



HAL
open science

Action d'un champ magnétique sur les trions excitoniques dans les puits quantiques de semi-conducteurs

Aali Moradi

► **To cite this version:**

Aali Moradi. Action d'un champ magnétique sur les trions excitoniques dans les puits quantiques de semi-conducteurs. Physique [physics]. Université Paul Verlaine - Metz, 2001. Français. NNT : 2001METZ022S . tel-01775442

HAL Id: tel-01775442

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01775442>

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

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.culture.gouv.fr/culture/infos-pratiques/droits/protection.htm>



UNIVERSITE DE METZ
LABORATOIRE DE THEORIE DE LA MATIERE CONDENSEE

THESE

présentée par

Aali MORADI

pour obtenir le grade de

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ	
N° inv.	20010655
Cote	S/MZ 01/22
Loc	

DOCTEUR en PHYSIQUE

de

L'UNIVERSITE de METZ

Spécialité Physique du Solide

***Action d'un champ magnétique sur les trions
excitoniques dans les puits quantiques de semi-
conducteurs***

Soutenue le 23 Octobre 2001

Rapporteurs :

B. HÖNERLAGE Professeur à l'Université Louis Pasteur de Strasbourg.

P. LEFEBVRE Chargé de Recherches au CNRS à l'Université de Montpellier II.

Examineurs :

A. AINANE Professeur à l'Université Moulay Ismaïl de Meknès.

H. DREYSSE Professeur à l'Université Louis Pasteur de Strasbourg.

K. KHENG Maître de Conférence à l'Université Joseph Fourier, Grenoble I.

G. KUGEL Professeur à l'Université de Metz.

Directeur de thèse :

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE DE METZ

de Metz.



022 421647 6



UNIVERSITE DE METZ
LABORATOIRE DE THEORIE DE LA MATIERE CONDENSEE

THESE

présentée par

Aali MORADI

pour obtenir le grade de

DOCTEUR en PHYSIQUE

de

l'UNIVERSITE de METZ
Spécialité Physique du Solide

***Action d'un champ magnétique sur les trions
excitoniques dans les puits quantiques de semi-
conducteurs***

Soutenue le 23 Octobre 2001

Rapporteurs :

B. HÖNERLAGE Professeur à l'Université Louis Pasteur de Strasbourg.
P. LEFEBVRE Chargé de Recherches au CNRS à l'Université de Montpellier II.

Examineurs :

A. AINANE Professeur à l'Université Moulay Ismail de Meknès.
H. DREYSSE Professeur à l'Université Louis Pasteur de Strasbourg.
K. KHENG Maître de Conférence à l'Université Joseph Fourier, Grenoble I.
G. KUGEL Professeur à l'Université de Metz.

Directeur de thèse :

B. STEBE Professeur à l'Université de Metz.

REMERCIEMENTS

Ce travail a été effectué au sein du Laboratoire de la Théorie de la Matière Condensée de l'Université de Metz sous la direction de Monsieur le Professeur Bernard STEBE.

Je tiens ici à lui exprimer ma profondé gratitude et de ma reconnaissance pour l'esprit avec lequel il m'a conseillé et guidé au cours de ce travail. Je lui suis reconnaissant pour l'aide constante et le soutien qu'il m'a apporté en me faisant profiter de ses compétences scientifiques.

Je remercie chaleureusement Monsieur G. KUGEL Professeur à l'université de Metz d'avoir accepté de présider le jury et Messieurs B. HÖNERLAGE Professeur à l'Université Louis Pasteur de Strasbourg, P. LEFEBVRE Chargé de Recherche au CNRS à l'Université de Montpellier II d'avoir accepté de juger ce travail. Qu'ils trouvent ici ma profonde reconnaissance.

Mes remerciements vont également à Messieurs H. DREYSSE Professeur à l'Université Louis Pasteur de Strasbourg, A. AINANE Professeur à l'Université Moulay Ismaïl de Meknès et K. KHENG Maître de Conférence à l'Université Joseph Fourier, Grenoble I pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant de participer au jury de cette thèse.

J'exprime mes sincères remerciements aux membres du Laboratoire pour l'aide qu'ils m'ont apportée. Particulièrement, Monsieur F. DUJARDIN Maître de Conférence à l'Université de Metz pour son aide efficace et compétente.

Mes remerciements vont aussi à tous les amis et collègues de l'Institut de Physique et d'électronique de Metz qui ont contribué à une ambiance amicale durant la préparation de cette thèse. En particulier les discussions que j'ai eu avec A. EL HASSANI, I. ESSAOUDI et P. WECK sans compter la sympathie de Messieurs J. L. BRETONNET, N. JAKSE et J. F. WAKS qui ont rendu mon séjour au Laboratoire aussi agréable qu'enrichissant. Qu'ils trouvent ici le témoignage de ma sincère gratitude.

A tous mes amis et collègues de l'Université de Metz. Qu'ils trouvent ici le témoignage de ma sincère amitié.

Table des Matières

1	INTRODUCTION GENERALE	5
2	ETATS DE TRIONS DANS UN Puits QUANTIQUE EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE	13
2.1	Introduction	13
2.2	Modèle à deux bandes	14
2.2.1	Hamiltonien électronique du cristal	14
2.2.2	Expression des opérateurs du Hamiltonien électronique	18
2.3	Etats trioniques	21
2.3.1	Définition	21
2.3.2	Equation de la fonction enveloppe	22
3	ENERGIE DE L'ETAT FONDAMENTAL DES TRIONS	27
3.1	Introduction	27
3.2	Trion positif à champ nul	28
3.3	Trion négatif et positif en présence d'un champ magnétique	32
3.4	Résultats et discussion	40

3.5	Conclusion	52
4	THEORIE DE L'INTERACTION RAYONNEMENT-MATIERE DANS UN MODELE A DEUX BANDES	53
4.1	Introduction	53
4.2	Interaction rayonnement-matière avec un système électron-trou dans un modèle à deux bandes	53
4.2.1	Approximation dipolaire électrique	57
4.2.2	Absorption à un photon	58
4.3	Propriétés optiques et magnéto-optiques des excitons dans les puits quantiques	59
4.3.1	Absorption des excitons à champ nul	59
4.3.2	Absorption des excitons en présence d'un champ magnétique .	63
4.4	Conclusion	65
5	PROPRIETES OPTIQUES ET MAGNETO-OPTIQUES DES TRI- ONS	67
5.1	Introduction	67
5.2	Absorption du trion négatif en l'absence de champ magnétique	69
5.2.1	Probabilité de transition	69
5.2.2	Coefficient d'absorption	76
5.3	Propriétés magnéto-optiques du trion négatif	76
5.3.1	Calcul des coefficients C_{λ_i}	76
5.3.2	Coefficient d'absorption	79

5.4	Résultats et discussion	80
5.5	Conclusion	92
	CONCLUSION GENERALE	93
	APPENDICES	95
A	PARTICULE DANS UN Puits QUANTIQUE EN PRESENCE	
	D'UN CHAMP MAGNETIQUE	95
A.1	Etats électroniques	95
A.2	Equation de la fonction enveloppe	97
A.2.1	Résolution de l'équation de Schrödinger d'une parti-cule dans un puits quantique à champ nul	98
A.2.2	Résolution de l'équation de Schrödinger d'une parti-cule dans un puits quantique en présence d'un champ magnétique	99
B	EXCITON DANS UN Puits QUANTIQUE EN PRESENCE D'UN	
	CHAMP MAGNETIQUE	103
B.1	Etats excitoniques	103
B.2	Equation de la fonction enveloppe	104
B.3	Hamiltonien effectif de l'exciton	106
B.4	Calcul des éléments de matrice	108
C	CALCUL DES TERMES DU POTENTIEL DU Puits ET DU	
	POTENTIEL COULOMBIEN	119

C.1	Calcul du potentiel du puits	119
C.2	Calcul de l'interaction coulombienne	120
D	ELEMENTS DE MATRICE DES TRIONS	129
	BIBLIOGRAPHIE	132

Chapitre 1

INTRODUCTION GENERALE

Les nouvelles méthodes de croissance cristalline (épitaxie par jets moléculaires ou épitaxie en phase vapeur des organo-métalliques) ont permis de réaliser des empilements de différents composés semi-conducteurs à l'échelle de la monocouche atomique et de réaliser des hétérostructures ou nanostructures de semi-conducteurs.

Il est ainsi possible de déposer un composé de faible énergie de bande interdite (par exemple GaAs) entre deux couches de plus grande énergie de bande interdite (par exemple GaAlAs). La couche de GaAs représente un puits de potentiel pour les électrons de la bande de conduction et pour les trous dans la bande de valence [Figure (1.1)]. Si l'épaisseur du puits est suffisamment réduite (environ 10nm), les effets du confinement quantique deviennent importants. Les propriétés électroniques de la microstructure sont modifiées par la présence de barrières de potentiel, et le comportement des matériaux devient quasi-bidimensionnel. En effet, l'énergie cinétique des électrons se déplaçant perpendiculairement au plan de la couche ne peut prendre qu'un nombre fini de valeurs, alors que leur mouvement dans le plan des couches reste "libre".

Par suite du confinement quantique, ces composés présentent des propriétés optiques et électroniques originales, d'un grand intérêt pratique pour les dispositifs optoélectroniques, comme les lasers à puits quantiques ou les modulateurs optiques. Cela résulte du fait que la densité d'état d'un gaz d'électrons bidimensionnel (2D) est constante alors que la densité d'état d'un gaz d'électrons tridimensionnel (3D) se comporte comme la racine carrée de l'énergie. En conséquence, les différentes caractéristiques optiques de ces composés sont modifiées. Enfin, le confinement quantique a également pour effet, d'augmenter les interactions coulombiennes entre quasi-

particules chargées.

Dans les cristaux semi-conducteurs, ces interactions peuvent donner naissance à des états excités électroniques particuliers, les excitons. Le concept d'exciton a été introduit, pour la première fois par Frenkel (1931), qui considère que l'électron et le trou sont étroitement liés, l'exciton dans ce cas est dit localisé. D'autres études ont été consacrées aux excitons, citons les travaux de Wannier (1937) et Mott (1938) pour qui la liaison est faible et la distance entre l'électron et le trou est grande par rapport aux paramètres cristallins, l'exciton dans ce cas s'étend sur plusieurs sites atomiques. D'autres auteurs se sont intéressés à l'étude de l'exciton dans les années 30, citons ici Peirls (1932). Dans sa représentation la plus simple, l'exciton peut être assimilé à une paire électron-trou (e, h) liée par un potentiel coulombien. Les premières observations expérimentales des excitons sont dues à Nikitine (1959) et Gross (1956). Une revue relative aux premiers travaux sur l'exciton est due à Knox (1963), Dimmok (1963), Reynolds (1965) et Nikitine (1969). Dans les hétérostructures de semi-conducteurs, les énergies de liaison des excitons deviennent plus importantes que dans le cas des semi-conducteurs massifs, de sorte qu'il devient possible de les observer à température ambiante. En réalité, l'exciton est un phénomène collectif qui ne peut être ramené à un problème à deux corps que dans certains cas particuliers [Haken (1956), Elliot (1957, 1961), Sham et Rice (1966) et Kubler (1967)]. Son étude présente une grande importance en pratique, puisque les niveaux excitoniques peuvent être utilisés dans les transitions intervenant dans le fonctionnement de modulateurs électro-optiques.

De même que les atomes d'un gaz d'hydrogène ont tendance à se combiner pour former des molécules d'Hydrogène (H_2), deux excitons libres peuvent se combiner pour donner naissance à un autre complexe excitonique mobile et neutre, le biexciton ou molécule excitonique (X_2) [Nikitine (1975), Hanamura (1976)]. Ce complexe excitonique a été identifié dans plusieurs semi-conducteurs dont le Silicium [Haynes (1966)] ainsi que dans les semi-conducteurs composés CuCl [Nikitine (1969)], ZnO [Packard et al. (1967)] et dans les puits quantiques de type GaAs/GaAlAs [Miller (1982)].

Par analogie avec certains petits systèmes atomiques et moléculaires stables, par exemple H^- , H_2^+ et H_2 , Lampert (1958) a suggéré l'existence de plusieurs complexes excitoniques dans les semi-conducteurs massifs, en généralisant le concept de l'exciton de Wannier aux complexes formés de plusieurs particules chargées. Ces complexes peuvent être mobiles ou localisés, chargés ou neutres.

Parmi les complexes localisés résultant de la liaison d'un exciton avec une impureté nous pouvons citer le complexe exciton-donneur neutre (D^0, X), le complexe exciton-accepteur neutre (A^0, X), ou encore le complexe exciton-donneur ionisé (D^+, X), qui ont été observés pour la première fois dans les spectres de photoluminescence du Silicium par Haynes (1960) et dans d'autres semi-conducteurs [Thomas et Hopfield (1962), Reynolds (1965), Nassau (1970) Dean et Herbert (1979)].

Lampert a également envisagé l'existence de complexes excitoniques mobiles et chargés résultant de la liaison d'un électron ou d'un trou avec un exciton, donnant lieu à un exciton chargé négativement ou trion négatif ($e+X \rightarrow X^-$), ou à un exciton chargé positivement ou trion positif ($h+X \rightarrow X_2^+$). Du fait de leur charge, ces complexes présentent des propriétés originales les différenciant des autres complexes excitoniques. Dans les années soixante dix, de nombreux auteurs se sont intéressés à la stabilité de ces complexes [Stébé (1974, 1975, 1976, 1977), Gerlach (1974), Insepov (1975), Rashba (1975)]. En particulier Munsch et Stébé (1974, 1975) ont calculé les énergies de liaison de ces deux complexes et démontré leur stabilité. Ils ont utilisé un calcul de type atomique pour l'exciton chargé négativement (X^-), et ont confirmé l'existence d'un état stable pour toute valeur du rapport des masses effectives de l'électron et du trou $\sigma = \frac{m_e^*}{m_h^*}$. Pour l'exciton chargé positivement (X_2^+), ils ont utilisé un calcul de type moléculaire non adiabatique, plus précis pour $\sigma \leq 0.1$.

Des études expérimentales dans les semi-conducteurs massifs ont été consacrées aux deux types de complexes (X^- et X_2^+). Citons ici les travaux de Thomas et Rice (1977) qui ont observé un élargissement de la raie de luminescence du Germanium quand l'intensité d'excitation augmente. Cet élargissement n'est observé que pour les basses énergies de la raie de luminescence et est attribué à la recombinaison de l'exciton chargé (X^- ou X_2^+). Kawabata et al. (1977) ont observé l'apparition de nouvelles raies d'absorption de résonance cyclotronique dans le Silicium, sous forte excitation, à $1.7K$ et qui disparaissent à $4.2K$. Ils ont émis l'hypothèse que ces nouvelles raies pourraient résulter de l'absorption de résonance cyclotronique d'exciton chargé. Stébé et Comte (1978) ont attribué la raie d'absorption ν_2 du chlorure de cuivre ($CuCl$) à celle de l'exciton chargé positivement (X_2^+). Notons que dans $CuCl$ les énergies de liaison excitoniques sont très élevées. Cependant, d'une manière générale, les énergies de liaison dans le cas des semi-conducteurs massifs restent très faibles, ce qui rend l'observation expérimentale de ces complexes très difficile. Le confinement dans un système de type puits quantique augmente l'énergie de liaison de tout complexe excitonique [(D^0, X) , (A^0, X) , etc ...] en forçant les porteurs à se rapprocher, accrois-

sant ainsi leurs interactions coulombiennes. Les excitons chargés devraient donc être plus facilement observables dans les puits quantiques. C'est ce qui a poussé certains théoriciens à chercher à calculer les énergies de liaison des trions dans le cas limite bidimensionnel (2D) [Stébé et Ainane (1989)], et dans les puits quantiques de semi-conducteurs [Stébé et al. (1997)]. Ces études ont permis de démontrer une importante augmentation de l'énergie de liaison lorsqu'on passe des semi-conducteurs 3D au semi-conducteurs 2D. Depuis ces premiers travaux théoriques, de nombreuses publications expérimentales ont confirmé l'existence des excitons chargés dans les puits quantiques de semi-conducteurs.

Depuis leurs premières identifications par Kheng (1993) dans les puits quantiques de type CdTe/CdZnTe, les excitons chargés ont fait l'objet de plusieurs études expérimentales, dans les hétérostructures semi-conductrices quasi-bidimensionnelles. Les expériences d'électroluminescence sur les puits quantiques de type GaAs/GaAlAs, ont permis d'observer une forte augmentation du pic de l'exciton chargé négativement (X^-), et une diminution du pic excitonique lorsqu'on augmente la concentration d'électrons dans le puits (de l'ordre de 10^{10}cm^{-2}) [Buhman (1995)]. D'autres expériences de photoluminescence ont permis l'identification simultanée de l'exciton chargé négativement (X^-) et positivement (X_2^+) [Shields (1995a), Finkelstein (1996a)]. Les expériences de magnéto-absorption dans les puits quantiques de type GaAs/GaAlAs ont permis l'identification de l'état singulet (X_s^-) ainsi que de l'état triplet (X_t^-) de l'exciton chargé négativement [Shields (1995a, 1995b), Buhman (1995), Finkelstein (1995, 1996a, 1996b), Gekhtman (1996), Homburg (2000)]. Dans les puits quantiques de type CdTe/CdZnTe et CdTe/CdMgTe, l'identification et les caractéristiques optiques du trion négatif piégé sur les îlots monomoléculaires de CdTe ont été étudiées [Taliencio et al. (1998)]. En particulier, ces auteurs ont observé pour la première fois le trion à trou léger. Il a été également observé que l'énergie de liaison du trion s'accroît fortement avec la localisation sur les îlots et qu'elle varie en fonction de l'excitation optique des échantillons, à cause de la neutralisation des champs électriques internes. La présence de ces complexes est à l'origine de propriétés optiques originales [Lefebvre et al. (1997a, 1997b), Calvo et al. (1998), Taliencio (2000)]. Notons que ces observations n'ont pas été faciles à cause du faible écart énergétique des raies excitoniques du complexe (D^0, X) et de celles de (X^-) [Kheng (1993)]. Il en a été de même pour l'ion (H^-) qui ne possède qu'un seul état lié [Bethe et Salpeter (1977)] : il n'admet pas d'états discrets. L'application d'un champ magnétique a facilité l'identification de l'exciton chargé dans les puits quantiques de type CdTe/CdZnTe [Kheng (1994, 1996, 1998), Lovisa (1997), Haury (1998), Yakovlev (1997, 2000)] comme dans les

puits quantiques de type GaAs/GaAlAs [Shields (1995c, 1997a, 1997b), Pnomarev (1996), Buhman (1996, 1999), Brinkmann (1995), Hayne (1999), Finkelstein (1996b), Kozhevnikov (1997), Ryu (1996), Volkov (1998), Glasberg (1999), Vanhoucke (2000)]. L'intérêt du champ pour l'étude de l'exciton chargé vient aussi du fait que celui-ci soit une entité chargée et puisse donc être susceptible d'avoir un mouvement cyclotronique. Récemment, Glasberg et al. (1999) ont montré que le comportement de l'exciton chargé positivement (X_2^+) est similaire à celui de l'exciton chargé négativement (X^-) à champ nul, mais leurs spectres sont différents en présence d'un champ magnétique.

Parmi les travaux théoriques concernant l'influence d'un champ magnétique sur l'exciton chargé, mentionnons les travaux de Woj (1995), Palacios (1996) Thilagam (1997), Chapman (1997, 1998) et Dzyubenko (2000a, 2000b). Leurs études ont été consacrées à l'influence d'un champ magnétique fort sur l'état singulet (X_s^-) de l'exciton chargé négativement dans le cas bidimensionnel (2D). D'autres travaux théoriques dans le cas des puits quantiques finis [Whittaker (1997)] ou infinis [Wang (1997)] ont été consacrés à l'étude de l'influence d'un champ magnétique fort sur les états singulets (X_s^-) et triplets (X_t^-) de l'exciton chargé négativement. A notre connaissance, il n'existe pas de travaux théoriques concernant l'exciton chargé positivement (X_2^+) dans les puits quantiques sous l'influence d'un champ magnétique. Dans le cas des champs faibles, les premières études théoriques menées par Stébé et Feddi (1987) sur les excitons chargés dans les semi-conducteurs tridimensionnels (3D) ont permis de mettre en évidence, d'une part l'augmentation de l'énergie de liaison et, d'autre part, l'apparition d'une magnéto-absorption oscillatoire résultant de l'existence des niveaux de Landau associés à la charge du centre de masse. Dans les milieux bidimensionnels (2D), Stébé et Ainane (1996) ont mis en évidence un renforcement et une quantification supplémentaire des énergies par suite du confinement géométrique.

Récemment, plusieurs travaux expérimentaux et théoriques ont été consacrés à l'étude des propriétés optiques des excitons chargés dans les puits quantiques de semi-conducteurs, notons les travaux de Ossau et al. (2000), Bronold (2000), Vanelle et al. (2000) et Taliercio et al. (2000). D'autres auteurs, se sont intéressés plus particulièrement au calcul de la durée de vie des trions négatifs dans les puits quantiques de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, mentionnant les travaux de Ciulin et al. (1998, 2000), Shields et al. (2000) et Esser et al. (2000a, 2000b, 2000c).

Nous consacrons ce travail à l'étude de l'influence d'un champ magnétique uniforme sur l'énergie des excitons chargés dans un puits quantique de semi-conducteur.

Au deuxième chapitre, nous présentons le formalisme des excitons chargés négative-

ment dans un puits quantique de semi-conducteur en présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan. Nous généralisons le formalisme développé dans le cas des semi-conducteurs tridimensionnels (3D) [Stébé (1976), Stébé et Feddi (1987)], bidimensionnels (2D) [Stébé et Ainane (1991)] en l'absence et en présence d'un champ magnétique ainsi que dans le cas des puits quantiques de semi-conducteurs à champ nul [Stébé et al. (1997)]. Enfin, nous établissons l'équation de Schrödinger pour la fonction enveloppe dans le cadre de l'approximation de la masse effective.

Au troisième chapitre, nous déterminons l'énergie de liaison de l'état fondamental de l'exciton chargé en l'absence et en présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches, à l'aide d'une méthode variationnelle, et nous discutons les invariants du problème. Nous remarquons que les énergies de liaison de l'exciton chargé négativement (X^-) et positivement (X_2^+) sont très proches à champ nul contrairement à ce qui se passe dans le cas des semi-conducteurs tridimensionnels et bidimensionnels, alors que leurs spectres sont différents en présence d'un champ magnétique. Nous montrons que seul le mouvement du centre de masse dans le plan des couches peut être séparé du mouvement relatif dans l'approximation des champs faibles, ainsi le couplage des deux mouvements dans le plan peut être négligé. De plus, le mouvement du centre de masse se comporte comme une particule chargée dont les niveaux d'énergie en présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan se décomposent en niveaux de Landau.

Au quatrième chapitre, nous présentons le formalisme général de l'interaction rayonnement matière dans un modèle à deux bandes dans un puits quantique de semi-conducteur en présence d'un champ magnétique dirigé selon l'axe z . Nous nous limitons aux transitions à un photon en faisant abstraction aux effets de polariton. Nous terminons par quelques propriétés optiques et magnéto-optiques des excitons dans les puits quantiques de semi-conducteurs.

Au cinquième chapitre, nous nous intéressons aux propriétés optiques et magnéto-optiques des excitons chargés dans les puits quantiques de semi-conducteurs. Nous calculons le coefficient d'absorption à champ nul en fonction des fréquences d'excitation en tenant compte de la température et de la densité des porteurs de charge. La forme de la raie d'absorption est caractérisée par un pic associé à une "queue" décroissante vers les basses fréquences. Ce phénomène est analogue à celui observé dans le cas tridimensionnel (3D) par Stébé et Feddi (1987) et bidimensionnel (2D) par Stébé et Ainane (1996) et Stébé et al. (1998). En tenant compte de la concentration des électrons, nous pouvons distinguer trois régions pour lesquelles le pic d'absorption de l'exciton

chargé négativement augmente ou diminue par rapport au pic excitonique; nous remarquons que pour une concentration d'électrons $n_e \leq 10^9 \text{ cm}^{-2}$, la raie d'absorption du trion négatif n'existe pratiquement pas, alors que celle de l'exciton est très importante, pour une concentration $n_e \simeq 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, nous assistons à l'apparition de la raie de l'exciton chargé négativement, alors que pour $n_e \simeq 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, la raie trionique est très importante par rapport à celle de l'exciton. Par ailleurs, plus nous augmentons la température plus le pic d'absorption diminue. La même remarque peut être faite pour l'exciton chargé positivement. En présence d'un champ magnétique, le spectre d'absorption se réduit à une série de pics de Dirac suite au confinement total (d'origine magnétique et du confinement quantique) séparés par l'énergie de résonance cyclotronique associée au centre de masse.

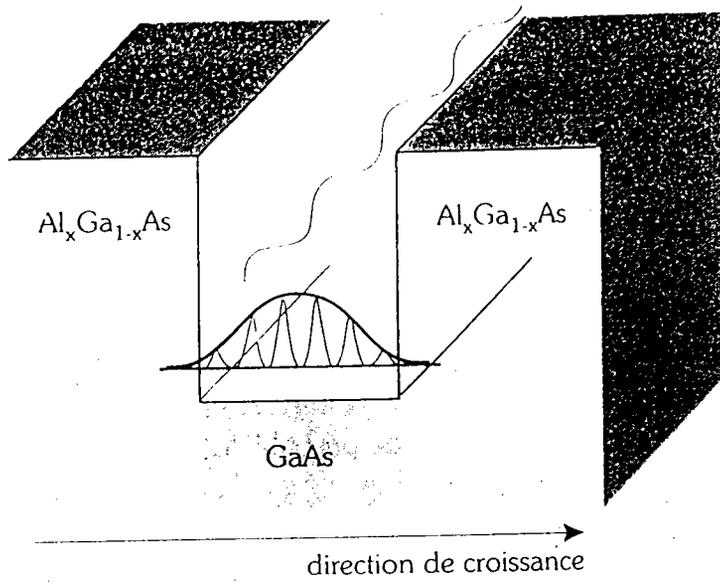


Figure (1.1) : Schéma d'un puits quantique crée en faisant croître une couche de GaAs entre deux couches "barrières" de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Chapitre 2

ETATS DE TRIONS DANS UN PUITS QUANTIQUE EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE

2.1 Introduction

A très basse température, l'état fondamental d'un cristal semi-conducteur correspond à des bandes de valence complètement occupées par N électrons et des bandes de conduction vides. Une excitation électronique se produit lorsqu'un électron de valence est déplacé vers une bande de conduction, laissant un état vide appelé "trou". Les $N-1$ électrons de valence qui restent se comportent alors comme une particule unique dotée d'une charge positive et d'une masse effective différente de celle de l'électron. L'interaction coulombienne entre l'électron et le trou donne lieu à un état lié caractérisé par une raie excitonique située au bord de l'absorption principal. Le modèle de bande ne suffit pas pour expliquer la présence de telles raies et il faut recourir à une théorie tenant compte des effets collectifs, ce qui est fait de manière satisfaisante dans le cadre de la deuxième quantification. Nous utilisons un formalisme consistant en une généralisation de celui développé par Haken (1976) dans le cas de l'exciton dans les semi-conducteurs tridimensionnels. Une extension de ce formalisme au cas des excitons chargés a été développée pour la première fois par Stébé (1977) dans les semi-conducteurs tridimensionnels à champ nul puis par Stébé et Feddi (1987) en présence d'un champ magnétique. Stébé et Ainane (1991) ont consacré leur étude à la généralisation de ce formalisme au cas des excitons chargés dans les milieux stricte-

ment bidimensionnels en présence d'un champ magnétique. En effet, nous tenons compte ici de la présence du champ magnétique et d'un potentiel relatif au puits quantique.

Nous établissons tout d'abord un Hamiltonien effectif d'interaction électron-trou dans un modèle à deux bandes non dégénérées. Nous négligeons tous les termes correspondant à des transitions virtuelles en supposant que le nombre d'électrons et de trous des deux bandes soit fixe. Nous négligeons les interactions d'échange électrons-trous ainsi que les contributions dues aux spins, et au couplage spin-orbite.

2.2 Modèle à deux bandes

2.2.1 Hamiltonien électronique du cristal

Nous supposons que les électrons se meuvent dans un réseau strictement périodique. Nous décrivons l'état fondamental du gaz d'électrons à température nulle dans l'approximation de Hartree-Fock en négligeant les effets relatifs aux spins et au couplage spin-orbite. Dans ces conditions, le Hamiltonien relatif à l'ensemble des électrons de valence dans un puits quantique de semi-conducteur en présence d'un champ magnétique, s'écrit :

$$H_{el} = \int d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) H_1 \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}') H_2 \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

où $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$ et $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ sont les opérateurs champs de fermions, correspondant respectivement à la création et l'annihilation d'un électron en un point \mathbf{r} . Les opérateurs H_1 et H_2 représentent respectivement des opérateurs à un et deux électrons. En présence du champ magnétique l'opérateur H_1 s'écrit :

$$H_1 = \frac{\pi^2}{2m_e} + V_p(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}). \quad (2.2)$$

L'opérateur $V_p(\mathbf{r})$ représente l'énergie potentielle effective d'un électron soumis au champ des noyaux atomiques, supposés infiniment lourds et au repos dans l'approximation de Born-Oppenheimer, et des électrons des couches internes. Ce potentiel périodique tient compte de l'interaction avec les ions du cristal ainsi que d'une partie de l'interaction d'échange électron-électron. Nous caractériserons l'influence du puits quantique par un potentiel $U(\mathbf{r})$ dont nous préciserons les propriétés par la suite.

m_e est la masse de l'électron au repos, $\boldsymbol{\pi}$ est l'opérateur quantité de mouvement généralisée

$$\boldsymbol{\pi} = -i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

avec e la charge de l'électron, c la vitesse de la lumière dans le vide et $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ le potentiel-vecteur de l'électron qui s'exprime en fonction du champ magnétique \mathbf{B} dans la jauge de Coulomb par $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$.

L'opérateur H_2 traduit l'interaction entre deux électrons et se limite au potentiel coulombien dans l'approximation non relativiste

$$H_2(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = V_c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{e^2}{\kappa|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (2.4)$$

où κ est une constante diélectrique effective tenant compte de l'effet d'écran des autres électrons et de la polarisation des ions.

Les opérateurs champs de fermions $\hat{\Psi}^+(\mathbf{r})$ et $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ sont développés dans une base orthonormée de fonctions à une particule $\varphi_{n\lambda}(\mathbf{r})$. En négligeant les interactions électrons-phonons, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}) &= \sum_{n\lambda} a_{n\lambda}^+ \varphi_{n\lambda}^*(\mathbf{r}) \\ \hat{\Psi}(\mathbf{r}) &= \sum_{n\lambda} a_{n\lambda} \varphi_{n\lambda}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.5)$$

où $a_{n\lambda}^+$ et $a_{n\lambda}$ sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation d'un électron dans un état $\lambda = (k_x, k_z, N)$ et la bande n . Ils satisfont aux relations de commutation suivantes :

$$\left[a_{n\lambda}^+, a_{n'\lambda'}^+ \right]_+ = \left[a_{n\lambda}, a_{n'\lambda'} \right]_+ = 0 \quad \text{et} \quad \left[a_{n\lambda}^+, a_{n'\lambda'} \right]_+ = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{nn'}, \quad (2.6)$$

et

$$\begin{aligned} \left[\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}), \hat{\Psi}^+(\mathbf{r}') \right]_+ &= \left[\hat{\Psi}(\mathbf{r}), \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \right]_+ = 0 \\ \left[\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}), \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \right]_+ &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (2.7)$$

La sommation se fait sur toutes les bandes et sur la première zone de Brillouin. En fait, nous simplifions le problème en ne considérant que les états de la dernière bande de valence et ceux de la première bande de conduction pour construire les états excités du cristal. Cette approximation est justifiée dans la mesure où les énergies de liaison des excitons considérés sont petites comparées à celles de la bande interdite ainsi que

celles correspondant à la décomposition des deux dernières bandes de valence par suite du couplage spin-orbite, que nous négligeons. De plus, nous nous limitons aux semi-conducteurs à bande interdite directe pour $\mathbf{k} = \mathbf{0}$.

Les fonctions $\varphi_{n\lambda}(\mathbf{r})$ sont obtenues en résolvant l'équation d'une particule en présence d'un champ magnétique ;

$$\left[\frac{\pi^2}{2m_e} + V_p(\mathbf{r}) \right] \varphi_{n\lambda}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{n\lambda} \varphi_{n\lambda}(\mathbf{r}), \quad (2.8)$$

ses solutions peuvent être obtenues dans le cadre de l'approximation de la masse effective [Luttinger et Kohn (1955)] et s'écrivent sous la forme :

$$\varphi_{n\lambda}(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) g_{n\lambda}(\mathbf{r}), \quad (2.9)$$

où $g_{n\lambda}(\mathbf{r})$ correspond au mouvement d'une particule dans un champ magnétique en l'absence de puits quantique (Appendice A-1). Les fonctions $u(\mathbf{r})$ correspondent à la partie périodique des fonctions de Bloch au centre de la zone de Brillouin ($\mathbf{k} = \mathbf{0}$). Les fonctions $g_{n\lambda}(\mathbf{r})$ sont données, dans le cas d'un électron, par :

$$g_{n\lambda}(\mathbf{r}) = g_{c\lambda}(\mathbf{r}) = \mathcal{A} \exp i(k_z z + k_x x) \exp \left[-i \left(\frac{eB}{2\hbar c} \right) xy \right] \exp \left[-(y - y_0)^2 \frac{eB}{2\hbar c} \right] \\ \times H_N \left[(y - y_0) \left(\frac{eB}{2\hbar c} \right)^{\frac{1}{2}} \right], \quad (2.10)$$

où H_N est le polynôme d'Hermite et \mathcal{A} est une constante de normation.

Afin d'exprimer le Hamiltonien électronique donné par l'équation (2.1) dans notre modèle à deux bandes, nous développons les opérateurs champs de fermions d'une manière plus dense, sous la forme :

$$\hat{\Psi}^+(\mathbf{r}) = \hat{\Psi}_c^+(\mathbf{r}) + \hat{\Psi}_v^+(\mathbf{r}), \\ \hat{\Psi}(\mathbf{r}) = \hat{\Psi}_c(\mathbf{r}) + \hat{\Psi}_v(\mathbf{r}), \quad (2.11)$$

avec

$$\hat{\Psi}_c^+(\mathbf{r}) = \hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} a_{\lambda}^+ \varphi_{c\lambda}^*(\mathbf{r}), \\ \hat{\Psi}_v^+(\mathbf{r}) = \hat{\Psi}_h^+(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda} d_{\lambda} \varphi_{h\lambda}(\mathbf{r}), \quad (2.12)$$

où $\varphi_{c\lambda}(\mathbf{r})$ et $\varphi_{h\lambda}(\mathbf{r})$ sont les fonctions d'onde des électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence en présence d'un champ magnétique.

Comme les fonctions $\varphi_{n\lambda}(\mathbf{r})$ forment une base orthonormée, les opérateurs de création et d'annihilation d'électron et de trou a_{λ}^{\dagger} et d_{λ} , respectivement, s'écrivent sous la forme :

$$\begin{aligned} a_{\lambda}^{\dagger} &= \int d^3\mathbf{r} \varphi_{c\lambda}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_e^{\dagger}(\mathbf{r}), \\ d_{\lambda} &= \int d^3\mathbf{r} \varphi_{h\lambda}^*(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_h(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.13)$$

En première approximation, les parties périodiques des fonctions de Bloch des deux bandes peuvent être approchées par leurs expressions $c(\mathbf{r})$ et $v(\mathbf{r})$ au centre de la zone de Brillouin. En présence du champ magnétique, les fonctions d'onde des électrons et des trous s'écrivent :

$$\begin{aligned} \varphi_{c\lambda}(\mathbf{r}) &= c(\mathbf{r}) g_{e\lambda}(\mathbf{r}) = \varphi_{e\lambda}(\mathbf{r}), \\ \varphi_{v\lambda}(\mathbf{r}) &= v(\mathbf{r}) g_{v\lambda}(\mathbf{r}) = \varphi_{h\lambda}^*(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.14)$$

En reportant les expressions (2.11) et (2.12) dans l'équation (2.1), nous obtenons l'expression du Hamiltonien effectif d'interaction électron-trou dans notre modèle à deux bandes ;

$$H_{el} = H_0 + H_I, \quad (2.15)$$

où

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\lambda\lambda',ij} a_{i\lambda}^{\dagger} a_{j\lambda'} \int d^3\mathbf{r} \varphi_{i\lambda}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\pi^2}{2m_e} + V_p(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \right] \varphi_{j\lambda'}^*(\mathbf{r}) \\ i, j &= c, v \end{aligned} \quad (2.16)$$

et

$$H_I = H_{cc} + H_{vv} + H_{cv}, \quad (2.17)$$

où

$$H_{cc} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda_i, i=1,4} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_2}^{\dagger} a_{\lambda_3} a_{\lambda_4} W \left(\begin{smallmatrix} c & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right). \quad (2.18)$$

Ce terme correspond à l'interaction entre les électrons de la bande de conduction, alors que

$$H_{vv} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda_i, i=1,4} d_{\lambda_1} d_{\lambda_2} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda_4}^{\dagger} W \left(\begin{smallmatrix} v & v \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right), \quad (2.19)$$

traduit l'interaction entre les trous de la bande de valence. Le dernier terme est donné par :

$$H_{cv} = - \sum_{\lambda_i, i=1,4} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_4} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda_2} \left\{ W \left(\begin{smallmatrix} c & v \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) - W \left(\begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda_2 \lambda_1 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \right\}, \quad (2.20)$$

ce terme correspond à l'interaction entre les électrons et les trous. Nous définissons :

$$W \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 & j_4 \\ \lambda_1 \lambda_2 & | & \lambda_3 \lambda_4 \end{pmatrix} = \int \int d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' \varphi_{j_1 \lambda_1}^* (\mathbf{r}) \varphi_{j_2 \lambda_2}^* (\mathbf{r}') V_c \varphi_{j_3 \lambda_3} (\mathbf{r}') \varphi_{j_4 \lambda_4} (\mathbf{r})$$

avec $j_i = c_i, v_i.$ (2.21)

Finalement, le Hamiltonien effectif H_{el} peut se mettre sous la forme d'une somme d'opérateurs d'électrons et de trous ;

$$H_{el} = H_e + H_h + H_{e-e} + H_{h-h} + H_{e-h} + \mathcal{E}_0. \quad (2.22)$$

2.2.2 Expression des opérateurs du Hamiltonien électronique

L'opérateur H_e représente le Hamiltonien des électrons dans la bande de conduction, n'interagissant ni entre eux, ni avec les trous ;

$$H_e = \sum_{\lambda \lambda'} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'} \int d^3 \mathbf{r} \varphi_{c\lambda}^* (\mathbf{r}) \left[H_{eff}^{c,\lambda} + U(\mathbf{r}) \right] \varphi_{c\lambda'} (\mathbf{r}). \quad (2.23)$$

où $H_{eff}^{c,\lambda}$ désigne le Hamiltonien effectif d'un électron de conduction tel que celui obtenu par les méthodes self-consistent utilisées dans les calculs de bandes et tenant compte d'une énergie potentielle effective V_{eff}^c , incluant l'énergie potentielle due aux bandes de valence pleines ainsi que l'énergie potentielle d'échange électron-trou. Une expression similaire est obtenue pour l'opérateur H_h qui présente le Hamiltonien des trous dans la bande de valence, n'interagissant ni entre eux, ni avec les électrons ;

$$H_h = - \sum_{\lambda \lambda'} d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda'} \int d^3 \mathbf{r} \varphi_{v\lambda}^* (\mathbf{r}) \left[H_{eff}^{v,\lambda} + U(\mathbf{r}) \right] \varphi_{v\lambda'} (\mathbf{r}). \quad (2.24)$$

L'opérateur H_{e-e} représente l'interaction coulombienne entre deux électrons de la bande de conduction :

$$H_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda_i, i=1,4} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_2}^{\dagger} a_{\lambda_3} a_{\lambda_4} W \begin{pmatrix} c & c & c & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & | & \lambda_3 \lambda_4 \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

L'opérateur H_{h-h} qui représente l'interaction coulombienne entre deux trous de la bande de valence peut se mettre sous une forme similaire :

$$H_{h-h} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda_i, i=1,4} d_{\lambda_1} d_{\lambda_2} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda_4}^{\dagger} W \begin{pmatrix} v & v & v & v \\ \lambda_1 \lambda_2 & | & \lambda_3 \lambda_4 \end{pmatrix}. \quad (2.26)$$

L'opérateur H_{e-h} correspond à l'interaction directe et d'échange entre un électron de conduction et un trou de la bande de valence :

$$H_{e-h} = - \sum_{\lambda_i, i=1,4} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_4} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda_2} \left[W \begin{pmatrix} c & v & v & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & | & \lambda_3 \lambda_4 \end{pmatrix} - W \begin{pmatrix} v & c & v & c \\ \lambda_2 \lambda_1 & | & \lambda_3 \lambda_4 \end{pmatrix} \right]. \quad (2.27)$$

\mathcal{E}_0 décrit l'énergie de la bande de valence pleine ; il tient compte des interactions coulombiennes directes et d'échange entre les électrons des bandes de valence ;

$$\mathcal{E}_0 = \sum_{v\lambda} \int d^3\mathbf{r} \varphi_{v\lambda}^*(\mathbf{r}) H_1 \varphi_{v\lambda}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{vv'} \sum_{\lambda\lambda'} \left[W \left(\begin{smallmatrix} vv' \\ \lambda\lambda' \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} v'v \\ \lambda'\lambda \end{smallmatrix} \right) - W \left(\begin{smallmatrix} v'v \\ \lambda'\lambda \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} v'v \\ \lambda'\lambda \end{smallmatrix} \right) \right]. \quad (2.28)$$

En tenant compte de l'orthogonalité des fonctions $\varphi_\lambda(\mathbf{r})$, nous obtenons

$$H_e = \sum_\lambda a_\lambda^+ a_\lambda \int d^3\mathbf{r} \varphi_{c\lambda}^*(\mathbf{r}) H_{eff}^{c\lambda} \varphi_{c\lambda}(\mathbf{r}) + \sum_{\lambda\lambda'} a_\lambda^+ a_{\lambda'} \int d^3\mathbf{r} \varphi_{c\lambda}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \varphi_{c\lambda'}(\mathbf{r}), \quad (2.29)$$

que nous pouvons encore écrire sous la forme :

$$H_e = \sum_\lambda a_\lambda^+ a_\lambda \varepsilon_{c\lambda} + \sum_{\lambda\lambda'} a_\lambda^+ a_{\lambda'} \int d^3\mathbf{r} \varphi_{c\lambda}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \varphi_{c\lambda'}(\mathbf{r}). \quad (2.30)$$

De même, nous aboutissons à

$$H_h = \sum_\lambda d_\lambda^+ d_\lambda \int d^3\mathbf{r} \varphi_{v\lambda}^*(\mathbf{r}) H_{eff}^{v\lambda} \varphi_{v\lambda}(\mathbf{r}) + \sum_{\lambda\lambda'} d_\lambda^+ d_{\lambda'} \int d^3\mathbf{r} \varphi_{v\lambda}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \varphi_{v\lambda'}(\mathbf{r}), \quad (2.31)$$

que nous pouvons mettre sous la forme :

$$H_h = - \sum_\lambda d_\lambda^+ d_\lambda \varepsilon_{\lambda,v} - \sum_{\lambda\lambda'} a_\lambda^+ a_{\lambda'} \int d^3\mathbf{r} \varphi_{\lambda v}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \varphi_{\lambda'v}(\mathbf{r}), \quad (2.32)$$

et par conséquent, le Hamiltonien H_{el} devient ;

$$\begin{aligned} H_{el} = & \mathcal{E}_0 + \sum_\lambda a_\lambda^+ a_\lambda \varepsilon_{c\lambda} + \sum_{\lambda\lambda'} a_\lambda^+ a_{\lambda'} \int d^3\mathbf{r} \varphi_{c\lambda}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \varphi_{c\lambda'}(\mathbf{r}) - \sum_\lambda d_\lambda^+ d_\lambda \varepsilon_{v\lambda} \\ & - \sum_{\lambda\lambda'} a_\lambda^+ a_{\lambda'} \int d^3\mathbf{r} \varphi_{v\lambda}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \varphi_{v\lambda'}(\mathbf{r}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\lambda_i, i=1,4} a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_2}^+ a_{\lambda_3} a_{\lambda_4} W \left(\begin{smallmatrix} c & c \\ \lambda_1 \lambda_2 \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} c & c \\ \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\lambda_i, i=1,4} d_{\lambda_1} d_{\lambda_2} d_{\lambda_3}^+ d_{\lambda_4}^+ W \left(\begin{smallmatrix} v & v \\ \lambda_1 \lambda_2 \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} v & v \\ \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \\ & - \sum_{\lambda_i, i=1,4} a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda_4} d_{\lambda_3}^+ d_{\lambda_2} \left[W \left(\begin{smallmatrix} c & v \\ \lambda_1 \lambda_2 \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) - W \left(\begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda_2 \lambda_1 \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Afin d'évaluer les termes correspondant aux interactions coulombiennes ainsi qu'au potentiel du puits, nous avons recours à une approximation qui consiste à supposer que les perturbations du système (une impureté peu profonde, un puits quantique dont la largeur n'est pas très petite ou un potentiel coulombien), sont telles que leurs variations soient faibles sur une cellule élémentaire de volume Ω_0 . D'autre part, nous admettons que les parties périodiques des fonctions de Bloch $c(\mathbf{r})$ et $v(\mathbf{r})$ sont à variations rapides comparées à celles des fonctions enveloppe $g_\lambda(\mathbf{r})$. Par conséquent, nous

pouvons, dans un premier temps, remplacer les intégrations sur tout le volume Ω par des sommations d'intégrations sur les cellules élémentaires, pour nous ramener, par un changement de coordonnées, à une intégration sur la cellule élémentaire contenant l'origine des coordonnées (Appendice C-1 et C-2). Si nous posons

$$U_{\lambda\lambda'}^i = \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} \varphi_{i\lambda}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \varphi_{i\lambda'}(\mathbf{r}), \quad i = c, v \quad (2.34)$$

alors, compte tenu de la relation (2.14), nous obtenons :

$$U_{\lambda\lambda'}^c = \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} c^*(\mathbf{r}) g_{e\lambda}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) c(\mathbf{r}) g_{e\lambda'}(\mathbf{r}), \quad (2.35)$$

et finalement nous aboutissons à (Appendice B-1)

$$U_{\lambda\lambda'}^c = \frac{1}{N} \left[\sum_m g_{e\lambda}^*(\mathbf{R}_m) U(\mathbf{R}_m) g_{e\lambda'}(\mathbf{R}_{m'}) \right]. \quad (2.36)$$

En remplaçant la somme discrète sur les cellules élémentaires par une intégration sur tout le volume Ω ,

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_0} d^3\mathbf{r} = \frac{1}{N} \sum_m, \quad (2.37)$$

nous obtenons :

$$U_{\lambda\lambda'}^c = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_0} d^3\mathbf{r} g_{e\lambda}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) g_{e\lambda'}(\mathbf{r}). \quad (2.38)$$

De même nous pouvons aboutir à une expression similaire pour le terme $U_{\lambda\lambda'}^v$;

$$U_{\lambda\lambda'}^v = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_0} d^3\mathbf{r} g_{h\lambda}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) g_{h\lambda'}(\mathbf{r}).$$

D'autre part, compte tenu du fait que les parties périodiques des fonctions de Bloch $c(\mathbf{r})$ et $v(\mathbf{r})$ sont à variations rapides par rapport aux fonctions $g_{\lambda}(\mathbf{r})$, le potentiel coulombien devient (Appendice C-2)

$$\begin{aligned} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & v & v & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) &= \sum_{m,m'} g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{R}_m) g_{h\lambda_2}(\mathbf{R}_{m'}) \frac{e^2}{|\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'}|} g_{h\lambda_3}^*(\mathbf{R}_m) g_{e\lambda_4}(\mathbf{R}_{m'}) \\ &\int_{\Omega_{0m}} \int_{\Omega_{0m'}} d^3\rho_m d^3\rho_{m'} |c(\rho_m + \mathbf{R}_m)|^2 |v(\rho_{m'} + \mathbf{R}_{m'})|^2. \end{aligned} \quad (2.39)$$

En utilisant la périodicité ainsi que l'orthogonalité des fonctions $c(\mathbf{r})$ et $v(\mathbf{r})$, nous obtenons :

$$\tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & v & v & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) = \frac{1}{N^2} \sum_{m,m'} g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{R}_m) g_{h\lambda_2}(\mathbf{R}_{m'}) \frac{e^2}{|\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'}|} g_{h\lambda_3}^*(\mathbf{R}_m) g_{e\lambda_4}(\mathbf{R}_{m'}). \quad (2.40)$$

En remplaçant les intégrations du potentiel coulombien par une sommation d'intégrales sur les cellules élémentaires (Appendice C-2), l'expression précédente devient :

$$\tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & v & v & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) = \frac{1}{\Omega^2} \int_{\Omega_0} d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' g_{e\lambda_1}^* (\mathbf{r}) g_{h\lambda_2} (\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} g_{h\lambda_3}^* (\mathbf{r}') g_{e\lambda_4} (\mathbf{r}). \quad (2.41)$$

Finalement, le Hamiltonien effectif s'écrit :

$$\begin{aligned} H_{el} = & \mathcal{E}_0 + \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \varepsilon_{c\lambda} + \sum_{\lambda\lambda'} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^e - \sum_{\lambda} d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda} \varepsilon_{v\lambda} - \sum_{\lambda\lambda'} d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^h \\ & - \sum_{\lambda_i, i=1,4} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_4} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda_2} \left[\tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & v & v & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) - \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} v & c & v & c \\ \lambda_2 \lambda_1 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \right] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\lambda_i, i=1,4} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_2}^{\dagger} a_{\lambda_3} a_{\lambda_4} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & c & c & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\lambda_i, i=1,4} d_{\lambda_1} d_{\lambda_2} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda_4}^{\dagger} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} v & v & v & v \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right). \end{aligned} \quad (2.42)$$

2.3 Etats trioniques

2.3.1 Définition

Les états des excitons chargés (X^- et X_2^+) se déduisent des états excitoniques par la création d'un électron ou d'un trou supplémentaire. Ils sont antisymétriques quant à l'échange de deux particules identiques, conformément au principe de Pauli. Nous traitons de façon explicite le cas de l'exciton chargé négativement (X^-). L'étude de l'exciton chargé positivement (X_2^+) s'en déduit par permutation des électrons et des trous.

