



HAL
open science

Effet d'un champ électrique sur les excitons chargés dans les semi-conducteurs massifs et bidimensionnels

Abdellatif El Hassani

► **To cite this version:**

Abdellatif El Hassani. Effet d'un champ électrique sur les excitons chargés dans les semi-conducteurs massifs et bidimensionnels. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paul Verlaine - Metz, 1997. Français. NNT : 1997METZ054S . tel-01775909

HAL Id: tel-01775909

<https://hal.univ-lorraine.fr/tel-01775909>

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>

Université de Metz

U.F.R. Sci.F.A

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 03 Décembre 1997

pour l'obtention du

Doctorat de l'Université de METZ
(Spécialité Physique du Solide)

par

Abdellatif EL HASSANI

| BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ | |
|--------------------------------------|-------------|
| N° inv. | 1997.1775 |
| Cote | S/M3 97/54 |
| Loc | Magasin TEC |

Effet d'un champ électrique sur les excitons chargés dans les semi-conducteurs massifs et bidimensionnels

Composition du jury

| | | |
|-----------------------------|-------------------------------------|---|
| <i>Rapporteurs :</i> | B. HÖNERLAGE L. STAUFFER | Université de Strasbourg. Université de Mulhouse. |
| <i>Examineurs :</i> | A. BATH B. JOULAKIAN B. STEBE | Université de Metz. Université de Metz. Université de Metz. |
| <i>Directeur de thèse :</i> | F. DUJARDIN | Université de Metz. |

Remerciements

Le présent travail a été réalisé au sein du groupe de Photoélectronique Théorique du Laboratoire de Théorie de la Matière Condensée de l'Université de Metz, sous la direction de Monsieur F. DUJARDIN, Maître de Conférences. Je tiens à lui faire part de ma profonde reconnaissance pour l'intérêt constant qu'il a manifesté vis-à-vis de mon travail et aussi des encouragements et des conseils qu'il n'a jamais cessé de me prodiguer.

Je remercie le Professeur B. STEBE, pour avoir assuré un suivi attentif et critique de la progression des résultats.

Je suis sensible à l'honneur que me font Madame L. STAUFFER, Professeur à l'Université de Mulhouse et Monsieur B. HÖNERLAGE, Professeur à l'Université de Strasbourg, d'avoir bien voulu accepter la charge de rapporteurs.

Mes remerciements s'adressent également à Messieurs A. BATH et B. JOULAKIAN, Professeurs à l'Université de Metz d'avoir voulu juger et examiner ce travail.

Je tiens aussi à remercier M. FEDDI, Maître de Conférences à l'Ecole Normale Supérieure de Tétouan, pour les discussions enrichissantes que j'ai eues avec lui.

A tous mes collègues du groupe de Photoélectronique Théorique, j'exprime ma sincère et amicale gratitude pour l'ambiance amicale qu'ils ont su faire régner au sein de l'Institut, particulièrement messieurs M. AZAITOUNI, A. MORADI, R. MOUSSADAR.

Je ne pourrais oublier le soutien des familles, AFIFI, BENOUCHE et BENYOUNESS, je remercie aussi toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail et que j'ai omis de citer ici.

Je remercie aussi tous mes amis, D. AFFANY, M. AMEZIANNE, L. BAUDOIN, A. BELWIDANE, R. GUEJIMMI et sa femme Barbara, K. KHALID et sa femme Meryeme, KAMAL et sa femme Zina, B. RIHANE sans oublier son aimable famille et mes chères amis (es) qui sont au Maroc sans exception.

Table des matières

| | |
|---|-----------|
| Table des figures | 9 |
| Liste des tableaux | 13 |
| 1 INTRODUCTION | 15 |
| 1 Généralités. | 19 |
| 1.1 Etats excitoniques dans les semi-conducteurs. | 21 |
| 1.2 Effet du champ électrique sur les semi-conducteurs. | 23 |
| 1.3 Effet Stark dans l'atome d'hydrogène et d'hélium *. | 30 |
| 1.3.1 Effet Stark dans l'atome d'hydrogène. | 30 |
| 1.3.2 Effet Stark dans l'atome d'hélium. | 34 |
| 2 Etat fondamental du trion X^- dans un semi-conducteur massif en présence d'un champ électrique uniforme faible. | 39 |
| 2.1 Introduction | 41 |
| 2.2 Equation de la masse effective | 42 |
| 2.3 Energie fondamentale des trions en présence d'un champ électrique uniforme | 43 |
| 2.3.1 Séparation du mouvement du centre de masse et du mouvement relatif | 43 |
| 2.3.2 Calcul variationnel de l'énergie fondamentale. | 46 |
| 2.4 Comparaison avec la physique atomique. | 57 |
| 2.4.1 Calcul des rayons moyens. | 58 |
| 2.5 Conclusion | 63 |

