'exciton suivant une valeur critique du champ qui diminue quand la largeur du puits augmente. Dans les puits quantiques de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As et CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te le complexe est stable par rapport aux produits de dissociation les plus probables, dans tout le domaine de la largeur du puits et de l'intensité de champ magnétique étudié. En présence d'un champ électrique, l'énergie de corrélation du complexe dépend de l'intensité du champ appliqué: dans le cas d'un puits quantique de type GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As, cette dépendance, faible pour un puits étroit, devient significative pour un puits large. Le complexe est stable dans le domaine de la largeur du puits et d'intensité du champ électrique étudiés.

---

## INFLUENCE OF A MAGNETIC AND ELECTRIC FIELDS ON AN EXCITON BOUND TO AN IONIZED DONOR IMPURITY IN SEMICONDUCTOR QUANTUM WELLS

---

### ABSTRACT

This work is devoted to the study of the electronic properties of an exciton bound to an ionized donor impurity ( $D^+, X$ ) in GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As and CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te semiconductor quantum wells in the presence of the magnetic and electric fields. This study falls in a context of a research in full development, because of the potential applications of the nanostructures in the optoelectronic field. Within the framework of the effective mass approximation, and assuming isotropic parabolic and nondegenerated bands, we have compared the correlation energies of the complex ( $D^+, X$ ), the neutral donor ( $D^0$ ) and free exciton ( $X$ ) in a quantum well. We have deduced that the complex is always stable in the studied range of the well widths. We have also discussed the effect of the donor position in the quantum well on the stability of the complex for a given well width. Finally we have examined the influence of a magnetic and electric fields on the ground state energy and on its stability. In the case of a GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum well, the application of a magnetic field led to an increase in the energy of the complex. Its stability must be studied either compared to the donor, or compared to the exciton according to a critical value of the field, which decreases when the well width increases. In the case of GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As and CdTe/Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>Te quantum wells the complex is stable against dissociation into the most stable dissociation product in all the range of the well widths and intensity of the magnetic field studied. In the presence of an electric field, the correlation energy of the complex depends on the intensity of the applied field: in the case of a GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As quantum wells, this dependence, weak for a narrow wells, becomes significant for a broad wells. The complex is stable in the range of the well width and intensity of the electric field studied.

### MOTS-CLES

EXCITON, IMPURETE, COMPLEXE( $D^+, X$ ), IMPURETE IONISEE, PHONONS (LO), PUIITS  
QUANTIQUE DE SEMI-CONDUCTEURS, CHAMP MAGNETIQUE, CHAMP ELECTRIQUE