Comme pour l'exciton, nous définissons tout d'abord les états $|\Phi_{123}\rangle$ de triplet non liés ($123 = eeh$), en appliquant successivement les opérateurs $a_{\lambda_1}^{\dagger}, a_{\lambda_2}^{\dagger}$ et $d_{\lambda_3}^{\dagger}$ sur l'état de la bande de valence pleine en présence du champ magnétique ;

$$|\Phi_{123}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_2}^{\dagger} d_{\lambda_3}^{\dagger} |\Phi_0\rangle. \quad (2.43)$$

La combinaison linéaire de ces états non perturbés permet d'obtenir les états du trion excitonique qui sont fonctions propres du Hamiltonien total ;

$$\begin{aligned} |\Phi_{X^-}\rangle &= \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} |\Phi_{123}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_2}^{\dagger} d_{\lambda_3}^{\dagger} |\Phi_0\rangle \end{aligned} \quad (2.44)$$

qui est un état antisymétrique quant à l'échange de deux électrons. Dans l'espace des coordonnées, cette relation s'écrit :

$$|\Phi_{X^-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \int \int \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_3 F_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}_1) \hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}_2) \hat{\Psi}_h^+(\mathbf{r}_3) |\Phi_0\rangle \quad (2.45)$$

où $F_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ est la fonction d'onde de l'exciton chargé négativement. En rapportant les expressions des fonctions $\varphi_\lambda(\mathbf{r})$ données par la relation (2.14) dans celle de $F_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$, nous obtenons :

$$F_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \Omega^{\frac{3}{2}} \Psi_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) g_{crist}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3), \quad (2.46)$$

où la fonction $\Psi_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ représente la fonction enveloppe du complexe (X^-) :

$$\Psi_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \Omega^{-\frac{3}{2}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{e\lambda_2}(\mathbf{r}_2) g_{h\lambda_3}(\mathbf{r}_3), \quad (2.47)$$

tandis que $g_{crist}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ est la fonction cristalline

$$g_{crist}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = c(\mathbf{r}_1) c(\mathbf{r}_2) v^*(\mathbf{r}_3). \quad (2.48)$$

2.3.2 Equation de la fonction enveloppe

Les états des trions excitoniques sont solutions de l'équation suivante

$$H_{eff}^{X^-} |\Phi_{X^-}\rangle = \mathcal{E}_{X^-} |\Phi_{X^-}\rangle, \quad (2.49)$$

où $H_{eff}^{X^-}$ est le Hamiltonien effectif qui tient compte du potentiel U ainsi que de toutes les interactions entre les trois particules. La méthode variationnelle est utilisée dans le but de déterminer \mathcal{E}_{X^-} , l'énergie du cristal associée à l'état trionique ainsi que les coefficients $C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}$ de la fonction enveloppe. Pour cela, nous calculons la valeur moyenne du Hamiltonien effectif

$$\langle \Phi_{X^-} | H_{eff}^{X^-} | \Phi_{X^-} \rangle = \mathcal{E}_{X^-} \langle \Phi_{X^-} | \Phi_{X^-} \rangle. \quad (2.50)$$

Dans le but d'établir une équation effective pour la fonction enveloppe, nous faisons abstraction du terme d'échange électron-trou qui peut être considéré comme négligeable devant l'énergie d'excitation du cristal. Par ailleurs, le terme qui correspond aux interactions trou-trou dans la bande de valence, ne donne lieu à aucune contribution. En tenant compte de la définition de $|\Phi_{X^-}\rangle$ donnée par la relation (2.44), des relations de commutation entre opérateurs, et de l'action des opérateurs d'annihilation sur les bandes de valence pleines

$$d_{v\lambda} |\Phi_0\rangle = 0 \quad \text{et} \quad a_{c\lambda} |\Phi_0\rangle = 0, \quad (2.51)$$

l'équation (2.49) devient :

$$\begin{aligned}
& \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3} C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \left[\sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \varepsilon_{\lambda c} + \sum_{\lambda \lambda'} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'} U_{\lambda \lambda'}^e - \sum_{\lambda} d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda} \varepsilon_{\lambda, v} - \sum_{\lambda \lambda'} d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda'} U_{\lambda \lambda'}^h \right. \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\lambda'_1, \lambda'_2, \lambda'_3, \lambda_4} a_{\lambda'_1}^{\dagger} a_{\lambda'_2}^{\dagger} a_{\lambda'_3} a_{\lambda_4} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & c & c \\ \lambda'_1 & \lambda'_2 & \lambda'_3 \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} c & c \\ \lambda_3 & \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) - \\
& \left. - \sum_{\lambda'_1, \lambda'_2, \lambda'_3, \lambda_4} a_{\lambda'_1}^{\dagger} a_{\lambda_4} d_{\lambda'_3}^{\dagger} d_{\lambda'_2} \left[\tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & v \\ \lambda'_1 & \lambda'_2 \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda'_3 & \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) - \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda'_2 & \lambda'_1 \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda'_3 & \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \right] \right] a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_2}^{\dagger} d_{\lambda_3}^{\dagger} |\Phi_0\rangle \\
& = (\mathcal{E}_{X-} - \mathcal{E}_0) \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3} C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_2}^{\dagger} d_{\lambda_3}^{\dagger} |\Phi_0\rangle. \tag{2.52}
\end{aligned}$$

Par la suite, le terme $\tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda'_2 & \lambda'_1 \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda'_3 & \lambda_4 \end{smallmatrix} \right)$ qui représente le terme d'échange électron-trou, sera négligé. Comme le champ magnétique est faible et uniforme dans tout le cristal, l'énergie ε_{λ} reste périodique et nous pouvons la développer en série de Fourier (Appendice C-2). Par conséquent, l'équation précédente devient :

$$\begin{aligned}
& \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3} C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \left[\sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_e + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_e \right) + \sum_{\lambda \lambda'} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'} U_{\lambda \lambda'}^e \right. \\
& - \sum_{\lambda} d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda} \hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_h - \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_h \right) - \sum_{\lambda \lambda'} d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda'} U_{\lambda \lambda'}^h \\
& + \frac{1}{2} \sum_{\lambda'_1, \lambda'_2, \lambda'_3, \lambda_4} a_{\lambda'_1}^{\dagger} a_{\lambda'_2}^{\dagger} a_{\lambda'_3} a_{\lambda_4} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & c & c \\ \lambda'_1 & \lambda'_2 & \lambda'_3 \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} c & c \\ \lambda_3 & \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \\
& \left. - \sum_{\lambda'_1, \lambda'_2, \lambda'_3, \lambda_4} a_{\lambda'_1}^{\dagger} a_{\lambda_4} d_{\lambda'_3}^{\dagger} d_{\lambda'_2} \left[\tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & v \\ \lambda'_1 & \lambda'_2 \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda'_3 & \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) - \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda'_2 & \lambda'_1 \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda'_3 & \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \right] \right] a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_2}^{\dagger} d_{\lambda_3}^{\dagger} |\Phi_0\rangle \\
& = (\mathcal{E}_{X-} - \mathcal{E}_0) \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3} C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_2}^{\dagger} d_{\lambda_3}^{\dagger} |\Phi_0\rangle. \tag{2.53}
\end{aligned}$$

Pour obtenir une équation effective pour les coefficients $C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}$, nous multiplions l'équation précédente par $\langle \Phi_0 | d_{\lambda_3} a_{\lambda_2} a_{\lambda_1}$, et en utilisant les règles de commutation définies par (2.6), nous aboutissons à

$$\begin{aligned}
& C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \left[\hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_1 + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_1 \right) + \hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_2 + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_2 \right) - \hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_3 - \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_3 \right) \right] \\
& + \sum_{\lambda'} C_{\lambda' \lambda_2 \lambda_3} U_{\lambda_1 \lambda'}^e + \sum_{\lambda'} C_{\lambda_1 \lambda' \lambda_3} U_{\lambda_2 \lambda'}^e - \sum_{\lambda'} C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda'} U_{\lambda' \lambda_3}^h \\
& + \sum_{\lambda_4, \lambda_3''} C_{\lambda_4 \lambda_3'' \lambda_3} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & c & c \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3'' \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} c & c \\ \lambda_3 & \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) - \sum_{\lambda_2'', \lambda_4} C_{\lambda_4 \lambda_2'' \lambda_2} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & v \\ \lambda_1 & \lambda_2'' \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda_3 & \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \\
& - \sum_{\lambda_2'', \lambda_4} C_{\lambda_1 \lambda_4 \lambda_2''} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda_2 & \lambda_2'' \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} v & c \\ \lambda_3 & \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \\
& = (\mathcal{E}_{X-} - \mathcal{E}_0) C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}. \tag{2.54}
\end{aligned}$$

L'équation effective pour le trion négatif (X^-) est obtenue alors en multipliant l'équation précédente par $\frac{1}{\Omega^{\frac{3}{2}}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{e\lambda_2}(\mathbf{r}_2) g_{h\lambda_3}(\mathbf{r}_3)$ puis, nous sommions sur λ_1, λ_2 et λ_3 , nous avons alors :

$$\begin{aligned}
& \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3} \frac{1}{\Omega^{\frac{3}{2}}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{e\lambda_2}(\mathbf{r}_2) g_{h\lambda_3}(\mathbf{r}_3) \times \\
& \left\{ C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} \left[\hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_1 + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_1 \right) + \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_2 + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_2 \right) - \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_h - \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_h \right) \right] \right. \\
& + \sum_{\lambda'} C_{\lambda' \lambda_2 \lambda_3} U_{\lambda_1 \lambda'}^e + \sum_{\lambda'} C_{\lambda_1 \lambda' \lambda_3} U_{\lambda_2 \lambda'}^e - \sum_{\lambda'} C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda'} U_{\lambda' \lambda_3}^h \\
& + \sum_{\lambda_4, \lambda_3''} C_{\lambda_4 \lambda_3'' \lambda_3} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & c & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3'' & \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) - \sum_{\lambda_2'', \lambda_4} C_{\lambda_4 \lambda_2 \lambda_2''} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & v & v \\ \lambda_1 \lambda_2'' & \lambda_3 & \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \\
& \left. - \sum_{\lambda_2'', \lambda_4} C_{\lambda_1 \lambda_4 \lambda_2''} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} v & c & v \\ \lambda_2 \lambda_2'' & \lambda_3 & \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \right\} \\
& = (\mathcal{E}_{X^-} - \mathcal{E}_0) \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3} \frac{1}{\Omega^{\frac{3}{2}}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{e\lambda_2}(\mathbf{r}_2) g_{h\lambda_3}(\mathbf{r}_3) C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}. \tag{2.55}
\end{aligned}$$

Nous parvenons ainsi à l'expression de l'équation de la fonction enveloppe de l'exciton chargé négativement (X^-) dans un puits quantique en présence d'un champ magnétique ;

$$\begin{aligned}
& \left\{ \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_1 + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_1 \right) + \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_2 + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_2 \right) - \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_3 - \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_3 \right) \right. \\
& + V_w^e(z_1) + V_w^e(z_2) + V_w^h(z_3) \\
& \left. + \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} - \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|} \right\} \Psi_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \\
& = (\mathcal{E}_{X^-} - \mathcal{E}_0) \Psi_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3). \tag{2.56}
\end{aligned}$$

Finalement l'équation effective peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{1}{2m_e^*} \left(-i\hbar\nabla_1 + \frac{e}{c} \mathbf{A}_1 \right)^2 + V_w^e(z_1) + \frac{1}{2m_e^*} \left(-i\hbar\nabla_2 + \frac{e}{c} \mathbf{A}_2 \right)^2 \right. \\
& + V_w^e(z_2) + \frac{1}{2m_h^*} \left(-i\hbar\nabla_3 - \frac{e}{c} \mathbf{A}_3 \right)^2 + V_w^h(z_3) \\
& \left. + \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} - \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} - \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|} \right] \Psi_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \\
& = (\mathcal{E}_{X^-} - \mathcal{E}_0) \Psi_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3), \tag{2.57}
\end{aligned}$$

où :

$$\mathcal{E}_{X^-} = \mathcal{E}_{crist} - 2\varepsilon_{c0} + \varepsilon_{v0}. \tag{2.58}$$

La constante diélectrique κ a été introduite afin de tenir compte des effets de polarisation électronique et ionique. La résolution de cette équation fera l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 3

ENERGIE DE L'ETAT FONDAMENTAL DES TRIONS

3.1 Introduction

Ce chapitre constitue une extension des études consacrées à l'exciton chargé dans les semi-conducteurs tridimensionnels et bidimensionnels en l'absence et en présence d'un champ magnétique [Stébé (1976), Stébé et Feddi (1987), Stébé et Ainane (1991)] ainsi que dans les puits quantiques de semi-conducteurs [Stébé et al. (1997)]. En effet, nous nous intéressons à l'étude de l'état singulet de l'exciton chargé en l'absence et en présence d'un champ magnétique en utilisant la méthode développée par Stébé (1997) lors de l'étude de l'exciton chargé négativement dans un puits quantique à champ nul. Nous calculons, tout d'abord, l'énergie de l'état fondamental de l'exciton chargé positivement (X_2^+) à champ nul, en utilisant la méthode variationnelle de Ritz. Dans un premier temps, nous donnons le Hamiltonien effectif du système dans le cadre de l'approximation de la fonction enveloppe. Nous résolvons ensuite l'équation de Schrödinger effective en précisant le choix de la fonction d'onde d'essai. Nous montrons ensuite que les énergies de liaison de l'exciton chargé négativement à champ nul [Stébé (1997)], et positivement dans les puits quantiques de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs sont très proches, ce qui n'est pas le cas dans les semi-conducteurs tridimensionnels et bidimensionnels. Nous démontrons la stabilité des deux types de trions quant à leur dissociation en un exciton et un électron ou un trou. Nous verrons en particulier comment les effets de confinement quantiques augmentent les énergies de liaison.

Nous nous proposons ensuite d'étudier l'influence d'un champ magnétique externe perpendiculaire au plan des couches sur les excitons chargés. En effet, ces derniers

peuvent être assimilés à des quasi-particules chargées et mobiles et de ce fait, ils présentent des propriétés originales sous l'influence d'un champ magnétique externe. En raison de la charge de leur centre de masse, leurs énergies se décomposent en niveaux de Landau. En principe, le mouvement du centre de masse des excitons chargés ne peut être découplé du mouvement relatif. Nous verrons, en particulier, que dans l'approximation des champs faibles, ces deux mouvements peuvent être séparés dans le plan perpendiculaire à la direction du champ magnétique alors que les deux mouvements restent couplés dans la direction z suite au confinement quantique. Nous démontrons par la suite comment les effets de confinement ainsi que les effets dus aux champs magnétique peuvent augmenter l'interaction coulombienne entre les trois porteurs de charge.

Au paragraphe (3.2), nous donnons quelques propriétés du Hamiltonien effectif de l'exciton chargé positivement en précisant les invariants du problème. Nous supposons que les masses effectives de l'électron et du trou m_e^* et m_h^* sont les même dans les barrières et dans le puits. Nous détaillons, ensuite, notre méthode variationnelle de résolution de l'équation de Schrödinger, en précisant le choix de notre fonction d'essai.

Au paragraphe (3.3), nous précisons tout d'abord l'expression du Hamiltonien effectif de l'exciton chargé négativement en présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches, compte tenu du choix de notre jauge. Nous étudions les invariants du problème. Nous déterminons l'énergie de l'état fondamental dans l'approximation des champs faibles. Nous comparons ensuite les énergies de liaison de l'exciton chargé négativement et de l'exciton chargé positivement obtenues par notre théorie avec celles mesurées expérimentalement dans le cas des puits de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs [Shields (1995a)] et dans le cas des puits de type CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe [Kheng (1996)]. Nous montrons qu'en présence d'un champ magnétique dirigé selon l'axe z , les énergies de liaison des deux types de trions augmentent avec l'intensité du champ et leurs spectres sont différents alors qu'à champ nul leurs énergies sont très proches.

Au paragraphe (3.4), nous discutons des résultats obtenus.

3.2 Trion positif à champ nul

Dans le cadre de l'approximation de la fonction enveloppe, le Hamiltonien effectif total d'un système à deux trous (1,2) et un électron (e) confinés dans un puits quantique de semi-conducteur de largeur L s'écrit :

$$H^{tot} = -\frac{\hbar^2}{2m_h^*} (\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_e - \frac{e^2}{\kappa} \left(\frac{1}{r_{1e}} + \frac{1}{r_{2e}} - \frac{1}{r_{12}} \right) + V_w, \quad (3.1)$$

où r_{1e} , r_{2e} et r_{12} sont les distances mutuelles entre les trois particules. La constante diélectrique effective κ , est supposée être la même dans les deux matériaux, ce qui permet de tenir compte des effets de polarisation électronique et ionique. Le potentiel de puits V_w s'écrit :

$$V_w = V_h Y\left(|z_1| - \frac{L}{2}\right) + V_h Y\left(|z_2| - \frac{L}{2}\right) + V_e Y\left(|z_e| - \frac{L}{2}\right); \quad (3.2)$$

où V_e et V_h sont les hauteurs des barrières de potentiel de confinement pour l'électron et le trou. $Y(z)$ est la fonction d'Heaviside donnée par :

$$Y(z) = \begin{cases} 1 & \text{si } z > 0 \\ 0 & \text{si } z < 0 \end{cases}. \quad (3.3)$$

Dans le but de séparer le mouvement relatif du mouvement de centre de masse dans le plan, nous utilisons les coordonnées relatives et de centre de masse (\mathbf{r} , \mathbf{R} , \mathbf{R}_0) dans le plan, définies par :

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \rho_1 - \rho_2, \quad \mathbf{R} = \frac{\rho_1 + \rho_2}{2} - \rho_e, \\ \mathbf{R}_0 &= \frac{m_h^*(\rho_1 + \rho_2) + m_e^* \rho_e}{2m_h^* + m_e^*}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

où ρ_i ($i = 1, 2, e$) sont les vecteurs- position dans le plan des trois particules. Dans ces conditions, le Hamiltonien s'écrit :

$$H^{tot} = H^{rel} + H^{CM}, \quad (3.5)$$

avec

$$H^{rel} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} (\Delta_{z_1} + \Delta_{z_2}) - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_{z_e} + V_c + V_w \quad (3.6)$$

et H^{CM} a pour expression

$$H^{CM} = -\frac{\hbar^2}{2M_0} \Delta_{\mathbf{R}_0}, \quad (3.7)$$

où :

$$\mu = \frac{m_h^*}{2}, \quad M = \frac{2m_e^* m_h^*}{2m_h^* + m_e^*}, \quad M_0 = 2m_h^* + m_e^* \quad (3.8)$$

La fonction d'onde Ψ du Hamiltonien total H peut ainsi s'écrire comme le produit de fonctions d'onde du mouvement relatif et du mouvement du centre de masse dans le plan

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_e) = \Psi^{rel}(\mathbf{r}, \mathbf{R}, z_1, z_2, z_e) \Psi^{CM}(\mathbf{R}_0), \quad (3.9)$$

où $\Psi^{CM}(\mathbf{R}_0)$ est solution de l'équation

$$H^{CM}\Psi^{CM}=E^{CM}\Psi^{CM}, \quad (3.10)$$

avec,

$$E^{CM} = \frac{\hbar^2 K_{0,p}^2}{2M_0} \quad (3.11)$$

l'énergie du centre de masse dans le plan. L'énergie totale s'écrit :

$$E^{tot} = E^{rel} + \frac{\hbar^2 K_{0,p}^2}{2M_0}, \quad (3.12)$$

où E^{rel} est l'énergie "relative" solution de l'équation

$$H^{rel}\Psi^{rel} = E^{rel}\Psi^{rel}, \quad (3.13)$$

$\mathbf{K}_{0,p}$ est le vecteur d'onde du centre de masse dans le plan, et $M_0 = 2m_h^* + m_e^*$ est la masse effective totale du système.

Nous déterminons l'énergie relative par une méthode variationnelle en utilisant une fonction d'essai identique à celle utilisée par Stébé (1997) lors de l'étude de l'exciton chargé négativement à champ nul, en interchangeant les électrons par les trous :

$$\begin{aligned} \psi = & \mathcal{N} f_h(z_1) f_h(z_2) f_e(z_e) \exp \left[-ks/2 - \alpha_h(z_1^2 + z_2^2) - \alpha_e z_e^2 \right] \\ & \cdot \sum_{lmnpqr} c_{lmnpqr} s^l u^m t^n (z_1^p z_2^q + z_1^q z_2^p) z_e^r, \end{aligned} \quad (3.14)$$

où s , t et u sont les coordonnées elliptiques ou d'Hylleraas (1929) dans le plan, définies par :

$$\begin{aligned} s &= \rho_{1e} + \rho_{2e}, \quad t = \rho_{1e} - \rho_{2e}, \quad u = \rho_{12} \\ 0 &\leq s, \quad -u \leq t \leq +u, \quad 0 \leq u \leq s, \end{aligned} \quad (3.15)$$

avec ρ_{12} , ρ_{1e} et ρ_{2e} sont les distances entre les particules dans le plan. $f_e(z)$ et $f_h(z)$ décrivent les fonctions d'onde de l'état fondamental des électrons et des trous, respectivement, dans un puits quantique fini. Les indices l , m , n , p , q et r sont des entiers positifs ou nuls. Dans notre cas, n est pair, vue la symétrie de la fonction enveloppe quant à la permutation des deux trous et \mathcal{N} est une constante de normation. Dans ces conditions, en exprimant le Hamiltonien relatif dans le système des unités atomiques, en utilisant comme unité de longueur $\kappa\hbar^2/m_h^*e^2$ et comme unité d'énergie

$m_h^* e^4 / \kappa^2 \hbar^2$, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
H^{rel} = & -\partial_{s^2}^2 - \partial_{t^2}^2 - \frac{2}{s^2 - t^2} (s\partial_s - t\partial_t) - \partial_{u^2}^2 - \frac{1}{u}\partial_u \\
& - \frac{2s(u^2 - t^2)}{u(s^2 - t^2)} \partial_{su}^2 - \frac{2t(s^2 - u^2)}{u(s^2 - t^2)} \partial_{tu}^2 - \frac{1}{2} (\partial_{z_1^2}^2 + \partial_{z_2^2}^2) \\
& - \frac{2}{\sigma} \left(\frac{s^2 - u^2}{s^2 - t^2} \partial_{s^2}^2 + \frac{u^2 - t^2}{s^2 - t^2} \partial_{t^2}^2 + \frac{s}{s^2 - t^2} \partial_s - \frac{t}{s^2 - t^2} \partial_t + \frac{1}{4} \partial_{z_h^2}^2 \right) \\
& - \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{s+t}{2}\right)^2 + (z_1^2 - z_e^2)}} - \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{s-t}{2}\right)^2 + (z_2^2 - z_e^2)}} + \frac{1}{\sqrt{u^2 + (z_1^2 - z_2^2)}} \\
& + V_w^h(z_1) + V_w^h(z_2) + V_w^e(z_e)
\end{aligned} \tag{3.16}$$

où $\sigma = m_e^*/m_h^*$ est le rapport des masses effectives de l'électron et du trou. Les paramètres variationnels c_{lmnpqr} , α_e , α_h et k sont déterminés en minimisant l'énergie :

$$\langle H^{rel} \rangle = \frac{\langle \psi | H^{rel} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \tag{3.17}$$

où $\langle \psi | \psi \rangle = \mathcal{N}^2 \int d\tau \psi^* \psi = 1$. L'élément de volume est donné par :

$$d\tau = \pi \frac{u(s^2 - t^2) ds dt du dz_1 dz_2 dz_e}{\sqrt{(s^2 - u^2)(u^2 - t^2)}}. \tag{3.18}$$

Ces paramètres variationnels satisfont aux conditions :

$$\frac{\partial \langle H^{rel} \rangle}{\partial k} = \frac{\partial \langle H^{rel} \rangle}{\partial \alpha_e} = \frac{\partial \langle H^{rel} \rangle}{\partial \alpha_h} = \frac{\partial \langle H^{rel} \rangle}{\partial c_{lmnpqr}} = 0, \tag{3.19}$$

pour toutes les valeurs possibles des indices l, m, n, p, q, r . La dernière équation est équivalente à une équation aux valeurs propres :

$$(\mathbf{H}^{rel} - E\mathbf{S}) \mathbf{c} = 0 \tag{3.20}$$

où \mathbf{c} représente la matrice colonne des coefficients linéaires c_{lmnpqr} . Les matrices \mathbf{H}^{rel} et \mathbf{S} sont définies dans la base des fonctions $|\lambda\rangle \equiv \chi_{lmnpqr} \equiv |lmnpqr\rangle$:

$$H_{\lambda\lambda'}^{rel} = \langle \lambda' | H^{rel} | \lambda \rangle, \quad S_{\lambda\lambda'} = \langle \lambda' | \lambda \rangle. \tag{3.21}$$

où

$$\begin{aligned}
\chi_{lmnpqr} = & f_h(z_1) f_h(z_2) f_e(z_e) \exp \left[-ks/2 - \alpha_h(z_1^2 + z_2^2) - \alpha_e z_e^2 \right] \\
& \cdot s^l u^m t^n (z_1^p z_2^q + z_1^q z_2^p) z_e^r.
\end{aligned} \tag{3.22}$$

La méthode et les approximations utilisées pour déterminer les éléments de matrices sont détaillées et discutées dans l'appendice D.

Nous avons calculé l'énergie E^{rel} de l'état fondamental de l'exciton chargé en utilisant une fonction d'onde symétrique à 66 termes définie par $l + m + n \leq 4$ et $\{pqr\} = (000, 101, 110)$. Dans le but d'estimer l'influence du confinement quantique sur l'interaction coulombienne, nous définissons "les énergies de corrélation", $E_{X^-}^c$, $E_{X_2^+}^c$ et E_X^c de l'exciton chargé et de l'exciton :

$$\begin{aligned} E_{X^-}^c &= E_{X^-}^{rel} - 2E_e - E_h \\ E_{X_2^+}^c &= E_{X_2^+}^{rel} - 2E_h - E_e \\ E_X^c &= E_X^{rel} - E_e - E_h, \end{aligned} \quad (3.23)$$

où E_e et E_h sont les énergies de l'état fondamental de l'électron et du trou dans un puits quantique. La condition de stabilité s'écrit alors :

$$\begin{aligned} W_{X^-} &= E_{X^-}^c - E_X^c \leq 0 \\ W_{X_2^+} &= E_{X_2^+}^c - E_X^c \leq 0, \end{aligned} \quad (3.24)$$

où $-W_{X^-}$ et $-W_{X_2^+}$ sont les énergies de liaison de l'exciton chargé négativement (X^-) et positivement (X_2^+). Dans le but de déterminer les énergies relatives et de corrélation de l'exciton, nous utilisons un calcul variationnel analogue à celui utilisé précédemment (Appendice B) en prenant comme fonction d'essai :

$$\psi_X = \mathcal{N}_X f_e(z_e) f_h(z_h) e^{-\beta\rho - \beta_e z_e^2 - \beta_h z_h^2} \sum_{pr} c_{pr} z_e^p z_h^r, \quad (3.25)$$

où β , β_e , β_h et c_{pr} sont des paramètres variationnels, p et r sont des entiers positifs ou nuls, choisis tels que $p + r$ soit pair, \mathcal{N}_X étant une constante de normation. Nous utilisons une fonction d'onde à 9 termes définis par la condition $p + r \leq 4$ donnant la même précision que celle obtenue pour le trion.

3.3 Trion négatif et positif en présence d'un champ magnétique

Nous présentons la théorie de l'exciton chargé négativement [X^- (e,e,h)] [Stébé et al. (1987, 1991, 1997)], le cas de l'exciton chargé positivement [X_2^+ (h,h,e)] est traité de façon analogue, en interchangeant les électrons (e) par les trous (h) et la masse effective isotrope m_e^* par m_h^* . Dans le cadre de l'approximation de la fonction enveloppe,

le Hamiltonien effectif du système s'écrit :

$$H^{tot} = \frac{1}{2m_e^*} \left(-i\hbar\nabla_1 + \frac{e}{c}\mathbf{A}_1 \right)^2 + \frac{1}{2m_e^*} \left(-i\hbar\nabla_2 + \frac{e}{c}\mathbf{A}_2 \right)^2 + \frac{1}{2m_h^*} \left(-i\hbar\nabla_h - \frac{e}{c}\mathbf{A}_h \right)^2 + V_c + V_w. \quad (3.26)$$

Le potentiel vecteur \mathbf{A}_i de l'électron et du trou est exprimé en fonction d'un champ magnétique uniforme B dans la jauge de Coulomb par $\mathbf{A}(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}_i$ ($i = e, h$). Nous supposons que le champ magnétique est dirigé suivant l'axe de croissance z . L'interaction entre les trois particules est modélisée par un potentiel coulombien V_c écranté par une constante diélectrique κ :

$$V_c = \frac{e^2}{\kappa} \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1h}} - \frac{1}{r_{2h}} \right) \quad (3.27)$$

Le potentiel de puits V_w est défini comme au paragraphe (3.2) (équation 3.2). Dans le but de séparer le mouvement du centre de masse du mouvement relatif dans le plan, nous utilisons les coordonnées relatives et du centre de masse \mathbf{r} , \mathbf{R} et \mathbf{R}_0 , déjà définies au paragraphe (3.2), en interchangeant les trous par les électrons. Ces coordonnées sont reliées aux coordonnées planes ρ_i ($i = 1, 2, h$) par :

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= \rho_1 - \rho_2, \quad \mathbf{R} = \frac{\rho_1 + \rho_2}{2} - \rho_h, \\ \mathbf{R}_0 &= \frac{m_e^*(\rho_1 + \rho_2) + m_h^*\rho_h}{2m_e^* + m_h^*}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Dans ces conditions, le Hamiltonien effectif devient :

$$H^{tot} = H_0 + H_1 + H_2, \quad (3.29)$$

où :

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\mathbf{r}} - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2M_0}\Delta_{\mathbf{R}_0} - \frac{\hbar^2}{2m_e^*}(\Delta_{z_1} + \Delta_{z_2}) - \frac{\hbar^2}{2m_h^*}\Delta_{z_h} + V_c + V_w, \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} H_1 &= -\frac{ie\hbar}{cm_e^*} \left[\mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{1-2\sigma^2}{1+2\sigma} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot \nabla_{\mathbf{R}} + \frac{2\sigma(1+\sigma)}{(1+2\sigma)^2} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot \nabla_{\mathbf{R}_0} + \right. \\ &\quad \left. + (1+\sigma) \mathbf{A}(\mathbf{R}_0) \cdot \nabla_{\mathbf{R}} + \frac{\sigma}{1+2\sigma} \mathbf{A}(\mathbf{R}_0) \cdot \nabla_{\mathbf{R}_0} \right], \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} H_2 &= \frac{e^2}{2c^2m_e^*} \left[\frac{1}{2} \mathbf{A}^2(\mathbf{r}) + 2 \frac{1+2\sigma^3}{(1+2\sigma)^2} \mathbf{A}^2(\mathbf{R}) + (2+\sigma) \mathbf{A}^2(\mathbf{R}_0) + \right. \\ &\quad \left. + 4 \frac{1-\sigma^2}{1+2\sigma} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}_0) \right], \end{aligned} \quad (3.32)$$

avec :

$$\mu = \frac{m_e^*}{2}, M = \frac{2m_e^*m_h^*}{2m_e^* + m_h^*}, M_0 = 2m_e^* + m_h^*. \quad (3.33)$$

Nous remarquons que le Hamiltonien H^{tot} commute avec la projection L_z du moment angulaire selon l'axe z , mais ne commute pas avec l'opérateur de quantité de mouvement de centre de masse \mathbf{P}_0 dans le cas tridimensionnel (3D). Cependant, les composantes planes de l'opérateur $\pi(\pi_x, \pi_y)$:

$$\begin{aligned} \pi &= \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_h - \frac{e}{c} [\mathbf{A}(\rho_1) + \mathbf{A}(\rho_2) - \mathbf{A}(\rho_h)] \\ &= -i\hbar\partial_{\mathbf{R}_0} - \frac{e}{c} \left[2\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} \mathbf{A}(\mathbf{R}) + \mathbf{A}(\mathbf{R}_0) \right], \end{aligned} \quad (3.34)$$

où \mathbf{p}_i est l'opérateur quantité de mouvement dans le plan, commutent avec H^{tot} mais ne commutent pas entre elles. Seules les composantes π_x et H ou π_y et H^{tot} peuvent être diagonalisées simultanément dans la même base de fonctions propres. Dans ce qui suit, nous déterminons la base commune à H^{tot} et à π_x . Ainsi, nous pouvons transformer le Hamiltonien effectif en une expression qui ne contient pas la coordonnée X_0 du centre de masse. En effet, comme les opérateurs π_x et H commutent, la fonction d'onde enveloppe Ψ est solution de l'équation différentielle suivante

$$\pi_x \Psi(z_1, z_2, z_h, \mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{R}_0) = \hbar K_x \Psi(z_1, z_2, z_h, \mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{R}_0) \quad (3.35)$$

dont la résolution conduit à :

$$\Psi(z_1, z_2, z_h, \mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{R}_0) = U \Phi(z_1, z_2, z_h, \mathbf{r}, \mathbf{R}, Y_0), \quad (3.36)$$

où l'opérateur unitaire U a pour expression :

$$U = \exp i \left[\left\{ \mathbf{K} + \frac{2e}{c\hbar} \frac{1+\sigma}{1+2\sigma} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \right\} \cdot \mathbf{R}_0 - \frac{eB}{2c\hbar} X_0 Y_0 \right]. \quad (3.37)$$

Nous remarquons que la fonction Φ est indépendante de X_0 . Nous avons introduit le vecteur d'onde dans le plan $\mathbf{K} \equiv (K_x, 0)$ du centre de masse, qui ne doit pas être confondu avec le vecteur d'onde $\mathbf{K}_{0,p} \equiv (K_x, K_y)$ du centre du masse dans le plan en l'absence du champ magnétique. le Hamiltonien transformé H' s'écrit :

$$H' = U^{-1} H^{tot} U = H'_1 + H'_2 + H'_3 + H'_4 + H'_5, \quad (3.38)$$

où :

$$H'_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (\Delta_{z_1} + \Delta_{z_2}) - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \Delta_{z_h} + V_c + V_w^e(z_1) + V_w^e(z_2) + V_w^h(z_h) \quad (3.39)$$

est la contribution à champ nul. Le second terme représente la contribution due à l'effet Zeeman linéaire en champ :

$$H'_2 = -\frac{ie\hbar}{cm_e^*} \left[\mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{1-2\sigma^2}{1+2\sigma} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \right]. \quad (3.40)$$

La contribution H'_3 représente l'effet diamagnétique quadratique en champ :

$$H'_3 = \frac{e^2}{c^2 m_e^*} \left[\frac{1}{4} \mathbf{A}^2(\mathbf{r}) + \lambda(\sigma) \mathbf{A}^2(\mathbf{R}) \right], \quad (3.41)$$

où

$$\lambda(\sigma) = \frac{1+4\sigma(1+\sigma)(2+\sigma+\sigma^2)}{(1+2\sigma)^3}, \quad (3.42)$$

avec $\sigma = m_e^*/m_h^*$. Le quatrième terme H'_4 décrit l'action du champ magnétique sur le mouvement de centre de masse :

$$H'_4 = -\frac{\hbar^2}{2M_0} \partial_{Y_0}^2 + \frac{M_0 \omega_{CM}^2}{2} \left(Y_0 - \frac{\hbar c}{eB} K_x \right)^2. \quad (3.43)$$

Il est analogue à le Hamiltonien d'un oscillateur harmonique de masse M_0 et de fréquence $\omega_{CM} = eB/M_0 c$ dont les oscillations s'effectuent autour du point $Y_0^0 = (\hbar c/eB) K_x$. Sa contribution conduit à décomposer les niveaux d'énergie en niveaux de Landau dans le plan perpendiculaire à la direction du champ magnétique. Finalement, le cinquième terme :

$$H'_5 = 2\hbar\omega_{CM} \frac{1+\sigma}{1+2\sigma} \left[-iX\partial_{Y_0} + \frac{M_0\omega_{CM}}{\hbar} Y \left(Y_0 - \frac{\hbar c}{eB} K_x \right) \right], \quad (3.44)$$

traduit le couplage entre les mouvements relatifs et du centre de masse dans le plan.

Comme dans le cas tridimensionnel (3D) [Stébé et Feddi (1987)] et bidimensionnel (2D) [Stébé et Ainane (1996)] lors de l'étude de l'influence d'un champ magnétique externe sur les excitons chargés, nous pouvons négliger l'influence du terme H'_5 dans le cas limite des champs faibles. Dans ces conditions, le mouvement du centre de masse dans le plan peut être séparé de celui du mouvement relatif. Moyennant cette approximation, nous pouvons écrire la fonction d'onde enveloppe Φ comme étant le produit de deux fonctions dont l'une représente la fonction d'onde du mouvement relatif et l'autre celle du mouvement du centre de masse dans le plan :

$$\Phi(z_1, z_2, z_h, \mathbf{r}, \mathbf{R}, Y_0) \simeq \psi(z_1, z_2, z_h, \mathbf{r}, \mathbf{R}) \Phi_{CM}(Y_0). \quad (3.45)$$

La fonction d'onde ψ du mouvement relatif vérifie l'équation aux valeurs propres suivante :

$$H^{rel}\psi = (H'_1 + H'_2 + H'_3)\psi = E^{rel}\psi, \quad (3.46)$$

alors que la fonction d'onde Φ_{CM} décrit le mouvement oscillatoire de la charge du centre de masse dans le plan et satisfait l'équation :

$$H'_4 \Phi_{CM} = E_L^N \Phi_{CM}, \quad (3.47)$$

dont la résolution donne lieu à des niveaux de Landau. Dans la suite, nous nous intéressons essentiellement à l'effet diamagnétique, négligeant ainsi la contribution orbital de l'effet Zeeman. Par conséquent l'énergie totale s'écrit :

$$E^{tot} = E^{rel} + E_L^N, \quad (3.48)$$

où E^{rel} est l'énergie relative et

$$E_L^N = \hbar\omega_{CM} \left(N + \frac{1}{2} \right), \quad N = 0, 1, 2... \quad (3.49)$$

correspond à l'énergie due au mouvement du centre de masse dans plan. Nous remarquons que le terme de couplage H'_5 ne donne lieu à aucune contribution dans notre approximation. En effet $\langle \psi | X | \psi \rangle = \langle \psi | Y | \psi \rangle = 0$ pour des fonctions d'onde relative à symétrie cylindrique, et nous pouvons encore vérifier que

$$\langle \Phi_{CM} | \partial / \partial Y_0 | \Phi_{CM} \rangle = \langle \Phi_{CM} | Y_0 - \frac{\hbar c}{eB} K_x | \Phi_{CM} \rangle = 0. \quad (3.50)$$

Nous avons déterminé l'énergie relative de l'état fondamental E^{rel} avec la méthode variationnelle de Ritz en utilisant la même fonction d'onde relative déjà utilisée par Stébé (1997) lors de l'étude de l'exciton chargé négativement (X^-) dans un puits quantique en l'absence de champ magnétique. Cette fonction est bien adaptée à cette étude car elle est de symétrie axiale. Elle s'écrit :

$$\psi(s, t, u, z_1, z_2, z_h) = \mathcal{N} \sum_{lmnpqr} c_{lmnpqr} \phi_{lmn}(s, t, u) \theta_{pqr}(z_1, z_2, z_h), \quad (3.51)$$

où l, m, n, p, q, r sont des entiers positifs ou nuls. Les fonctions de base sont choisies comme étant le produit des fonctions ϕ_{lmn} dépendant seulement des coordonnées dans le plan et des fonctions θ_{pqr} dépendant seulement des coordonnées z . Les fonctions d'onde de base dans le plan :

$$\phi_{lmn}(s, t, u) = e^{-k\frac{s}{2}} s^l u^m t^n \quad (3.52)$$

sont de type Hylleraas. La partie dépendant de z est choisie telle que :

$$\theta_{pqr}(z_1, z_2, z_h) = f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_h) e^{-\alpha_e(z_1^2+z_2^2)-\alpha_h z_h^2} (z_1^p z_2^q + z_1^q z_2^p) z_h^r, \quad (3.53)$$

où f_e et f_h sont les fonctions propres de l'état fondamental de l'électron et du trou, respectivement, dans un puits quantique. Dans le cas de l'état singulet d'un exciton chargé, ψ est symétrique quant à l'échange des deux électrons. Dans ces conditions, n doit être pair, \mathcal{N} étant une constante de normation. Dans le cas d'un puits quantique symétrique par rapport à l'origine, le Hamiltonien est invariant par inversion des coordonnées selon z . La fonction d'onde doit donc être à parité définie, soit paire, soit impaire. Pour l'étude de l'état fondamental, nous choisissons une fonction paire. Ainsi, nous choisissons $p+q+r$ pair. Dans ces conditions, le Hamiltonien H^{rel} s'écrit, dans le système des unités atomiques, en utilisant comme unité de longueur $\kappa\hbar^2/m_e^*e^2$ et comme unité d'énergie $2R_y = m_e^*e^4/\kappa^2\hbar^2$, sous la forme :

$$\begin{aligned}
H^{rel} = & -\partial_{s^2}^2 - \partial_{t^2}^2 - \frac{2}{s^2-t^2} (s\partial_s - t\partial_t) - \partial_{u^2}^2 - \frac{1}{u}\partial_u \\
& - \frac{2s(u^2-t^2)}{u(s^2-t^2)}\partial_{su}^2 - \frac{2t(s^2-u^2)}{u(s^2-t^2)}\partial_{tu}^2 - \frac{1}{2}(\partial_{z_1^2}^2 + \partial_{z_2^2}^2) \\
& - 2\sigma \left(\frac{s^2-u^2}{s^2-t^2}\partial_{s^2}^2 + \frac{u^2-t^2}{s^2-t^2}\partial_{t^2}^2 + \frac{s}{s^2-t^2}\partial_s - \frac{t}{s^2-t^2}\partial_t + \frac{1}{4}\partial_{z_2^2}^2 \right) \\
& - \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{s+t}{2}\right)^2 + (z_1^2 - z_h^2)}} - \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{s-t}{2}\right)^2 + (z_2^2 - z_h^2)}} + \frac{1}{\sqrt{u^2 + (z_1^2 - z_2^2)}} \\
& + V_w^e(z_1) + V_w^e(z_2) + V_w^h(z_h) + H_{dia}, \tag{3.54}
\end{aligned}$$

où

$$H_{dia}(s, t, u) = \frac{\gamma^2}{16} \left[u^2 + \lambda(\sigma) \{ s^2 + t^2 - u^2 \} \right], \tag{3.55}$$

avec $\gamma = \frac{\hbar\omega_e}{2R_y}$ traduisant l'intensité du champ magnétique ou encore l'énergie de résonance cyclotronique $\hbar\omega_e$, en unités atomiques, et $\sigma = m_e^*/m_h^*$ étant le rapport des masses effectives. Les paramètres linéaires c_{lmnpqr} ainsi que les paramètres variationnels non-linéaires k , α_e et α_h sont déterminés en utilisant la méthode variationnelle de Ritz, de la même manière que dans le cas à champ nul [Stébé (1997)] en minimisant l'énergie totale du système aboutissant ainsi à une équation aux valeurs propres :

$$(\mathbf{H}^{rel} - E\mathbf{S})\mathbf{c} = 0, \tag{3.56}$$

où \mathbf{H}^{rel} et \mathbf{S} sont les matrices du Hamiltonien relatif et de normation, et \mathbf{c} est la matrice colonne des coefficients linéaires c_{lmnpqr} . Le calcul de ses éléments de matrice est détaillé dans l'appendice D.