| | |
|---|------------|
| 3 Etude de la stabilité du trion X^- en présence d'un champ électrique dans un semi-conducteur massif. | 65 |
| 3.1 Introduction | 67 |
| 3.2 Energie relative de l'exciton en présence d'un champ électrique. | 68 |
| 3.2.1 Comparaison des méthodes utilisées pour déterminer l'état $1s$ de l'exciton. | 68 |
| 3.2.2 Résolution de l'équation de la fonction enveloppe excitonique. | 71 |
| 3.3 Energie de liaison du trion X^- | 76 |
| 3.4 Résultats et discussions | 79 |
| 3.5 Conclusion | 85 |
| | |
| 4 Energie de liaison de X^- dans un semi-conducteur bidimensionnel soumis à un champ électrique uniforme. | 87 |
| 4.1 Introduction | 89 |
| 4.2 Structures bidimensionnelles. | 90 |
| 4.3 Séparation de l'équation de la masse effective. | 90 |
| 4.3.1 Mouvement du centre de masse. | 93 |
| 4.3.2 Mouvement relatif. | 95 |
| 4.4 Résultats et discussions | 96 |
| 4.4.1 Cas de l'exciton chargé négativement X^- | 96 |
| 4.4.2 Cas de l'exciton chargé positivement X_2^+ | 98 |
| 4.5 Calcul des rayons moyens. | 105 |
| 4.6 Conclusion | 107 |
| 4.7 Conclusion générale. | 109 |
| | |
| A Effet d'un champ électrique sur les états électroniques. | 113 |
| A.1 Effet d'un champ électrique sur les niveaux d'énergie de lélectron. | 113 |
| A.1.1 Mouvement du paquet d'onde | 113 |
| A.1.2 Niveaux de Wannier | 117 |
| | |
| B Calcul de l'élément de volume $d\tau$ | 123 |
| | |
| C Calcul des éléments de matrice des différents opérateurs. | 127 |

| | |
|--|------------|
| D Séparation des mouvements du centre de masse et relatif de l'exciton. | 137 |
| E Expression de l'équation du mouvement relatif en unités atomiques. | 141 |
| F Calcul de l'énergie d'interaction coulombienne. | 145 |
| Bibliographie | 151 |

Table des figures

| | | |
|-----|--|----|
| 1.1 | Modification des bandes de conduction et de valence dans la direction du champ appliqué, l'électron et le trou pénètrent par effet tunnel dans la bande interdite et réduisent l'énergie du gap (Bastard (1988)). | 23 |
| 1.2 | Courbes du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie du photon pour quelques valeurs du champ électrique f , l'absorption en dessous du gap et l'oscillation du coefficient d'absorption pour des champs élevés correspond à l'effet Franz-Keldysh (Ralph (1968)). | 24 |
| 1.3 | Modification de la barrière du puits de potentiel en présence du champ, (a) en absence du champ, (b) en présence du champ (Callaway (1974)). | 27 |
| 1.4 | Effet d'un champ électrique sur les fonctions d'onde pour un SR, $F=0$ correspond à 3D, l'électron passe par effet tunnel à travers les barrières, $F=high$ localise l'électron dans un seul puits 2D (Hosoda (1996)). | 28 |
| 1.5 | Localisation des fonctions d'ondes dans un super-réseau, pour un champ électrique faible (a), moyen (b) et fort (c) (Mendez (1988)). | 28 |
| 1.6 | Echantillon permettant l'observation de l'effet Franz-Keldysh à deux dimensions, $\Delta V = 1.5V$ génère un champ d'intensité $10^5 V/cm$ (Schmeller (1994)). | 29 |
| 1.7 | Distribution de charge de l'état ($n_1 = 2, n_2 = 0, m = 0$) nombres quantiques paraboliques(Bethe (1957)). | 31 |
| 1.8 | Fonction d'énergie cinétique $\phi(\eta)$, (A) pour un champ intermédiaire, (B) pour un champ très fort (Bethe (1957)). | 33 |
| 2.1 | Coordonnées du trion X^- dans le repère absolu. | 47 |
| 2.2 | Energie relative du trion X^- en fonction du paramètre d'échelle k . | 53 |
| 2.3 | Tracé des énergies moyennes totales H_0 et H , cinétiques T_e et T_h , potentielles V et W en fonction du champ électrique pour une valeur de $\sigma = 0.1$ | 54 |