Nous avons calculé l'énergie relative E^{rel} de l'état fondamental de l'exciton chargé négativement et positivement en utilisant une fonction d'onde à 66 termes définis par

$l + m + n \leq 4$ et $\{pqr\} = (000, 101, 110)$. Le cas de l'exciton chargé positivement (X_2^+) est analogue à celui de l'exciton chargé négativement (X^-). Toute la discussion précédente reste valable dans ce cas en interchangeant les électrons par les trous. Pour simplifier, nous choisissons une fonction analogue pour le trion positif (X_2^+).

Dans le but d'estimer l'influence du confinement quantique ainsi que l'effet du champ magnétique sur la corrélation coulombienne, nous définissons "les énergies de corrélations", $E_{X^-}^c$, $E_{X_2^+}^c$ et E_X^c de l'exciton chargé et de l'exciton :

$$\begin{aligned} E_{X^-}^c &= E_{X^-}^{rel} - 2E_{e,L}^0 - E_{h,L}^0 \\ E_{X_2^+}^c &= E_{X_2^+}^{rel} - 2E_{h,L}^0 - E_{e,L}^0 \\ E_X^c &= E_X^{rel} - E_{e,L}^0 - E_{h,L}^0, \end{aligned} \quad (3.57)$$

où $E_{e,L}^0$ et $E_{h,L}^0$ sont les énergies de l'état fondamental pour un niveau de Landau $N = 0$ de l'électron et du trou dans un puits quantique fini. Nous pouvons vérifier que la condition de stabilité s'écrit :

$$\begin{aligned} W_{X^-} &= E_{X^-}^c - E_X^c + \frac{\sigma}{1+2\sigma} \frac{\hbar\omega_e}{2} \leq 0 \\ W_{X_2^+} &= E_{X_2^+}^c - E_X^c + \frac{\sigma}{2+\sigma} \frac{\hbar\omega_e}{2} \leq 0 \end{aligned} \quad (3.58)$$

où $-W_{X^-}$ et $-W_{X_2^+}$ sont les énergies de liaison des trions négatifs (X^-) et positifs (X_2^+) [Figure (3.1)]. Nous remarquons que, contrairement à ce qui se passe en l'absence du champ magnétique, l'énergie de liaison n'est pas seulement la différence de l'énergie de corrélation de l'exciton et de l'exciton chargé. Dans le but de vérifier ces conditions de stabilité, il est nécessaire de connaître les valeurs des énergies relatives et de corrélation E_X^{rel} et E_X^c avec une précision comparable à celle que nous avons dans le cas de l'exciton chargé. Pour cela, nous utilisons un calcul variationnel de l'énergie de l'état fondamental de l'exciton en présence d'un champ magnétique avec une fonction d'onde similaire à celle que nous avons utilisée à champ nul :

$$\psi_X = \mathcal{N}_X f_e(z_e) f_h(z_h) e^{-\beta\rho - \beta_e z_e^2 - \beta_h z_h^2} \sum_{pr} c_{pr} z_e^p z_h^r, \quad (3.59)$$

où β , β_e , β_h et c_{pr} sont des paramètres variationnels, p et r sont des entiers positifs ou nuls choisis tels que $p + r$ soit pair et \mathcal{N}_X est une constante de normation. Nous utilisons une fonction d'onde à 9 termes tels que $p + r \leq 4$ pour obtenir la même précision que celle obtenue pour le trion.

Dans les études précédentes relatives au cas bidimensionnel [Stébé et al. (1998)], lors de l'étude de la magnéto-absorption entre un état initial d'électron ou un trou et un

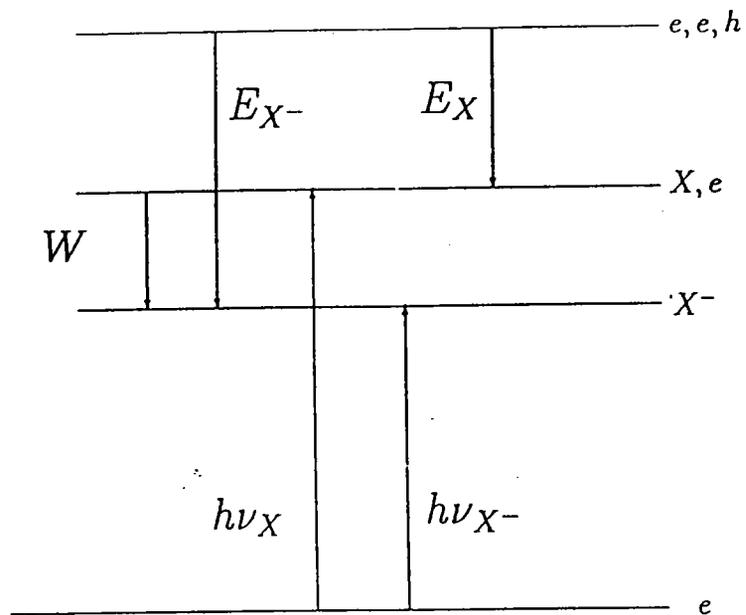


Figure (3.1) : Diagramme des transitions qui peuvent avoir lieu entre un état initial d'électron et un état final de trion négatif (X^-) dans un puits quantique de semi-conducteur.

état final d'exciton chargé négativement (X^-) ou positivement (X_2^+), le coefficient d'absorption se réduit à une série de pics de Dirac. Nous nous attendons à trouver la même chose dans le cas des puits quantiques de semi-conducteurs comme nous allons le voir au chapitre 5. Dans ces conditions, les énergies de transition [Figure (3.1)] sont données par :

$$\begin{aligned} h\nu_{X^-} &= \epsilon_g + E_{X^-}^{rel} - E_e - \frac{1+\sigma}{1+2\sigma} \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_e \\ h\nu_{X_2^+} &= \epsilon_g + E_{X_2^+}^{rel} - E_h - \sigma \frac{1+\sigma}{2+\sigma} \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_e, \end{aligned} \quad (3.60)$$

où ϵ_g est le gap à champ nul du matériau puits. E_e et E_h sont les énergies de l'état fondamental de l'électron et du trou dans un puits quantique à champ nul. $\omega_e = eB/m_e^*c$ correspond à la fréquence cyclotronique de l'électron. L'énergie de transition de l'exciton est donnée par :

$$h\nu_X = \epsilon_g + E_X^{rel} + \frac{\hbar^2 K_p^2}{2M}, \quad (3.61)$$

où \mathbf{K}_p est le vecteur d'onde du centre de masse dans le plan de l'exciton, qui s'annule pour les transitions à gap direct à $T = 0$ K. M est la masse totale de l'exciton. L'énergie de localisation de l'exciton chargé correspondant au niveau de Landau ($N = 0$) est donnée par :

$$\Delta h\nu = h\nu_X - h\nu = -W + \frac{\hbar^2 K_p^2}{2M}. \quad (3.62)$$

Cependant, dans le cas des excitons chargés négativement (X^-) et positivement (X_2^+) nous avons :

$$\begin{aligned} \Delta h\nu_{X^-} &= E_X^c - E_{X^-}^c - \frac{\sigma}{1+2\sigma} \frac{\hbar\omega_e}{2} + \frac{\hbar^2 K_p^2}{2M} \\ \Delta h\nu_{X_2^+} &= E_X^c - E_{X_2^+}^c - \frac{\sigma}{\sigma+2} \frac{\hbar\omega_e}{2} + \frac{\hbar^2 K_p^2}{2M}. \end{aligned} \quad (3.63)$$

3.4 Résultats et discussion

Dans le cas d'un puits de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, nous avons utilisé les données suivantes [Miller (1984)] : $m_e^*/m_0 = 0.0665$ pour la masse de l'électron et $m_{hh}^*/m_0 = 0.34$ pour la masse du trou lourd. Ainsi, le rapport des masses effectives de l'électron et du trou est donné par $\sigma = \frac{m_e^*}{m_{hh}^*} = 0.196$. Les band-offset sont données par $V_e = Q_e \Delta\epsilon_g$ et $V_h = Q_h \Delta\epsilon_g$ où $Q_e = 0.57 = 1 - Q_h$. Nous supposons que la différence de la bande interdite $\Delta\epsilon_g$ et le pourcentage x d'Aluminium sont liés

par $\Delta\epsilon_g = 1.155x + 0.37x^2$ eV [Lee (1980)] et nous prenons pour constante diélectrique la valeur $\kappa = 12.5$ [Green (1983)]. Dans le cas d'un puits quantique de type 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 [Romestain (1980)] dans CdTe, et la 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 magnéto-absorption à deux photons dans CdTe [Neuman (1988)]. Le rapport des masses effectives de l'électron et du trou est donné par $\sigma = 0.505$. Pour $x = 0.16$ les band-offsets de conduction et de valence sont $V_e = 71.4$ meV et $V_h = 24.1$ meV [Kheng (1993)]. Sur la figure (3.2), nous comparons les énergies de corrélation de l'exciton et des excitons chargés négativement et positivement. Nous constatons que les deux types de trions (X^- et X_2^+) sont stables, quant à leur produit de dissociation le plus probable, à savoir en un exciton et un électron ou un trou, pour toutes les valeurs L de la largeur du puits ; de plus leurs énergies de corrélation sont très proches. Lorsque L tend vers l'infini, nous trouvons la valeur tridimensionnelle (3D) de l'énergie de l'exciton, $E_X = -4.84$ meV, ainsi que celle des excitons chargés en utilisant la méthode déjà développée par Stébé et Munchy (1975) : $E_{X^-}^c = -5.07$ meV, $E_{X_2^+}^c = -5.24$ meV et nous obtenons pour les énergies de liaison ; $-W_{X^-} = 0.23$ meV et $-W_{X_2^+} = 0.4$ meV ; il en résulte qu'à cette limite, l'exciton chargé positivement (X_2^+) est plus stable que l'exciton chargé négativement (X^-). Ce résultat est bien connu en physique atomique, où l'ion hydrogène (H^-) est moins stable que l'ion (H_2^+). Cependant, pour les petites valeurs de L , les énergies de corrélation des trions négatif (X^-) et positif (X_2^+) sont très proches. Ce résultat est en accord avec les observations expérimentales récentes [Glasberg (1999)] des deux complexes (X^- et X_2^+) dans le même matériau. Ceci peut être expliqué par le fait que le confinement quantique localise plus les trous lourds dans le cas de l'exciton chargé positivement (X_2^+) que les électrons dans l'exciton chargé négativement (X^-). Par conséquent, la répulsion coulombienne est plus importante pour les trous que pour les électrons. Ce qui explique pourquoi le trion positif (X_2^+) devient moins stable dans les puits quantiques que dans les semi-conducteurs tridimensionnels (3D). La figure (3.3) représente la variation des énergies de corrélation de l'exciton (X) et de l'exciton chargé négativement (X^-) en fonction de L pour trois valeurs de champ magnétique dans un puits de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. Nous remarquons que le confinement quantique ainsi que le champ magnétique augmentent la corrélation coulombienne. Nous remarquons aussi que le trion négatif (X^-) est toujours stable, pour toutes les valeurs de largeur de puits L et de champ magnétique B . Cependant, bien que l'énergie de liaison W ne soit pas simplement égale à la différence des énergies

de corrélation de l'exciton et de l'exciton chargé, nous pouvons vérifier, dans notre cas, que le dernier terme de l'équation (3.58) est de 0.1 meV/T et peut par conséquent être négligé. Sur la figure (3.4), nous présentons la variation de l'énergie totale, donnée par l'équation (3.48), de l'exciton chargé négativement (X^-) en fonction du champ magnétique dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. Nous observons l'aspect quadratique dû à la contribution diamagnétique ainsi que la décomposition des niveaux d'énergie en niveaux de Landau qui est due au mouvement du centre de masse chargé ; nous assistons alors à une levée de dégénérescence des niveaux d'énergie des trions à champ nul. Ce résultat est analogue à celui déjà obtenu précédemment dans le cas de semi-conducteurs tridimensionnels (3D) [Stébé et Feddi (1987)], et bidimensionnels (2D) [Stébé et Ainane (1996)]. Sur la figure (3.5), nous comparons la variation des énergies de transition théoriques et expérimentales [Shields (1995a)] de l'exciton (X) et de l'exciton chargé négativement (X^-) dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, dans le cas d'un trou lourd, avec $x = 0.33$ et $L = 30$ nm, en fonction du champ magnétique B . Nos valeurs théoriques de l'exciton chargé négativement (X^-) sont plus basses que celles observées, même à champ nul. Ce point a été discuté par Stébé (1997) lors de l'étude de l'exciton chargé négativement dans un puits quantique à champ nul. Cette divergence peut être attribuée en partie aux paramètres du matériau utilisé, mais aussi au fait que nous avons négligé l'interaction d'échange électron-trou, dont nous nous attendons à ce qu'elle soit plus importante dans un puits quantique que dans les semi-conducteurs tridimensionnels (3D). Cependant, nous observons un accord qualitatif entre la courbe théorique correspondant à (X^-), pour un niveau de Landau $N = 0$, et la courbe expérimentale. En particulier, nous obtenons un minimum aux alentours de 1 T, qui apparaît aussi sur la courbe expérimentale. Ce minimum peut être expliqué par le fait que lorsque le champ magnétique est très faible, l'énergie de transition donnée par l'équation (3.60), se comporte comme le dernier terme, qui est négatif et linéaire en champ magnétique et qui décroît lorsque le champ augmente. Cependant, lorsque le champ magnétique est élevé, le second terme qui est quadratique en champ magnétique et positif devient plus important, ce qui conduit à une augmentation de l'énergie de transition lorsque le champ magnétique croît. Pourtant, les résultats expérimentaux récents, ne montrent pas l'existence des niveaux de Landau que nous avons prédite. Sur la figure (3.6), nous présentons les énergies de transition théoriques et expérimentales [Shields (1995a)] de l'exciton (X) et de l'exciton chargé positivement (X_2^+) dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, dans le cas d'un trou lourd, avec $x = 0.33$ et $L = 30$ nm. La même discussion que pour la figure (3.5) peut être développée.

Sur la figure (3.7), nous représentons les énergies de transition de l'exciton chargé négativement (X^-) et positivement (X_2^+) pour un niveau de Landau $N = 0$, dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, pour un trou lourd, avec $x = 0.33$ et $L = 30$ nm, en fonction du champ magnétique B . Il apparaît que ces énergies de transition sont très proches quelque soit la valeur du champ magnétique et deviennent identiques à champ nul. Ce résultat est en accord avec les observations récentes [Glasberg (1999)]. Il peut être expliqué par le fait que le confinement quantique localise plus les trous dans le cas du trion positif (X_2^+) que les électrons dans le cas du trion négatif (X^-), car les trous sont plus légers que les électrons. Ainsi, la répulsion coulombienne est plus importante pour les trous que pour les électrons, ce qui explique pourquoi le complexe (X_2^+) devient moins stable dans un puits quantique que dans les semi-conducteurs tridimensionnels (3D). Nous remarquons aussi que la courbe du complexe (X^-) passe par un minimum alors que ce n'est pas le cas pour le complexe (X_2^+). Ceci est dû au fait que le terme diamagnétique quadratique en champ dans l'énergie de transition est plus important pour l'exciton chargé positivement (X_2^+). Sur les figures (3.8) et (3.9), nous présentons nos résultats obtenus dans le cas d'un puits quantiques de type CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe, pour un trou lourd, avec $x = 0.16$ et $L = 10$ nm. Nos résultats sont essentiellement les mêmes que ceux présentés sur les figures (3.3) et (3.5) dans le cas d'un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. Cependant, nous remarquons que nos résultats théoriques concernant les variations de l'énergie de transition en fonction du champ magnétique sont plus élevés que ceux obtenus expérimentalement par Kheng (1996), même à champ nul. Ce désaccord est peut être dû aux paramètres du matériau utilisés. Nous observons, néanmoins, un accord qualitatif entre les courbes théoriques et expérimentales.

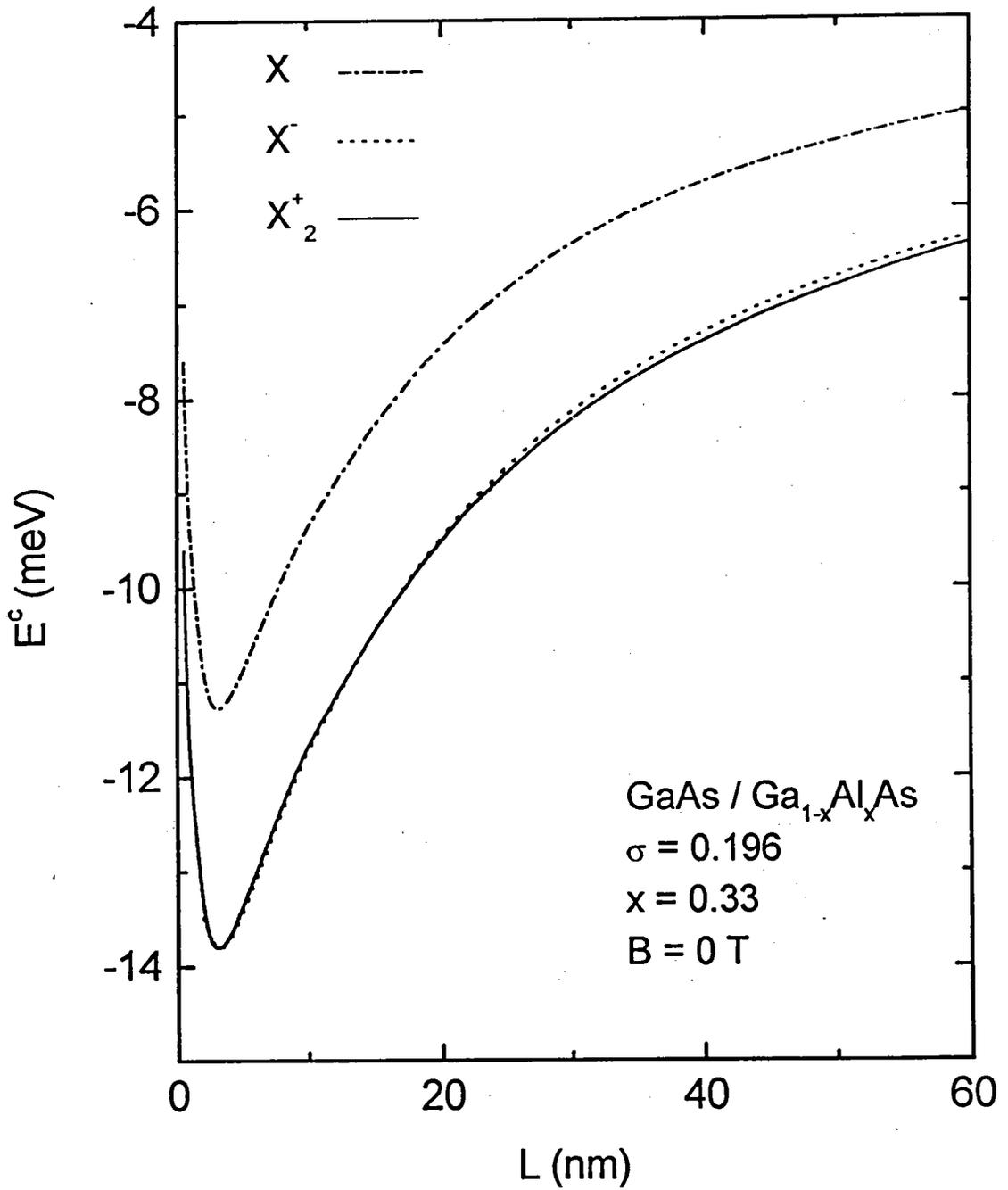


Figure (3.2) : Comparaison des énergies de corrélation entre (X), (X^-) et (X_2^+) en fonction de la largeur de puits L dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs.

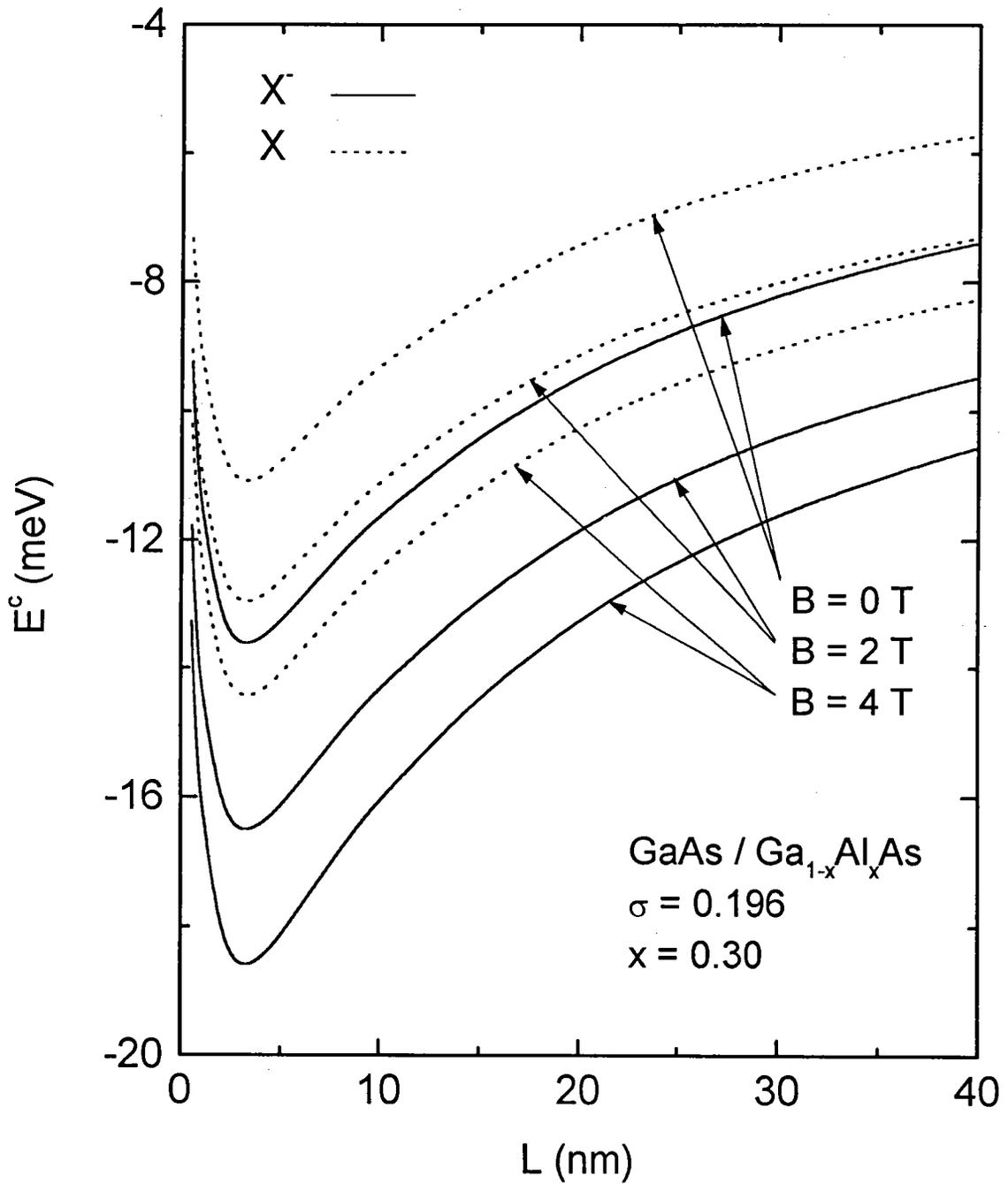


Figure (3.3) : Variation de l'énergie de corrélation de (X) et de (X^-) en fonction de la largeur de puits L pour différentes valeurs du champ magnétique dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs.

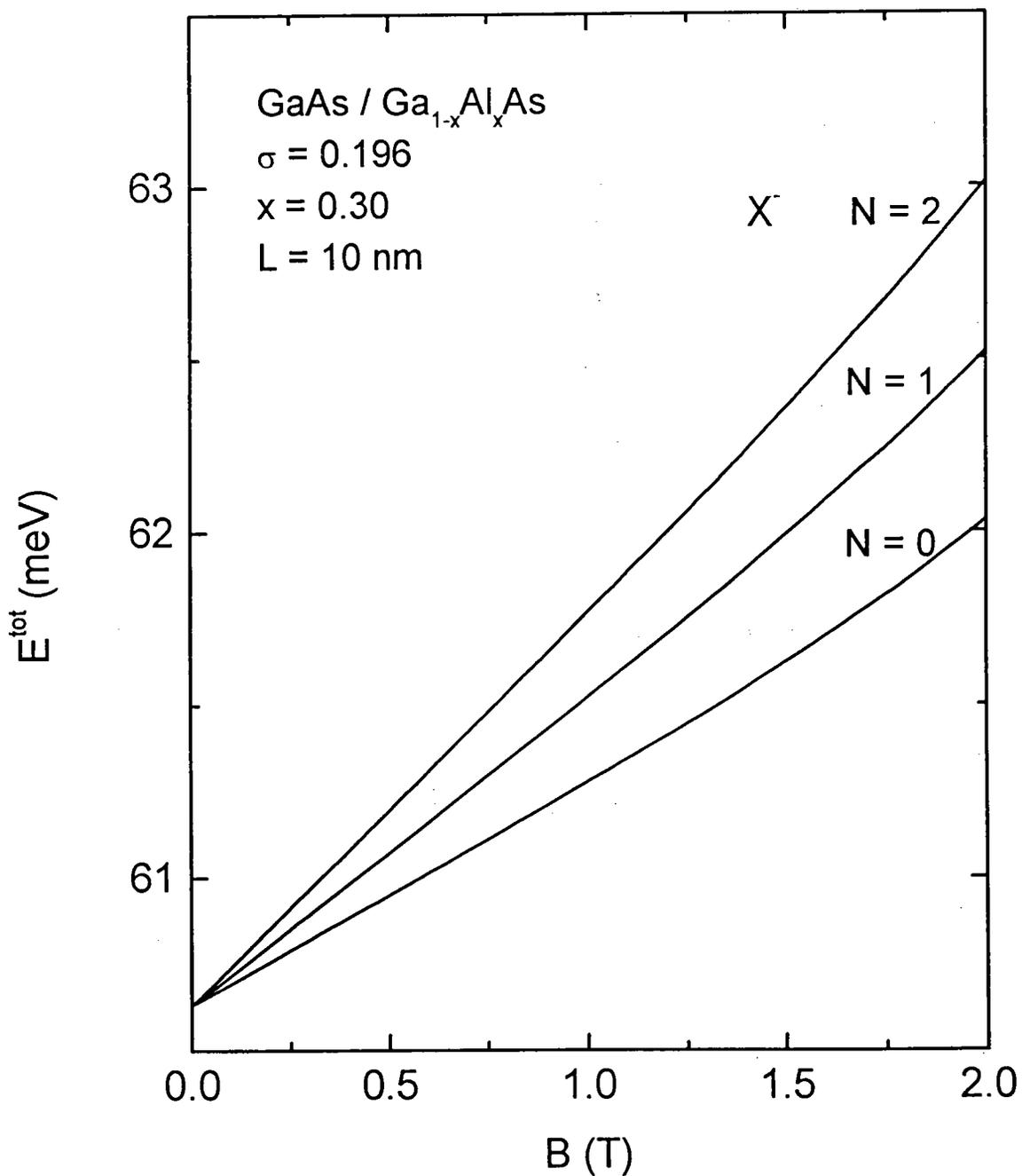


Figure (3.4) : Variations de l'énergie totale des premiers niveaux de Landau de (X^-) en fonction du champ magnétique dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs.

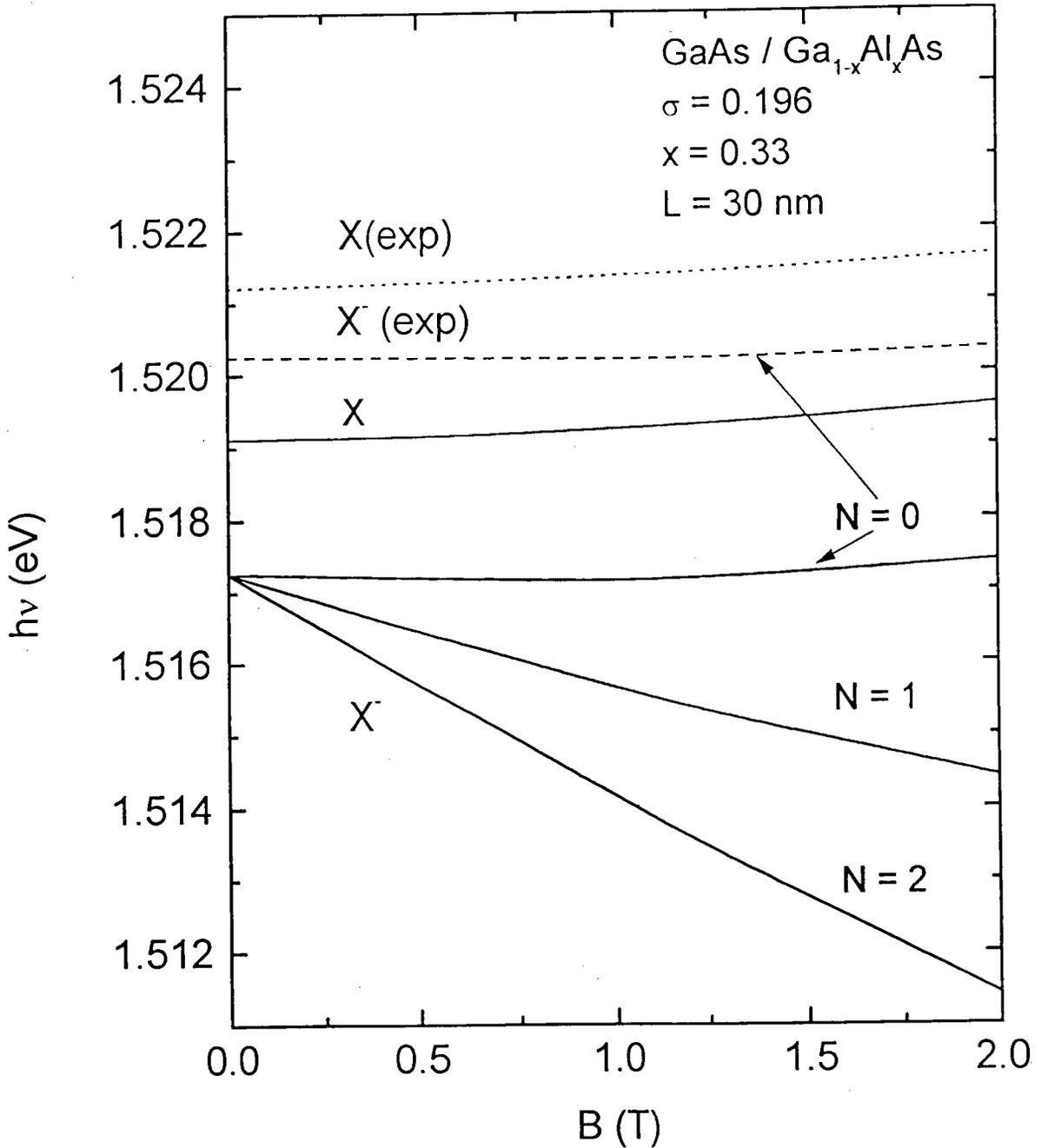


Figure (3.5) : Comparaison des énergies de transition théoriques et expérimentales de (X) et de (X⁻) en fonction du champ magnétique dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs.

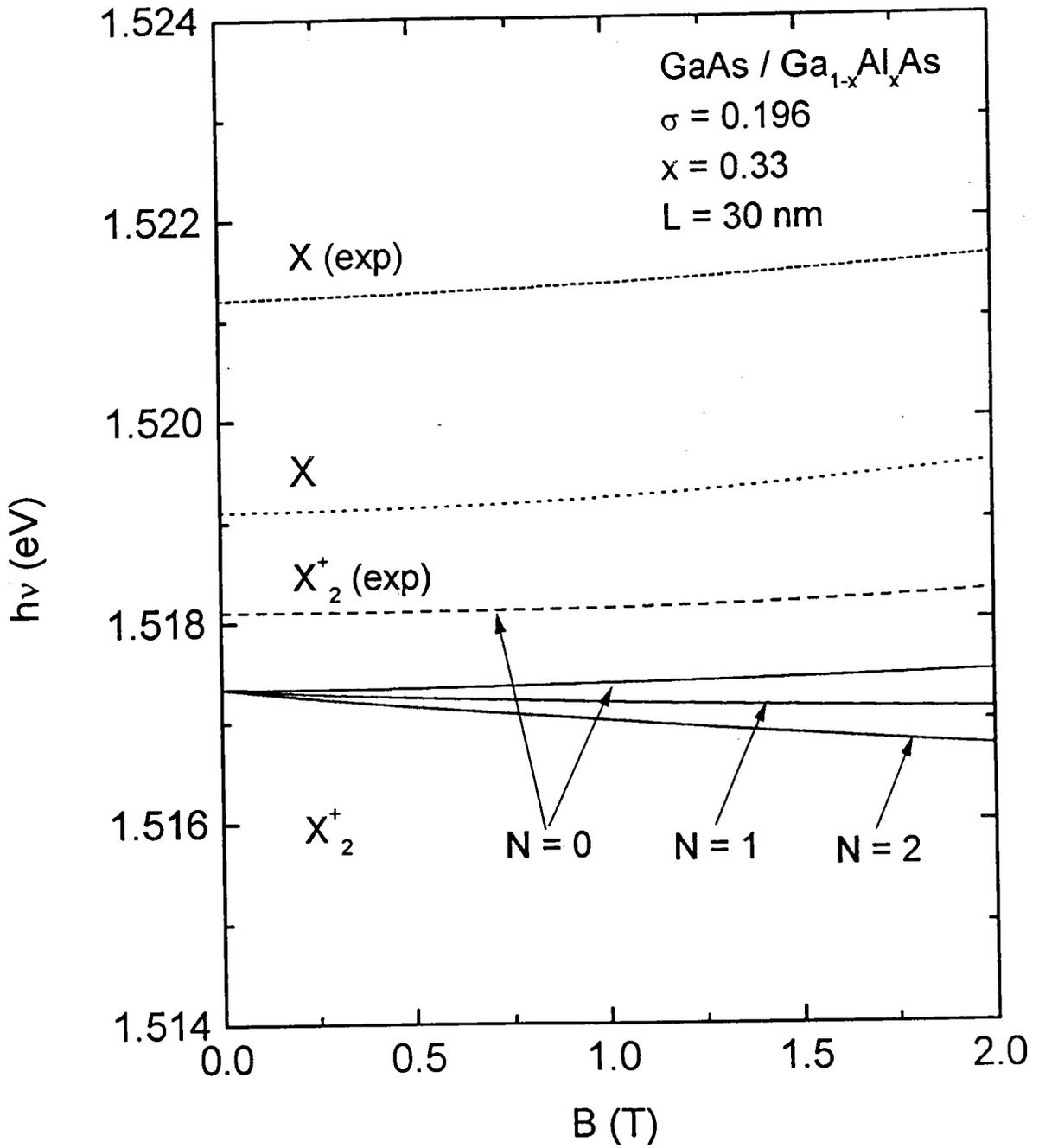


Figure (3.6) : Comparaison des énergies de transition théoriques et expérimentales de (X) et de (X₂⁺) en fonction du champ magnétique dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs.

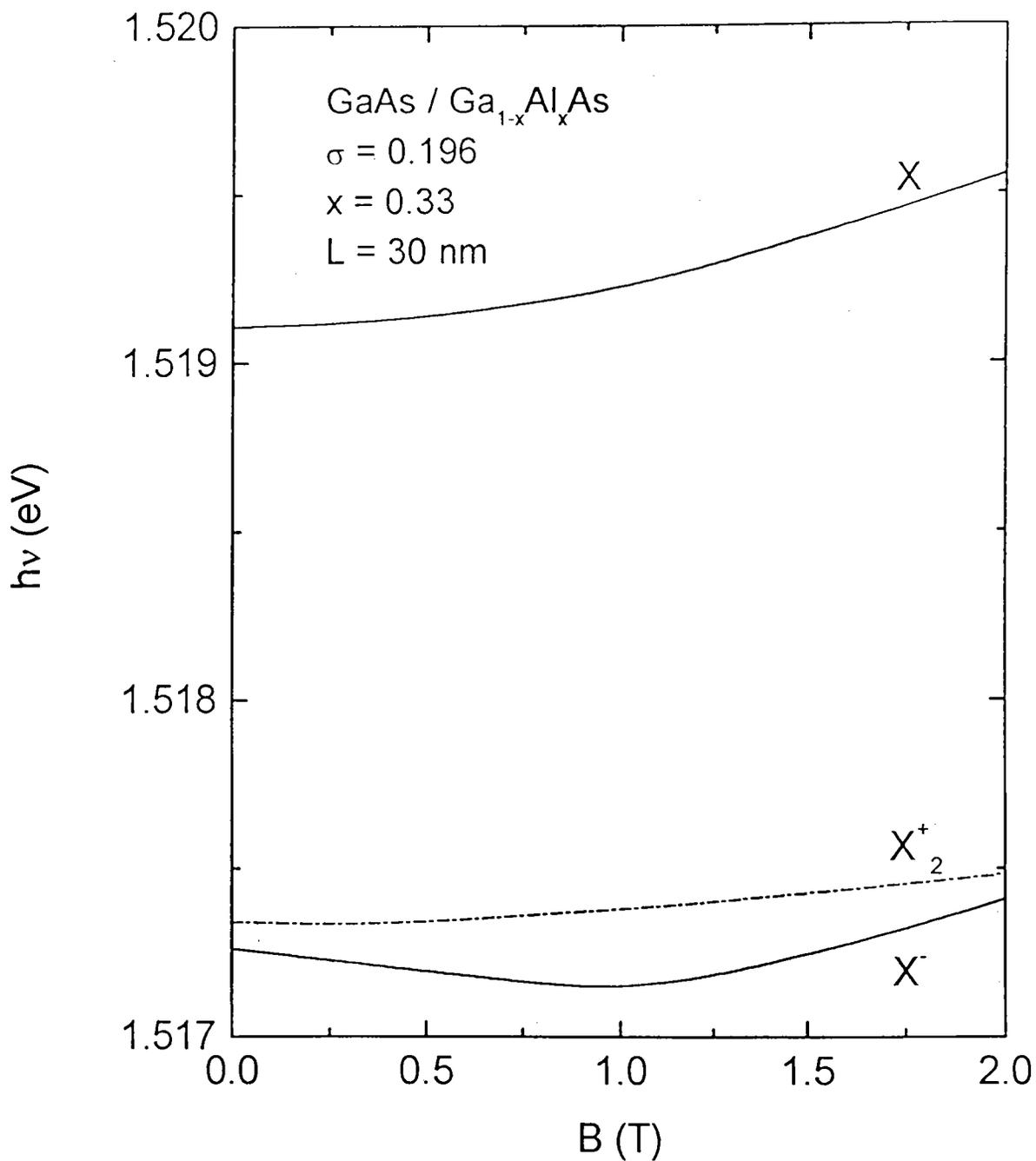


Figure (3.7) : Comparaison des énergies de transition de (X), (X⁻) et (X₂⁺) en fonction du champ magnétique dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs.

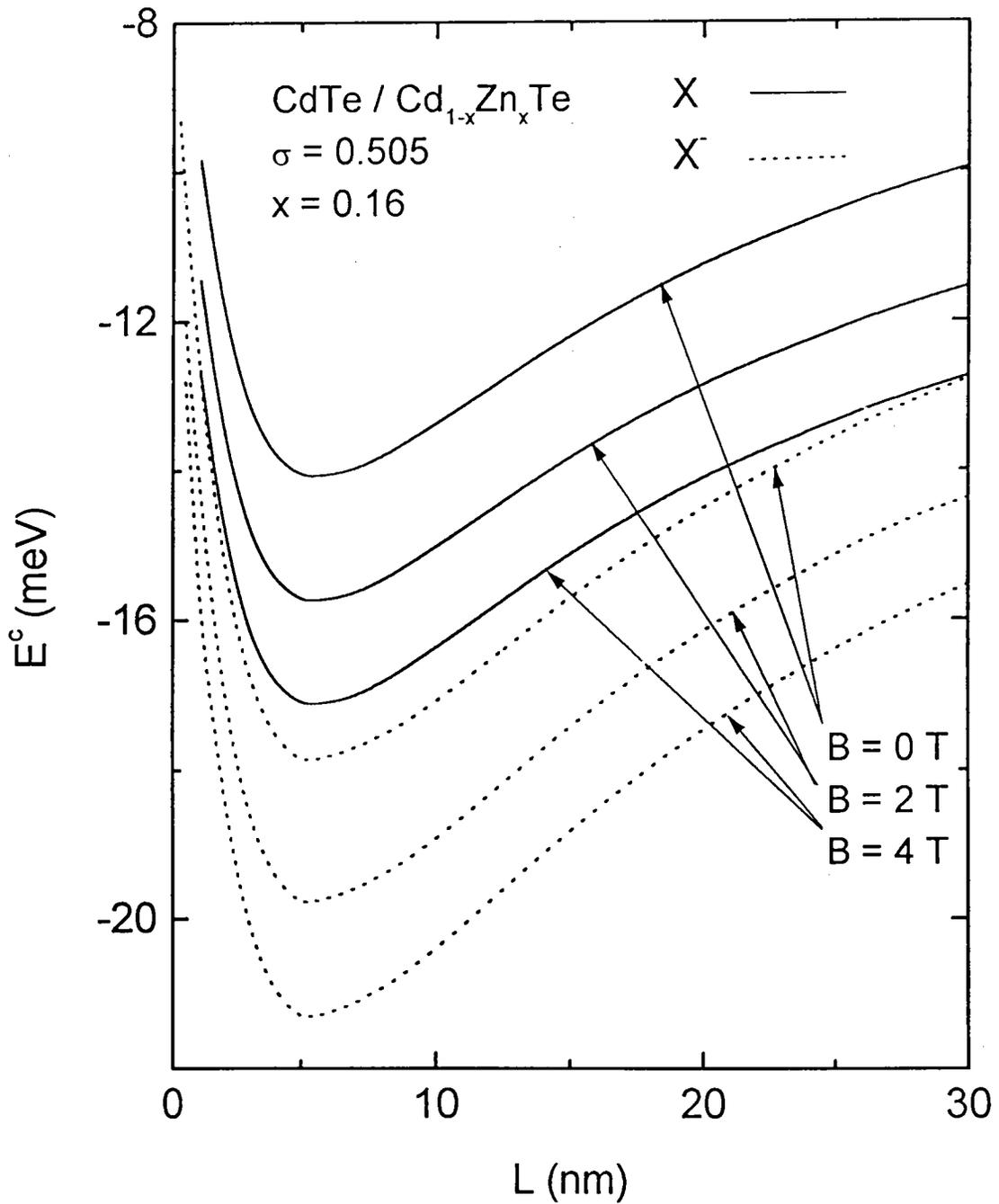


Figure (3.8) : Variation de l'énergie de corrélation de (X) et de (X⁻) en fonction de la largeur de puits L pour différentes valeurs du champ magnétique dans un puits quantique de type CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe.

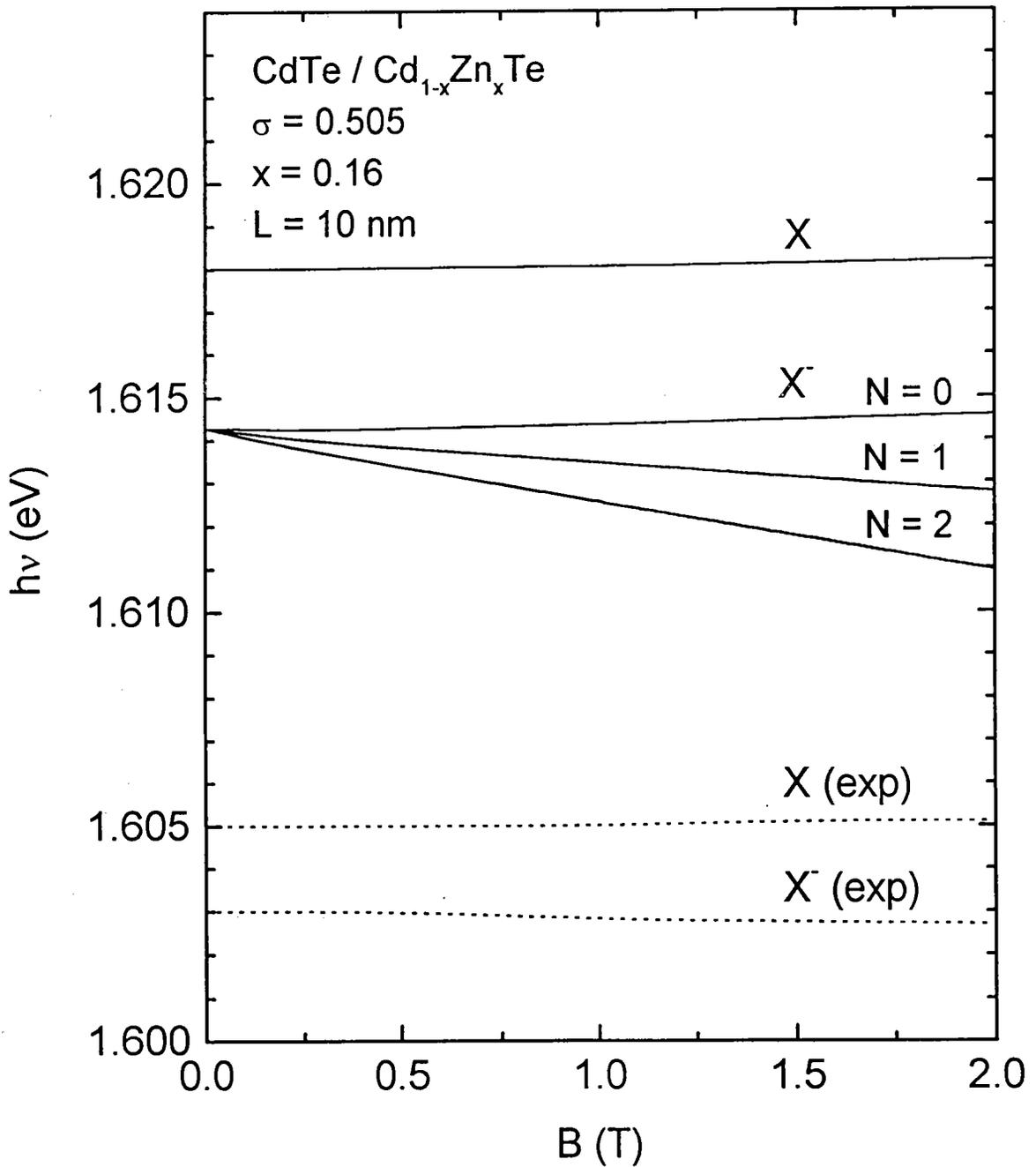


Figure (3.9) : Comparaison des énergies de transition théoriques et expérimentales de (X) et de (X⁻) en fonction du champ magnétique dans un puits quantique de type CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe.

3.5 Conclusion

En conclusion, nous avons montré que dans un puits quantique, en l'absence d'un champ magnétique, les énergies de corrélation des excitons chargés négativement et positivement sont très proches, en accord avec les observations expérimentales récentes de Glasberg (1999), contrairement à ce qui se passe dans les semi-conducteurs tridimensionnels et bidimensionnels [Stébé et feddi (1987), Stébé et Ainane (1991)]. D'autre part, lors de l'application d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches, nous obtenons une décomposition des niveaux d'énergie en niveaux de Landau traduisant le fait que le centre de masse des trions est une entité chargée. L'existence de ces niveaux n'a pas encore été observée expérimentalement. Nous avons montré également comment les effets quantiques de confinement ainsi que les effets dus au champ magnétique augmentent l'interaction coulombienne entre les trois porteurs de charge. Nous avons également étudié la stabilité des deux types de trions, négatifs et positifs, par rapport au produit de leurs dissociations en un exciton et un électron ou un trou, en calculant leurs énergies de transition respectives. Nous avons montré que cette énergie augmente avec le champ magnétique, ce qui traduit un renforcement de la stabilité de ces deux complexes. L'écart de l'énergie de transition entre l'exciton et l'exciton chargé augmente avec le champ, conformément aux résultats expérimentaux.

Chapitre 4

THEORIE DE L'INTERACTION RAYONNEMENT-MATIERE DANS UN MODELE A DEUX BANDES

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous développons le formalisme de l'interaction rayonnement-matière dans un modèle à deux bandes en présence d'un champ magnétique perpendiculaire aux couches dans un puits quantique de semi-conducteurs. Ce formalisme consiste en une généralisation de celui développé dans le cas des semi-conducteurs tridimensionnels et bidimensionnels en l'absence et en présence d'un champ magnétique [Stébé (1975), Stébé et Feddi (1987), Stébé et Ainane (1991), Stébé et al. (1998)].

Nous nous intéressons en particulier à l'étude des transitions monophotoniques, puis nous terminons par quelques propriétés optiques et magnéto-optiques des excitons dans les puits quantiques de semi-conducteurs.

4.2 Interaction rayonnement-matière avec un système électron-trou dans un modèle à deux bandes

Le Hamiltonien électronique du cristal dans un puits quantique en présence d'un champ magnétique extérieur en interaction avec une radiation électromagnétique

s'écrit en deuxième quantification sous la forme

$$H = \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_R \right)^2 + V_p(\mathbf{r}) + V_w(z) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}') \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (4.1)$$

où $\hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r})$ et $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$ sont les opérateurs champ de fermions donnés par l'expression (2.5), \mathbf{p} est le vecteur quantité de mouvement, c la vitesse de la lumière dans le vide, m_e la masse de l'électron au repos, $V_p(\mathbf{r})$ est le potentiel périodique du cristal qui tient compte de l'interaction avec les ions ainsi que de l'échange électron-électron ; \mathbf{A}_R correspond au potentiel-vecteur de la radiation électromagnétique, $\mathbf{A}_{ext} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \wedge \mathbf{r}$ est le potentiel vecteur décrivant le champ magnétique extérieur \mathbf{B} dans la jauge de Coulomb. L'influence du puits quantique est caractérisée par un potentiel $V_w(z)$. En représentation de Schrödinger indépendante du temps, nous avons

$$\mathbf{A}_R = \sum_{q\nu} \frac{c}{n} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{q\nu}\Omega}} \left[\boldsymbol{\varepsilon}_{q\nu} b_{q\nu} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) + \boldsymbol{\varepsilon}_{q\nu}^* b_{q\nu}^{\dagger} \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \right], \quad (4.2)$$

où n est l'indice de réfraction du cristal de volume $\Omega = L_x L_y L_z$, $b_{q\nu}$ et $b_{q\nu}^{\dagger}$ sont les opérateurs d'annihilation et de création d'un photon de vecteur d'onde \mathbf{q} , de polarisation ν et de pulsation ω , respectivement, et $\boldsymbol{\varepsilon}_{q\nu}$ est le vecteur unitaire de polarisation de la lumière tel que $\boldsymbol{\varepsilon}_{q\nu} \cdot \mathbf{q} = 0$, en accord avec la condition $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Nous pouvons encore écrire notre Hamiltonien H sous la forme

$$H = H^e + H_2 + H_1^{e-r} + H_2^{e-r}, \quad (4.3)$$

avec,

$$H^e = \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{2m_e} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right)^2 + V_p(\mathbf{r}) + V_w(z) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}). \quad (4.4)$$

Ce terme représente la contribution due aux électrons dans un puits quantique en présence d'un champ magnétique extérieur, tandis que

$$H_2 = \frac{1}{2} \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}') \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \hat{\Psi}(\mathbf{r}') \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (4.5)$$

traduit l'interaction coulombienne électronique. Le terme H_1^{e-r} donné par

$$H_1^{e-r} = \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) \frac{e}{m_e c} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right) \cdot \mathbf{A}_R \hat{\Psi}(\mathbf{r}), \quad (4.6)$$

représente l'interaction rayonnement-matière linéaire, alors que

$$H_2^{e-r} = \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} \hat{\Psi}^{\dagger}(\mathbf{r}) \frac{e^2}{2m_e c^2} \mathbf{A}_R^2 \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \quad (4.7)$$

traduit l'interaction rayonnement-matière quadratique. Par la suite, nous allons négliger ce terme car il relève de l'optique non linéaire et n'a de signification que dans le cas des champs intenses. Dans ces conditions, le Hamiltonien traduisant l'interaction rayonnement-matière s'écrit

$$H^{e-r} = H_1^{e-r} + H_2^{e-r} \simeq H_1^{e-r}. \quad (4.8)$$

Dans notre modèle à deux bandes, nous ne tiendrons pas compte des termes correspondant à la création suivie de la destruction d'une même particule dans la même bande. De plus, les transitions interbandes ne seront pas prises en compte, ceci est justifié si nous considérons seulement les énergies d'excitation optique comparables au gap à basses températures. Dans ces conditions, en utilisant les expressions des opérateurs champ de fermions déjà définis au chapitre 2 par l'équation (2.11), notre Hamiltonien d'interaction rayonnement-matière s'écrit

$$\begin{aligned} H^{e-r} = & \frac{e}{m_e c} \int_{\Omega} d^3 \mathbf{r} \hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}) \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right) \cdot \mathbf{A}_R \hat{\Psi}_h^+(\mathbf{r}) \\ & + \frac{e}{m_e c} \int_{\Omega} d^3 \mathbf{r} \hat{\Psi}_h(\mathbf{r}) \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right) \cdot \mathbf{A}_R \hat{\Psi}_e(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (4.9)$$

D'autre part, en utilisant les développements des opérateurs champs de fermions dans la base des fonctions d'électrons et de trous (2.12), nous obtenons

$$\begin{aligned} H^{e-r} = & \frac{e}{m_e c} \sum_{\lambda \lambda'} a_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda'}^{\dagger} \int_{\Omega} d^3 \mathbf{r} \varphi_{e\lambda}^*(\mathbf{r}) \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right) \cdot \mathbf{A}_R \varphi_{h\lambda'}(\mathbf{r}) \\ & + \frac{e}{m_e c} \sum_{\lambda \lambda'} d_{\lambda} a_{\lambda'} \int_{\Omega} d^3 \mathbf{r} \varphi_{h\lambda}(\mathbf{r}) \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right) \cdot \mathbf{A}_R \varphi_{e\lambda'}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (4.10)$$

où $\varphi_{\lambda}(\mathbf{r})$ sont les fonctions d'onde des électrons, relatives à la bande de conduction et à la bande de valence. Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, nous rappelons que les fonctions $\varphi_{\lambda}(\mathbf{r})$ s'écrivent comme étant le produit de la partie périodique d'une fonction de Bloch au centre de la zone de Brillouin par une fonction d'onde enveloppe des électrons (trous) en présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches.

$$\begin{aligned} \varphi_{c\lambda}(\mathbf{r}) &= c(\mathbf{r}) g_{e\lambda}(\mathbf{r}) = \varphi_{e\lambda}(\mathbf{r}) \\ \varphi_{v\lambda}(\mathbf{r}) &= v(\mathbf{r}) g_{v\lambda}(\mathbf{r}) = \varphi_{h\lambda}^*(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (4.11)$$

où les fonctions $g_{\lambda}(\mathbf{r})$ sont données par

$$\begin{aligned} g_{e\lambda}(\mathbf{r}) &= f_{e\lambda}(\boldsymbol{\rho}) f_e(z) \\ g_{h\lambda}(\mathbf{r}) &= f_{h\lambda}(\boldsymbol{\rho}) f_h(z), \end{aligned} \quad (4.12)$$

et

$$f_\lambda(\rho) = \exp i(k_x x) \exp \left[-i \left(\frac{eB}{2\hbar c} \right) xy \right] \exp \left[-(y - y_0)^2 \frac{eB}{2\hbar c} \right] \\ \times H_N \left[(y - y_0) \left(\frac{eB}{2\hbar c} \right)^{\frac{1}{2}} \right], \quad (4.13)$$

avec $\lambda = (k, N)$, où k est le module du vecteur d'onde de l'électron dans le plan, f_e et f_h sont les fonctions propres de l'état fondamental de l'électron et du trou, respectivement, dans un puits quantique. En reportant le développement des fonctions $\varphi_\lambda(\mathbf{r})$ dans le Hamiltonien d'interaction rayonnement-matière, nous obtenons

$$H^{e-r} = \frac{e}{m_e c} \sum_{\lambda\lambda'} a_\lambda^\dagger d_{\lambda'}^\dagger \int_\Omega d^3\mathbf{r} g_{e\lambda}^*(\mathbf{r}) c^*(\mathbf{r}) \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right) \cdot \mathbf{A}_R g_{h\lambda'}^*(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) \quad (4.14) \\ + \frac{e}{m_e c} \sum_{\lambda\lambda'} d_\lambda a_{\lambda'} \int_\Omega d^3\mathbf{r} g_{h\lambda}(\mathbf{r}) v^*(\mathbf{r}) \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right) \cdot \mathbf{A}_R g_{e\lambda'}(\mathbf{r}) c(\mathbf{r}),$$

or, l'application de l'opérateur $\left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right) \cdot \mathbf{A}_R = \left(-i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right) \cdot \mathbf{A}_R$ sur les fonctions $\varphi_\lambda(\mathbf{r})$ donne

$$\left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right) \cdot \mathbf{A}_R g_{e\lambda}(\mathbf{r}) c(\mathbf{r}) \\ = g_{e\lambda}(\mathbf{r}) \mathbf{A}_R \cdot \mathbf{p} c(\mathbf{r}) + c(\mathbf{r}) \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right) \cdot \mathbf{A}_R g_{e\lambda}(\mathbf{r}). \quad (4.15)$$

Par ailleurs, H^{e-r} s'écrit

$$H^{e-r} = \frac{e}{m_e c} \sum_{\lambda\lambda'} a_\lambda^\dagger d_{\lambda'}^\dagger \left\{ \int_\Omega d^3\mathbf{r} g_{e\lambda}^*(\mathbf{r}) g_{h\lambda'}^*(\mathbf{r}) c^*(\mathbf{r}) \mathbf{A}_R \cdot \mathbf{p} v(\mathbf{r}) \right. \\ \left. + \int_\Omega g_{e\lambda}^*(\mathbf{r}) c^*(\mathbf{r}) v(\mathbf{r}) \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right) \cdot \mathbf{A}_R g_{h\lambda'}^*(\mathbf{r}) \right\} \\ + \frac{e}{m_e c} \sum_{\lambda\lambda'} d_\lambda a_{\lambda'} \left\{ \int_\Omega d^3\mathbf{r} g_{h\lambda}(\mathbf{r}) g_{e\lambda'}^*(\mathbf{r}) v^*(\mathbf{r}) \mathbf{A}_R \cdot \mathbf{p} c(\mathbf{r}) \right. \\ \left. + \int_\Omega g_{h\lambda}(\mathbf{r}) c(\mathbf{r}) v^*(\mathbf{r}) \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}_{ext} \right) \cdot \mathbf{A}_R g_{e\lambda'}^*(\mathbf{r}) \right\}. \quad (4.16)$$

Nous pouvons séparer les intégrales sur Ω en un produit de deux contributions, dont l'une porte sur une cellule élémentaire et l'autre sur tout le cristal (Appendice C-2). Ceci est justifié si nous admettons qu'à l'intérieur d'une cellule élémentaire, les parties périodiques $c(\mathbf{r})$ et $v(\mathbf{r})$ sont à variations rapides tandis que les variations des fonctions $g_{e\lambda}(\mathbf{r})$, $g_{h\lambda}(\mathbf{r})$ et \mathbf{A}_{ext} sont lentes. Dans ces conditions, nous pouvons les considérer comme constantes sur une cellule élémentaire de volume Ω_0 . En utilisant le fait que les parties périodiques $c(\mathbf{r})$ et $v(\mathbf{r})$ soient normalisées sur une cellule

élémentaire alors que les fonctions $g_{e\lambda}(\mathbf{r})$, $g_{h\lambda}(\mathbf{r})$ le sont sur tout le cristal, nous obtenons

$$H^{e-r} = \frac{e}{m_e c} \int dz f_e(z) f_h(z) \left[\sum_{\lambda} a_{\lambda}^{+} d_{\lambda}^{+} \int_{\Omega} d^3 \mathbf{r} c^{*}(\mathbf{r}) \mathbf{A}_R \cdot \mathbf{p} v(\mathbf{r}) + \sum_{\lambda} d_{\lambda} a_{\lambda} \int_{\Omega} d^3 \mathbf{r} v^{*}(\mathbf{r}) \mathbf{A}_R \cdot \mathbf{p} c(\mathbf{r}) \right]. \quad (4.17)$$

Dans cette relation, le premier terme correspond à l'absorption d'un photon, tandis que le second correspond à l'émission. Dans ce qui suit, nous nous limiterons au cas de l'absorption monophotonique.

4.2.1 Approximation dipolaire électrique

En général, le vecteurs d'onde \mathbf{q} du photon est négligeable par rapport au vecteur d'onde de la zone de Brillouin tel que $|\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}| \ll 1$. En effet, les vecteurs d'onde des électrons et des photons dans le domaine de la lumière visible et proche-visible sont fort distincts : $q = \frac{2\pi}{\lambda} \simeq 10^4 - 10^6 \text{ cm}^{-1}$, alors que les vecteurs d'onde de la zone de Brillouin sont de l'ordre de $k = \frac{2\pi}{a} = 10^8 \text{ cm}^{-1}$, où a est la distance interatomique. Dans ces conditions, nous pouvons développer en série le facteur $\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$ au voisinage de zéro, soit

$$\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) = 1 + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + \dots \quad (4.18)$$

L'approximation dipolaire électrique consiste à négliger le terme $i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}$ et les termes d'ordre supérieur en se limitant au premier terme du développement. Dans le cadre de cette approximation, le potentiel vecteur \mathbf{A}_R s'écrit

$$\mathbf{A}_R = \sum_{q\nu} \frac{c}{n} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{q\nu}\Omega}} \left[\boldsymbol{\epsilon}_{q\nu} b_{q\nu} + \boldsymbol{\epsilon}_{q\nu}^{*} b_{q\nu}^{+} \right]. \quad (4.19)$$

Le Hamiltonien correspondant à l'absorption optique s'écrit alors

$$H_{abs}^{e-r} = \frac{1}{m_e n} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{q\nu}\Omega}} \int dz f_e(z) f_h(z) \times \sum_{q\nu} \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{+} d_{\lambda}^{+} b_{q\nu} \boldsymbol{\epsilon}_{q\nu} \cdot \int_{\Omega} d^3 \mathbf{r} c^{*}(\mathbf{r}) \mathbf{e} p v(\mathbf{r}), \quad (4.20)$$

où nous avons négligé les termes correspondant à la création ou à la destruction simultanée de photon et de paire électron-trou. Nous pouvons simplifier l'équation

(4.20) en introduisant le moment dipolaire \mathbf{D} correspondant à la création d'une paire électron-trou non liée

$$H_{abs}^{e-r} = \frac{1}{m_e n} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{q\nu}\Omega}} \int dz f_e(z) f_h(z) \sum_{q\nu} \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{+} d_{\lambda}^{+} b_{q\nu} |\boldsymbol{\varepsilon}_{q\nu} \cdot \mathbf{D}|, \quad (4.21)$$

où

$$\mathbf{D} = \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} c^*(\mathbf{r}) e p v(\mathbf{r}). \quad (4.22)$$

4.2.2 Absorption à un photon

La probabilité de transition par unité de temps pour l'absorption d'un photon d'énergie $\hbar\omega$ entre l'état initial $|i\rangle$ et l'état final $|f\rangle$ est donnée par

$$W_{abs}^{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,f} |H_{abs}|^2 \delta(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i - \hbar\omega),$$

où \mathcal{E}_f et \mathcal{E}_i sont les énergies des états initiaux et finaux du système d'électrons du cristal interagissant avec un photon d'énergie $\hbar\omega$. H_{abs} désigne les éléments de matrice de transition entre les états initiaux $|i\rangle$ et finaux $|f\rangle$ du système électron-photon non interagissant considéré. Plusieurs processus d'absorption peuvent être envisagés, mais dans notre cas nous nous restreignons aux transitions à basses températures. Les états initiaux et finaux du système électron-photon correspondent, respectivement, à l'état initial $|\Phi_i\rangle$ avec $N_{q\nu}$ photons et l'état final $|\Phi_f\rangle$ avec $N_{q\nu} - 1$ photons

$$\begin{aligned} |i\rangle &= |\Phi_i, 0, 1, \dots, N_{q\nu}, \dots\rangle \\ |f\rangle &= |\Phi_f, 0, 1, \dots, N_{q\nu} - 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Dans ces conditions, H_{abs} s'écrit

$$H_{abs} = \langle \Phi_f, 0, 1, \dots, N_{q\nu} - 1, \dots | H_{abs}^{e-r} | 0, 1, \dots, N_{q\nu}, \dots \Phi_i \rangle. \quad (4.24)$$

En utilisant les propriétés des opérateurs de photons $b_{q\nu}$, nous avons

$$b_{q\nu} |0, 1, \dots, N_{q\nu}, \dots\rangle = \sqrt{N_{q\nu}} |0, 1, \dots, N_{q\nu} - 1, \dots\rangle, \quad (4.25)$$

et compte tenu de l'orthogonalité des états photoniques, nous obtenons

$$H_{abs} = \frac{1}{m_e n} \sqrt{\frac{2\pi\hbar \tilde{N}_{q\nu}}{\omega_{q\nu}}} \int dz f_e(z) f_h(z) |\boldsymbol{\varepsilon}_{q\nu} \cdot \mathbf{D}| \langle \Phi_f | \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{+} d_{\lambda}^{+} | \Phi_i \rangle. \quad (4.26)$$

où $\tilde{N}_{q\nu} = \frac{N_{q\nu}}{\Omega}$ désigne le nombre de photons par unité de volume.

4.3 Propriétés optiques et magnéto-optiques des excitons dans les puits quantiques

4.3.1 Absorption des excitons à champ nul

Dans cette partie, nous particularisons le formalisme développé dans le paragraphe précédent au cas des excitons dans un puits quantique à champ nul. Dans ces conditions, les états des électrons et de trous sont définies simplement par leur vecteur d'onde dans le plan \mathbf{k} . Nous nous proposons, tout d'abord, d'établir l'expression du coefficient d'absorption d'un photon d'énergie $\hbar\omega$ comparable au gap. L'état initial est défini par

$$|\Phi_i\rangle = |\Phi_0\rangle. \quad (4.27)$$

L'état final correspond à l'exciton et est défini par

$$|\Phi_f\rangle = |\Phi_X\rangle = \sum_{k_1 k_2} C_{k_1 k_2} a_{k_1}^+ d_{k_2}^+ |\Phi_0\rangle, \quad (4.28)$$

où $|\Phi_0\rangle$ représente l'état de la bande de valence pleine à température nulle. $C_{k_1 k_2}$ sont les transformées de Fourier des fonctions d'onde enveloppes de l'exciton. En procédant de la même manière que dans le cas à champ magnétique non nul, les éléments de matrice de transition dipolaire électrique s'écrivent alors

$$H_{abs} = \frac{1}{m_e n} \sqrt{\frac{2\pi\hbar \tilde{N}_{qv}}{\omega_{qv}}} \int dz f_e(z) f_h(z) |\boldsymbol{\epsilon}_{qv} \cdot \mathbf{D}| \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}\mathbf{k}}^*. \quad (4.29)$$

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, les coefficients C_i peuvent être obtenus à partir de la fonction d'onde enveloppe de l'exciton donnée par

$$\Psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{S} \sum_{k_1 k_2} C_{k_1 k_2} \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \boldsymbol{\rho}_1) \exp(-i\mathbf{k}_2 \cdot \boldsymbol{\rho}_2) f_e(z_1) f_h(z_2). \quad (4.30)$$

En effectuant une transformée de Fourier de Ψ_X , nous obtenons alors

$$C_{k_1 k_2} = \frac{1}{S} \int_{\Omega} d^2 \rho_1 d^2 \rho_2 dz_1 dz_2 \Psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \exp(-i\mathbf{k}_1 \cdot \boldsymbol{\rho}_1) \times \exp(i\mathbf{k}_2 \cdot \boldsymbol{\rho}_2) f_e(z_1) f_h(z_2), \quad (4.31)$$

dans ces conditions, il vient

$$\sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}'\mathbf{k}'}^* = \frac{1}{S} \int d^2 \rho_1 d^2 \rho_2 dz_1 dz_2 \Psi_X^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \exp(-i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\rho}_1) \exp(i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\rho}_2) f_e(z_1) f_h(z_2). \quad (4.32)$$

En utilisant les relations d'orthogonalité des fonctions $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ nous aboutissons à

$$\frac{1}{S} \sum_{\mathbf{k}'} \exp[i\mathbf{k}' \cdot (\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2)] = \delta(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2), \quad (4.33)$$

et l'expression précédente devient alors

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}'\mathbf{k}'}^* &= \int d^2\rho_1 d^2\rho_2 dz_1 dz_2 \Psi_X^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &\times \exp(-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}_2) f_e(z_1) f_h(z_2) \delta(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2) \\ &= \int d^2\rho_1 \Psi_X^*(z_1, z_2, \boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_1) f_e(z_1) f_h(z_2). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Dans le cas d'un exciton dans un puits quantique, seul le mouvement du centre de masse dans le plan peut se séparer du mouvement relatif. Dans ces conditions, la fonction d'onde enveloppe peut être écrite comme étant le produit du mouvement du centre de masse, libre dans le plan, et du mouvement relatif

$$\Psi_X^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(-i\mathbf{K}_{0p} \cdot \mathbf{R}) \psi^*(z_1, z_2, \mathbf{r}), \quad (4.35)$$

où \mathbf{K}_{0p} désigne le vecteur d'onde du centre de masse dans le plan et (\mathbf{r}, \mathbf{R}) sont les coordonnées relatives et du centre de masse dans le plan définies par

$$\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho}_2 - \boldsymbol{\rho}_1, \quad \mathbf{R} = \frac{m_e^* \boldsymbol{\rho}_1 + m_h^* \boldsymbol{\rho}_h}{m_e^* + m_h^*}. \quad (4.36)$$

L'expression (4.34) devient alors

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}'\mathbf{k}'}^* &= \frac{1}{\sqrt{S}} \int d^2\mathbf{R} dz_1 dz_2 \exp[-i\mathbf{K}_{0p} \cdot \mathbf{R}] \psi^*(z_1, z_2, \mathbf{0}) f_e(z_1) f_h(z_2) \\ &= \sqrt{S} \delta_{\mathbf{K}_{0p}, \mathbf{0}} \int dz_1 dz_2 \psi^*(z_1, z_2, \mathbf{0}) f_e(z_1) f_h(z_2). \end{aligned} \quad (4.37)$$

Pour $\mathbf{K}_p \neq \mathbf{0}$, les éléments de matrice de transition s'écrivent alors sous la forme

$$|H_{abs}|^2 = \frac{2\pi\hbar \tilde{N}_{qv}}{m_e^2 n^2 \omega_{qv}} \left| \int dz f_e(z) f_h(z) \right|^2 |\boldsymbol{\epsilon}_{qv} \cdot \mathbf{D}|^2 I_X(\mathbf{K}_{0p}), \quad (4.38)$$

où

$$I_X(\mathbf{K}_{0p}) = \left| \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}'\mathbf{k}'}^* \right|^2. \quad (4.39)$$

Afin d'obtenir une expression explicite de l'intégrale $I_X(\mathbf{K}_{0p})$, nous allons utiliser la fonction d'essai définie au chapitre 3 par

$$\psi(z_1, z_2, \mathbf{r}) = \mathcal{N}_X \sum_{pr} c_{pr} \chi_{pr}, \quad (4.40)$$

où \mathcal{N}_X est une constante de normation donnée par

$$\mathcal{N}_X = \left\{ \frac{\pi}{2\alpha^2} \sum_{pr} \sum_{p'r'} c_{pr} c_{p'r'} \langle p'r' | pr \rangle \right\}^{-\frac{1}{2}}, \quad (4.41)$$

d'où l'intégrale $I_X(\mathbf{K}_p)$ s'écrit alors

$$I_X^{\frac{1}{2}}(\mathbf{K}_{0p}) = \sqrt{S} \delta_{\mathbf{K}_{0p}, \mathbf{0}} \mathcal{N}_X \mathcal{N}_e \mathcal{N}_h \sum_{pr} c_{pr} \int dz_1 dz_2 f_e^2(z_1) f_h^2(z_2) a_p(z_1) b_r(z_2). \quad (4.42)$$

Finalement, nous obtenons

$$I_X^{\frac{1}{2}}(\mathbf{K}_{0p}) = \sqrt{S} \delta_{\mathbf{K}_{0p}, \mathbf{0}} \mathcal{N}_X \mathcal{N}_e \mathcal{N}_h \sum_{pr} c_{pr} \{2[1 + (-1)^p]\} W_p^1 W_r^2, \quad (4.43)$$

avec

$$\begin{aligned} W_\lambda^1 &= \int_0^{+\infty} dz f_e^2(z) z^\lambda \exp(-\alpha_e z^2) \\ W_\lambda^2 &= \int_0^{+\infty} dz f_h^2(z) z^\lambda \exp[-(\alpha_h) z^2], \end{aligned} \quad (4.44)$$

où α_e et α_h sont des paramètres variationnels, f_e et f_h sont les fonctions propres de l'état fondamental de l'électron et du trou, respectivement, dans un puits quantique, \mathcal{N}_e , \mathcal{N}_h et \mathcal{N}_X sont des constantes de normation. La probabilité de transition par unité de temps entre un état initial $|i\rangle$ et un état final $|f\rangle$, pour l'absorption d'un photon d'énergie $\hbar\omega$ s'écrit

$$W_{abs}^{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{K}_{0p}} \delta_{\mathbf{K}_{0p}, \mathbf{0}} |H_{abs}(K_{0p})|^2 \delta[\mathcal{E}_f(K_{0p}) - \mathcal{E}_0 - \hbar\omega], \quad (4.45)$$

où \mathcal{E}_i et \mathcal{E}_f représentent les énergies des états initiaux et finaux. Nous pouvons remplacer la sommation discrète par une sommation continue

$$\sum_{K_{0p}} \rightarrow \frac{S}{(2\pi)^2} \int d^2 K_{0p}, \quad (4.46)$$

nous obtenons alors pour W_{abs}^{if}

$$W_{abs}^{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{S}{(2\pi)^2} \int d^2 K_{0p} |H_{abs}(K_{0p})|^2 \delta[\mathcal{E}_f(K_{0p}) - \mathcal{E}_0 - \hbar\omega], \quad (4.47)$$

où $\frac{(2\pi)^2}{S}$ est la surface relative à un état quantique dans l'espace réciproque. En utilisant la forme explicite de $|H_{abs}(\mathbf{K}_{0p})|^2$, nous obtenons

$$\begin{aligned} W_{abs}^{if} &= \frac{S \tilde{N}_{qv}}{m_e^2 n^2 \omega_{qv}} |\boldsymbol{\varepsilon}_{qv} \cdot \mathbf{D}|^2 \times \\ &\times \left| \int dz f_e(z) f_h(z) \right|^2 \int 2\pi K_{0p} dK_{0p} I_X(K_{0p}) \delta[\mathcal{E}_f(K_{0p}) - \mathcal{E}_0 - \hbar\omega]. \end{aligned} \quad (4.48)$$

Les énergies des états initiaux et finaux sont données par

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_i &= \mathcal{E}_0 \\ \mathcal{E}_f &= \mathcal{E}_0 + \varepsilon_{c0} - \varepsilon_{v0} + E_X^{rel} + \frac{\hbar^2 K_{0p}^2}{2M},\end{aligned}\quad (4.49)$$

où \mathcal{E}_0 est l'énergie de la bande de valence pleine, E_X^{rel} est l'énergie relative de l'exciton dans un puits quantique. Or,

$$\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i - \hbar\omega = \varepsilon_g + E_X^{rel} + \frac{\hbar^2 K_{0p}^2}{2M} - \hbar\omega, \quad (4.50)$$

avec $\varepsilon_g = \varepsilon_{c0} - \varepsilon_{v0}$ est l'énergie de la bande interdite. Afin d'évaluer l'intégrale intervenant dans l'expression de $I_X(K_{0p})$, nous utilisons les propriétés de la fonction δ de Dirac ;

$$\int_a^b g(x) \delta[f(x)] dx = \sum_{x_0} g(x_0) \left| \frac{dx}{df(x)} \right|_{x=x_0}, \quad (4.51)$$

où x_0 est la racine de $f(x)$ comprise entre a et b ; dans notre cas $g(x)$ et $f(x)$ sont données par

$$\begin{aligned}g(K_{0p}) &= K_p I_X(K_{0p}) \\ f(K_{0p}) &= \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i - \hbar\omega.\end{aligned}\quad (4.52)$$

Par conséquent, la racine positive Q de $f(K_p)$ est donnée par

$$Q = \left(\frac{2m_e^*}{\mu_X \hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\varepsilon_g + E_X^{rel} - \hbar\omega \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (4.53)$$

D'autre part la quantité $\left| \frac{dK_{0p}}{df(K_{0p})} \right|_{K_{0p}=Q}$ s'écrit

$$\left| \frac{dK_{0p}}{df(K_{0p})} \right|_{K_{0p}=Q} = \frac{m_e^*}{\mu_X \hbar^2 Q}, \quad (4.54)$$

et finalement, la probabilité de transition est donnée par

$$W_{abs}^{if} = 2\pi \frac{\xi m_e^*}{\mu_X \hbar^2} I_X(Q), \quad (4.55)$$

avec

$$\xi = \frac{S \tilde{N}_{qv}}{m_e^2 n^2 \omega_{qv}} \left| \int dz f_e(z) f_h(z) \right|^2 |\boldsymbol{\varepsilon}_{qv} \cdot \mathbf{D}|^2. \quad (4.56)$$

Le coefficient d'absorption est défini comme étant le rapport de l'énergie perdue par l'onde incidente par unité de volume, de temps et d'énergie. Il traduit l'affaiblissement du flux lumineux lors de son passage dans un matériau, i.e.,

$$\alpha = \frac{\text{énergie dissipée par unité de volume}}{\text{Densité d'énergie} \times \text{vitesse de propagation}}, \quad (4.57)$$

qu'on peut encore écrire sous la forme

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{W_{abs}^{if} \hbar \omega}{\Omega} \frac{1}{\tilde{N}_{qv} \hbar \omega c / n} \\ &= \frac{n W_{abs}^{if}}{c \tilde{N}_{qv} \Omega}, \end{aligned} \quad (4.58)$$

où n représente l'indice du milieu absorbant, c la vitesse de la lumière dans le vide et \tilde{N}_{qv} le nombre de photons incidents par unité de volume. En reportant l'expression de W_{abs}^{if} dans celle du coefficient d'absorption, nous obtenons

$$\alpha = \frac{2\pi m_e^*}{n m_e^2 c \omega_{qv} \mu_X \hbar^2} \frac{S}{\Omega} \left| \int dz f_e(z) f_h(z) \right|^2 |\boldsymbol{\varepsilon}_{qv} \cdot \mathbf{D}|^2 I_X(Q), \quad (4.59)$$

qu'on peut encore écrire sous la forme

$$\alpha(\hbar\omega) = \alpha_{crist} \times \alpha_{env}(\hbar\omega), \quad (4.60)$$

avec

$$\begin{aligned} \alpha_{crist} &= \frac{2\pi m_e^* S}{n m_e^2 c \hbar \Omega} \left| \int dz f_e(z) f_h(z) \right|^2 |\boldsymbol{\varepsilon}_{qv} \cdot \mathbf{D}|^2 \\ \alpha_{env}(\hbar\omega) &= \frac{1}{\mu_X} \frac{1}{\hbar\omega} I_X(Q), \end{aligned} \quad (4.61)$$

où $\mu_X = \frac{\sigma}{\sigma + 1}$ et

$$I_X^{\frac{1}{2}}(Q) = \sqrt{S} \delta_{\mathbf{Q},0} \mathcal{N}_X \mathcal{N}_e \mathcal{N}_h \sum_{pr} c_{pr} \{2[1 + (-1)^p]\} W_p^1 W_r^2. \quad (4.62)$$

4.3.2 Absorption des excitons en présence d'un champ magnétique

Dans cette partie, nous nous proposons d'étudier le comportement du coefficient d'absorption monophotonique, en tenant compte de la présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches. En effet, nous avons une quantification totale des états propres correspondant aux états initiaux et finaux $|i\rangle$ et $|f\rangle$ et, dans

ces conditions, le coefficient d'absorption se présente sous la forme d'une série de pics de Dirac. Les énergies des états initiaux et finaux, pour des bandes de conduction et de valence supposées paraboliques, s'écrivent

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_i &= \mathcal{E}_0 \\ \mathcal{E}_f &= \mathcal{E}_0 + \varepsilon_{c0} - \varepsilon_{v0} + E_X^{rel} + \frac{\hbar^2 \mathbf{K}_p^2}{2M},\end{aligned}\quad (4.63)$$

où M est la masse de l'exciton, \mathcal{E}_0 est l'énergie de la bande de valence pleine. La fonction d'onde correspondant à l'état final s'écrit

$$\Psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{S} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} f_{e\lambda_1}(\boldsymbol{\rho}_1) f_{h\lambda_2}(\boldsymbol{\rho}_2) f_e(z_1) f_h(z_2). \quad (4.64)$$

Nous nous proposons par la suite d'établir l'expression de

$$I_X = \left| \sum_{\lambda'} C_{\lambda' \lambda'}^* \right|^2. \quad (4.65)$$

A cet effet, nous effectuons une transformée de Fourier de la fonction $\Psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ pour déterminer les coefficients C_{λ_i} . Dans ce cas, nous obtenons

$$C_{\lambda_1 \lambda_2} = \frac{1}{S} \int_{\Omega} d^2 \boldsymbol{\rho}_1 d^2 \boldsymbol{\rho}_2 f_{e\lambda_1}^*(\boldsymbol{\rho}_1) f_{h\lambda_2}^*(\boldsymbol{\rho}_2) f_e(z_1) f_h(z_2) \Psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (4.66)$$

d'où

$$\begin{aligned}\sum_{\lambda'} C_{\lambda' \lambda'}^* &= \int_{\Omega} d^2 \boldsymbol{\rho}_1 d^2 \boldsymbol{\rho}_2 dz_1 dz_2 \Psi_X^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) f_e(z_1) f_h(z_2) \\ &\quad \frac{1}{S} \sum_{\lambda'} f_{e\lambda'}(\boldsymbol{\rho}_1) f_{h\lambda'}(\boldsymbol{\rho}_2),\end{aligned}\quad (4.67)$$

or, comme les fonctions $f_{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ sont orthogonales, nous avons

$$\frac{1}{S} \sum_{\lambda'} f_{e\lambda'}(\boldsymbol{\rho}_1) f_{h\lambda'}(\boldsymbol{\rho}_2) = \delta(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2), \quad (4.68)$$

par conséquent,

$$\begin{aligned}\sum_{\lambda'} C_{\lambda' \lambda'}^* &= \int_{\Omega} d^2 \boldsymbol{\rho}_1 d^2 \boldsymbol{\rho}_2 dz_1 dz_2 \Psi_X^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) f_e(z_1) f_h(z_2) \delta(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2) \\ &= \int_{\Omega} d^2 \boldsymbol{\rho}_1 dz_1 dz_2 \Psi_X^*(z_1, z_2, \boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_1) f_e(z_1) f_h(z_2).\end{aligned}\quad (4.69)$$

Dans ce qui suit, nous utilisons les coordonnées du centre de masse et relatives dans le plan définies par l'expression (4.36). Or, comme $\boldsymbol{\rho}_1 = \boldsymbol{\rho}_2$, alors $\mathbf{r} = \mathbf{0}$, et par

conséquent

$$\begin{aligned}
\sum_{\lambda'} C_{\lambda'\lambda'}^* &= \mathcal{N}_e \mathcal{N}_h \mathcal{N}_X \int_{\Omega} d^2 \mathbf{R} dz_1 dz_2 \exp(-i \mathbf{K}_p \cdot \mathbf{R}) \psi_X(z_1, z_2, \mathbf{0}) \\
&\quad \times f_e(z_1) f_h(z_2) \\
&= \sqrt{S} \delta_{\mathbf{K}_p, \mathbf{0}} \mathcal{N}_e \mathcal{N}_h \mathcal{N}_X \int_{\Omega} dz_1 dz_2 \psi_X(z_1, z_2, \mathbf{0}) f_e(z_1) f_h(z_2).
\end{aligned} \tag{4.70}$$

La probabilité de transition dans le cas d'un champ perpendiculaire aux couches est donnée par la relation

$$W_{abs}^{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,f} |H_{abs}|^2 \delta(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i - \hbar\omega). \tag{4.71}$$

Compte tenu de ce qui précède, nous aboutissons à

$$W_{abs}^{if} = \frac{2\pi \tilde{N}_{q\nu} S}{m_e^2 \eta^2 \omega_{q\nu}} \left| \int dz f_e(z) f_h(z) \right|^2 |\boldsymbol{\varepsilon}_{q\nu} \cdot \mathbf{D}|^2 \int K_p dK_p I_X(K_p) \delta[\mathcal{E}_f(K_p) - \mathcal{E}_i - \hbar\omega], \tag{4.72}$$

où

$$I_X(K_p) = \left| \sum_{\lambda'} C_{\lambda'\lambda'}^* \right|^2, \tag{4.73}$$

et

$$\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i - \hbar\omega = \varepsilon_g + E_X^{rel} + \frac{\hbar^2 K_p^2}{2M} - \hbar\omega. \tag{4.74}$$

En procédant de la même manière que dans le cas sans champ, nous obtenons pour le coefficient d'absorption

$$\alpha = \frac{2\pi S}{n m_e^2 c \omega_{q\nu} \Omega} \left| \int dz f_e(z) f_h(z) \right|^2 |\boldsymbol{\varepsilon}_{q\nu} \cdot \mathbf{D}|^2 \delta\left(\varepsilon_g + E_X^{rel} + \frac{\hbar^2 K_p^2}{2M} - \hbar\omega\right) I_X(Q), \tag{4.75}$$

où $I_X(Q)$ a la même expression que dans le cas à champ nul.

4.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons établi un formalisme général de l'interaction rayonnement-matière dans un modèle à deux bandes dans un puits quantique de semi-conducteurs. Nous avons calculé le coefficient d'absorption de l'exciton en l'absence et en présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches dans un puits quantique de semi-conducteurs. Nous allons comparer, par la suite, ce coefficient d'absorption à celui de l'exciton chargé négativement. Cette étude fera l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 5

PROPRIETES OPTIQUES ET MAGNETO-OPTIQUES DES TRIONS

5.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'étude des propriétés optiques et magnéto-optiques des excitons chargés dans un puits quantique de semi-conducteurs. Cette étude constitue un élargissement du travail effectué par Stébé et al. (1998) dans le cas 2D et 3D. Nous nous proposons d'établir l'expression du coefficient d'absorption monophotonique entre un état initial correspondant à un électron (un trou) quasi-libre et un état final d'exciton chargé négativement (positivement) dans un puits quantique. Nous nous plaçons dans le cadre de l'approximation dipolaire électrique en nous limitant aux phénomènes d'optique linéaire.

En l'absence de champ magnétique, le centre de masse des trions se comporte comme une quasi-particule chargée et libre dans le plan perpendiculaire à l'axe de croissance z . Nous tenons compte de l'effet de la température ainsi que de la probabilité d'occupation des états initiaux et finaux en utilisant le comportement fermionique des électrons, des trous et des excitons chargés, décrit par la statistique de Fermi-Dirac. Nous verrons comment les effets du confinement quantique modifient aussi sensiblement les propriétés optiques des trions. Cela résulte du fait que la densité d'états d'un gaz d'électrons bidimensionnel (2D) est constante alors que la densité d'états d'un gaz d'électrons tridimensionnel (3D) se comporte comme la racine carrée de l'énergie. Aussi, observe-t-on des spectres optiques ayant une allure en marches d'escalier. En conséquence, les différentes caractéristiques optiques de ces composés sont modifiées.

Nous nous attendons à des raies fines présentant un bord d'absorption accompagné d'une queue décroissante vers les basses énergies. Ceci est dû à la conservation de la quantité de mouvement dans le plan entre l'état initial d'un électron ou de trou et l'état final de trion et peut prendre toutes les valeurs possibles. Au contraire, dans le cas des transitions excitoniques, seules sont possibles les transitions vers les états d'exciton à vecteur d'onde quasi-nul, car l'état initial correspond à des bandes de valence pleines caractérisées par une quantité de mouvement nulle d'une part, et d'autre part, le vecteur d'onde d'un photon reste très petit par rapport à celui d'un électron ou d'un trou. A noter également que, la température ainsi que la densité des électrons modifient les raies d'absorption. En effet, nous pouvons distinguer deux régions selon que la raie d'absorption soit plus marquée ou quasi-inexistante. Pour une concentration d'électron $n_e \leq 10^{13} \text{cm}^{-2}$, la raie de l'exciton chargé négativement est presque inexistante alors qu'elle est très marquée pour $n_e \geq 10^{14} \text{cm}^{-2}$. Quant à la variation de la température, nous pouvons remarquer que plus la température augmente plus la raie d'absorption s'affaiblit. Nous pouvons constater la même chose concernant l'exciton chargé positivement.

En présence d'un champ magnétique faible, les trions présentent des phénomènes magnéto-optiques originaux. En effet, en raison du mouvement de leur centre de masse, qui se comporte comme une quasi-particule chargée, leurs niveaux d'énergie se décomposent en niveaux de Landau. Par conséquent, nous nous attendons à ce que les spectres des trions présentent des magnéto-absorptions oscillatoires dues aux transitions entre les niveaux de Landau de l'électron et de trou quasi-libre et ceux correspondant au mouvement du centre de masse du trion dans le plan perpendiculaire à la direction du champ. Nous nous proposons d'étudier le comportement du coefficient d'absorption monophotonique de l'exciton chargé négativement, en tenant compte de la présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches. En effet, comme dans le cas 2D [Ainane (1991)], nous avons une quantification totale (due au champ magnétique et au confinement quantique) des états propres correspondant aux états initiaux et finaux. Dans ces conditions, le coefficient d'absorption se présente sous la forme d'une série de pics de Dirac séparés par l'énergie de résonance cyclotronique $\hbar\omega$ associée au centre de masse du trion. le cas de l'exciton chargé positivement est similaire à celui de l'exciton chargé négativement, en échangeant les électrons par les trous ainsi que leurs masses respectives.

Au paragraphe 5.2, nous déterminons les éléments de matrice de transition dipolaire électrique à champ nul, en tenant compte de l'effet de la température et de la densité des électrons en utilisant une statistique de Fermi-Dirac ; ensuite, nous étab-

lissons la probabilité de transition monophotonique dans le but d'obtenir le coefficient d'absorption du trion négatif.

Au paragraphe 5.3, nous présentons la méthode de calcul du coefficient d'absorption en présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches. Nous verrons également comment les effets relatifs au champ magnétique ainsi que ceux dus au confinement quantique peuvent modifier les raies d'absorption.

Au paragraphe 5.4, nous discutons les résultats obtenus.

5.2 Absorption du trion négatif en l'absence de champ magnétique

5.2.1 Probabilité de transition

Nous présentons la théorie de l'exciton chargé négativement, le cas de l'exciton chargé positivement est traité de façon analogue, en interchangeant les électrons (e) par les trous (h) et la masse effective isotrope m_e^* par m_h^* . La probabilité de transition par unité de temps entre un état initial $|i\rangle$ à un électron et un état final $|f\rangle$ d'exciton chargé négativement dans un puits quantique de semi-conducteur, pour l'absorption d'un photon d'énergie $\hbar\omega$ s'écrit :

$$w_{abs}^{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,f} F_i(1 - F_f) |H_{abs}^{if}|^2 \delta \{ \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i - \hbar\omega \}, \quad (5.1)$$

où \mathcal{E}_i et \mathcal{E}_f représentent les énergies des états initiaux et finaux du système électronique, respectivement, F_i (F_f) est la probabilité pour qu'un électron (trion) occupe à l'équilibre thermodynamique un état d'énergie E_i (E_f)

$$F_j = \frac{1}{1 + \exp(\frac{E_j - \mu_c}{K_B T})}, j = i, f, \quad (5.2)$$

où $\mu_c = K_B T \ln [\exp (E_F / K_B T) - 1]$ est le potentiel chimique qui à température nulle se réduit à l'énergie de Fermi, K_B est la constante de Boltzmann. Le terme $(1 - F_f)$ représente la probabilité des états finaux non occupés ; comme dans notre cas l'état final est vide ce terme se réduit alors à l'unité. De ce fait, nous nous restreignons à la probabilité d'occupation de l'état initial F_i . Cet état est caractérisé par la présence d'un électron dans un puits quantique et est défini par

$$|\Phi_i\rangle = |\Phi_e\rangle = a_k^+ |\Phi_0\rangle. \quad (5.3)$$

L'état final correspond au trion négatif dans un puits quantique

$$|\Phi_f\rangle = |\Phi_{X-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k_1 k_2 k_3} C_{k_1 k_2 k_3} a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ d_{k_3}^+ |\Phi_0\rangle, \quad (5.4)$$

où $|\Phi_0\rangle$ représente l'état de la bande de valence pleine à température nulle. $C_{k_1 k_2 k_3}$ est la transformée de Fourier de la fonction d'onde enveloppe du trion. Les éléments de matrice de transition dipolaire électrique s'écrivent alors sous la forme

$$H_{abs}^{if} = \frac{2}{mn} \sqrt{\frac{\pi \hbar N}{\omega_{qv} \Omega}} \mathbf{D}_{eh}^* \sum_{k'} C_{k' k k'}^* \quad (5.5)$$

avec \mathbf{D}_{eh}^* est le moment dipolaire

$$\mathbf{D}_{eh}^* = \int dz f_e(z) f_h(z) \mathbf{D} \sum_k a_k^+ d_k^+ \quad (5.6)$$

où f_i ($i = e, h$) sont les fonctions de l'état fondamental d'électron et de trou dans un puits quantique fini. \mathbf{D} représente l'élément de matrice de transition bande à bande de l'opérateur quantité de mouvement de l'électron

$$\mathbf{D} = \int_{\Omega} d^3 \mathbf{r} \mathbf{c}^*(\mathbf{r}) \mathbf{e} \mathbf{p} \mathbf{v}(\mathbf{r}) \quad (5.7)$$

\mathbf{c} et \mathbf{v} sont les parties périodiques de Bloch de l'électron et du trou à $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. a_k^+ et d_k^+ sont les opérateurs de création des électrons et des trous. Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, les coefficients C_i peuvent être obtenus à partir de la fonction d'onde enveloppe du trion donnée par :

$$\begin{aligned} \Psi_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) &= \frac{1}{S^{\frac{3}{2}}} \sum_{k_1 k_2 k_3} C_{k_1 k_2 k_3} \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \boldsymbol{\rho}_1) \exp(i\mathbf{k}_2 \cdot \boldsymbol{\rho}_2) \\ &\times \exp(-i\mathbf{k}_3 \cdot \boldsymbol{\rho}_3) f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3). \end{aligned} \quad (5.8)$$

En effectuant une transformée de Fourier de Ψ_{X^-} , nous obtenons alors

$$\begin{aligned} C_{k_1 k_2 k_3} &= \frac{1}{S^{\frac{3}{2}}} \int_{\Omega} d^2 \boldsymbol{\rho}_1 d^2 \boldsymbol{\rho}_2 d^2 \boldsymbol{\rho}_3 dz_1 dz_2 dz_3 \Psi_{X^-}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \exp(-i\mathbf{k}_1 \cdot \boldsymbol{\rho}_1) \\ &\times \exp(-i\mathbf{k}_2 \cdot \boldsymbol{\rho}_2) \exp(i\mathbf{k}_3 \cdot \boldsymbol{\rho}_3) f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3). \end{aligned} \quad (5.9)$$

Dans ces conditions, nous aboutissons à

$$\begin{aligned} \sum_{k'} C_{k' k k'}^* &= \frac{1}{S^{\frac{3}{2}}} \int d^2 \boldsymbol{\rho}_1 d^2 \boldsymbol{\rho}_2 d^2 \boldsymbol{\rho}_3 dz_1 dz_2 dz_3 \Psi_{X^-}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \exp(-i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\rho}_1) \\ &\times \exp(-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}_2) \exp(i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\rho}_3) f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3). \end{aligned} \quad (5.10)$$

En utilisant les relations d'orthogonalité des fonctions $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ nous avons

$$\frac{1}{S} \sum_{k'} \exp[i\mathbf{k}' \cdot (\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_3)] = \delta(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_3), \quad (5.11)$$

dans ces conditions, l'expression (5.10) devient

$$\begin{aligned}
\sum_{k'} C_{k'kk'}^* &= \frac{1}{S^{\frac{1}{2}}} \int d^2 \rho_1 d^2 \rho_2 d^2 \rho_3 dz_1 dz_2 dz_3 \Psi_{X^-}^* (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \\
&\quad \times \exp(-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}_2) f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3) \delta(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_3) \\
&= \frac{1}{S^{\frac{1}{2}}} \int d^2 \rho_1 d^2 \rho_3 \Psi_{X^-}^* (\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2, \boldsymbol{\rho}_1, z_1, z_2, z_3) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}_2) \\
&\quad \times f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3).
\end{aligned} \tag{5.12}$$

Dans le cas d'un trion dans un puits quantique, seul le mouvement du centre de masse dans le plan peut être séparé du mouvement relatif. Par suite, la fonction d'onde enveloppe peut être écrite comme étant le produit du mouvement du centre de masse, libre dans le plan, et du mouvement relatif

$$\Psi_{X^-}^* (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(-i\mathbf{K}_{0,p} \cdot \mathbf{R}_0) \psi^* (z_1, z_2, z_3, \mathbf{r}, \mathbf{R}), \tag{5.13}$$

où $\mathbf{K}_{0,p}$ désigne le vecteur d'onde du centre de masse dans le plan et où les coordonnées relatives et du centre de masse dans le plan $(\mathbf{r}, \mathbf{R}, \mathbf{R}_0)$ sont données par

$$\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_2, \quad \mathbf{R} = \frac{\boldsymbol{\rho}_1 + \boldsymbol{\rho}_2}{2} - \boldsymbol{\rho}_h, \quad \mathbf{R}_0 = \frac{m_e^* \boldsymbol{\rho}_1 + m_e^* \boldsymbol{\rho}_2 + m_h^* \boldsymbol{\rho}_h}{2m_e^* + m_h^*}. \tag{5.14}$$

L'expression (5.12) devient alors

$$\begin{aligned}
\sum_{k'} C_{k'kk'}^* &= \frac{1}{S} \int d^2 \mathbf{R}_0 d^2 \mathbf{r} dz_1 dz_2 dz_3 \exp[i(\mathbf{k} - \mathbf{K}_{0,p}) \cdot \mathbf{R}_0] \exp(i\boldsymbol{\mu} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \\
&\quad \times \psi \left(z_1, z_2, z_3, \mathbf{r}, \frac{\mathbf{r}}{2} \right) f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3) \\
&= \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{K}_0} \int d^2 \mathbf{r} dz_1 dz_2 dz_3 \exp(i\boldsymbol{\mu} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \psi \left(z_1, z_2, z_3, \mathbf{r}, \frac{\mathbf{r}}{2} \right) \\
&\quad \times f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3),
\end{aligned} \tag{5.15}$$

où $\boldsymbol{\mu} = \frac{1 + \sigma}{1 + 2\sigma}$, et σ est le rapport des masses effectives de l'électron et du trou. Nous remarquons que les éléments de matrice de transition s'annulent lorsque le vecteur d'onde de l'électron (état initial) est différent de celui du mouvement du centre de masse du trion (état final), ce qui traduit les lois de conservation des quantités de mouvements. Les éléments de matrice de transition s'écrivent alors pour $\mathbf{k} = \mathbf{K}_{0,p}$ sous la forme

$$|H_{abs}^{if}|^2 = \frac{4\pi\hbar N}{m^2 n^2 \Omega \omega_{qv}} \left| \int dz f_e(z) f_h(z) \right|^2 |\boldsymbol{\varepsilon}_{qv} \cdot \mathbf{D}|^2 I_{X^-}(\mathbf{K}_{0,p}), \tag{5.16}$$

où

$$I_{X^-}(\mathbf{K}_{0,p}) = \left| \sum_{k'} C_{k'kk'}^* \right|^2. \tag{5.17}$$

Afin d'obtenir une expression explicite de l'intégrale $I_{X^-}(\mathbf{K}_{0,p})$ donnée par

$$I_{X^-}(\mathbf{K}_{0,p}) = \left| \int d^2\mathbf{r} dz_1 dz_2 dz_3 \exp(i\mu\mathbf{K}_{0,p} \cdot \mathbf{r}) \psi\left(z_1, z_2, z_3, \mathbf{r}, \frac{\mathbf{r}}{2}\right) f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3) \right|^2, \quad (5.18)$$

nous allons utiliser la fonction d'essai définie au chapitre 3 par

$$\begin{aligned} \psi\left(z_1, z_2, z_3, \mathbf{r}, \frac{\mathbf{r}}{2}\right) &= \mathcal{N}_{X^-} \sum_{lmnpqr} c_{lmnpqr} e^{-k\frac{r}{2}} r^{l+m+n} f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3) \quad (5.19) \\ &\times [a_p(z_1) a_q(z_2) + a_q(z_1) a_p(z_2)] b_r(z_3), \end{aligned}$$

où \mathcal{N}_{X^-} est une constante de normation donnée par

$$\mathcal{N}_{X^-} = \left\{ \sum_{lmnpqr} \sum_{l'm'n'p'q'r'} c_{lmnpqr} c_{l'm'n'p'q'r'} \langle l'm'n'p'q'r' | lmnpqr \rangle \right\}^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.20)$$

d'où, l'intégrale $I_{X^-}(\mathbf{K}_{0,p})$ s'écrit alors

$$\begin{aligned} I_{X^-}^{\frac{1}{2}}(\mathbf{K}_{0,p}) &= \mathcal{N}_{X^-} \mathcal{N}_e^2 \mathcal{N}_h \sum_{lmnpqr} c_{lmnpqr} \int d^2\mathbf{r} \exp(i\mu\mathbf{K}_{0,p} \cdot \mathbf{r}) e^{-k\frac{r}{2}} r^{l+m+n} \\ &\times \int dz_1 dz_2 dz_3 f_e^2(z_1) f_e^2(z_2) f_h^2(z_3) \\ &\times [a_p(z_1) a_q(z_2) + a_q(z_1) a_p(z_2)] b_r(z_3). \quad (5.21) \end{aligned}$$

En utilisant les coordonnées polaires (\mathbf{r}, θ) , le produit scalaire $\mathbf{K}_{0,p} \cdot \mathbf{r}$ sera exprimé en fonction de l'angle θ que fait le vecteur d'onde $\mathbf{K}_{0,p}$ avec \mathbf{r} , comme

$$\mathbf{K}_{0,p} \cdot \mathbf{r} = K_{0,p} r \cos(\theta). \quad (5.22)$$

L'intégrale $I_{X^-}(\mathbf{K}_{0,p})$ devient alors

$$\begin{aligned} I_{X^-}^{\frac{1}{2}}(\mathbf{K}_{0,p}) &= \mathcal{N}_{X^-} \mathcal{N}_e^2 \mathcal{N}_h \sum_{lmnpqr} c_{lmnpqr} \int_0^{+\infty} \int_0^{2\pi} r dr d\theta \exp[i\mu K_{0,p} r \cos(\theta)] e^{-k\frac{r}{2}} r^{l+m+n} \\ &\times \int dz_1 dz_2 dz_3 f_e^2(z_1) f_e^2(z_2) f_h^2(z_3) \\ &\times [a_p(z_1) a_q(z_2) + a_q(z_1) a_p(z_2)] b_r(z_3). \quad (5.23) \end{aligned}$$

Si nous posons

$$I_1 = \int_0^{2\pi} d\theta \exp[i\mu K_{0,p} r \cos(\theta)], \quad \text{avec } 0 \leq \theta \leq 2\pi, \quad (5.24)$$

et en utilisant le changement de variable suivant

$$\begin{aligned} \omega &= \theta - \pi \\ x &= -\cos(\theta), \end{aligned}$$

l'expression de I_1 devient alors

$$\begin{aligned} I_1 &= 2 \int_{-1}^{+1} dx \frac{\exp(i\mu K_{0,p} r x)}{\sqrt{1-x^2}} \\ &= 2\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) J_0(\mu K_{0,p} r), \end{aligned} \quad (5.25)$$

où $J_0(\mu K_{0,p} r)$ est la fonction de Bessel d'ordre 0, $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$. J_0 peut être développée en série sous la forme

$$J_0(\mu K_{0,p} r) = \sum_{i=0}^{+\infty} \frac{(-1)^i (\mu K_{0,p} r)^{2i}}{2^{2i} (i!)^2} \quad i = 0, 1, 2, \dots \quad (5.26)$$

Par conséquent, $I_{X^-}(\mathbf{K}_{0,p})$ s'écrit

$$\begin{aligned} I_{X^-}^{\frac{1}{2}}(\mathbf{K}_{0,p}) &= 2\pi \mathcal{N}_X - \mathcal{N}_e^2 \mathcal{N}_h \sum_{lmnpqr} c_{lmnpqr} \int_0^{+\infty} dr J_0(\mu K_{0,p} r) e^{-k \frac{r}{2} r^{l+m+n+1}} \\ &\quad \times \int dz_1 dz_2 dz_3 f_e^2(z_1) f_e^2(z_2) f_h^2(z_1) \\ &\quad \times [a_p(z_1) a_q(z_2) + a_q(z_1) a_p(z_2)] b_r(z_3). \end{aligned} \quad (5.27)$$

En posant

$$Y_{lmn}(K_{0,p}) = \int_0^{+\infty} dr J_0(\mu K_{0,p} r) e^{-k \frac{r}{2} r^{l+m+n+1}}, \quad (5.28)$$

et en effectuant le changement de variable suivant

$$r' = k \frac{r}{2} \quad (5.29)$$

nous obtenons alors

$$Y_{lmn}(K_{0,p}) = \left(\frac{2}{k}\right)^{l+m+n+2} \int_0^{+\infty} dr' J_0\left(\mu K_{0,p} \frac{2r'}{k}\right) e^{-r' r'^{l+m+n+1}}, \quad (5.30)$$

qu'on peut encore écrire sous la forme

$$Y_{lmn}(K_{0,p}) = \left(\frac{2}{k}\right)^{l+m+n+2} \int_0^{+\infty} dr J_0\left(\mu K_{0,p} \frac{2r}{k}\right) e^{-r r^{l+m+n+1}}. \quad (5.31)$$

Finalement, $I_{X^-}(\mathbf{K}_{0,p})$ devient

$$\begin{aligned} I_{X^-}^{\frac{1}{2}}(\mathbf{K}_{0,p}) &= 8\pi \mathcal{N}_X - \mathcal{N}_e^2 \mathcal{N}_h \sum_{lmnpqr} c_{lmnpqr} Y_{lmn}(K_{0,p}) \\ &\quad \times \left\{ [1 + (-1)^{p+r} + (-1)^{q+r} + (-1)^{p+q}] W_q^e W_p^e W_r^h \right\}, \end{aligned} \quad (5.32)$$

où

$$\begin{aligned} W_\lambda^e &= \int_0^{+\infty} dz f_e^2(z) z^\lambda \exp(-\alpha_e z^2) \\ W_\lambda^h &= \int_0^{+\infty} dz f_h^2(z) z^\lambda \exp[-(\alpha_h) z^2], \end{aligned} \quad (5.33)$$

avec α_e et α_h des paramètres variationnels, $f_e(z)$ et $f_h(z)$ les fonctions de l'état fondamental de l'électron et du trou dans un puits quantique fini, \mathcal{N}_{X^-} , \mathcal{N}_e et \mathcal{N}_h des constantes de normation. La probabilité de transition par unité de temps entre un état initial $|i\rangle$ et un état final $|f\rangle$, pour l'absorption d'un photon d'énergie $\hbar\omega$ s'écrit

$$w_{abs}^{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k, K_{0,p}} \delta_{k, K_{0,p}} F_e(k, T) \left| H_{abs}^{if}(K_{0,p}) \right|^2 \delta \{ \mathcal{E}_f(K_{0,p}) - \mathcal{E}_i(k) - \hbar\omega \}, \quad (5.34)$$

où \mathcal{E}_i et \mathcal{E}_f représentent, respectivement, les énergies des états initiaux et finaux, du système électronique. Nous pouvons remplacer la sommation discrète par une sommation continue dans l'espace des \mathbf{k}

$$\sum_{K_{0,p}} \rightarrow \frac{S}{(2\pi)^2} \int d^2 K_{0,p}, \quad (5.35)$$

et nous obtenons alors pour w_{abs}^{if} l'expression suivante

$$w_{abs}^{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{S}{(2\pi)^2} \int d^2 K_{0,p} F(K_{0,p}, T) \left| H_{abs}^{if}(K_{0,p}) \right|^2 \delta [\mathcal{E}_f(K_{0,p}) - \mathcal{E}_i(k) - \hbar\omega], \quad (5.36)$$

où $\frac{(2\pi)^2}{S}$ est la surface relative à un état quantique dans l'espace réciproque. En utilisant la forme explicite de $\left| H_{abs}^{if}(K_{0,p}) \right|^2$, nous parvenons à

$$w_{abs}^{if} = \frac{2SN}{m^2 n^2 \Omega \omega_{X^-}} |\boldsymbol{\varepsilon}_{qv} \cdot \mathbf{D}|^2 \left| \int dz f_e(z) f_h(z) \right|^2 \times \int 2\pi K_{0,p} dK_{0,p} F(K_{0,p}, T) I_{X^-}(K_{0,p}) \delta [\mathcal{E}_f(K_{0,p}) - \mathcal{E}_i(k) - \hbar\omega]. \quad (5.37)$$

Les énergies des états initiaux et finaux sont données par

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_i &= \mathcal{E}_0 + \varepsilon_{c0} + E_e + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} \\ \mathcal{E}_f &= \mathcal{E}_0 + 2\varepsilon_{c0} - \varepsilon_{v0} + E^{rel} + \frac{\hbar^2 K_{0,p}^2}{2M_0}, \end{aligned} \quad (5.38)$$

où \mathcal{E}_0 est l'énergie de la bande de valence pleine, E_e et E^{rel} sont, respectivement, l'énergie de confinement de l'électron et l'énergie relative du trion négatif dans un puits quantique. La conservation des quantités de mouvement lors d'une transition optique directe impose $k = K_{0,p}$. Dans ce cas, nous avons

$$\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i - \hbar\omega = \varepsilon_g + E^{rel} - E_e - \mu \frac{\hbar^2 K_{0,p}^2}{2m_e^*} - \hbar\omega, \quad (5.39)$$

avec $\varepsilon_g = \varepsilon_{c0} - \varepsilon_{v0}$ est l'énergie de la bande interdite. Afin d'évaluer l'intégrale intervenant dans l'expression de $I_{X^-}(K_{0,p})$, nous utilisons les propriétés de la fonction δ de Dirac ;

$$\int_a^b g(x) \delta[f(x)] dx = \sum_{x_0} g(x_0) \left| \frac{dx}{df(x)} \right|_{x=x_0}, \quad (5.40)$$

où x_0 est la racine de $f(x)$ comprise entre a et b ; dans notre cas $g(x)$ et $f(x)$ sont données par

$$\begin{aligned} g(K_{0,p}) &= K_{0,p} F(K_{0,p}, T) I_{X^-}(K_{0,p}) \\ f(K_{0,p}) &= \mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i - \hbar\omega. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Par conséquent, la racine positive Q de $f(K_{0,p})$ est donnée par

$$Q = \left(\frac{2m_e^*}{\mu\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\varepsilon_g + E^{rel} - E_e - \hbar\omega \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (5.42)$$

et la quantité $\left| \frac{dK_{0,p}}{df(K_{0,p})} \right|_{K_{0,p}=Q}$ peut être exprimée par la relation suivante

$$\left| \frac{dK_{0,p}}{df(K_{0,p})} \right|_{K_{0,p}=Q} = \frac{m_e^*}{\mu\hbar^2 Q}. \quad (5.43)$$

Finalement, la probabilité de transition est donnée par

$$w_{abs}^{if} = 2\xi S_{eh}^2 I_{X^-}(Q, T), \quad (5.44)$$

avec

$$\xi = \frac{2\pi m_e^* N}{m^2 n^2 \omega_{qv} \hbar^2 \Omega} |\varepsilon_{qv} \cdot \mathbf{D}|^2, \quad (5.45)$$

et

$$S_{eh} = \int dz_e dz_h f_e(z) f_h(z) \delta(z_e - z_h). \quad (5.46)$$

Cette expression représente une intégrale de recouvrement et $I_{X^-}(Q, T)$ est donné par

$$\begin{aligned} I_{X^-}^{\frac{1}{2}}(Q, T) &= 8\pi \mathcal{N}_{X^-} \mathcal{N}_e^2 \mathcal{N}_h \frac{1}{\mu} F_e(Q, T) \sum_{lmnpqr} c_{lmnpqr} Y_{lmn}(Q) \\ &\times \left\{ [1 + (-1)^{p+r} + (-1)^{q+r} + (-1)^{p+q}] W_q^e W_p^e W_r^h \right\}. \end{aligned} \quad (5.47)$$

où

$$F_e(Q, T) = \frac{1}{\exp \left[\frac{1}{K_B T} \left(\frac{\hbar^2 Q^2}{2m_e^*} - \mu_C \right) + 1 \right]}. \quad (5.48)$$

avec Q peut se mettre sous la forme

$$\begin{aligned} Q^2 &= \frac{2m_e^*}{\mu\hbar^2} (\hbar\omega_0 - \hbar\omega) \\ &\simeq \Delta h\nu \end{aligned} \quad (5.49)$$

où la pulsation ω_0 représente le bord d'absorption pour le trion.

5.2.2 Coefficient d'absorption

Le coefficient d'absorption est défini comme étant le rapport de l'énergie perdue par l'onde incidente par unité de volume, de temps et d'énergie. Il traduit l'affaiblissement du flux lumineux lors de son passage par un matériau.

$$\alpha = \frac{\text{énergie dissipée par unité de volume}}{\text{Densité d'énergie} \times \text{vitesse de propagation}}, \quad (5.50)$$

qu'on peut encore écrire sous la forme

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{W_{abs}^{if} \hbar\omega}{N} \frac{1}{\hbar\omega c/n} \\ &= \frac{nW_{abs}^{if}}{cN} \end{aligned} \quad (5.51)$$

où n représente l'indice du milieu absorbant, c la vitesse de la lumière dans le vide et N le nombre de photons incidents. L'expression de W_{abs}^{if} est donnée par

$$W_{abs}^{if} = \int w_{abs}^{if}(\Delta h\nu) d\Delta h\nu. \quad (5.52)$$

En reportant l'expression de W_{abs}^{if} dans celle du coefficient d'absorption, nous obtenons

$$\alpha = \frac{4\pi m_e^*}{nm^2 c \omega_{qv} \hbar^2} \frac{S}{\Omega} S_{eh}^2 |\boldsymbol{\varepsilon}_{qv} \cdot \mathbf{D}|^2 J_{X^-}, \quad (5.53)$$

où

$$J_{X^-} = \int I_{X^-}(\Delta h\nu) d\Delta h\nu, \quad (5.54)$$

5.3 Propriétés magnéto-optiques du trion négatif

5.3.1 Calcul des coefficients C_{λ_i}

Dans le cas d'un trion négatif dans un puits quantique en présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches, les énergies des états initiaux et finaux, pour des bandes de conduction et de valence supposées paraboliques, s'écrivent

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_i &= \mathcal{E}_0 + \varepsilon_{c0} + E_e + \hbar\omega_e \left(N' + \frac{1}{2} \right) \\ \mathcal{E}_f &= \mathcal{E}_0 + 2\varepsilon_{c0} - \varepsilon_{v0} + E + \hbar\omega_{CM} \left(N + \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (5.55)$$

où

$$\begin{aligned}\omega_e &= \frac{eB}{m_e^*c} \\ \omega_{CM} &= \frac{eB}{M_0c},\end{aligned}\quad (5.56)$$

avec M_0 est la masse de l'exciton chargé, N et N' sont des entiers positifs ou nuls, \mathcal{E}_0 est l'énergie de la bande de valence pleine, ω_e et ω_{CM} sont les pulsations cyclotroniques de l'électron et du trion négatif. Les fonctions d'onde correspondant aux états initiaux et finaux s'écrivent

$$\begin{aligned}\Psi_e(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{S}} f_{e\lambda}(\boldsymbol{\rho}) f_e(z) \\ \Psi_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) &= \frac{1}{S^{\frac{3}{2}}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} f_{e\lambda_1}(\boldsymbol{\rho}_1) f_{e\lambda_2}(\boldsymbol{\rho}_2) f_{h\lambda_3}(\boldsymbol{\rho}_3) \\ &\quad \times f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3).\end{aligned}\quad (5.57)$$

Nous nous proposons par la suite d'établir l'expression de I_{X^-} donnée par

$$I_{X^-} = \left| \sum_{\lambda'} C_{\lambda' \lambda \lambda'}^* \right|^2. \quad (5.58)$$

A cet effet, nous effectuons une transformée de Fourier des fonctions Ψ_e et Ψ_{X^-} pour déterminer les coefficients C_{λ_i} et dans ce cas, nous avons

$$\begin{aligned}C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} &= \frac{1}{S^{\frac{3}{2}}} \int_{\Omega} d^2 \boldsymbol{\rho}_1 d^2 \boldsymbol{\rho}_2 d^2 \boldsymbol{\rho}_3 dz_1 dz_2 dz_3 f_{e\lambda_1}^*(\boldsymbol{\rho}_1) f_{e\lambda_2}^*(\boldsymbol{\rho}_2) f_{h\lambda_3}^*(\boldsymbol{\rho}_3) \\ &\quad \times f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3) \Psi_{X^-}(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2, \boldsymbol{\rho}_3, z_1, z_2, z_3),\end{aligned}\quad (5.59)$$

d'où

$$\begin{aligned}\sum_{\lambda'} C_{\lambda' \lambda \lambda'}^* &= \frac{1}{S^{\frac{3}{2}}} \int_{\Omega} d^2 \boldsymbol{\rho}_1 d^2 \boldsymbol{\rho}_2 d^2 \boldsymbol{\rho}_3 dz_1 dz_2 dz_3 \Psi_{X^-}^*(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2, \boldsymbol{\rho}_3, z_1, z_2, z_3) \\ &\quad \times f_{e\lambda}(\boldsymbol{\rho}_2) f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3) \frac{1}{S} \sum_{\lambda'} f_{e\lambda'}(\boldsymbol{\rho}_1) f_{h\lambda'}(\boldsymbol{\rho}_3).\end{aligned}\quad (5.60)$$

Or, comme les fonctions $f_{\lambda}(\boldsymbol{\rho})$ sont orthogonales, elles vérifient l'égalité

$$\frac{1}{S} \sum_{\lambda'} f_{e\lambda'}(\boldsymbol{\rho}_1) f_{h\lambda'}(\boldsymbol{\rho}_3) = \delta(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_3), \quad (5.61)$$

et par conséquent l'expression (5.60) devient

$$\begin{aligned}\sum_{\lambda'} C_{\lambda' \lambda \lambda'}^* &= \frac{1}{\sqrt{S}} \int_{\Omega} d^2 \boldsymbol{\rho}_1 d^2 \boldsymbol{\rho}_2 d^2 \boldsymbol{\rho}_3 dz_1 dz_2 dz_3 \Psi_{X^-}^*(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2, \boldsymbol{\rho}_3, z_1, z_2, z_3) \\ &\quad \times f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3) \delta(\boldsymbol{\rho}_1 - \boldsymbol{\rho}_3) \\ &= \frac{1}{\sqrt{S}} \int_{\Omega} d^2 \boldsymbol{\rho}_1 d^2 \boldsymbol{\rho}_2 dz_1 dz_2 dz_3 \Psi_{X^-}^*(\boldsymbol{\rho}_1, \boldsymbol{\rho}_2, \boldsymbol{\rho}_1, z_1, z_2, z_3) \\ &\quad \times f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3).\end{aligned}\quad (5.62)$$

Dans ce qui suit, nous utilisons les coordonnées du centre de masse et relatives dans le plan données par

$$\mathbf{r} = \rho_1 - \rho_2, \quad \mathbf{R} = \frac{\rho_1 + \rho_2}{2} - \rho_h, \quad \mathbf{R}_0 = \frac{m_e^* \rho_1 + m_e^* \rho_2 + m_h^* \rho_h}{2m_e^* + m_h^*}, \quad (5.63)$$

or, comme $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_3$, nous pouvons alors écrire

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}}{2}, \quad \rho_1 = \mathbf{R}_0 - \frac{\sigma}{2\sigma + 1} \mathbf{r}, \quad \rho_2 = \mathbf{R}_0 + \frac{\sigma + 1}{2\sigma + 1} \mathbf{r}, \quad (5.64)$$

et suite

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda'} C_{\lambda' \lambda \lambda'}^* &= \mathcal{N}_e^2 \mathcal{N}_h \mathcal{N}_{X^-} \frac{1}{\sqrt{S}} \int_{\Omega} d^2 \mathbf{R}_0 d^2 \mathbf{r} dz_1 dz_2 dz_3 \exp(-i\mu k_x x) \exp(i k_x X_0) \\ &\times \exp\left[-i \frac{eB}{2\hbar c} (\mu x + X_0) (\mu y + Y_0)\right] \exp\left[-\frac{eB}{2\hbar c} (\mu y + Y_0 - y_0)^2\right] \\ &\times H_N \left[\sqrt{\frac{eB}{\hbar c}} (\mu y + Y_0 - y_0)\right] U \psi_{X^-} \left(\mathbf{r}, \frac{\mathbf{r}}{2}, Y_0, z_1, z_2, z_3\right) \\ &\times f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3), \end{aligned} \quad (5.65)$$

avec

$$y_0 = \frac{c\hbar}{eB} k_x, \quad (5.66)$$

et U est une transformation unitaire donnée par

$$U = \frac{1}{\sqrt{L_X}} \exp(i K_x X_0) \exp\left[i \frac{eB}{2\hbar c} (-y X_0 + x Y_0) - \frac{eB}{2\hbar c} X_0 Y_0\right]. \quad (5.67)$$

Finalement, l'expression (5.65) devient

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda'} C_{\lambda' \lambda \lambda'}^* &= \mathcal{N}_e^2 \mathcal{N}_h \mathcal{N}_{X^-} \frac{1}{\sqrt{L_X}} \frac{1}{\sqrt{S}} \int_{\Omega} d^2 \mathbf{R}_0 d^2 \mathbf{r} dz_1 dz_2 \exp[i(k_x - K_x) X_0] \\ &\times \psi_{X^-}^* \left(\mathbf{r}, \frac{\mathbf{r}}{2}, Y_0, z_1, z_2, z_1\right) \exp(-i\mu k_x x) \exp\left[-i \frac{eB}{\hbar c} \mu \left(x Y_0 + \frac{1}{2} \mu x y\right)\right] \\ &\times \exp\left[-\frac{eB}{2\hbar c} (\mu y + Y_0 - y_0)^2\right] H_N \left[\sqrt{\frac{eB}{\hbar c}} (\mu y + Y_0 - y_0)\right] \\ &\times f_e(z_1) f_e(z_2) f_h(z_3). \end{aligned} \quad (5.68)$$

Nous avons vu au chapitre 3 que la fonction ψ_{X^-} s'écrit sous forme d'un produit de deux fonctions décrivant, respectivement, le mouvement relatif et celui du centre de masse, et ceci pour des champs suffisamment faibles. Or, le mouvement de ce dernier est beaucoup plus lent que celui du mouvement relatif "approximation adiabatique". Dans ces conditions, nous pouvons nous limiter au premier terme du développement

en série de la deuxième et troisième exponentielle intervenant dans l'expression précédente, et nous pouvons écrire

$$H_N \left[\sqrt{\frac{eB}{\hbar c}} (\mu y + Y_0 - y_0) \right] \simeq H_N (Y_0). \quad (5.69)$$

D'autre part,

$$\Psi_{X^-} \left(\mathbf{r}, \frac{\mathbf{r}}{2}, Y_0, z_1, z_2, z_1 \right) = \Phi_N (Y_0) \psi \left(\mathbf{r}, \frac{\mathbf{r}}{2}, z_1, z_2, z_1 \right), \quad (5.70)$$

et nous pouvons alors écrire, compte tenu de l'orthogonalité des fonctions H_N et Φ_N ,

$$\sum_{\lambda'} C_{\lambda'\lambda\lambda'}^* = \mathcal{N}_e^2 \mathcal{N}_h \mathcal{N}_{X^-} \delta_{K_x k_x} \delta_{NN'} \int_{\Omega} d^2 \mathbf{r} dz_1 dz_2 \exp(-i\mu k_x x) \psi^* \left(\mathbf{r}, \frac{\mathbf{r}}{2}, z_1, z_2, z_1 \right) f_e(z_2). \quad (5.71)$$

Il apparait donc que les transitions ne sont permises que si $K_x = k_x$ et $N = N'$.

5.3.2 Coefficient d'absorption

Dans cette partie, nous allons déterminer la probabilité de transition dans le cas d'un champ perpendiculaire, donnée par la relation

$$W_{abs}^{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,f} |H_{abs}|^2 \delta(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i - \hbar\omega). \quad (5.72)$$

Comme les mouvements oscillatoires des quasi-particules chargées (l'électron et le trion négatif) s'effectuent autour de la position $Y_0^0 = y_0 = \frac{c\hbar}{eB} K_x$, les états possibles de K_x ne peuvent prendre que des valeurs comprises dans l'intervalle $[0, L_Y]$

$$0 \leq Y_0^0 \leq L_Y \text{ ou } 0 \leq K_x \leq \frac{eB}{c\hbar} L_Y. \quad (5.73)$$

La probabilité de transition, obtenue en remplaçant la sommation discrète par une sommation continue, s'écrit alors

$$W_{abs}^{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{L_X}{2\pi} \int_0^{\frac{eB}{c\hbar} L_Y} dK_x |H_{abs}|^2 \delta(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i - \hbar\omega), \quad (5.74)$$

où

$$H_{abs} = \frac{2}{m_e n} \sqrt{\frac{\pi \hbar \tilde{N}_{qv}}{\omega_{qv}}} \int dz f_e(z) f_h(z) |\boldsymbol{\varepsilon}_{qv} \cdot \mathbf{D}| I_{X^-}(K_x, N), \quad (5.75)$$

et

$$I_{X^-}(K_x, N) = \left| \sum_{\lambda'} C_{\lambda'\lambda\lambda'}^* \right|^2, \quad (5.76)$$

qu'on peut encore écrire sous la forme

$$I_{X^-}^{\frac{1}{2}}(K_x, N) = 8\pi \mathcal{N}_{X^-} \mathcal{N}_e^2 \mathcal{N}_h \sum_{lmnpqr} c_{lmnpqr} \int d^2\mathbf{r} \exp(i\mu K_x x) e^{-\frac{k}{2}r} r^{l+m+n} \\ \times \left\{ \left[1 + (-1)^{p+r} + (-1)^{q+r} + (-1)^{p+q} \right] W_q^e W_p^e W_r^h \right\} \quad (5.77)$$

où \mathcal{N}_{X^-} , \mathcal{N}_e^2 et \mathcal{N}_h sont des constantes de normation alors que les intégrales W_j^i ($i = e, h$ et $j = p, q, r$) sont données par l'expression (5.33). La différence d'énergie $\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i - \hbar\omega$ a pour expression

$$\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i - \hbar\omega = \varepsilon_g + E - E_e - \mu\hbar\omega_e \left(N + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega. \quad (5.78)$$

Nous remarquons que cette différence d'énergie est indépendante de K_x , ce qui nous permet de faire sortir l'expression $\delta(\mathcal{E}_f - \mathcal{E}_i - \hbar\omega)$ de l'intégrale figurant dans l'expression de W_{abs}^{if} . Par conséquent, le coefficient d'absorption s'écrit

$$\alpha = \alpha_N \\ = \frac{4\pi L_x}{nm_e^2 c \omega_{qv} \Omega} \left| \int dz f_e(z) f_h(z) \right|^2 |\varepsilon_{qv} \cdot \mathbf{D}|^2 \delta \left[\varepsilon_g + E^{rel} - E_e - \mu\hbar\omega_e \left(N + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega \right] \\ \times \int_0^{\frac{eB}{\hbar} L_y} dK_x I_{X^-}(K_x, N). \quad (5.79)$$

Le coefficient d'absorption total est alors donné par

$$\alpha_{tot} = \sum_N \alpha_N. \quad (5.80)$$

5.4 Résultats et discussion

Nous avons calculé le coefficient d'absorption ainsi que l'intensité d'oscillateur I_{X^-} en présence et en absence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches dans un puits quantique de semi-conducteurs. Les courbes obtenues sont relatives à des puits quantiques de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs et de type CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe pour un trou lourd. Nous présentons sur la figure (5.1) l'intensité d'oscillateur I_{X^-} en fonction de l'écart d'énergie $\Delta h\nu = h\nu_0 - h\nu$ relatif à l'énergie $h\nu_0$ correspondant au bord d'absorption, dans le cas d'un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. Nous particularisons nos résultats à une largeur de puits $L = 20 \text{ nm}$, une concentration d'Aluminium $x = 0.35$, pour un trou lourd ($\sigma = 0.196$) pour différentes concentrations d'électrons n_e à température constante ($T = 2K$). Nous remarquons que l'intensité d'oscillateur est importante au voisinage du bord d'absorption, puis décroît vers les

basses énergies. D'autre part, nous constatons que plus la concentration d'électrons diminue plus cette intensité décroît. Sur la figure (5.2), nous représentons l'influence de la température sur l'intensité d'oscillateur à concentration d'électrons constante ($n_e = 10^{14} \text{ m}^{-2}$). Nous constatons que plus la température augmente plus l'intensité d'oscillateur s'affaiblit. Sur les figures (5.3) et (5.4), nous présentons la variation de l'intensité d'oscillateur enveloppe de l'exciton chargé positivement en fonction de l'écart d'énergie $\Delta h\nu$ dans le cas d'un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, avec une largeur de puits $L = 20 \text{ nm}$, une concentration d'Aluminium $x = 0.33$, pour un trou lourd ($\sigma = 0.196$) pour différentes concentrations de trous n_h à température constante ($T = 2K$) d'une part ainsi que pour différentes valeurs de température T à une concentration constante ($n_h = 2.10^{14} \text{ m}^{-2}$). La même discussion peut être élaborée que dans le cas des figures (5.1) et (5.2). Sur la figure (5.5), nous présentons l'intensité d'oscillateur intégrée J_{X^-} en fonction de la température pour différentes concentrations d'électrons dans le cas d'un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs pour largeur de puits $L = 20 \text{ nm}$, une concentration d'Aluminium $x = 0.35$, pour un trou lourd ($\sigma = 0.196$). Nous constatons que cette intensité décroît lorsque la température augmente alors qu'elle croît en fonction de la concentration d'électrons. Par ailleurs, nous remarquons que pour une température comprise entre $0K$ et $10K$, l'intensité d'oscillateur intégrée est une constante pour des concentrations allant de 8.10^{14} m^{-2} à 2.10^{15} m^{-2} . Ceci se justifie par le fait que le potentiel chimique est constant dans cet intervalle de température et de concentration, et même égal, dans ce cas à l'énergie de Fermi $E_F = \frac{\pi \hbar^2 n_e}{m_e^*}$. En conclusion, le comportement de l'intensité d'oscillateur intégrée J_{X^-} ainsi que de l'intensité d'oscillateur I_{X^-} est régi par le potentiel chimique qui est une fonction décroissante de la température et croissante de la concentration des porteurs de charge. Sur les figures (5.6) et (5.7), nous représentons l'intensité d'oscillateur I_{X^-} en fonction de l'écart d'énergie $\Delta h\nu = h\nu_0 - h\nu$, dans le cas d'un puits quantique de type CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe, pour une largeur de puits $L = 10 \text{ nm}$, une concentration de Zinc $x = 0.12$, pour un trou lourd ($\sigma = 0.505$). Nous étudions l'influence de la concentration d'électrons et de la température sur cette intensité. Nos résultats sont essentiellement les mêmes que ceux présentés sur les figures (5.1) et (5.2). Cependant, nous pouvons remarquer que l'intensité d'oscillateur est plus faible dans le cas d'un puits de type CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe que dans le cas d'un puits de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs. Ceci est dû au fait que la valeur du Rydberg effectif est plus grande rendant ainsi l'énergie de liaison, dans ce cas, plus élevée. Sur la figure (5.8), nous comparons le coefficient d'absorption intégré $\alpha_{X^-,int}$ de l'exciton chargé

négativement à celui de l'exciton α_X , donnés par

$$\begin{aligned}\alpha_{X^-,int} &= 2S_{eh}^2 J_{X^-} \\ \alpha_X &= S_{eh}^2 I_X\end{aligned}\tag{5.81}$$

dans le cas d'un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, pour un trou lourd ($\sigma = 0.196$), une concentration d'Aluminium $x = 0.30$, une concentration d'électrons $n_e = 2.10^{15} m^{-2}$, et pour une température $T = 0 K$. Nous constatons que, pour les deux complexes le coefficient d'absorption passe par un maximum pour une largeur de puits $L \simeq 5 nm$ pour l'exciton et $8 nm$ dans le cas du trion négatif. La figure (5.9) représente la variation du coefficient d'absorption de l'exciton chargé négativement en fonction de l'énergie $\hbar\omega$ en présence d'un champ magnétique dirigé selon l'axe z. Par suite des effets de confinement (confinement quantique et magnétique), les raies d'absorption se réduisent, comme dans le cas bidimensionnel [Ainane (1991)], à des pics de Dirac. Nous tirons la même conclusion que dans le cas de l'exciton chargé positivement.

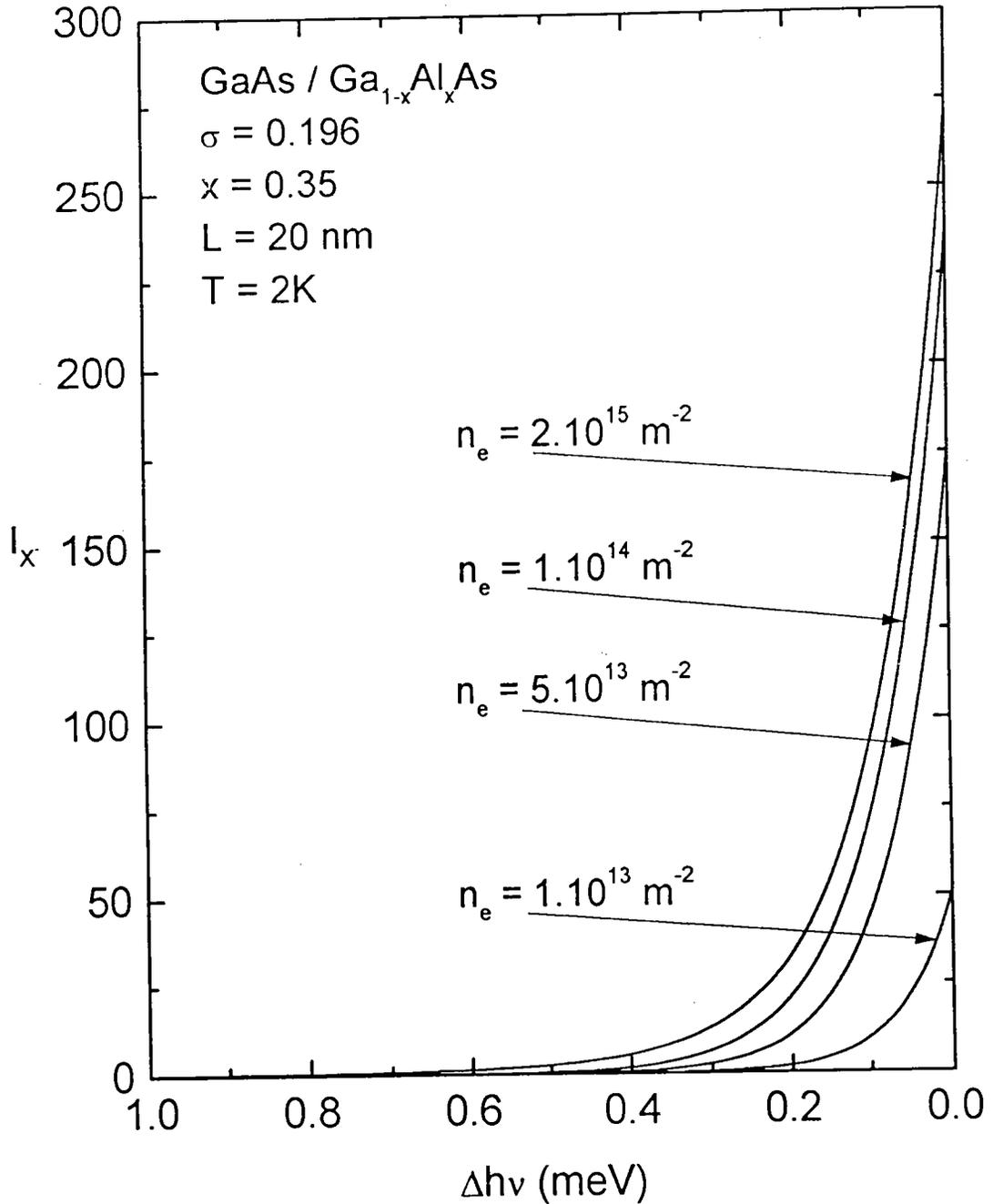


Figure (5.1) : Variation de l'intensité d'oscillateur de (X^-) en fonction de l'écart énergétique $\Delta h\nu$ relatif à l'énergie du bord d'absorption $h\nu_0$, pour différentes concentrations d'électrons n_e à $T = 2 \text{ K}$ dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs.

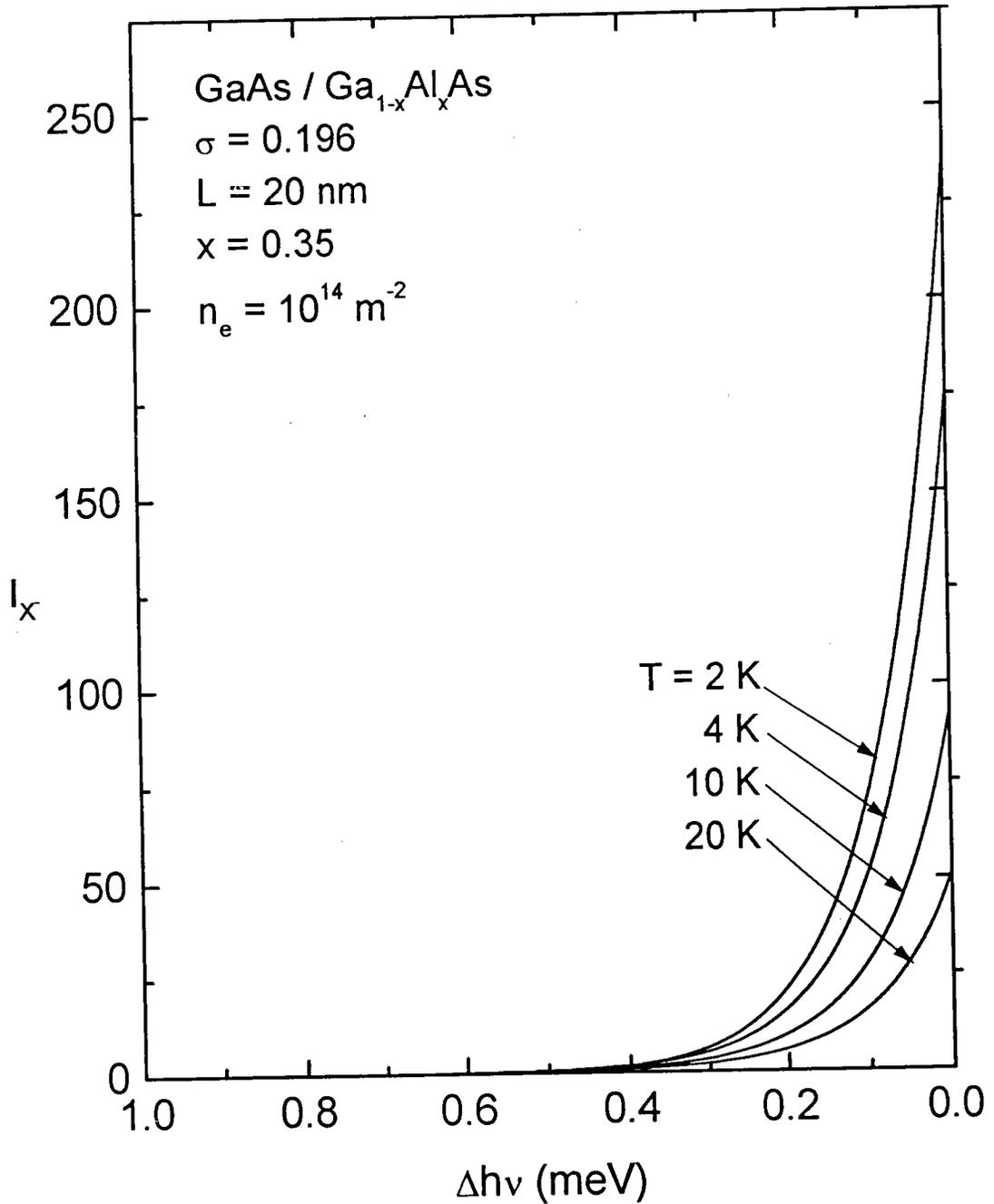


Figure (5.2) : Variation de l'intensité d'oscillateur de (X^-) en fonction de l'écart énergétique $\Delta h\nu$ relatif à l'énergie du bord d'absorption $h\nu_0$, pour différentes températures à une concentration d'électrons $n_e = 10^{14} \text{ m}^{-2}$ dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs.

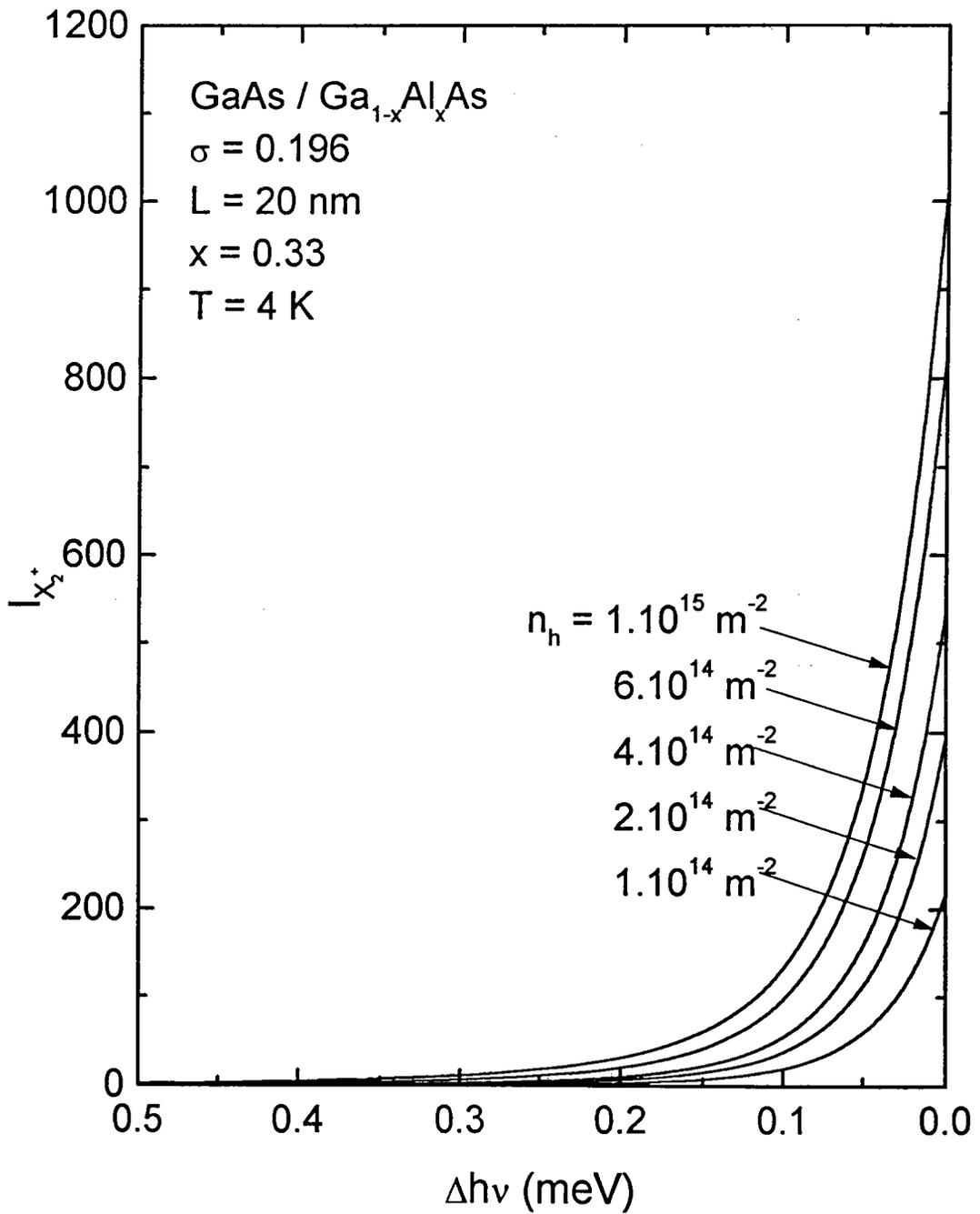


Figure (5.3) : Variation de l'intensité d'oscillateur de (X_2^+) en fonction de l'écart énergétique $\Delta h\nu$ relatif à l'énergie du bord d'absorption $h\nu_0$, pour différentes concentrations de trous n_h à $T = 4 \text{ K}$ dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs.

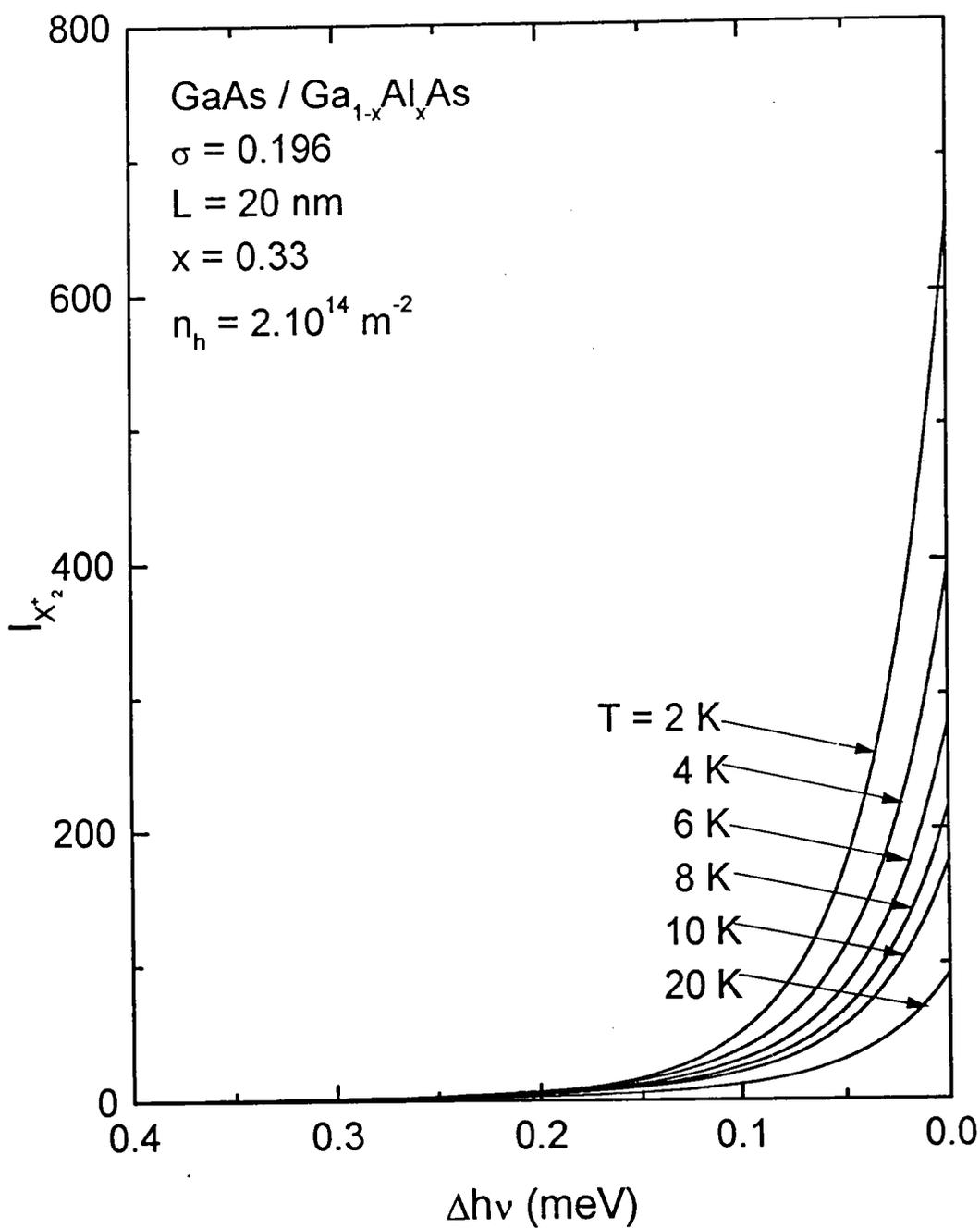


Figure (5.4) : Variation de l'intensité d'oscillateur de (X_2^+) en fonction de l'écart énergétique $\Delta h\nu$ relatif à l'énergie du bord d'absorption $h\nu_0$, pour différentes températures à une concentration de trous $n_h = 2.10^{14} \text{ m}^{-2}$ dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs.

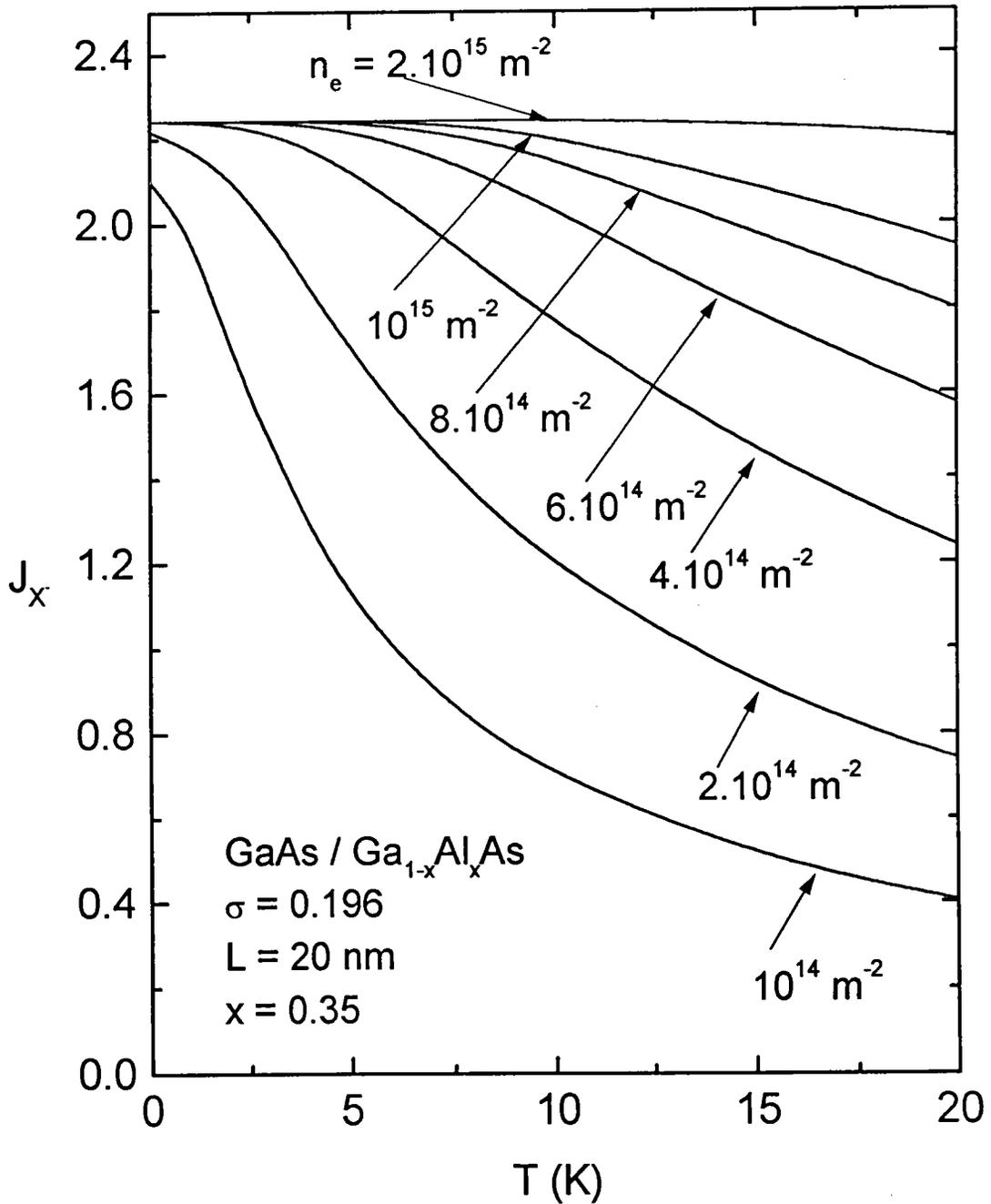


Figure (5.5) : Variation de l'intensité d'oscillateur intégrée J_X - en fonction de la température pour différentes concentrations d'électrons n_e et une largeur du puits $L = 20 \text{ nm}$ dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs.

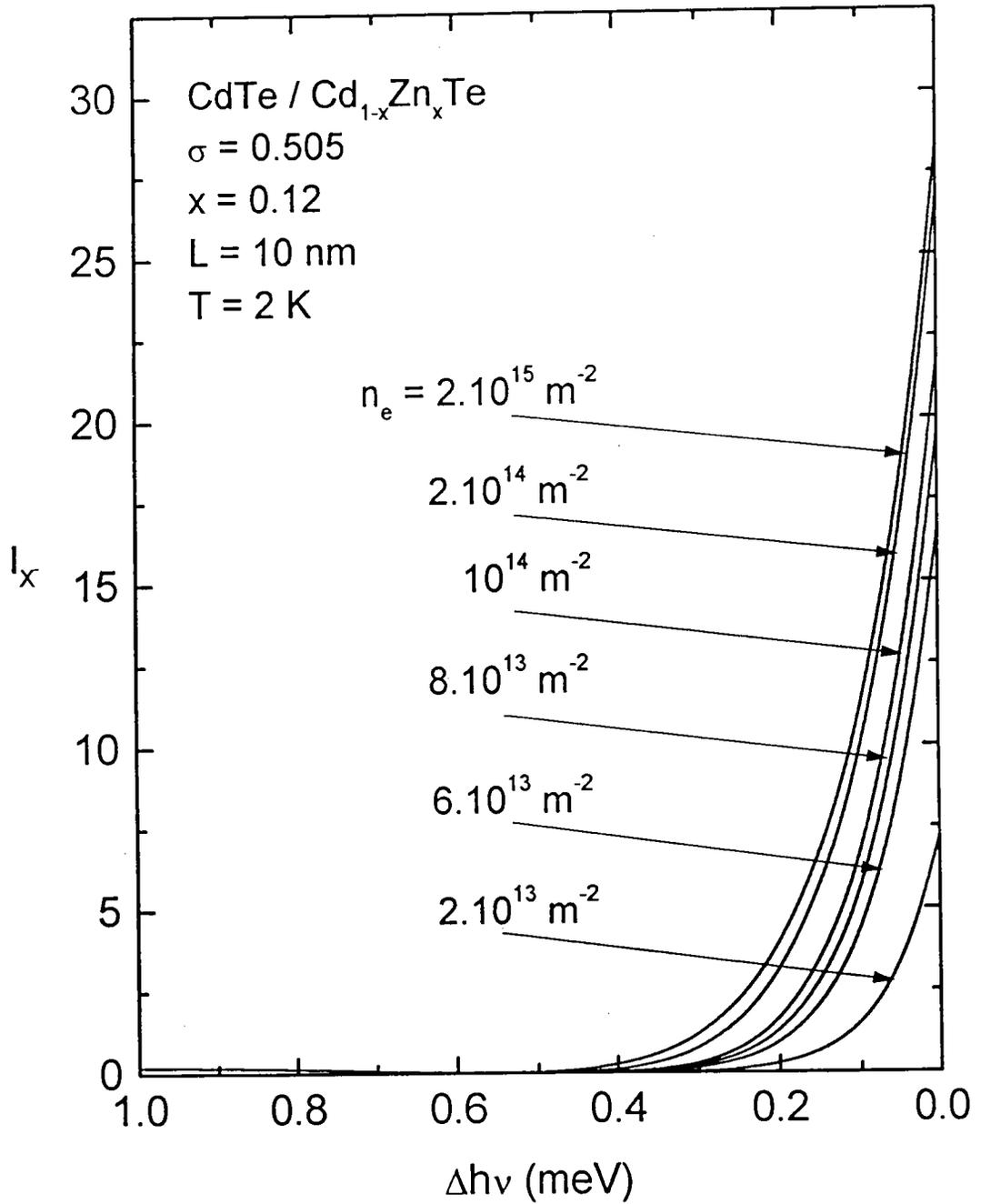


Figure (5.6) : Variation de l'intensité d'oscillateur de (X^-) en fonction de l'écart énergétique $\Delta h\nu$ relatif à l'énergie du bord d'absorption $h\nu_0$, pour différentes concentrations d'électrons n_e à $T = 2 \text{ K}$ dans un puits quantique de type CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe.

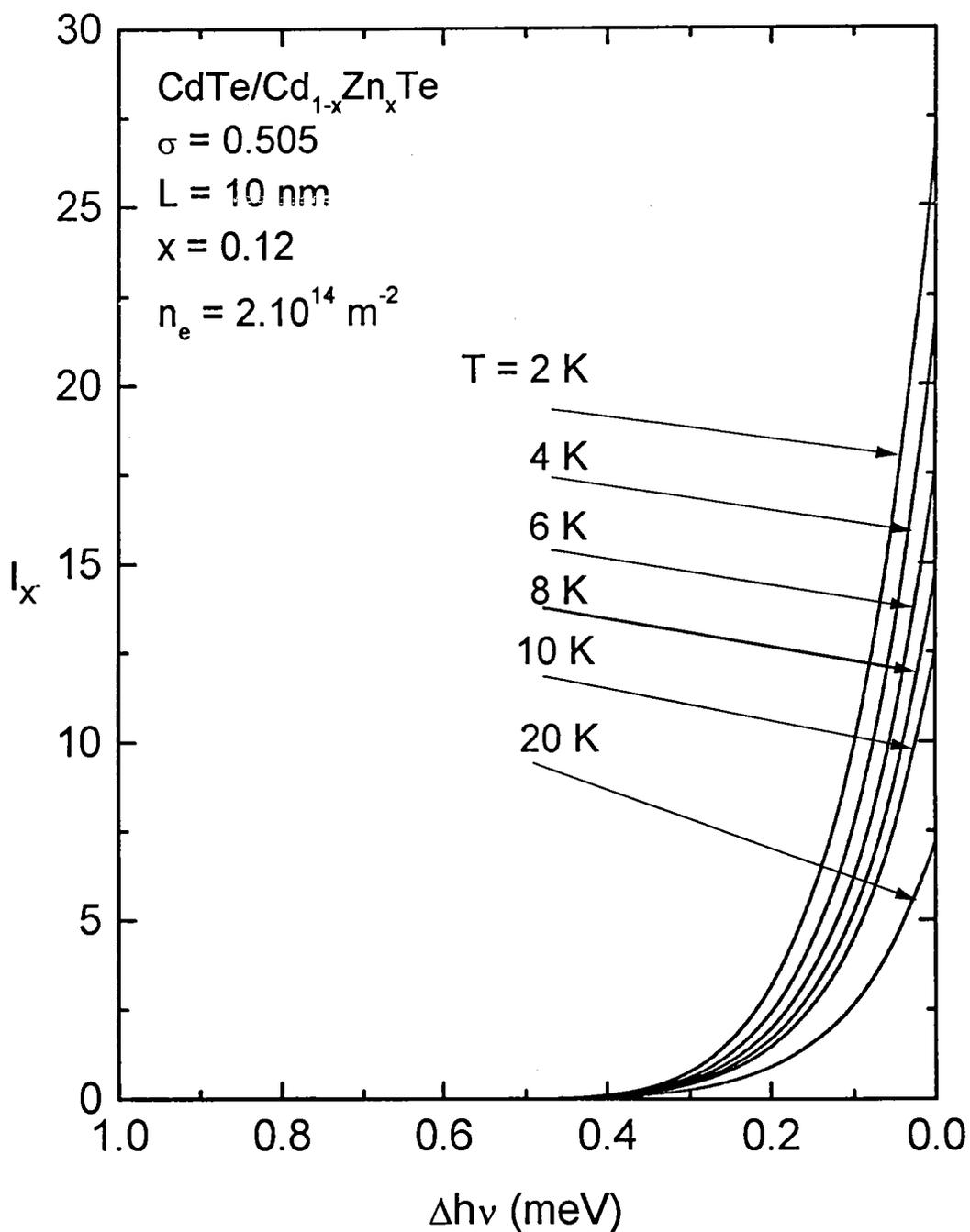


Figure (5.7) : Variation de l'intensité d'oscillateur de (X^-) en fonction de l'écart énergétique $\Delta h\nu$ relatif à l'énergie du bord d'absorption $h\nu_0$, pour différentes températures à une concentration d'électrons $n_e = 2.10^{14} \text{ m}^{-2}$ dans un puits quantique de type CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe.

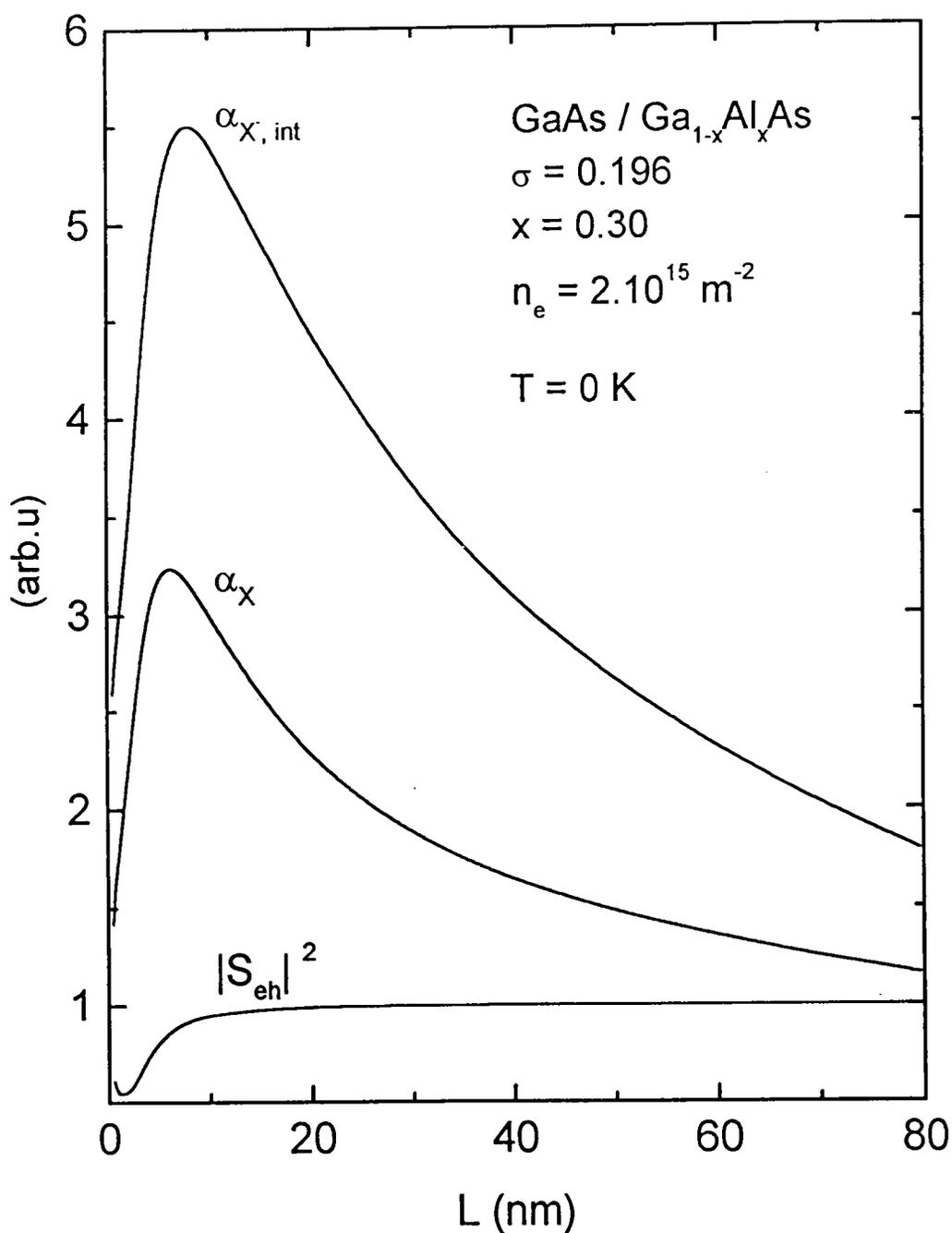


Figure (5.8) : Comparaison des coefficients d'absorption de (X) et de (X^-) en fonction de la largeur du puits pour une concentration d'électrons $n_e = 2.10^{15} \text{ m}^{-2}$ à $T = 0 \text{ K}$, dans un puits quantique de type GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs

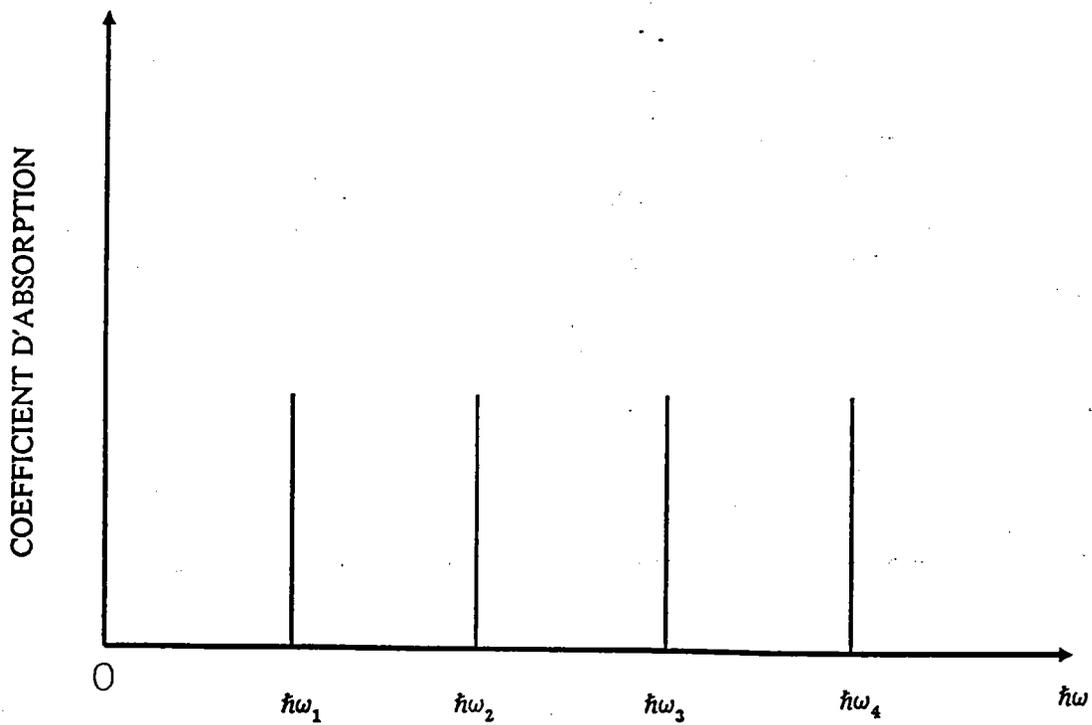


Figure (5.9) : Magnéto-absorption oscillatoire de (X^-) sous l'action d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches dans un puits quantique.

5.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié l'intensité d'oscillateur ainsi que le coefficient d'absorption du trion négatif en l'absence et en présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches dans un puits quantique de semi-conducteur. En l'absence de champ, cette intensité d'oscillateur est importante au bord d'absorption et décroît vers les basses énergies. D'autre part, nous avons étudié l'influence de la température ainsi que de la concentration des porteurs de charge en utilisant le comportement fermionique des électrons et des excitons chargés. Nous avons remarqué que l'intensité d'oscillateur est importante au bord d'absorption quelque soit la température et la concentration des électrons. Par ailleurs, cette intensité diminue d'autant plus que la concentration des porteurs augmentent et que la température diminue. Ceci se justifie par le fait que le potentiel chimique μ_C devient plus important quand la concentration des porteurs augmente et que la température diminue. Nous avons constaté aussi que le coefficient d'absorption du trion négatif passe par un maximum aux alentours d'une largeur de puits L_m , ce qui s'explique par le fait qu'à cette largeur de puits, l'interaction coulombienne est plus importante entre l'électron et le trou. En présence d'un champ magnétique le coefficient d'absorption se réduit à une série de pics de Dirac comme dans les cas strictement bidimensionnels mais son intensité est supérieure dans notre cas, suite au confinement quantique. Par ailleurs, ce coefficient d'absorption augmente lorsque le champ magnétique croît. Ceci vient du fait que le champ magnétique augmente la stabilité du trion négatif. Nous pouvons en dire de même que pour l'exciton chargé positivement.

CONCLUSION GENERALE

Nous avons consacré ce mémoire à l'étude des excitons chargés dans les puits quantiques de semi-conducteurs, en l'absence et en présence d'un champ magnétique. L'intérêt essentiel de cette étude réside dans le fait que ces quasi-particules chargées et mobiles, présentent des propriétés originales qui les différencient des autres complexes excitoniques (L'apparition des niveaux de Landau et une magnéto-absorption oscillatoire).

Dans une première partie, nous avons généralisé la théorie excitonique, en développant le concept de l'exciton chargé dans le cas d'un puits quantique de type I en présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches. Nous nous sommes limités aux semi-conducteurs à transitions directes dans un modèle à deux bandes. Dans l'approximation de la fonction enveloppe, nous avons résolu l'équation effective obtenue en utilisant la méthode variationnelle de Ritz.

Nous avons montré qu'en l'absence de champ magnétique, les deux types d'excitons chargés (X^- et X_2^+) sont stables que ce soit dans les puits quantiques de type GaAs/Ga_{1-x}Al_x ou de type CdTe/Cd_{1-x}Zn_xTe. Ceci est dû au fait que leur énergie de liaison est plus importante que dans le cas des semi-conducteurs tridimensionnels ce qui a facilité leur observation expérimentale. Nous avons montré également, que la forme des raies d'absorption est différente de celles des excitons et autres complexes excitoniques. Dans cette étude des propriétés optiques, nous avons tenu compte de la densité des porteurs de charge ainsi que de la température en utilisant la statistique quantique des fermions à savoir la statistique de Fermi-Dirac. Nous avons ainsi étudié l'influence de la variation de la température ainsi que de la concentration des porteurs de charges sur la forme de la raie d'absorption. Nous avons montré que l'intensité d'oscillateur devient plus importante lorsque la concentration des porteurs augmente et la température diminue.

L'action d'un champ magnétique sur les trions excitoniques, conduit à un renforcement et une quantification supplémentaire des énergies. Pour un champ magnétique faible et perpendiculaire au plan des couches cette quantification est totale. En effet, en plus du confinement quantique, les trions excitoniques se comportent comme des quasi-particules chargées qui en présence d'un champ magnétique faible et dirigé selon l'axe de croissance z, donnent lieu à des niveaux de Landau comme dans les cas bidimensionnels et tridimensionnels. Lors de l'étude de la magnéto-absorption, nous

avons constaté que, comme dans le cas bidimensionnel, le coefficient d'absorption se réduit à une série de pics de Dirac.

Le calcul de la durée de vie de l'exciton chargé négativement a été l'objet de récentes études expérimentales [Ciulin et al. (1998, 2000), Sanvitto et al. (2000)] et théorique [Esser et al. (2000a, 2000b, 2000c)]. Notre objectif, sera de poursuivre ce travail en tenant compte de l'effet d'échange ainsi que de l'interaction avec les phonons et de faire une comparaison quantitative et qualitative avec les résultats expérimentaux et théoriques obtenus de la durée de vie dans le cas du trion négatif et positif.

Appendice A

PARTICULE DANS UN PUIITS QUANTIQUE EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE

A.1 Etats électroniques

Les états d'une particule de charge $-e$ peuvent être construits à partir de l'application des opérateurs de création d'électrons sur l'état vide $|\Phi_0\rangle$, soit :

$$a_{\lambda_1}^+ |\Phi_0\rangle. \quad (\text{A.1})$$

où $(\lambda \equiv k, N)$, N est un entier positif ou nul. La combinaison linéaire de ces états permet d'obtenir les états électroniques qui sont fonctions propres du Hamiltonien total, soit :

$$|\Phi_e\rangle = \sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} a_{\lambda_1}^+ |\Phi_0\rangle, \quad (\text{A.2})$$

Du fait que nous avons

$$a_{\lambda_1}^+ = \int d^3\mathbf{r} \varphi_{e\lambda_1}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}), \quad (\text{A.3})$$

où $|\Phi_e\rangle$ est donné par

$$\begin{aligned} |\Phi_e\rangle &= \int d^3\mathbf{r} \sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} \varphi_{e\lambda_1}(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}) |\Phi_0\rangle \\ &= \int d^3\mathbf{r} F_e(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}) |\Phi_0\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

avec

$$F_e(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} \varphi_{e\lambda_1}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.5})$$

Or les fonctions $\varphi_{e\lambda_1}(\mathbf{r})$ s'écrivent sous la forme

$$\varphi_{e\lambda_1}(\mathbf{r}) = c(\mathbf{r}) g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.6})$$

dans ce cas l'expression de $F_e(\mathbf{r})$ devient alors

$$F_e(\mathbf{r}) = \sqrt{\Omega} \psi_e(\mathbf{r}) c(\mathbf{r}), \quad (\text{A.7})$$

où

$$\psi_e(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.8})$$

Cette fonction représente la fonction enveloppe dans l'espace direct. Dans le cas d'un électron, la contribution des termes correspondant aux interactions électron-électron, trou-trou et électron-trou donnent une contribution nulle. Dans ces conditions, les états électroniques sont fonctions propres de l'équation :

$$H_{eff}^e |\Phi_e\rangle = \mathcal{E}_e |\Phi_e\rangle. \quad (\text{A.9})$$

Cette équation peut s'écrire encore sous la forme

$$\sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} \left[\sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} + \sum_{\lambda\lambda'} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^e \right] a_{\lambda_1}^{\dagger} |\Phi_0\rangle = (\mathcal{E}_e - \mathcal{E}_0) \sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} a_{\lambda_1}^{\dagger} |\Phi_0\rangle, \quad (\text{A.10})$$

où $U_{\lambda_1\lambda_2}^e$ est donné par

$$U_{\lambda_1\lambda_2}^e = \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} \varphi_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \varphi_{e\lambda_2}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.11})$$

Etant donné que l'énergie ε_{λ} est périodique dans l'espace réciproque, ceci est justifié car le champ magnétique est uniforme et suffisamment faible dans tout le cristal. Dans ce cas nous pouvons la développer en série de Fourier, et nous pouvons vérifier (Appendice B-3) que :

$$\hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) \varphi_{\lambda e}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\lambda} \varphi_{\lambda e}(\mathbf{r}), \quad (\text{A.12})$$

et par conséquent l'équation (A.10) devient alors

$$\sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} \left[\sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) + \sum_{\lambda\lambda'} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'} U_{\lambda\lambda'}^e \right] a_{\lambda_1}^{\dagger} |\Phi_0\rangle = (\mathcal{E}_e - \mathcal{E}_0) \sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} a_{\lambda_1}^{\dagger} |\Phi_0\rangle \quad (\text{A.13})$$

A.2 Equation de la fonction enveloppe

Pour obtenir une équation effective pour les coefficients C_{λ_1} , nous multiplions l'équation (A.10) par $\langle \Phi_0 | a_{\lambda'_1}$, et en utilisant les règles de commutation définies en (2.6), nous obtenons :

$$C_{\lambda_1} \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) + \sum_{\lambda_2} C_{\lambda_2} U_{\lambda_1 \lambda_2}^e = (\mathcal{E}_e - \mathcal{E}_0) C_{\lambda_1}. \quad (\text{A.14})$$

Si nous multiplions cette équation par $\frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1)$ et en sommant sur λ_1 nous aboutissons à

$$\begin{aligned} & \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) \sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) + \sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) \sum_{\lambda'} C_{\lambda'} U_{\lambda_1 \lambda'}^e \\ &= (\mathcal{E}_e - \mathcal{E}_0) \sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1). \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Or,

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) \sum_{\lambda'} C_{\lambda'} U_{\lambda_1 \lambda'}^e &= \sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) \\ & \sum_{\lambda'} C_{\lambda'} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int_{\Omega_0} g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) g_{e\lambda'}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ &= \int_{\Omega_0} \left[\frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) \right] \\ & U(\mathbf{r}) \sum_{\lambda'} C_{\lambda'} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda'}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

et comme les fonctions $g_{e\lambda_1}(\mathbf{r})$ sont orthogonales, elles vérifient la relation suivante

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}). \quad (\text{A.17})$$

En effectuant une intégration sur \mathbf{r} , nous avons

$$\sum_{\lambda_1} C_{\lambda_1} \frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) \sum_{\lambda'} C_{\lambda'} U_{\lambda_1 \lambda'}^e = U(\mathbf{r}) \sum_{\lambda_2} C_{\lambda_2} \frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_2}(\mathbf{r}). \quad (\text{A.18})$$

Finalement en tenant compte de la relation (A.8) nous obtenons :

$$\left[\hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) + U(\mathbf{r}) \right] \psi_e(\mathbf{r}) = (\mathcal{E}_e - \mathcal{E}_0) \psi_e(\mathbf{r}). \quad (\text{A.19})$$

Si $U(\mathbf{r})$ correspond à un potentiel de puits suivant la direction z , $U(\mathbf{r}) \equiv V_w^e(z)$, cette équation devient :

$$\left[\hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) + V_w^e(z) \right] \psi_e(\mathbf{r}) = (\mathcal{E}_e - \mathcal{E}_0) \psi_e(\mathbf{r}), \quad (\text{A.20})$$

qui est l'équation effective d'une particule dans un puits quantique en présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches. Finalement, l'équation effective peut être écrite sous la forme :

$$\left[\frac{1}{2m_e^*} \left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + V_w^e(z) \right] \psi_e(\mathbf{r}) = (\mathcal{E}_e - \mathcal{E}_0) \psi_e(\mathbf{r}). \quad (\text{A.21})$$

où

$$\mathcal{E}_e = \mathcal{E}_{\text{crist}} - \varepsilon_{c0} \quad (\text{A.22})$$

A.2.1 Résolution de l'équation de Schrödinger d'une particule dans un puits quantique à champ nul

L'équation de Schrödinger d'un électron dans un puits quantique fini de largeur L s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta + V_w(z) \right] \psi_k(\mathbf{r}) = E_e \psi_k(\mathbf{r}), \quad (\text{A.23})$$

où

$$V_w(z) = \begin{cases} V_e \text{ si } |z| > \frac{L}{2} \\ 0 \text{ si } |z| \leq \frac{L}{2} \end{cases}. \quad (\text{A.24})$$

En écrivant $\psi_k(\mathbf{r})$ sous la forme :

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \psi_{k_p}(\boldsymbol{\rho}) f_w(z), \quad (\text{A.25})$$

nous obtenons

$$\begin{aligned} & \left\{ \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \right] + \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_w(z) \right] \right\} \psi_{k_p}(\boldsymbol{\rho}) f_w(z) \\ & = E_e \psi_{k_p}(\boldsymbol{\rho}) f_w(z). \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

Soit :

$$H_p \psi_{k_p}(\boldsymbol{\rho}) = E_p \psi_{k_p}(\boldsymbol{\rho}), \quad (\text{A.27})$$

où

$$H_p = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right). \quad (\text{A.28})$$

et

$$\begin{aligned} \psi_{k_p}(\boldsymbol{\rho}) &= \mathcal{A} \exp[i\mathbf{k}_p \cdot \boldsymbol{\rho}] \\ E_p &= \frac{\hbar^2 k_p^2}{2m_e^*}. \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

avec \mathcal{A} est une constante de normation. D'autre part nous avons

$$H_w f_w(z) = E_w f_w(z), \quad (\text{A.30})$$

où

$$H_w = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_w(z). \quad (\text{A.31})$$

Cette équation décrit le mouvement de l'électron suivant l'axe z , avec :

$$f_w(z) = \begin{cases} A_e \cos(\alpha_e z) & \text{si } |z| \leq \frac{L}{2} \\ B_e \exp(-\beta_e |z|) & \text{si } |z| > \frac{L}{2} \end{cases}, \quad (\text{A.32})$$

où

$$\alpha_e = \sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2} E_w} \text{ et } \beta_e = \sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2} (V_e - E_w)} \quad (\text{A.33})$$

avec A_e et B_e sont des constantes de normation obtenues en utilisant les conditions aux limites au point $\frac{L}{2}$ de la fonction d'onde et de sa dérivée.

A.2.2 Résolution de l'équation de Schrödinger d'une particule dans un puits quantique en présence d'un champ magnétique

Le Hamiltonien décrivant le mouvement de l'électron dans un puits quantique en présence d'un champ magnétique dirigé selon l'axe z s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m_e^*} \left(-i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V_w(z), \quad (\text{A.34})$$

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

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} = \frac{B}{2} (-y, x, 0), \quad (\text{A.35})$$

Nous nous intéressons à résoudre l'équation

$$H \psi_\lambda(\mathbf{r}) = E^N \psi_\lambda(\mathbf{r}), \quad (\text{A.36})$$

pour cela, nous séparons le mouvement dans le plan de celui suivant z . Dans ce cas, nous pouvons écrire

$$\psi_\lambda(\mathbf{r}) = \psi_{p\lambda}(x, y) f_w(z) \quad (\text{A.37})$$

et

$$E^N = E_p^N + E_w. \quad (\text{A.38})$$

Par conséquent notre Hamiltonien s'écrit

$$H = H_p + H_w$$

où

$$H_p = \frac{1}{2m_e^*} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{eB}{2c} y \right)^2 + \frac{1}{2m_e^*} \left(\frac{\partial}{\partial y} + \frac{eB}{2c} x \right)^2 \quad (\text{A.39})$$

$$H_w = \frac{p_{ez}^2}{2m_e^*} + V_w(z). \quad (\text{A.40})$$

L'équation de Schrodinger dans le plan s'écrit :

$$H_p \psi_{p\lambda}(x, y) = E_p \psi_{p\lambda}(x, y). \quad (\text{A.41})$$

Nous remarquons que cette Hamiltonien ne commute pas avec l'opérateur quantité de mouvement dans le plan à champ mul. Cependant nous introduisons l'opérateur donné par :

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \quad (\text{A.42})$$

où \mathbf{p} est l'opérateur quantité de mouvement de l'électron dans le plan. Les composantes π_x et π_y qui commutent avec π , ne commutent pas entre elles mais commutent avec H . Seuls les opérateurs π_x et H ou π_y et H peuvent être diagonalisés dans une même base de fonctions propres. De ce fait nous avons :

$$\pi_x \psi_{p\lambda}(x, y) = \hbar k_x \psi_{p\lambda}(x, y), \quad (\text{A.43})$$

que nous pouvons mettre encore sous la forme

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \frac{eB}{2c} y \right) \psi_{p\lambda}(x, y) = \hbar k_x \psi_{p\lambda}(x, y). \quad (\text{A.44})$$

Cette équation a pour solution des fonctions de la forme :

$$\psi_{p\lambda}(x, y) = \mathcal{A} \exp(ik_x x) \exp\left(-i \frac{eB}{2c\hbar} xy\right) \varphi(y), \quad (\text{A.45})$$

où \mathcal{A} est une constante de normation. En reportant l'expression précédente dans l'équation (A.41), nous vérifions que $\varphi(y)$ vérifie l'équation suivante

$$\frac{\partial^2 \varphi(y)}{\partial y^2} + \frac{2m_e^*}{\hbar^2} \left[E_p - \frac{m_e^* \omega_e^2}{2} (y - y_0)^2 \right] \varphi(y) = 0. \quad (\text{A.46})$$

avec

$$y_0 = \frac{c\hbar}{eB}k_x, \omega_e = \frac{eB}{m_e^*c}. \quad (\text{A.47})$$

C'est l'équation d'un oscillateur harmonique de fréquence ω_e et dont les oscillations s'effectuent autour du point y_0 . E_p est l'énergie de l'oscillateur harmonique dans le plan, qui peut prendre les valeurs suivantes :

$$E_p = \hbar\omega_e \left(N + \frac{1}{2} \right) \text{ où } N \geq 0. \quad (\text{A.48})$$

La fonction $\varphi(y)$ a pour expression

$$\varphi(y) = \exp \left[-\frac{eB}{2\hbar c} (y - y_0)^2 \right] H_n \left[\left(\frac{eB}{\hbar c} \right)^{\frac{1}{2}} (y - y_0) \right], \quad (\text{A.49})$$

où H_n sont les polynômes d'Hermite donnés par

$$H_n = (-1)^n \exp(x^2) \frac{\partial^n}{\partial x^n} \exp(-x^2). \quad (\text{A.50})$$

Le mouvement suivant z est décrit par :

$$\left[\frac{P_{ez}^2}{2m_e^*} + V_w(z) \right] f_w(z) = E_w f_w(z), \quad (\text{A.51})$$

où

$$H_w f_w(z) = E_w f_w(z). \quad (\text{A.52})$$

Conclusion

Le mouvement de l'électron dans un puits quantique fini en présence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan est totalement quantifié.



Appendice B

EXCITON DANS UN PUIITS QUANTIQUE EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE

B.1 Etats excitoniques

En présence d'un champ magnétique, les états d'une paire électron-trou (e, h) non liées peuvent être construits à partir de l'application répétée des opérateurs de création d'états d'électrons et de trous sur l'état vide $|\Phi_0\rangle$:

$$|\Phi_{eh}\rangle = a_{\lambda_1}^+ d_{\lambda_2}^+ |\Phi_0\rangle. \quad (\text{B.1})$$

La combinaison linéaire de ces états non perturbés permet d'obtenir les états excitoniques qui sont des fonctions propres du Hamiltonien total

$$|\Phi_X\rangle = \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} |\Phi_{eh}\rangle, \quad (\text{B.2})$$

soit encore :

$$|\Phi_X\rangle = \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} a_{\lambda_1}^+ d_{\lambda_2}^+ |\Phi_0\rangle. \quad (\text{B.3})$$

Dans l'espace des coordonnées, cette relation peut s'écrire :

$$|\Phi_X\rangle = \int \int d^3 \mathbf{r}_e d^3 \mathbf{r}_h F_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \hat{\Psi}_e^+(\mathbf{r}_e) \hat{\Psi}_h^+(\mathbf{r}_h) |\Phi_0\rangle, \quad (\text{B.4})$$

où

$$F_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} \varphi_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_e) \varphi_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_h) \quad (\text{B.5})$$

est la fonction excitonique dans l'espace direct. En reportant les expressions des fonctions $\varphi_\lambda(\mathbf{r})$ données par la relation (2.9) dans celle de $F_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$, nous obtenons :

$$F_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \Omega \psi_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) g_{crist}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h), \quad (\text{B.6})$$

où

$$\psi_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \Omega^{-1} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_e) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_h) \quad (\text{B.7})$$

est la fonction enveloppe dans l'espace direct, tandis que :

$$g_{crist}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = c(\mathbf{r}_e) v^*(\mathbf{r}_h). \quad (\text{B.8})$$

B.2 Equation de la fonction enveloppe

Comme l'exciton ne fait intervenir qu'une paire (e, h), les termes H_{cc} et H_{vv} dans l'expression de H_I donné par l'équation (2.17), qui correspondent aux interactions électron-électron et trou-trou conduisent à une contribution nulle. Dans ces conditions, les états excitoniques sont fonctions propres de l'équation :

$$H_X^{eff} |\Phi_X\rangle = (\mathcal{E}_X - \mathcal{E}_0) |\Phi_X\rangle, \quad (\text{B.9})$$

que nous pouvons encore mettre sous la forms :

$$\begin{aligned} & \sum_{\lambda_1, \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} \left[\sum_{\lambda} a_{\lambda}^+ a_{\lambda} \varepsilon_{\lambda c} + \sum_{\lambda \lambda'} a_{\lambda}^+ a_{\lambda'} U_{\lambda \lambda'}^e - \sum_{\lambda} d_{\lambda}^+ d_{\lambda} \varepsilon_{\lambda v} - \sum_{\lambda \lambda'} d_{\lambda}^+ d_{\lambda'} U_{\lambda \lambda'}^h \right. \\ & \left. - \sum_{\lambda'_1, \lambda'_2, \lambda_3, \lambda_4} a_{\lambda'_1}^+ a_{\lambda_4} d_{\lambda_3}^+ d_{\lambda'_2} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & v \\ \lambda'_1 \lambda'_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \right] a_{\lambda_1}^+ d_{\lambda_2}^+ |\Phi_0\rangle \\ & = (\mathcal{E}_X - \mathcal{E}_0) \sum_{\lambda_1, \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} a_{\lambda_1}^+ d_{\lambda_2}^+ |\Phi_0\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Etant donné que l'énergie ε_λ est périodique dans l'espace réciproque, puisque le champ magnétique est uniforme et suffisamment faible dans tout le cristal, nous pouvons la développer en série de Fourier et nous vérifions (Aappendice B-3) que pour les électrons

$$\hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_e + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_e \right) \varphi_{\lambda_1 e}(\mathbf{r}_e) = \varepsilon_{\lambda c} \varphi_{\lambda_1 e}(\mathbf{r}_e), \quad (\text{B.11})$$

et que pour trous nous avons

$$\hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_h - \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_h \right) \varphi_{\lambda_2 h}(\mathbf{r}_h) = \varepsilon_{\lambda v} \varphi_{\lambda_2 h}(\mathbf{r}_h). \quad (\text{B.12})$$

Par conséquent, l'équation précédente devient :

$$\begin{aligned}
& \sum_{\lambda_1, \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} \left[\sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_e + \frac{e}{c \hbar} \mathbf{A}_e \right) + \sum_{\lambda \lambda'} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'} U_{\lambda \lambda'}^e \right. \\
& - \sum_{\lambda} d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda} \hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_h - \frac{e}{c \hbar} \mathbf{A}_h \right) - \sum_{\lambda \lambda'} d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda'} U_{\lambda \lambda'}^h \\
& \left. - \sum_{\lambda'_1, \lambda'_2, \lambda_3, \lambda_4} a_{\lambda'_1}^{\dagger} a_{\lambda_4} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda'_2} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & v & v & c \\ \lambda'_1 \lambda'_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \right] a_{\lambda_1}^{\dagger} d_{\lambda_2}^{\dagger} |\Phi_0\rangle \\
& = (\mathcal{E}_X - \mathcal{E}_0) \sum_{\lambda_1, \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} a_{\lambda_1}^{\dagger} d_{\lambda_2}^{\dagger} |\Phi_0\rangle. \tag{B.13}
\end{aligned}$$

Pour obtenir une équation effective pour les coefficients $C_{\lambda_1 \lambda_2}$, nous multiplions cette relation par $\langle \Phi_0 | d_{\lambda_2} a_{\lambda_1}$, et en utilisant les règles de commutation définies par (2.6), nous obtenons :

$$\begin{aligned}
& C_{\lambda_1 \lambda_2} \left[\hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_e + \frac{e}{c \hbar} \mathbf{A}_e \right) - \hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_h - \frac{e}{c \hbar} \mathbf{A}_h \right) \right] \\
& + \sum_{\lambda'_1} C_{\lambda'_1 \lambda_2} U_{\lambda_1 \lambda'_1}^e - \sum_{\lambda'_2} C_{\lambda_1 \lambda'_2} U_{\lambda_2 \lambda'_2}^h - \sum_{\lambda_3 \lambda_4} C_{\lambda_3 \lambda_4} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & v & v & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \\
& = (\mathcal{E}_X - \mathcal{E}_0) C_{\lambda_1 \lambda_2}. \tag{B.14}
\end{aligned}$$

Pour obtenir une équation effective pour l'exciton, nous multiplions l'équation précédente par $\frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_2)$ puis nous sommes sur λ_1 et λ_2 , nous aboutissons alors à :

$$\begin{aligned}
& \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_e) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_h) \left[\hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_e + \frac{e}{c \hbar} \mathbf{A}_e \right) - \hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_h - \frac{e}{c \hbar} \mathbf{A}_h \right) \right. \\
& \left. + \sum_{\lambda'_1} C_{\lambda'_1 \lambda_2} U_{\lambda_1 \lambda'_1}^e - \sum_{\lambda'_2} C_{\lambda_1 \lambda'_2} U_{\lambda_2 \lambda'_2}^h - \sum_{\lambda_3 \lambda_4} C_{\lambda_3 \lambda_4} \tilde{W} \left(\begin{smallmatrix} c & v & v & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) \right] \\
& = (\mathcal{E}_X - \mathcal{E}_0) \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_e) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_h). \tag{B.15}
\end{aligned}$$

Nous obtenons ainsi l'équation de la fonction enveloppe d'un exciton dans un puits quantique en présence d'un champ magnétique :

$$\begin{aligned}
& \left[\hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_e + \frac{e}{c \hbar} \mathbf{A}_e \right) - \hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_h - \frac{e}{c \hbar} \mathbf{A}_h \right) + V_w^e(z_e) + V_w^h(z_h) \right. \\
& \left. - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \right] \psi_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \\
& = (\mathcal{E}_X - \mathcal{E}_0) \psi_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h). \tag{B.16}
\end{aligned}$$

Finalement l'équation effective peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{1}{2m_e^*} \left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A}_e \right)^2 + V_w^e(z_e) + \frac{1}{2m_h^*} \left(-i\hbar\nabla_h - \frac{e}{c}\mathbf{A}_h \right)^2 + V_w^h(z_h) \right. \\
& \left. - \frac{e^2}{\kappa|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \right] \psi_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \\
& = (\mathcal{E}_X - \mathcal{E}_0) \psi_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h),
\end{aligned} \tag{B.17}$$

où

$$\mathcal{E}_X = \mathcal{E}_{crist} - \varepsilon_g. \tag{B.18}$$

avec

$$\varepsilon_g = \varepsilon_{c0} - \varepsilon_{v0} \tag{B.19}$$

désigne l'énergie de la bande interdite. La constante diélectrique κ a été introduite de façon phénoménologique afin de tenir compte des effets de polarisation électroniques et ioniques.

B.3 Hamiltonien effectif de l'exciton

Dans cette partie, nous nous proposons de résoudre l'équation de Schrödinger effective pour la fonction enveloppe de l'exciton dans un puits quantique et en présence d'un champ magnétique. A cet effet, nous précisons tout d'abord l'expression du Hamiltonien effectif compte tenu du choix de notre jauge. Nous étudions les invariants du problème puis nous développons notre méthode variationnelle de résolution de l'équation de Schrödinger. Nous avons vu ci-dessus que le Hamiltonien effectif relatif à l'exciton dans un puits quantique en présence d'un champ magnétique s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m_e^*} \left(-i\hbar\nabla + \frac{e}{c}\mathbf{A}_e \right)^2 + \frac{1}{2m_h^*} \left(-i\hbar\nabla_h - \frac{e}{c}\mathbf{A}_h \right)^2 + V_c + V_w(z), \tag{B.20}$$

où

$$V_c = -\frac{e^2}{\kappa|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \text{ et } V_w(z) = V_w^e(z_e) + V_w^h(z_h). \tag{B.21}$$

\mathbf{A}_e et \mathbf{A}_h désignent les potentiels vecteurs de l'électron et du trou, c la vitesse de la lumière dans le vide, m_e^* et m_h^* les masses effectives de l'électron et du trou, supposées isotropes et κ est une constante diélectrique qui a été introduite pour tenir en compte des effets de polarisation électronique et ionique. Dans le cas d'une jauge de Lorentz, nous pouvons exprimer les potentiels vecteurs par

$$\mathbf{A}_i = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}_i \text{ où } i = e, h. \tag{B.22}$$

Dans ce cas $\text{div}\mathbf{A}_i = \mathbf{0}$. Dans le cas tridimensionnel et en l'absence du puits, le mouvement du centre de masse se sépare du mouvement relatif. Dans ce qui suit nous allons montrer que dans le cas d'un puits quantique et en présence de champ magnétique, nous ne pouvons séparer que la projection du mouvement du centre de masse dans le plan des couches du mouvement relatif. Dans ce but nous utilisons les coordonnées relatives planes suivantes

$$\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho}_e - \boldsymbol{\rho}_h, \quad \mathbf{R} = \frac{m_e^* \boldsymbol{\rho}_e + m_h^* \boldsymbol{\rho}_h}{m_e^* + m_h^*}. \quad (\text{B.23})$$

Dans ces conditions, le Hmitonien effectif se réduit à

$$\begin{aligned} H = & -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_{z_e} - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \Delta_{z_h} + V_w^e(z_e) + V_h^e(z_h) + V_c + \\ & + \frac{e}{icm_e^*} \left[(1 + \sigma) \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + (1 - \sigma) \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{\sigma}{1 + \sigma} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \right] + \\ & + \frac{e^2}{2c^2 m_e^*} \left[(1 + \sigma) A^2(\mathbf{R}) + 2\mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \frac{1 + \sigma^3}{(1 + \sigma)^2} A^2(\mathbf{r}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

La difficulté résulte dans l'existence des termes couplant le champ magnétique avec les coordonnées du centre de masse. Ces termes peuvent être éliminés en utilisant une transformation de jauge analogue à celle utilisée dans la théorie de l'atome d'Hydrogène. Nous remarquons que le Hamiltonien H commute avec la projection selon l'axe z du moment angulaire orbital L_z mais ne commute pas avec l'opérateur quantité de mouvement P_0 dans le cas tridimensionnel. Cependant, il apparaît que l'opérateur $\boldsymbol{\pi} (\pi_x, \pi_y)$ donné par :

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p}_e + \mathbf{p}_h - \frac{e}{c} [\mathbf{A}_e(\boldsymbol{\rho}_e) + \mathbf{A}_h(\boldsymbol{\rho}_h)] = -i\hbar \nabla_{\mathbf{R}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \quad (\text{B.25})$$

où \mathbf{p}_i sont les opérateur quantité de mouvement de particules libres dans le plan, commute avec H . A cet effet, nous pouvons déterminer une base commune de vecteurs propres à H et $\boldsymbol{\pi}$ en résolvant l'équation différentielle suivante

$$\boldsymbol{\pi} \Psi_X(\mathbf{r}, \mathbf{R}, z_e, z_h) = \hbar \mathbf{K} \Psi_X(\mathbf{r}, \mathbf{R}, z_e, z_h), \quad (\text{B.26})$$

avec

$$\Psi_X(\mathbf{r}, \mathbf{R}, z_e, z_h) = U(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}, z_e, z_h). \quad (\text{B.27})$$

L'opérateur unitaire $U(\mathbf{R})$ est donné par

$$U(\mathbf{R}) = \exp \left[i \left(\mathbf{K} + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right) \cdot \mathbf{R} \right], \quad (\text{B.28})$$

\mathbf{K} représente le vecteur d'onde du centre de masse dans le plan en présence de champ magnétique. Le Hamiltonien transformé s'écrit alors

$$H' = U^{-1} H U = H'_1 + H'_2 + H'_3 \quad (\text{B.29})$$

où le premier terme

$$H'_1 = \frac{\hbar^2 K^2}{2M} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\mathbf{r}} - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_{z_e} - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \Delta_{z_h} + V_c + V_w^e(z_e) + V_w^h(z_h), \quad (\text{B.30})$$

représente la contribution à champ nul, le terme H'_2 correspond à l'effet diamagnétique quadratique

$$H'_2 = \frac{e^2}{2\mu c^2} A^2(\mathbf{R}). \quad (\text{B.31})$$

Dans l'expression de H'_3 donnée par

$$H'_3 = \frac{2e\hbar}{Mc} \mathbf{K} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \frac{ie\hbar}{m_e^* c} (1 - \sigma) \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}}. \quad (\text{B.32})$$

Le premier terme traduit l'effet d'un champ électrique induit par le champ magnétique extérieur et le deuxième terme traduit l'effet Zeman linéaire en champ. Ce dernier peut encore s'écrire sous la forme

$$\frac{ie\hbar}{m_e^* c} (1 - \sigma) \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} = \frac{e}{2m_e^* c} (1 - \sigma) \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}, \quad (\text{B.33})$$

où $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ représente le moment orbital dû à la rotation de l'électron et du trou autour du centre de masse. Le premier terme peut s'écrire sous la forme

$$\frac{2e\hbar}{Mc} \mathbf{K} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{e}{c} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{r} = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}, \quad (\text{B.34})$$

où \mathbf{v} est la vitesse du centre de masse et $\mathbf{E} = \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}$. Par conséquent, le terme H'_3 s'écrit

$$H'_3 = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} + \frac{e}{2m_e^* c} (1 - \sigma) \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} \quad (\text{B.35})$$

B.4 Calcul des éléments de matrice

Nous choisissons une fonction d'essai qui respecte la symétrie du problème et qui permet le calcul de l'énergie de liaison avec la précision désirée :

$$\psi(r, z_e, z_h) = \exp(-\alpha r) f_e(z_e) f_h(z_h) \sum_{p, q} c_{p, q} z_e^p \exp(-\alpha_e z_e^2) z_h^q \exp(-\alpha_h z_h^2). \quad (\text{B.36})$$

Dans le cas d'un puits de potentiel symétrique par rapport à l'origine, le Hamiltonien est invariant par inversion des coordonnées selon z . La fonction d'onde doit donc être à parité définie, soit paire soit impaire. Pour l'étude de l'état fondamental, nous choisissons une fonction paire.

$$\psi(r, z_e, z_h) = \sum_{p,q} c_{p,q} \chi_{pq}, \quad (\text{B.37})$$

où

$$\begin{aligned} \chi_{pq} &= \exp(-\alpha r) f_e(z_e) f_h(z_h) z_e^p \exp(-\alpha_e z_e^2) z_h^q \exp(-\alpha_h z_h^2) \\ &= \phi(r) \theta_{pq}(z_e, z_h). \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

Par ailleurs, :

$$\begin{aligned} f_e(z_e) &= \begin{cases} A_e \cos(\alpha_e z_e) & \text{si } |z_e| \leq \frac{L}{2} \\ B_e \exp(-\beta_e |z_e|) & \text{si } |z_e| > \frac{L}{2} \end{cases} \\ f_h(z_h) &= \begin{cases} A_h \cos(\alpha_h z_h) & \text{si } |z_h| \leq \frac{L}{2} \\ B_h \exp(-\beta_h |z_h|) & \text{si } |z_h| > \frac{L}{2} \end{cases}, \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

où

$$\begin{aligned} \alpha_e &= \sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2} E_w} \text{ et } \beta_e = \sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2} (V_e - E_w)} \\ \alpha_h &= \sqrt{\frac{2m_h^*}{\hbar^2} E_w} \text{ et } \beta_h = \sqrt{\frac{2m_h^*}{\hbar^2} (V_h - E_w)}, \end{aligned} \quad (\text{B.40})$$

avec

$$a_p = z_e^p \exp(-\alpha_e z_e^2) \text{ et } b_q = z_h^q \exp(-\alpha_h z_h^2). \quad (\text{B.41})$$

L'énergie de corrélation de l'exciton est déterminée par la méthode variationnelle qui consiste à déterminer la valeur minimale de l'énergie par rapport aux paramètres variationnels α , α_e , α_h , et c_{pq} (p et q sont des entiers positifs ou nuls et $p + q$ est paire) :

$$E = \frac{\langle \psi_X | H | \psi_X \rangle}{\langle \psi_X | \psi_X \rangle}, \quad (\text{B.42})$$

que nous pouvons réécrire sous la forme :

$$E = \frac{\langle \psi(x, y, z_e, z_h) | H' | \psi(x, y, z_e, z_h) \rangle}{\langle \psi(x, y, z_e, z_h) | \psi(x, y, z_e, z_h) \rangle}, \quad (\text{B.43})$$

où

$$H' = U^{-1}HU. \quad (\text{B.44})$$

Pour calculer l'énergie de liaison de l'exciton nous sommes amenés à résoudre l'équation matricielle suivante :

$$(\mathbf{H}' - E\mathbf{S})\mathbf{c} = 0. \quad (\text{B.45})$$

où \mathbf{H}' et \mathbf{S} désignent respectivement les matrices des opérateurs H' et l'unité dans la base $\{\chi_{pq}\}$. \mathbf{c} désigne le vecteur colonne des coefficients c_{pq} . Nous sommes amenés à calculer les éléments de matrice de \mathbf{H}' et de \mathbf{S} . Nous allons voir que les éléments de matrice s'expriment en fonction des intégrales :

$$\begin{aligned} \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f_e(z_e) a_p(z_e) \rangle &= W_e^0 \\ \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f'_e(z_e) a'_p(z_e) \rangle &= W_e^1 \\ \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f''_e(z_e) a''_p(z_e) \rangle &= W_e^2 \\ \langle f_h(z_h) b_{q'}(z_h) | f_h(z_h) b_q(z_h) \rangle &= W_h^0 \\ \langle f_h(z_h) b_{q'}(z_h) | f'_h(z_h) b'_q(z_h) \rangle &= W_h^1, \\ \langle f_h(z_h) b_{q'}(z_h) | f''_h(z_h) b''_q(z_h) \rangle &= W_h^2. \end{aligned} \quad (\text{B.46})$$

Calcul de $S_{p,q}^{p',q'}$

$$\begin{aligned} S_{p,q}^{p',q'} &= \langle \phi \theta_{p',q'} | \phi \theta_{p,q} \rangle \\ &= \langle \phi | \phi \rangle \langle \theta_{p',q'} | \theta_{p,q} \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.47})$$

$$\begin{aligned} \langle \phi | \phi \rangle &= \int \exp(-2\alpha r) r 2\pi d\rho = \frac{\pi}{2\alpha^2} \\ \langle \theta_{p',q'} | \theta_{p,q} \rangle &= W_e^0 W_h^0. \end{aligned} \quad (\text{B.48})$$

$$W_e^0 W_h^0 = \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f_e(z_e) a_p(z_e) \rangle \langle f_h(z_h) b_{q'}(z_h) | f_h(z_h) b_q(z_h) \rangle. \quad (\text{B.49})$$

Par conséquent nous avons

$$S_{p,q}^{p',q'} = \frac{\pi}{2\alpha^2} W_e^0(p,p') W_h^0(q,q'). \quad (\text{B.50})$$

Calcul de $H_{1p,q}^{p',q'}$

$$H_1' = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r. \quad (\text{B.51})$$

En coordonnées polaires nous avons :

$$\begin{aligned} x &= r \cos(\theta) \\ y &= r \sin(\theta), \end{aligned} \quad (\text{B.52})$$

d'où :

$$\Delta_r = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (\text{B.53})$$

et par suite nous obtenons :

$$H_1' = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right], \quad (\text{B.54})$$

Les éléments de matrice de H_1' sont donnés par :

$$\begin{aligned} H_{1p,q}^{\prime p',q'} &= \langle \phi_{p',q'} | H_1' | \phi_{p,q} \rangle \\ &= \langle \phi | H_1' | \phi \rangle \langle \theta_{p',q'} | \theta_{p,q} \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.55})$$

où :

$$\langle \phi | H_1' | \phi \rangle = (1 + \sigma) \frac{\pi}{4}. \quad (\text{B.56})$$

Par conséquent, nous obtenons

$$H_{1p,q}^{\prime p',q'} = (1 + \sigma) \frac{\pi}{4} W_e^0(p, p') W_h^0(q, q'). \quad (\text{B.57})$$

Calcul de $V_{c,p,q}^{\prime p',q'}$

Le terme décrivant le potentiel coulombien s'écrit en coordonnées polaires comme suit

$$V_c' = -\frac{e^2}{\kappa \sqrt{r^2 + |z_e - z_h|^2}}. \quad (\text{B.58})$$

Ce potentiel couple le mouvement en z des deux particules. Nous linéarisons ce potentiel en utilisant l'approximation suivante :

$$\left\langle \phi_{p',q'} \left| -\frac{1}{\sqrt{r^2 + |z_e - z_h|^2}} \right| \phi_{p,q} \right\rangle \simeq \left\langle \theta_{p',q'} \left| \frac{a}{b + |z_e - z_h|} \right| \theta_{p,q} \right\rangle. \quad (\text{B.59})$$

Cette approximation a été introduite pour réduire l'intégration triple en une intégration double. Les constantes a et b sont choisies de telle sorte que les valeurs correctes de V_c soient retrouvées pour les valeurs limites $|z_e - z_h| \rightarrow \infty$ et $|z_e - z_h| \rightarrow 0$, soit :

$$\begin{aligned} \frac{a}{|z_e - z_h|} &= 2\pi \lim_{|z_e - z_h| \rightarrow \infty} \int_0^{+\infty} -\frac{r \exp(-2\alpha r)}{\sqrt{r^2 + |z_e - z_h|^2}} dr \\ &= \frac{2\pi}{|z_e - z_h|} \int_0^{+\infty} -r \exp(-2\alpha r) dr \\ &= \frac{-\frac{2\pi}{4\alpha^2}}{|z_e - z_h|}. \end{aligned} \quad (\text{B.60})$$

D'autre part nous avons, :

$$\begin{aligned} \frac{a}{b} &= 2\pi \lim_{|z_e - z_h| \rightarrow 0} \int_0^{+\infty} -\frac{r \exp(-2\alpha r)}{\sqrt{r^2 + |z_e - z_h|^2}} dr \\ &= -\frac{2\pi}{2\alpha}, \end{aligned} \quad (\text{B.61})$$

d'où :

$$a = -\frac{\pi}{2\alpha^2} \text{ et } b = \frac{1}{2\alpha}. \quad (\text{B.62})$$

Par conséquent, les éléments de matrice de V'_c deviennent

$$\begin{aligned} &\left\langle \theta_{p',q'} \left| -\frac{\pi}{\alpha + 2\alpha^2 |z_e - z_h|} \right| \theta_{p,q} \right\rangle \\ &= \left\langle f_e(z_e) f_h(z_h) a_{p'}(z_e) b_{q'}(z_h) \left| -\frac{\pi}{\alpha + 2\alpha^2 |z_e - z_h|} \right| f_e(z_e) f_h(z_h) a_p(z_e) b_q(z_h) \right\rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.63})$$

Si nous posons :

$$Z_{1h} = \left\langle f_e(z_e) f_h(z_h) a_{p'}(z_e) b_{q'}(z_h) \left| -\frac{2\alpha}{1 + 2\alpha |z_e - z_h|} \right| f_e(z_e) f_h(z_h) a_p(z_e) b_q(z_h) \right\rangle, \quad (\text{B.64})$$

nous aurons alors :

$$V'_{c,p,q} = \frac{e^2}{\kappa} \frac{\pi}{2\alpha^2} Z_{1h}. \quad (\text{B.65})$$

Calcul de $H'_{2p,q}$

Le terme décrivant l'effet diamagnétique s'écrit

$$H'_2 = \frac{\gamma^2}{4} \left(\frac{1 + \sigma}{2} \right) r^2, \quad (\text{B.66})$$

avec $\gamma = \frac{\hbar\omega_e}{2R_y}$ traduisant l'intensité du champ magnétique ou encore l'énergie de résonance cyclotronique $\hbar\omega_e$, en unités atomiques. Dans ces conditions, les éléments de matrice de H'_2 s'écrivent

$$\begin{aligned} H'_{2p,q} &= \langle \phi \theta_{p',q'} | H'_2 | \phi \theta_{p,q} \rangle \\ &= \langle \phi | H'_2 | \phi \rangle \langle \theta_{p',q'} | \theta_{p,q} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.67})$$

Or,

$$\langle \phi | H'_2 | \phi \rangle = \frac{3\pi}{4\alpha^4} \frac{\gamma^2}{4} \left(\frac{1 + \sigma}{2} \right). \quad (\text{B.68})$$

Par conséquent, nous aboutissons à :

$$H'_{2p,q} = \frac{3\pi\gamma^2(1+\sigma)}{32\alpha^4} W_e^0(p,p') W_h^0(q,q'). \quad (\text{B.69})$$

Calcul de $H_{3p,q}^{p',q'}$

Dans ce terme nous négligeons les contributions des termes $\mathbf{K} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r})$ et $\mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}}$. En effet, si nous admettons que l'exciton a été obtenu par absorption optique dans un semi-conducteur à transition directe, les règles de conservation de la quantité de mouvement imposent que la quantité de mouvement du centre de masse soit nulle. Par contre, la contribution orbitale de l'effet Zeeman ne peut être négligée en principe. Dans cette étude, nous nous limitons à la seule prise en compte de la contribution diamagnétique, négligeant ainsi la contribution Zeeman.

Calcul de $H_{4p,q}^{p',q'}$

Le terme H_4' ne fait intervenir que les contributions en z de la fonction d'onde :

$$H_4' = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\sigma}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + V_w^e(z_e) + V_w^h(z_h), \quad (\text{B.70})$$

Dans ce cas, nous pouvons écrire

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + V_w^e(z_e) \right] a_p(z_e) f_e(z_e) = \left[-\frac{1}{2} f_e''(z_e) + V_w^e(z_e) f_e(z_e) \right] a_p(z_e) - \frac{1}{2} f_e(z_e) a_p''(z_e) - f_e'(z_e) a_p'(z_e), \quad (\text{B.71})$$

avec :

$$-\frac{1}{2} f_e''(z_e) + V_w^e(z_e) f_e(z_e) = E_e f_e(z_e), \quad (\text{B.72})$$

d'où :

$$\begin{aligned} & \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | H_4' | f_e(z_e) a_p(z_e) \rangle \\ &= E_e \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f_e(z_e) a_p(z_e) \rangle - \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f_e'(z_e) a_p'(z_e) \rangle \\ & \quad - \frac{1}{2} \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f_e(z_e) a_p''(z_e) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.73})$$

De même nous avons pour le trou

$$\begin{aligned} & \langle f_h(z_h) b_{q'}(z_h) | H_4' | f_h(z_h) b_q(z_h) \rangle \\ &= E_h \langle f_h(z_h) b_{q'}(z_h) | f_h(z_h) b_q(z_h) \rangle - \sigma \langle f_h(z_h) b_{q'}(z_h) | f_h'(z_h) b_q'(z_h) \rangle \\ & \quad - \frac{\sigma}{2} \langle f_h(z_h) b_{q'}(z_h) | f_h(z_h) b_q''(z_h) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.74})$$

Finalement, nous obtenons

$$\begin{aligned} H_{4p,q}^{p',q'} &= \langle \phi \theta_{p',q'} | H_4' | \phi \theta_{p,q} \rangle \\ &= \langle \phi | \phi \rangle \langle \theta_{p',q'} | H_4' | \theta_{p,q} \rangle \\ &= \langle \phi | \phi \rangle \\ & \quad \left\{ - \langle f_h(z_h) b_{q'}(z_h) | f_h(z_h) b_q(z_h) \rangle \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | H_4' | f_e(z_e) a_p(z_e) \rangle \right. \\ & \quad \left. - \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f_e(z_e) a_p(z_e) \rangle \langle f_h(z_h) b_{q'}(z_h) | H_4' | f_h(z_h) b_q(z_h) \rangle \right\}, \end{aligned} \quad (\text{B.75})$$

et par conséquent :

$$H_{4p, q}^{p', q'} = \frac{\pi}{2\alpha^2} \left[(E_e + E_h) W_e^0 W_h^0 - W_e^1 W_h^0 - \frac{1}{2} W_e^2 W_h^0 - \sigma W_e^0 W_h^1 - \frac{\sigma}{2} W_e^0 W_h^2 \right], \quad (\text{B.76})$$

où

$$\langle \phi | \phi \rangle = \frac{\pi}{2\alpha^2},$$

Les éléments de matrice du Hamiltonien total, s'écrivent alors

$$\begin{aligned} H_{p, q}^{p', q'} &= \frac{\pi}{2\alpha^2} \left(\frac{1+\sigma}{\sigma} \right) K^2 W_e^0 W_h^0 + (1+\sigma) \frac{\pi}{4} W_e^0 W_h^0 + \frac{3\pi\gamma^2(1+\sigma)}{32\alpha^4} W_e^0 W_h^0 \\ &+ \frac{\pi}{2\alpha^2} \left\{ (E_e + E_h) W_e^0 W_h^0 - \frac{\sigma}{2} W_e^0 W_h^2 - W_e^1 W_h^0 - \frac{1}{2} W_e^2 W_h^0 - \sigma W_e^0 W_h^1 \right\} \\ &+ \frac{e^2\pi}{2\epsilon\alpha^2} Z_{1h}. \end{aligned} \quad (\text{B.77})$$

Définition des intégrales simples

$$\begin{aligned} W_e^0(p, p') &= \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f_e(z_e) a_p(z_e) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} B_e^2 \exp \left[2\sqrt{2(V_w^e - E_e)} z_e - 2\alpha_e z_e^2 \right] z_e^{p+p'} dz_e + \\ &\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} A_e^2 \cos^2 \left(\sqrt{2E_e} z_e \right) \exp \left(-2\alpha_e z_e^2 \right) z_e^{p+p'} dz_e + \\ &\int_{\frac{L}{2}}^{+\infty} B_e^2 \exp \left[-2\sqrt{2(V_w^e - E_e)} z_e - 2\alpha_e z_e^2 \right] z_e^{p+p'} dz_e. \end{aligned} \quad (\text{B.78})$$

Suivant la parité de $p+p'$ nous pouvons transformer l'expression de W_e^0 sous la forme :

$$W_e^0(p, p') = \left[1 + (-1)^{p+p'} \right] [T_e + R_e], \quad (\text{B.79})$$

où

$$\begin{aligned} T_e &= \int_{\frac{L}{2}}^{+\infty} B_e^2 \exp \left[-2\sqrt{2(V_w^e - E_e)} z_e - 2\alpha_e z_e^2 \right] z_e^{p+p'} dz_e \\ R_e &= \int_0^{\frac{L}{2}} A_e^2 \cos^2 \left(\sqrt{2E_e} z_e \right) \exp \left(-2\alpha_e z_e^2 \right) z_e^{p+p'} dz_e. \end{aligned} \quad (\text{B.80})$$

D'autre part :

$$W_h^0(q, q') = \langle f_h(z_h) b_{q'}(z_h) | f_h(z_h) b_q(z_h) \rangle, \quad (\text{B.81})$$

que nous pouvons écrire sous la forme :

$$W_h^0(q, q') = \left[1 + (-1)^{q+q'} \right] [T_h + R_h], \quad (\text{B.82})$$

avec :

$$T_h = \int_{\frac{L}{2}}^{+\infty} B_h^2 \exp \left[-2\sqrt{\frac{2}{\sigma}} (V_w^h - E_h) z_h - 2\alpha_h z_h^2 \right] z_h^{q+q'} dz_h \quad (\text{B.83})$$

$$R_h = \int_0^{\frac{L}{2}} A_h^2 \cos^2 \left(\sqrt{\frac{2}{\sigma}} E_h z_h \right) \exp \left(-2\alpha_h z_h^2 \right) z_h^{q+q'} dz_h$$

et

$$f_e(z_e) = \begin{cases} A_e \cos(\alpha_e z_e) & \text{si } |z_e| \leq \frac{L}{2} \\ B_e \exp(-\beta_e |z_e|) & \text{si } |z_e| > \frac{L}{2} \end{cases}$$

$$f_h(z_h) = \begin{cases} A_h \cos(\alpha_h z_h) & \text{si } |z_h| \leq \frac{L}{2} \\ B_h \exp(-\beta_h |z_h|) & \text{si } |z_h| > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (\text{B.84})$$

Nou définissons $W_e^1(p, p')$ et $W_h^1(q, q')$ par :

$$W_e^1(p, p') = \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f_e'(z_e) a_p'(z_e) \rangle \quad (\text{B.85})$$

$$W_h^1(q, q') = \langle f_h(z_h) b_{q'}(z_h) | f_h'(z_h) b_q'(z_h) \rangle.$$

Or, les dérivées premières des fonctions $f_e(z_e)$ et $f_h(z_h)$ sont données par

$$f_e'(z_e) = \begin{cases} B_e \sqrt{2(V_w^e - E_e)} \exp(\sqrt{2(V_w^e - E_e)} z_e) & \text{si } z_e < -\frac{L}{2} \\ -A_e \sqrt{2E_e} \sin(\sqrt{2E_e} z_e) & \text{si } |z_e| \leq \frac{L}{2} \\ -B_e \sqrt{2(V_w^e - E_e)} \exp(-\sqrt{2(V_w^e - E_e)} z_e) & \text{si } z_e > \frac{L}{2} \end{cases}$$

$$f_h'(z_h) = \begin{cases} B_h \sqrt{\frac{2}{\sigma}(V_w^h - E_h)} \exp\left(\sqrt{\frac{2}{\sigma}(V_w^h - E_h)} z_h\right) & \text{si } z_h < -\frac{L}{2} \\ -A_h \sqrt{2E_h} \sin\left(\sqrt{\frac{2}{\sigma}} E_h z_h\right) & \text{si } |z_h| \leq \frac{L}{2} \\ -B_h \sqrt{\frac{2}{\sigma}(V_w^h - E_h)} \exp\left(-\sqrt{\frac{2}{\sigma}(V_w^h - E_h)} z_h\right) & \text{si } z_h > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (\text{B.86})$$

D'autre part, nous avons :

$$a_p(z_e) = z_e^p \exp(-\alpha_e z_e^2) \text{ et } b_q(z_h) = z_h^q \exp(-\alpha_h z_h^2), \quad (\text{B.87})$$

d'où :

$$a_p'(z_e) = \left(-2\alpha_e z_e + \frac{p}{z_e} \right) a_p(z_e)$$

$$b_q'(z_h) = \left(-2\alpha_h z_h + \frac{q}{z_h} \right) b_q(z_h), \quad (\text{B.88})$$

et par suite nous obtenons :

$$\begin{aligned} W_e^1(p, p') &= -\left(1 + (-1)^{p+p'}\right) \left(B_e^2 \sqrt{2(V_w^e - E_e)} I_e + A_e^2 \sqrt{2E_e} J_e\right) \\ W_h^1(q, q') &= -\left(1 + (-1)^{q+q'}\right) \left(B_h^2 \sqrt{\frac{2}{\sigma}(V_w^h - E_h)} I_h + A_h^2 \sqrt{\frac{2}{\sigma} E_h} J_h\right), \end{aligned} \quad (\text{B.89})$$

où

$$\begin{aligned} I_e &= \int_{\frac{L}{2}}^{+\infty} \exp\left(-2\sqrt{2(V_w^e - E_e)} z_e\right) a_{p'}(z_e) a_p'(z_e) dz_e \\ I_h &= \int_{\frac{L}{2}}^{+\infty} \exp\left(-2\sqrt{\frac{2}{\sigma}(V_w^h - E_h)} z_h\right) b_{q'}(z_h) b_q'(z_h) dz_h \\ J_e &= \int_0^{\frac{L}{2}} \cos\left(\sqrt{2E_e} z_e\right) \sin\left(\sqrt{2E_e} z_e\right) a_{p'}(z_e) a_p'(z_e) dz_e \\ J_h &= \int_0^{\frac{L}{2}} \cos\left(\sqrt{\frac{2}{\sigma} E_h} z_h\right) \sin\left(\sqrt{\frac{2}{\sigma} E_h} z_h\right) b_{q'}(z_h) b_q'(z_h) dz_h. \end{aligned} \quad (\text{B.90})$$

De même nous définissons :

$$\begin{aligned} W_e^2(p, p') &= \langle f_e(z_e) a_{p'}(z_e) | f_e(z_e) a_p''(z_e) \rangle \\ W_h^2(q, q') &= \langle f_h(z_h) b_{q'}(z_h) | f_h(z_h) b_q''(z_h) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.91})$$

Or,

$$\begin{aligned} a_p''(z_e) &= \left(4\alpha_e z_e^2 - 2\alpha_e(2p+1) + \frac{p(p-1)}{z_e^2}\right) a_p(z_e) \\ b_q''(z_h) &= \left(4\alpha_h z_h^2 - 2\alpha_h(2q+1) + \frac{q(q-1)}{z_h^2}\right) b_q(z_h), \end{aligned} \quad (\text{B.92})$$

et par conséquent nous obtenons

$$\begin{aligned} W_e^2(p, p') &= \left(1 + (-1)^{p+p'}\right) (Q_1 + Q_2) \\ W_h^2(q, q') &= \left(1 + (-1)^{q+q'}\right) (Q_3 + Q_4), \end{aligned} \quad (\text{B.93})$$

où

$$\begin{aligned} Q_1 &= \int_{\frac{L}{2}}^{+\infty} B_e^2 \exp\left(-2\sqrt{2(V_w^e - E_e)} z_e\right) a_{p'}(z_e) a_p''(z_e) dz_e \\ Q_2 &= \int_0^{\frac{L}{2}} A_e^2 \cos^2\left(\sqrt{2E_e} z_e\right) a_{p'}(z_e) a_p''(z_e) dz_e \\ Q_3 &= \int_{\frac{L}{2}}^{+\infty} B_h^2 \exp\left[-2\sqrt{\frac{2}{\sigma}(V_w^h - E_h)} z_h\right] b_{q'}(z_h) b_q''(z_h) dz_h \\ Q_4 &= \int_0^{\frac{L}{2}} A_h^2 \cos^2\left(\sqrt{\frac{2}{\sigma} E_h} z_h\right) b_{q'}(z_h) b_q''(z_h) dz_h. \end{aligned} \quad (\text{B.94})$$

Définition des intégrales doubles

Vue la symétrie du problème nous pouvons se ramener aux calculs des quatres intégrales de la région pour laquelle nous avons $z_e \geq 0$ et $z_h \geq 0$. Nous obtenons alors :

$$Z_{1h} = \left\langle f_e(z_e) f_h(z_h) a_{p'}(z_e) b_{q'}(z_h) \middle| - \frac{2\alpha}{1 + 2\alpha |z_e - z_h|} \right. \\ \left. | f_e(z_e) f_h(z_h) a_p(z_e) b_q(z_h) \right\rangle, \quad (\text{B.95})$$

que nous pouvons écrire sous la forme

$$Z_{1h} = -T_e Q_5 - T_e Q_6 - R_e Q_5 - R_e Q_6, \quad (\text{B.96})$$

où

$$Q_5 = \int_{\frac{L}{2}}^{+\infty} B_h^2 \exp \left[-2\sqrt{\frac{2}{\sigma}} (V_w^h - E_h) z_h - 2\alpha_h z_h^2 \right] z_h^{q+q'} Q dz_h \\ Q_6 = \int_0^{\frac{L}{2}} A_h^2 \cos^2 \left(\sqrt{\frac{2}{\sigma}} E_h z_h \right) \exp \left(-2\alpha_h z_h^2 \right) z_h^{q+q'} Q dz_h. \quad (\text{B.97})$$

les expressions de T_e et R_e ont été définies précédemment.

$$Q = \left(1 + (-1)^{p+p'+q+q'} \right) \left[\frac{1}{b + |z_e - z_h|} + \frac{(-1)^{p+p'}}{b + |z_e + z_h|} \right]. \quad (\text{B.98})$$

Appendice C

CALCUL DES TERMES DU POTENTIEL DU PUIITS ET DU POTENTIEL COULOMBIEN

C.1 Calcul du potentiel du puits

$$U_{\lambda_1\lambda_2} = \int_{\Omega} d^3\mathbf{r} u^*(\mathbf{r}) g_{\lambda_1}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) u(\mathbf{r}) g_{\lambda_2}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.1})$$

Nous admettons que les variations de la partie périodique $u(\mathbf{r})$ sont rapides comparées à celles des fonctions $g_{\lambda}(\mathbf{r})$, du fait que le champ magnétique est uniforme et suffisamment faible. D'autre part, nous supposons que $U(\mathbf{r})$ varie peu sur une cellule élémentaire de volume Ω_0 . Nous pouvons alors dans un premier temps, remplacer les intégrations sur tout le volume Ω par une somme d'intégrations sur les cellules élémentaires, pour nous ramener par un changement de coordonnées à une intégration sur la cellule élémentaire contenant l'origine des coordonnées. Si nous posons :

$$\mathbf{r} = \mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m, \quad (\text{C.2})$$

nous pourrions écrire alors :

$$U_{\lambda_1\lambda_2} = \sum_m \int_{\Omega_{0m}} d^3\boldsymbol{\rho}_m u^*(\mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m) g_{\lambda_1}^*(\mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m) U(\mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m) u(\mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m) g_{\lambda_2}(\mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m). \quad (\text{C.3})$$

où \mathbf{R}_m et $\boldsymbol{\rho}_m$ désignent, respectivement, la position de la cellule m par rapport à une origine fixe et le vecteur position de la particule dans un repère lié à la m -ième cellule unité. Compte tenu de la variation lente des fonctions $g_{\lambda}(\mathbf{r})$ et $U(\mathbf{r})$ à l'intérieur d'une cellule élémentaire, nous pouvons séparer la relation précédente en produit de

deux contributions dont l'une porte sur une cellule élémentaire et l'autre sur tout le cristal. Pour cela, nous effectuons un développement limité au voisinage de \mathbf{R}_m des deux fonctions $g_\lambda(\mathbf{r})$ et $U(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} g_\lambda(\mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m) &= g_\lambda(\mathbf{R}_m) + \boldsymbol{\rho}_m \cdot \left[\nabla_{\boldsymbol{\rho}_m} g_\lambda(\mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m) \right]_{\boldsymbol{\rho}_m=0} + \dots \\ U(\mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m) &= U(\mathbf{R}_m) + \boldsymbol{\rho}_m \cdot \left[\nabla_{\boldsymbol{\rho}_m} U(\mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m) \right]_{\boldsymbol{\rho}_m=0} + \dots \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

En nous limitons au premier ordre du développement, nous obtenons :

$$\begin{aligned} U_{\lambda_1 \lambda_2} &= \sum_m g_{\lambda_1}^*(\mathbf{R}_m) U(\mathbf{R}_m) g_{\lambda_2}(\mathbf{R}_m) \\ &\quad \int_{\Omega_{0m}} d^3 \boldsymbol{\rho}_m u^*(\mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m) u(\mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m). \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

Or, du fait de la périodicité de la fonction $u(\mathbf{r})$ nous avons :

$$u(\mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m) = u(\boldsymbol{\rho}_m). \quad (\text{C.6})$$

D'autre part, la condition d'orthonormalisation conduit à :

$$\int_{\Omega_0} |u(\mathbf{r})|^2 d^3 \mathbf{r} = \frac{1}{N}, \quad (\text{C.7})$$

d'où :

$$U_{\lambda_1 \lambda_2} = \frac{1}{N} \sum_m g_{\lambda_1}^*(\mathbf{R}_m) U(\mathbf{R}_m) g_{\lambda_2}(\mathbf{R}_m). \quad (\text{C.8})$$

En remplaçant la sommation discrète sur les cellules élémentaires par une intégration sur tout le volume Ω nous aboutissons à :

$$U_{\lambda_1 \lambda_2} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_0} d^3 \mathbf{r} g_{\lambda_1}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) g_{\lambda_2}(\mathbf{r}). \quad (\text{C.9})$$

C.2 Calcul de l'interaction coulombienne

$$\begin{aligned} W \left(\begin{smallmatrix} c & v \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) &= \int \int d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} g_{h\lambda_3}^*(\mathbf{r}') g_{e\lambda_4}(\mathbf{r}) \\ &\quad \times |c(\mathbf{r})|^2 |v(\mathbf{r}')|^2 \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Les positions \mathbf{r} et \mathbf{r}' peuvent être exprimées en fonction des nouvelles coordonnées \mathbf{R}_m et $\boldsymbol{\rho}_m$ qui désignent respectivement la position de la cellule m par rapport à une origine fixe et le vecteur position de la particule dans un repère lié à la m -ième cellule unité.

$$\mathbf{r} = \mathbf{R}_m + \boldsymbol{\rho}_m \text{ et } \mathbf{r}' = \mathbf{R}'_m + \boldsymbol{\rho}'_m. \quad (\text{C.11})$$

En remplaçant les intégrales par des sommations d'intégrations sur toutes les cellules élémentaires du cristal, nous obtenons :

$$\begin{aligned}
W \left(\begin{smallmatrix} c & v & v & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & | & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) &= \sum_m \sum_{m'} \int_{\Omega_{0m}} \int_{\Omega_{0m'}} d^3 \rho_m d^3 \rho_{m'} g_{e\lambda_1}^* (\mathbf{R}_m + \rho_m) g_{h\lambda_2} (\mathbf{R}'_m + \rho'_{m'}) \\
&\times \frac{e^2}{|\mathbf{R}_m + \rho_m - \mathbf{R}'_m - \rho'_{m'}|} g_{h\lambda_3}^* (\mathbf{R}'_m + \rho'_{m'}) g_{e\lambda_4} (\mathbf{R}_m + \rho_m) \\
&\times |c(\mathbf{R}_m + \rho_m)|^2 |v(\mathbf{R}'_m + \rho'_{m'})|^2. \tag{C.12}
\end{aligned}$$

Nous séparons cette relation en produit de deux contributions ; car à l'intérieur d'une cellule élémentaire les parties périodiques $v(\mathbf{r})$ et $c(\mathbf{r})$ sont à variations rapides par rapport à $g_\lambda(\mathbf{r})$. De plus nous supposons que le potentiel V_c a une variation lente à l'intérieur d'une cellule élémentaire. Pour cela, nous allons effectuer un développement limité au voisinage de \mathbf{R}_m des deux fonctions $g_\lambda(\mathbf{r})$ et V_c :

$$g_\lambda(\mathbf{R}_m + \rho_m) \approx g_\lambda(\mathbf{R}_m) + \rho_m \cdot \left[\nabla_{\rho_m} g_\lambda(\mathbf{R}_m + \rho_m) \right]_{\rho_m=0} + \dots \tag{C.13}$$

$$\frac{1}{|\mathbf{R} + \rho|} \approx \frac{1}{|\mathbf{R}|} + \rho \cdot \left[\nabla_\rho \frac{1}{|\mathbf{R} + \rho|} \right]_{\rho=0} + \dots \tag{C.14}$$

où

$$\rho = \rho_m - \rho_{m'} \text{ et } \mathbf{R} = \mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'} \tag{C.15}$$

Si nous nous limitons au première ordre du développement, l'expression peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned}
W \left(\begin{smallmatrix} c & v & v & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & | & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) &= \sum_{m,m'} g_{e\lambda_1}^* (\mathbf{R}_m) g_{h\lambda_2} (\mathbf{R}_{m'}) \frac{e^2}{|\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'}|} g_{h\lambda_3}^* (\mathbf{R}_{m'}) g_{e\lambda_4} (\mathbf{R}_m) \\
&\times \int_{\Omega_{0m}} \int_{\Omega_{0m'}} d^3 \rho_m d^3 \rho_{m'} |c(\mathbf{R}_m + \rho_m)|^2 |v(\mathbf{R}_{m'} + \rho_{m'})|^2 \tag{C.16}
\end{aligned}$$

Or,

$$c(\mathbf{R}_m + \rho_m) = c(\rho_m) \text{ et } v(\mathbf{R}_{m'} + \rho_{m'}) = v(\rho_{m'}), \tag{C.17}$$

car $v(\mathbf{r})$ et $c(\mathbf{r})$ sont périodiques. La condition de normalisation de ces deux fonctions s'écrit :

$$\int_{\Omega_0} |c(\mathbf{r})|^2 d^3 \mathbf{r} = \frac{1}{N} \text{ et } \int_{\Omega_0} |v(\mathbf{r})|^2 d^3 \mathbf{r} = \frac{1}{N}, \tag{C.18}$$

où N est le nombre de cellules élémentaires. Par conséquent $W \left(\begin{smallmatrix} c & v & v & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & | & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right)$ devient :

$$W \left(\begin{smallmatrix} c & v & v & c \\ \lambda_1 \lambda_2 & | & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) = \frac{1}{N^2} \sum_{m,m'} g_{e\lambda_1}^* (\mathbf{R}_m) g_{h\lambda_2} (\mathbf{R}_{m'}) \frac{e^2}{|\mathbf{R}_m - \mathbf{R}_{m'}|} g_{h\lambda_3}^* (\mathbf{R}_{m'}) g_{e\lambda_4} (\mathbf{R}_m). \tag{C.19}$$

Enfin nous transformons la sommation discrète en intégrale double en remarquant que :

$$\frac{1}{N} \sum_m = \frac{1}{\Omega} \int d^3 \mathbf{r}, \quad (\text{C.20})$$

d'où :

$$W \left(\begin{smallmatrix} c & v \\ \lambda_1 \lambda_2 & \lambda_3 \lambda_4 \end{smallmatrix} \right) = \frac{1}{\Omega^2} \int \int d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} g_{h\lambda_3}^*(\mathbf{r}') g_{e\lambda_4}(\mathbf{r}), \quad (\text{C.21})$$

avec Ω est le volume total du cristal, $\Omega = N\Omega_0$ et Ω_0 est le volume d'une cellule élémentaire. Montrons que si $\varepsilon_{\lambda c}$ et $\varepsilon_{\lambda v}$ sont périodiques, alors nous avons pour les électrons :

$$\hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_e + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_e \right) \varphi_{\lambda e}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\lambda c} \varphi_{\lambda e}(\mathbf{r}). \quad (\text{C.22})$$

et pour les trous :

$$\hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_h - \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_h \right) \varphi_{\lambda h}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\lambda v} \varphi_{\lambda h}(\mathbf{r}). \quad (\text{C.23})$$

Dans le cas des électrons, $\varepsilon_{\lambda c} = \varepsilon_{k,N,c}$, nous remplaçons \mathbf{k} par $-i\nabla$ et N par $\frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}$ où e est la charge de l'électron. Comme $\varepsilon_{\lambda c}$ est périodique, alors nous pouvons la développer en série de Fourier, soit :

$$\varepsilon_{\lambda c} = \sum_m E_m \exp \left[i \left(\mathbf{k} + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) \cdot \mathbf{R}_m \right] = \sum_m E_m \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m) \exp \left(i \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \cdot \mathbf{R}_m \right), \quad (\text{C.24})$$

ce qui nous ramène à :

$$\hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) = \sum_m E_m \exp(\nabla \cdot \mathbf{R}_m) \exp \left(i \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \cdot \mathbf{R}_m \right). \quad (\text{C.25})$$

Par conséquent, nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) \varphi_{\lambda e}(\mathbf{r}) &= \sum_m E_m \exp(\nabla \cdot \mathbf{R}_m) \exp \left(i \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \cdot \mathbf{R}_m \right) \varphi_{\lambda e}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_m E_m \left(1 + \nabla \cdot \mathbf{R}_m + \frac{1}{2} (\nabla \cdot \mathbf{R}_m)^2 + \dots \right) \varphi_{\lambda e}(\mathbf{r}) \\ &\quad \times \exp \left(i \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \cdot \mathbf{R}_m \right) \\ &= \sum_m E_m \varphi_{\lambda e}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m) \exp \left(i \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \cdot \mathbf{R}_m \right). \end{aligned} \quad (\text{C.26})$$

Comme les fonctions $\varphi_{\lambda e}(\mathbf{r})$ sont périodiques, nous pouvons appliquer le théorème de Bloch

$$\varphi_{\lambda e}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_m) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m) \varphi_{\lambda e}(\mathbf{r}), \quad (\text{C.27})$$

dans ces conditions, nous avons

$$\begin{aligned}
\hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) \varphi_{\lambda e}(\mathbf{r}) &= \sum_m E_m \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m) \varphi_{\lambda e}(\mathbf{r}) \exp\left(i \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \cdot \mathbf{R}_m\right) \\
&= \sum_m E_m \exp\left[i \left(\mathbf{k} + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) \cdot \mathbf{R}_m\right] \varphi_{\lambda e}(\mathbf{r}) \\
&= \varepsilon_{\lambda c} \varphi_{\lambda e}(\mathbf{r}).
\end{aligned} \tag{C.28}$$

En faisant les mêmes démarches que pour l'électron nous aboutissons une relation sémi-laire pour le trou.

Nous avons

$$\begin{aligned}
&\sum_{\lambda_1} c_{\lambda_1} \left[\sum_{\lambda\lambda'} a_{\lambda}^+ a_{\lambda'} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_0} g_{e\lambda}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) g_{e\lambda'}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right] a_{\lambda_1}^+ |\Phi_0\rangle \\
&= \sum_{\lambda_1} c_{\lambda_1} \sum_{\lambda\lambda'} a_{\lambda}^+ a_{\lambda'} a_{\lambda_1}^+ \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_0} g_{e\lambda}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) g_{e\lambda'}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} |\Phi_0\rangle.
\end{aligned} \tag{C.29}$$

Or,

$$\sum_{\lambda_1} c_{\lambda_1} \sum_{\lambda\lambda'} a_{\lambda}^+ a_{\lambda'} a_{\lambda_1}^+ |\Phi_0\rangle = \sum_{\lambda_1} c_{\lambda_1} \sum_{\lambda\lambda'} a_{\lambda}^+ [\delta_{\lambda'\lambda_1} - a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda'}] |\Phi_0\rangle \tag{C.30}$$

et du fait que nous avons

$$a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda'} |\Phi_0\rangle = 0, \tag{C.31}$$

nous pouvons écrire alors :

$$\sum_{\lambda_1} c_{\lambda_1} \sum_{\lambda\lambda'} a_{\lambda}^+ a_{\lambda'} a_{\lambda_1}^+ |\Phi_0\rangle = \sum_{\lambda_1} c_{\lambda_1} \sum_{\lambda\lambda'} a_{\lambda}^+ \delta_{\lambda'\lambda_1} |\Phi_0\rangle. \tag{C.32}$$

Si nous multiplions à gauche par $\langle \Phi_0 | a_{\lambda_1}$ nous aurons :

$$\begin{aligned}
\sum_{\lambda_1} c_{\lambda_1} \sum_{\lambda\lambda'} \langle \Phi_0 | a_{\lambda_1} a_{\lambda'}^+ \delta_{\lambda'\lambda_1} |\Phi_0\rangle &= \sum_{\lambda_1} c_{\lambda_1} \sum_{\lambda\lambda'} \langle \Phi_0 | [\delta_{\lambda_1\lambda} - a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda'}] \delta_{\lambda'\lambda_1} |\Phi_0\rangle \\
&= \sum_{\lambda_1} c_{\lambda_1} \sum_{\lambda\lambda'} \langle \Phi_0 | \delta_{\lambda_1\lambda} \delta_{\lambda'\lambda_1} |\Phi_0\rangle \\
&= \sum_{\lambda'} c_{\lambda'} \langle \Phi_0 | \Phi_0\rangle.
\end{aligned} \tag{C.33}$$

Nous avons utilisé la relation suivante :

$$\sum_{\alpha} \delta_{\alpha\alpha'} = \begin{cases} 1 & \text{si } \alpha = \alpha' \\ 0 & \text{si } \alpha \neq \alpha' \end{cases}. \tag{C.34}$$

Par conséquent, nous obtenons

$$\begin{aligned}
& \langle \Phi_0 | a_{\lambda'_1} \sum_{\lambda_1} c_{\lambda_1} \left[\sum_{\lambda\lambda'} a_{\lambda}^+ a_{\lambda'} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_0} g_{e\lambda}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) g_{e\lambda'}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right] a_{\lambda_1}^+ | \Phi_0 \rangle \\
&= \sum_{\lambda'} c_{\lambda'} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_0} g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) g_{e\lambda'}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\
&= \sum_{\lambda'} c_{\lambda'} U_{\lambda_1\lambda'}^e.
\end{aligned} \tag{C.35}$$

En multipliant par $\frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1)$ et en sommant sur λ_1 nous aboutissons à :

$$\begin{aligned}
& \sum_{\lambda_1} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) \sum_{\lambda'} c_{\lambda'} U_{\lambda_1\lambda'}^e \\
&= \sum_{\lambda_1} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) \sum_{\lambda'} c_{\lambda'} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_0} g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) g_{e\lambda'}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\
&= \int_{\Omega_0} \sum_{\lambda_1} \left[\frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) \right] U(\mathbf{r}) \sum_{\lambda'} c_{\lambda'} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda'}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}.
\end{aligned} \tag{C.36}$$

Or,

$$\sum_{\lambda_1} \left[\frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) \right] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1). \tag{C.37}$$

En faisant l'intégration sur \mathbf{r} nous avons :

$$\begin{aligned}
\sum_{\lambda_1} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) \sum_{\lambda'} c_{\lambda'} U_{\lambda_1\lambda'}^e &= U(\mathbf{r}_1) \sum_{\lambda'} c_{\lambda'} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda'}(\mathbf{r}_1) \\
&= U(\mathbf{r}_1) \Psi_e(\mathbf{r}_1).
\end{aligned} \tag{C.38}$$

D'autre part nous avons :

$$\begin{aligned}
& \langle \Phi_0 | a_{\lambda'_1} \sum_{\lambda_1} \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) c_{\lambda_1} \sum_{\lambda} a_{\lambda}^+ a_{\lambda} a_{\lambda_1}^+ | \Phi_0 \rangle \\
&= \sum_{\lambda_1} c_{\lambda_1} \sum_{\lambda} \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) \langle \Phi_0 | a_{\lambda'_1} a_{\lambda}^+ a_{\lambda} a_{\lambda_1}^+ | \Phi_0 \rangle.
\end{aligned} \tag{C.39}$$

En utilisant les relations de commutation des opérateurs de création d'électrons nous pouvons écrire

$$\begin{aligned}
\langle \Phi_0 | a_{\lambda'_1} a_{\lambda}^+ a_{\lambda} a_{\lambda_1}^+ | \Phi_0 \rangle &= \langle \Phi_0 | a_{\lambda'_1} a_{\lambda}^+ [\delta_{\lambda\lambda'_1} - a_{\lambda_1}^+ a_{\lambda}] | \Phi_0 \rangle \\
&= \langle \Phi_0 | a_{\lambda'_1} a_{\lambda}^+ \delta_{\lambda\lambda'_1} | \Phi_0 \rangle \\
&= \langle \Phi_0 | [\delta_{\lambda_1\lambda} - a_{\lambda}^+ a_{\lambda'_1}] \delta_{\lambda\lambda'_1} | \Phi_0 \rangle \\
&= \delta_{\lambda_1\lambda} \delta_{\lambda\lambda'_1} \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle,
\end{aligned} \tag{C.40}$$

par suite, nous avons :

$$\begin{aligned}
& \langle \Phi_0 | a_{\lambda'_1} \sum_{\lambda_1} \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) c_{\lambda_1} \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} a_{\lambda'_1}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle \\
&= \sum_{\lambda_1} c_{\lambda_1} \sum_{\lambda} \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) \delta_{\lambda_1 \lambda} \delta_{\lambda \lambda'_1} \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle \\
&= c_{\lambda_1} \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right). \tag{C.41}
\end{aligned}$$

En remarquant que :

$$c_{\lambda_1} \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) = \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) c_{\lambda_1}, \tag{C.42}$$

nous obtenons :

$$\begin{aligned}
\sum_{\lambda_1} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) c_{\lambda_1} &= \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) \sum_{\lambda_1} c_{\lambda_1} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) \\
&= \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A} \right) \Psi_e(\mathbf{r}_1). \tag{C.43}
\end{aligned}$$

Cas relatif à deux particules :

$$\begin{aligned}
& \langle \Phi_0 | d_{\lambda_2} a_{\lambda_1} \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} c_{\lambda'_1 \lambda'_2} \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_e + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_e \right) a_{\lambda'_1}^{\dagger} d_{\lambda'_2}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle \\
&= \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} c_{\lambda'_1 \lambda'_2} \sum_{\lambda} \langle \Phi_0 | d_{\lambda_2} a_{\lambda_1} a_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda'_2}^{\dagger} a_{\lambda} a_{\lambda'_1}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_e + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_e \right). \tag{C.44}
\end{aligned}$$

Or,

$$\langle \Phi_0 | d_{\lambda_2} a_{\lambda_1} a_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda'_2}^{\dagger} a_{\lambda} a_{\lambda'_1}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle = \langle \Phi_0 | \delta_{\lambda \lambda_1} \delta_{\lambda \lambda'_1} \delta_{\lambda_2 \lambda'_2} | \Phi_0 \rangle. \tag{C.45}$$

Par conséquent, nous avons

$$\begin{aligned}
& \langle \Phi_0 | d_{\lambda_2} a_{\lambda_1} \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} c_{\lambda'_1 \lambda'_2} \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_e + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_e \right) a_{\lambda'_1}^{\dagger} d_{\lambda'_2}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle \\
&= \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} c_{\lambda'_1 \lambda'_2} \sum_{\lambda} \langle \Phi_0 | \delta_{\lambda \lambda_1} \delta_{\lambda \lambda'_1} \delta_{\lambda_2 \lambda'_2} | \Phi_0 \rangle \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_e + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_e \right). \tag{C.46}
\end{aligned}$$

D'autre part nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}
& \langle \Phi_0 | d_{\lambda_2} a_{\lambda_1} \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} c_{\lambda'_1 \lambda'_2} \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_e + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_e \right) a_{\lambda'_1}^{\dagger} d_{\lambda'_2}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle \\
&= c_{\lambda_1 \lambda_2} \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_e + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_e \right) \\
&= \hat{\varepsilon} \left(-i\nabla_e + \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}_e \right) c_{\lambda_1 \lambda_2}, \tag{C.47}
\end{aligned}$$

et nous obtenons alors :

$$\begin{aligned}
& \langle \Phi_0 | d_{\lambda_2} a_{\lambda_1} \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} c_{\lambda'_1 \lambda'_2} \sum_{\lambda} d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda} \hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_h - \frac{e}{c \hbar} \mathbf{A}_h \right) a_{\lambda_1}^{\dagger} d_{\lambda_2}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle \\
&= \hat{\varepsilon} \left(-i \nabla_h - \frac{e}{c \hbar} \mathbf{A}_h \right) c_{\lambda_1 \lambda_2}.
\end{aligned} \tag{C.48}$$

Or, nous avons :

$$\begin{aligned}
& \langle \Phi_0 | d_{\lambda_2} a_{\lambda_1} \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} c_{\lambda'_1 \lambda'_2} \sum_{\lambda \lambda'} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'} U_{\lambda \lambda'}^e a_{\lambda_1}^{\dagger} d_{\lambda_2}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle \\
&= \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} c_{\lambda'_1 \lambda'_2} \sum_{\lambda \lambda'} \langle \Phi_0 | d_{\lambda_2} a_{\lambda_1} a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda'} a_{\lambda_1}^{\dagger} d_{\lambda_2}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle U_{\lambda \lambda'}^e \\
&= \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} c_{\lambda'_1 \lambda'_2} \sum_{\lambda \lambda'} \langle \Phi_0 | \delta_{\lambda \lambda_1} \delta_{\lambda'_1 \lambda'} \delta_{\lambda_2 \lambda'_2} | \Phi_0 \rangle U_{\lambda \lambda'}^e \\
&= \sum_{\lambda'} c_{\lambda' \lambda_2} U_{\lambda_1 \lambda'}^e.
\end{aligned} \tag{C.49}$$

Finalement, nous aboutissons à :

$$\langle \Phi_0 | d_{\lambda_2} a_{\lambda_1} \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} c_{\lambda'_1 \lambda'_2} \sum_{\lambda \lambda'} d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda'} U_{\lambda \lambda'}^e a_{\lambda_1}^{\dagger} d_{\lambda_2}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle = \sum_{\lambda'} c_{\lambda_1 \lambda'} U_{\lambda' \lambda_2}^h. \tag{C.50}$$

Pour le potentiel coulombien nous avons :

$$\begin{aligned}
& \langle \Phi_0 | d_{\lambda_2} a_{\lambda_1} \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} c_{\lambda'_1 \lambda'_2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \sum_{\lambda_3 \lambda_4} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_4} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda_2} \tilde{W} a_{\lambda_1}^{\dagger} d_{\lambda_2}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle \\
&= \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} c_{\lambda'_1 \lambda'_2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \sum_{\lambda_3 \lambda_4} \langle \Phi_0 | d_{\lambda_2} a_{\lambda_1} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_4} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda_2} a_{\lambda_1}^{\dagger} d_{\lambda_2}^{\dagger} | \Phi_0 \rangle \tilde{W} \\
&= \sum_{\lambda'_1 \lambda'_2} c_{\lambda'_1 \lambda'_2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \sum_{\lambda_3 \lambda_4} \delta_{\lambda_2' \lambda_2} \delta_{\lambda_1' \lambda_4} \delta_{\lambda_1 \lambda_1} \delta_{\lambda_2 \lambda_3} \langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle \tilde{W} \\
&= \sum_{\lambda_3 \lambda_4} c_{\lambda_3 \lambda_4} W_1,
\end{aligned} \tag{C.51}$$

où

$$\begin{aligned}
\tilde{W} &= \frac{1}{\Omega^2} \int \int d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' g_{e \lambda_1}^*(\mathbf{r}) g_{h \lambda_2}(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} g_{h \lambda_3}^*(\mathbf{r}') g_{e \lambda_4}(\mathbf{r}) \\
W_1 &= \frac{1}{\Omega^2} \int \int d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}' g_{e \lambda_1}^*(\mathbf{r}) g_{h \lambda_4}(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} g_{h \lambda_2}^*(\mathbf{r}') g_{e \lambda_3}(\mathbf{r}).
\end{aligned} \tag{C.52}$$

En multipliant l'équation (C.51) par $\frac{1}{\Omega} g_{e \lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{h \lambda_2}(\mathbf{r}_2)$ et en faisant la somme sur λ_1 et λ_2 nous obtenons :

$$\begin{aligned}
& \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_2) \sum_{\lambda'} c_{\lambda' \lambda_2} U_{\lambda_1 \lambda'}^e \\
&= \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_2) \\
&\quad \times \sum_{\lambda'} c_{\lambda' \lambda_2} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_0} g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) g_{e\lambda'}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \\
&= \int_{\Omega_0} d^3 \mathbf{r} \sum_{\lambda_1} \left[\frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) \right] \\
&\quad \times U(\mathbf{r}) \sum_{\lambda_2 \lambda'} c_{\lambda' \lambda_2} g_{e\lambda'}(\mathbf{r}) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_2). \tag{C.53}
\end{aligned}$$

Comme les fonctions $g_{e\lambda_1}$ sont orthogonales, nous avons :

$$\sum_{\lambda_1} \left[\frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) \right] = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}). \tag{C.54}$$

D'où :

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_0} d^3 \mathbf{r} \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \sum_{\lambda_2 \lambda'} c_{\lambda' \lambda_2} g_{e\lambda'}(\mathbf{r}) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_2) \\
&= U(\mathbf{r}_1) \frac{1}{\Omega} \sum_{\lambda_2 \lambda'} c_{\lambda' \lambda_2} g_{e\lambda'}(\mathbf{r}_1) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_2) \\
&= U(\mathbf{r}_1) \Psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \tag{C.55}
\end{aligned}$$

De même en utilisant la relation de fermeture suivante

$$\sum_{\lambda_2} \left[\frac{1}{\Omega} g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_2) g_{h\lambda_2}^*(\mathbf{r}) \right] = \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}), \tag{C.56}$$

nous aboutissons à :

$$\sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_2) \sum_{\lambda'} c_{\lambda_1 \lambda'} U_{\lambda' \lambda_2}^h = U(\mathbf{r}_2) \Psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \tag{C.57}$$

Pour le potentiel coulombien nous obtenons :

$$\begin{aligned}
& \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_2) \sum_{\lambda_3 \lambda_4} c_{\lambda_3 \lambda_4} W_1 \\
&= \iint \left[\frac{1}{\Omega} \sum_{\lambda_1} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{e\lambda_1}^*(\mathbf{r}) \right] \sum_{\lambda_3 \lambda_4} \frac{1}{\Omega} c_{\lambda_3 \lambda_4} g_{h\lambda_4}(\mathbf{r}') V_c g_{e\lambda_3}(\mathbf{r}) \\
&\quad \left[\frac{1}{\Omega} \sum_{\lambda_2} g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_2) g_{h\lambda_2}^*(\mathbf{r}') \right] d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{r}'. \tag{C.58}
\end{aligned}$$

En intégrant sur \mathbf{r}' et \mathbf{r} , il vient que

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{1}{\Omega} g_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) g_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_2) \sum_{\lambda_3 \lambda_4} c_{\lambda_3 \lambda_4} W_1 \\
 = & \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \sum_{\lambda_3 \lambda_4} \frac{1}{\Omega} c_{\lambda_3 \lambda_4} g_{e\lambda_3}(\mathbf{r}_1) g_{h\lambda_4}(\mathbf{r}_2) \\
 = & \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \Psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \tag{C.59}
 \end{aligned}$$

Appendice D

ELEMENTS DE MATRICE DES TRIONS

Comme les fonctions χ_{lmnpqr} se séparent en une contributions suivant le plan $|i\rangle \equiv \phi_{lmn}(s, t, u) \equiv |lmn\rangle$ et en une contribution selon z $|j\rangle \equiv \theta_{pqr}(z_1, z_2, z_h) \equiv |pqr\rangle$, l'élément de matrice du Hmiltonien \mathbf{H} peut être écrit sous la forme :

$$\mathbf{H} = \mathbf{T}^{//} + \mathbf{V}^c + \mathbf{T}^z + \mathbf{V}^w + \mathbf{H}_{dia} \quad (\text{D.1})$$

où $\mathbf{T}^{//}$ correspond à la contribution dans le plan de l'opérateur énergie cinétique, \mathbf{T}^z décrit la contribution dépendant des coordonnées selon z . \mathbf{V}^c et \mathbf{V}^w sont respectivement l'interaction coulombienne et le potentiel de puits et \mathbf{H}_{dia} correspond au terme diamagnétique. La détermination des éléments de matrice peut être simplifiée en remarquant le fait que les uns d'entre eux peuvent être écrites comme le produit d'une contribution dans le plan et une contribution selon la direction z , nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} S_{\lambda\lambda'} &= S_{ii'} S_{jj'} \\ T_{\lambda\lambda'}^{//} &= T_{ii'}^{//} S_{jj'} \\ (T^z + V^w)_{\lambda\lambda'} &= (T^z + V^w)_{jj'} S_{ii'}. \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Les éléments de matrice dans le plan $T_{ii'}^{//}$ et $S_{ii'}$, avec $i \equiv (lmn)$ et $i' \equiv (l'm'n')$, peuvent être exprimés en fonction des intégrales $J_{ii'}$ définies par :

$$\begin{aligned} J_{ii'}(\lambda, \mu, \nu) &= 2\pi \int_0^\infty \exp(-ks) s^{l+l'+\lambda} ds \int_0^s \frac{u^{m+m'+\mu}}{\sqrt{s^2-u^2}} du \int_0^u \frac{t^{n+n'+\nu}}{\sqrt{u^2-t^2}} dt \\ &= \frac{2\pi (l+l'+\lambda+m+m'+\mu+n+n'+\nu)!}{k^{l+l'+\lambda+m+m'+\mu+n+n'+\nu+1}} I_{m+m'+\mu+n+n'+\nu} I_{n+n'+\nu}, \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

où

$$I_n = \int_0^1 \frac{x^n dx}{\sqrt{1-x^2}}. \quad (D.4)$$

Il est facile de vérifier que :

$$I_{2n} = \frac{(2n)! \pi}{(n!)^2 2^{2n+1}}, \quad \text{et} \quad I_{2n+1} = \frac{(n!)^2 2^{2n}}{(2n+1)!}. \quad (D.5)$$

Nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} T_{ii'}^{//} = & -\frac{k^2}{4} J_{ii'}(2, 1, 0) + \frac{k^2}{4} J_{ii'}(0, 1, 2) - (l-n)(l+n+2m+1) J_{ii'}(0, 1, 0) \\ & + k(l+m+1) J_{ii'}(1, 1, 0) - m(m+2n) J_{ii'}(2, -1, 0) \\ & + m(m+2l) J_{ii'}(0, -1, 2) - kl J_{ii'}(-1, 1, 2) + l(l-1) J_{ii'}(-2, 1, 2) \\ & - n(n-1) J_{ii'}(2, 1, -2) - km J_{ii'}(1, -1, 2) + \sigma[-2(l^2 - n^2) J_{ii'}(0, 1, 0) \\ & + k(2l+1) J_{ii'}(1, 1, 0) - \frac{k^2}{2} J_{ii'}(2, 1, 0) + \frac{k^2}{2} J_{ii'}(0, 3, 0) \\ & - 2kl J_{ii'}(-1, 3, 0) + 2l(l-1) J_{ii'}(-2, 3, 0) - 2n(n-1) J_{ii'}(0, 3, -2)] \end{aligned} \quad (D.6)$$

$$S_{ii'} = J_{ii'}(2, 1, 0) - J_{ii'}(0, 1, 2). \quad (D.7)$$

Les éléments de matrice $S_{jj'}$ et $(T^z + V^w)_{jj'}$ peuvent être exprimés en fonction des intégrales $W_e^0, W_e^1, W_e^2, W_h^0, W_h^1$, et W_h^2 définis en (B.46), soit :

$$S_{jj'} = 2 W_h^0(r', r) [W_e^0(p', p) W_e^0(q', q) + W_e^0(p', q) W_e^0(q', p)] \quad (D.8)$$

$$\begin{aligned} (T^z + V^w)_{jj'} = & 2 \left[2E_e + E_h - \frac{1}{2} \frac{W_e^2(p', p)}{W_e^0(p', p)} - \frac{W_e^1(p', p)}{W_e^0(p', p)} - \frac{1}{2} \frac{W_e^2(q', q)}{W_e^0(q', q)} - \frac{W_e^1(q', q)}{W_e^0(q', q)} \right. \\ & \left. - \frac{\sigma W_h^2(r', r)}{2 W_h^0(r', r)} - \sigma \frac{W_h^1(r', r)}{W_h^0(r', r)} \right] W_e^0(p', p) W_e^0(q', q) W_h^0(r', r) \\ & + 2 \left[2E_e + E_h - \frac{1}{2} \frac{W_e^2(p', q)}{W_e^0(p', q)} - \frac{W_e^1(p', q)}{W_e^0(p', q)} - \frac{1}{2} \frac{W_e^2(q', p)}{W_e^0(q', p)} - \frac{W_e^1(q', p)}{W_e^0(q', p)} \right. \\ & \left. - \frac{\sigma W_h^2(r', r)}{2 W_h^0(r', r)} - \sigma \frac{W_h^1(r', r)}{W_h^0(r', r)} \right] W_e^0(q', p) W_e^0(p', q) W_h^0(r', r), \end{aligned} \quad (D.9)$$

et :

$$(H_{dia})_{\lambda\lambda'} = (H_{dia})_{ii'} S_{jj'} \quad (D.10)$$

où :

$$\begin{aligned} (H_{dia})_{ii'} = & \frac{\gamma^2}{16} \{ J_{ii'}(2, 3, 0) - J_{ii'}(0, 3, 2) + \lambda(\sigma) [J_{ii'}(4, 1, 0) - J_{ii'}(0, 1, 4) + \\ & + J_{ii'}(0, 3, 2) - J_{ii'}(2, 3, 0)] \}. \end{aligned} \quad (D.11)$$

Dans le but de simplifier le temps de calcul numérique des éléments de matrice du potentiel coulombien $V_{\lambda\lambda'}^c$, nous procédons d'abord en une intégration sur les coordonnées planes ensuite sur les coordonnées z :

$$V_{\lambda\lambda'}^c \equiv V_{ij'j'}^c = \langle j' | V_{ii'}^c | j \rangle \quad (\text{D.12})$$

en utilisant l'approximation suivante :

$$V_{ii'}^c \simeq -\frac{\gamma}{\delta + |z_1 - z_h|} - \frac{\gamma}{\delta + |z_2 - z_h|} + \frac{\gamma}{\beta + |z_1 - z_2|}. \quad (\text{D.13})$$

Les coefficients β , γ et δ sont déterminés de telle sorte que les valeurs correctes des éléments de matrice du potentiel coulombien soient retrouvées lorsque les valeurs absolues des projections des distances inter-particules selon la direction z soient nulles ou infinies. Ces conditions sont satisfaites lorsque :

$$\delta = \frac{S_{ii'}}{2J_{ii'}(1, 1, 0)}, \quad \beta = \frac{S_{ii'}}{J_{ii'}(2, 0, 0) - J_{ii'}(0, 0, 2)}, \quad \gamma = S_{ii'}. \quad (\text{D.14})$$

Cette approximation a été souvent utilisée et discutée dans plusieurs études précédentes. Quand la symétrie sphérique devient cylindrique par une perturbation, dans ce cas les coordonnées dans le plan sont séparées de celles selon la direction z au niveau de la fonction d'onde. Les courbes obtenues par un potentiel exacte et en utilisant cette approximation sur le potentiel coulombien sont très proches [Stébé et al. (1987)]. Dans le cas de l'exciton, nous avons comparé les résultats obtenus en utilisant cette approximation avec ceux obtenus en utilisant le potentiel exacte en intégrant sur les variables dans le plan, par la méthode de Gauss-Laguerre à 16 points pour obtenir une précision raisonnable. Les résultats numériques montrent que les calculs exactes conduisent à une valeur absolue de l'énergies de corrélation plus grande de 5% que la valeur obtenue en utilisant l'approximation sur le potentiel, avec un temps-machine qui augmente brutalement d'un facteur 16. Dans le cas du trion, nous estimons que cette erreur serait de même ordre de grandeur, ainsi l'énergie de liaison ne serait pas très affectée par cette approximation. D'autre part, les calculs utilisant le potentiel exacte nécessiteraient des intégrales d'ordre 4 au lieu d'intégrales d'ordre 2 qui prendraient un temps-machine gigantesque.

BIBLIOGRAPHIE

- A. Ainane, *Thèse de l'Université de Metz*, (1991).
- H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- And Two-Electron Atoms*, Editions Plenum/Rosetta, New York (1977).
- D. Brinkmann, J. Kudrna, P. Gilliot, B. Hönerlage, A. Arnoult, J. Cibert, and S. Tatarenko, *Phys. Rev. B* **60**, 7969 (1995).
- F. X. Bronnold, *J. Luminescence* **87-89**, 198 (2000).
- H. Buhman, L. Mansouri, J. Wang, P. H. Beton, N. Mori, L. Eaves, M. Henini, and M. Potemski, *Phys. Rev. B* **51**, 4474 (1999).
- V. Calvo, N. Magnea, T. Taliercio, P. Lefebvre, J. Allègre, and H. Mathieu, *Phys. Rev. B* **58**, 15737 (1998).
- J.R. Chapman, N. F. Johnson, and V. N. Nicopoulos, *Phys. Rev. B* **55**, R10221 (1997).
- J.R. Chapman, N. F. Johnson, and V. N. Nicopoulos, *Phys. Rev. B* **57**, 1762 (1998).
- V. Ciulin, P. Kossacki, S. Haacke, J.-D. Ganière, B. Deveaud, A. Esser, M. Kutrowski, and T. Wojtowicz, *Phys. Rev. B* **62**, R16310 (2000).
- 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.
- J. O. Dimmock, *Semiconductors and Semimetals*, Vol. 3, edited by R. K. Williardson and A. C. Beer, Academic Press (1963).
- D. Dresselhauss, *J. Phys. Chem. Sol.* **1**, 14 (1957).
- F. Dujardin, B. Stébé and G. Munsch, *Phys. Status Solidi. B* **141**, 559 (1987).
- A. B. Dzyubenko, *Solid State Commun.* **113**, 683 (2000a).
- A. B. Dzyubenko, A. Yu. Sivachenko, H. A. Nickel, T. M. Yeo, G. Kioseoglou, B. D. McCombe, and A. Petrou, *Physica E* **6**, 156 (2000b).
- R. J. Elliot, *Phys. Rev. B* **108**, 1384 (1957).
- R. J. Elliot, *Phys. Rev. B* **124**, 340 (1961).
- A. Esser, E. Runge, R. Zimmermann, and W. Langbein, *Phys. Rev. B* **62**, 8232 (2000a).

- A. Esser, E. Runge, R. Zimmermann, and W. Langbein, *Phys. Status Solidi A* **178**, 489 (2000b).
- A. Esser, E. Runge, R. Zimmermann, and W. Langbein, *Phys. Status Solidi B* **221**, 281 (2000c).
- E. Feddi, *Thèse de Troisième Cycle*, Metz (1987).
- G. Finkelstein, H. Shtrikman, and I. Bar-Joseph, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 976 (1995).
- G. Finkelstein, H. Shtrikman, and I. Bar-Joseph, *Phys. Rev. B* **53**, R1709 (1996a).
- G. Finkelstein, H. Shtrikman, and I. Bar-Joseph, *Phys. Rev. B* **53**, 12593 (1996b).
- G. Finkelstein, V. Umansky, I. Bar-Joseph, V. Ciulin, S. Haacke, J.-D. Ganière, and B. Deveaud, *Phys. Rev. B* **58**, 12637 (1998).
- J. Frenkel, *Phys. Rev.* **37**, 17 (1931).
- B. Gerlach, *Phys. Status Solidi. B* **63**, 459 (1974).
- D. Gekhtman, E. Cohen, A. Ron, and L. N. Pfeiffer, *Phys. Rev. B* **54**, 10320 (1996).
- S. Glasberg, G. Finkelstein, H. Shtrikman, and I. Bar-Joseph, *Phys. Rev. B* **59**, R10425 (1999).
- R. L. Greene and K. K. Bajaj, *Solid State Commun.* **45**, 825 (1983).
- E. F. Gross, *Izvest. Akad. Nauk. S.S.S.R. Ser. Fiz.* **20**, 89 (1956a).
- E. F. Gross, *Nuovo Cimento.* **3**, 672 (1956b).
- H. Haken, *Nuovo Cimento.* **10**, 1230 (1956).
- H. Haken, *Quantum Field Theory of Solids*, North Holland (1976).
- E. Hanamura, *Optical Properties of Solids*, p. 81. North Holland (1976).
- A. Haury, A. Arnoult, V. A. Chitta, J. Cibert, Y. Merle d'Aubigné, S. Tatarenko, and A. Wasiela, *Superlatt. and Microstruct.* **23**, 1098 (1998).
- J. R. Haynes, *Phys. Rev. Lett.* **4**, 361 (1960).
- J. R. Haynes, *Phys. Rev. Lett.* **4**, 866 (1966).
- M. Hayne, C. L. Jones, R. Bogaerts, C. Riva, A. Usher, F. M. Peeters, F. Herlach, V. V. Moshchalkov, and M. Henini, *Phys. Rev. B* **59**, 2927 (1999).
- C. H. Henry and K. Nassau, *Phys. Rev. B* **1**, 1628 (1970).
- O. Homburg, P. Michler, K. Sebald, J. Gutowski, H. Wenisch, and D. Hommel, *J. Crystal Growth* **214/215**, 832 (2000).

- J. J. Hopfield, in *7th International Conference on the Physics of Semiconductors*, p. 725, Dunod (1964).
- E. A. Hylleraas, *Z. Physik.* **54**, 347 (1929).
- Z. A. Insepov and G. E. Norman, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **69**, 1321 (1975) [*Sov. Phys. JETP* **42**, 674 (1976)].
- T. Kawabata, K. Muro, and S. Narita, *Solid State Commun.* **23**, 267 (1977).
- K. Kheng, R. T. Cox, Y. Merle d'Aubigné, F. Bassani, K. Saminadayar, and S. Tatarenko, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1752 (1993).
- K. Kheng, K. Saminadayar, N. Magnea, *Physica E* **2**, 256 (1998).
- K. Kheng, R. T. Cox, V. P. Kochereshko, K. Saminadayar, S. Tatarenko, F. Bassani, and A. Franciosi, *Superlatt. and Microstruct.* **15**, 253 (1994).
- K. Kheng, R. T. Cox, T. Baron, K. Saminadayar, S. Tatarenko. *J. Crystal Growth* **159**, 443 (1996).
- R. S. Knox, *Theory of Excitons*, *Solid State Physics*, **5** suppl. Academic Press, New York (1963).
- M. Kozhevnikov, E. Cohen, A. Ron, H. Shtrikman, and L. N. Pfeiffer, *Phys. Rev. B* **56**, 2044 (1997).
- J. Kübler, *Z. Physik.* **201**, 172 (1967).
- M. A. Lampert, *Phys. Rev. Lett.* **1**, 450 (1958).
- H. J. Lee, L. Y. Juravel, J. C. Wolley, and A. C. Springthorpe, *Phys. Rev. B* **21**, 659 (1980).
- P. Lefebvre, V. Calvo, N. Magnea, T. Taliercio, J. Allègre, and H. Mathieu, *Phys. Rev. B* **56**, 3907 (1997a).
- P. Lefebvre, V. Calvo, N. Magnea, T. Taliercio, J. Allègre, and H. Mathieu, *Phys. Rev. B* **56**, R10040 (1997b).
- S. Lovisa, R. T. Cox, K. Saminadayar, *Phys. Status Solidi A* **164**, 175 (1997).
- A. Manassen, E. Cohen, A. Ron, E. Linder, and L. N. Pfeiffer, *Phys. Rev. B* **54**, 10609 (1996).
- R. C. Miller, D. A. Kleinmann, and A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* **29**, 7085 (1984).
- R. C. Miller, D. A. Kleinmann, A. C. Gossard, and O. Munteanu, *Phys. Rev. B* **25**, 6545 (1982).

- A. J. Shields, F. M. Bolton, M. . Simmons, M. Pepper, and D. A. Ritchie, Phys. Rev. B **55**, R1970 (1997a).
- A. J. Schields, J. L. Osborne, D. M. Whittaker, M. Y. Simmons, M. Pepper, and D. A. Ritchie, Phys. Rev. B **55**, 1318 (1997b).
- B. Stébé and G. Munsch, Solid State Commun. **17**, 1051 (1975).
- B. Stébé and C. Comte, Solid State Commun. **19**, 1237 (1976).
- B. Stébé, *Thèse d'Etat*, Metz (1977).
- B. Stébé and C. Comte, Phys. Rev. B **15**, 3967 (1977).
- B. Stébé, T. Sauder, M. Certier, and C. Comte, Solid State Commun. **26**, 637 (1978).
- B. Stébé, E. Feddi, and G. Munsch, Phys. Rev. B **35**, 4331 (1987).
- B. Stébé and A. Ainane, Superlattices and Microstructures **5**, 545 (1989).
- B. Stébé, A. Ainane, and F. Dujardin, J. Phys.: Condensed Matter **8**, 5383 (1996).
- B. Stébé, G. Munsch, L. Stauffer, F. Dujardin, and J. Murat, Phys. Rev. B **56**, 12454 (1997).
- B. Stébé, E. Feddi, A. Ainane, and F. Dujardin, Phys. Rev. B **58**, 9926 (1998).
- T. Taliercio, P. Lefebvre, V. Calvo, D. Scalbert, N. Magnea, H. Mathieu, and J. Allègre, Phys. Rev. B **58**, 15408 (1998).
- T. Taliercio, P. Lefebvre, V. Calvo, N. Magnea, H. Mathieu, and J. Allègre, Phys. Status Solidi B **220**, 875 (2000).
- A. Thilagam, Phys. Rev. B **55**, 7804 (1997).
- D. G. Thomas and J. J. Hopfield, Phys. Rev. **128**, 2135 (1962).
- G. A. Thomas and T. M. Rice, Solid State Commun. **23**, 359 (1977).
- E. Vanelle, D. Brinkmann, P. Gilliot, M. Paillard, X. Marie, T. Amand, B. Hönerlage, J. Cibert, and S. Tatarenko, J. Crystal Growth **214/215**, 827 (2000).
- T. Vanhoucke, M Hayne, V. V. Moshchalkov, and M. Heinini, Solid State Commun. **115**, 403 (2000).
- O. V. Volkov, I. V. Kukushkin, K. von Klitzing, and K. Eberl, JETP Lett. **68**, 236 (1998).
- G. H. Wannier, Phys. Rev. **52**, 191 (1937).
- A. Wojs and P. Hawrylak, Phys. Rev. B **51**, 10880 (1995).

D.M. Whittaker and A.J. Shields, *Phys. Rev. B* **56**, 15185 (1997).

D. R. Yakovlev, V. P. Kochereshko, R. A. Suris, H. Schenk, W. Ossau, A. Waag, G. Landweher, P. C. M. Christianen, and J. C. Maan, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3974 (1997).

D. R. Yakovlev, H. A. Nickel, B. D. McCombe, A. Keller, G. V. Astakhov, V. P. Kochereshko, W. Ossau, J. Nürnberger, W. Faschinger, and G. Landweher, *J. Crystal Growth* **214/215**, 823 (2000).

RESUME

Le travail présenté dans ce mémoire est consacré à l'étude des excitons chargés (ou trions excitoniques) dans les puits quantiques de semi-conducteurs, en l'absence et en présence d'un champ magnétique. Les résultats numériques ont été particularisés à des composés de type GaAs/GaAlAs et CdTe/CdZnTe en raison des applications potentielles de ces nanostructures dans le domaine de l'optoélectronique. Les excitons chargés résultent de la liaison d'un exciton (paire électron trou) avec un électron (trion négatif) ou un trou (trion positif), et peuvent donc être considérés comme des quasi-particules chargées et mobiles. De ce fait, ils présentent des propriétés originales qui les différencient des autres complexes excitoniques. Dans une première étude, en l'absence de champ magnétique, nous avons déterminé les énergies de liaison des deux types de trions, en nous plaçant dans le cadre de l'approximation de la masse effective et dans un modèle à deux bandes non dégénérées. Pour les composés étudiés, les deux types de trions sont stables pour toutes les valeurs de la largeur du puits. De plus, les raies d'absorption sont très différentes de celle des excitons et des autres complexes excitoniques. Contrairement à ces dernières, elles ne sont pas fines, mais présentent un bord d'absorption principal suivi d'une queue décroissante vers les basses énergies. Nous avons ensuite étudié l'influence d'un champ magnétique perpendiculaire au plan des couches. Il apparaît que le champ conduit à une augmentation des énergies. De plus, pour des champs suffisamment faibles, nous avons montré que les énergies se décomposent en niveaux de Landau, résultant du mouvement du centre de masse chargé dans un plan perpendiculaire au champ. Ce résultat est original, et n'a pas encore donné lieu à aucune confirmation expérimentale. Enfin, nous avons montré que la magnéto-absorption des trions se réduit en une série de pics de Dirac.

ABSTRACT

This work is devoted to the study of the charged excitons (or trions) in semiconductor quantum wells, with or without an external magnetic field. The numerical results concern more particularly GaAs/GaAlAs and CdTe/CdZnTe compounds due to their possible in the field of optoelectronics. Charged excitons result from the binding of an exciton (electron hole pair) and an electron (negative trion) or a hole (positive trion), and may be considered as mobile and charged particles. Thus, they are expected to exhibit original properties, differentiating them from other excitonic complexes. In a first study, without any magnetic field, we have determined the binding energies of the two kinds of trions in the frame of the effective mass approximation within a two isotropic parabolic bands model. It results that in the case of the above compounds, the two kinds of trions are stable against dissociation for all values of the well widths. Moreover the optical absorption does not give rise to sharp lines, as in the cases of excitons or bound excitons, but to a main absorption threshold followed by a decreasing tail on its low energy side. We have also studied the influence of a magnetic field directed along the growth axis. It appears that the field gives rise to an increase of the energies. Moreover in the case of low magnetic fields, we have shown that the energies splits into Landau levels. This is due to the quantized motion of their-plane motion of the center of mass of the trions. This result is original, and has not yet received experimental confirmation. Finally we have shown that the optical magnetoabsorption reduces to a serie of Dirac peaks.

MOTS-CLES

EXCITON, IMPURETE, EXCITON CHARGE, TRION, SEMI-CONDUCTEUR, PUIITS QUANTIQUE, CHAMP MAGNETIQUE, ABSORPTION, MAGNETO-ABSORPTION.