Table des figures

| | | |
|-----|---|-----|
| 2.4 | Energie relative de l'exciton chargé X^- en fonction du rapport de masse σ pour différentes valeurs de champs. | 55 |
| 2.5 | Distance moyenne r_{1h} du trion X^- en présence d'un champ électrique. | 60 |
| 2.6 | Distance moyenne r_{12} du trion X^- en présence d'un champ électrique. | 61 |
| 3.1 | Positions des pics d'absorption excitonique (trait plein), limite de champ faible (tirets), limite de l'effet Franz-Keldysh (pointillés). d=3 SC massif, d=2 SC bidimensionnel, J=0 sans interaction coulombienne, J=1 avec interaction coulombienne. (d'après Lederman (1976)). | 70 |
| 3.2 | Effet du champ électrique sur l'état fondamental de l'exciton ((a) f=0.1, (b) f=0.32, (c) f=1.0)(d'après Blossey (1972)). | 70 |
| 3.3 | Energie relative de l'exciton (perturbative et variationnelle). | 75 |
| 3.4 | Energie de liaison du trion X^- en fonction de σ pour différentes valeurs de champs $f(u.a.)$ | 80 |
| 3.5 | Comparaison entre nos résultats (a,a',a'' en traits pleins) et ceux de Katih et al.(b,b',b'' en pointillés). | 82 |
| 3.6 | Diagramme des transitions. | 83 |
| 4.1 | (a) Empilement de couches semi-conductrices, (b) Disposition relative des bandes. | 91 |
| 4.2 | Variation du rapport de l'énergie relative du trion X^- en fonction de σ pour différentes valeurs de $f(u.a.)$ | 99 |
| 4.3 | Variation de $\Delta W_{X^-} = W(f) - W(0)$ en fonction de σ | 100 |
| 4.4 | Comparaison entre les énergies de liaison du trion X^- (3D) et (2D) en fonction du paramètre de champ $f(u.a.)$ pour $\sigma = 0.4$ et $\sigma = 0.8$ | 101 |
| 4.5 | Variations du rapport des énergies relatives $E_{X_2^+}(f)/E_{X_2^+}(0)$ en fonction du rapport des masses σ pour différentes valeurs de $f(u.a.)$ | 103 |
| 4.6 | Variations du rapport des énergies relatives $E_{X^-}(f)/E_{X^-}(0)$ et $E_{X_2^+}(f)/E_{X_2^+}(0)$ en fonction du rapport des masses σ pour différentes valeurs de $f(u.a.)$ | 104 |
| 4.7 | Distance moyenne r_{12} pour une valeur de champ $f = 0.015u.a$ | 106 |

Liste des tableaux

| | | |
|-----|---|----|
| 2.1 | Indices des coefficients de la fonction d'onde pour $\omega = 4$ | 50 |
| 2.2 | Comparaison entre les énergies relatives de H^- et X^- pour $\sigma = 0$ | 58 |
| 2.3 | Distances inter-particules moyennes dans le complexe X^- | 59 |
| 3.1 | Correspondance entre unités atomiques et V/cm du champ électrique pour $f = 0.02 u.a.$ | 76 |

1 INTRODUCTION

Une paire électron trou peut être créée dans un semi-conducteur par absorption d'un photon dont l'énergie est supérieure à la largeur de la bande interdite, cette paire peut réduire son énergie en se liant pour former un état stable appelé exciton dont la durée de vie est comprise entre $10^{-9}s$ et $10^{-3}s$. La paire ainsi formée peut se déplacer dans le cristal en transportant l'énergie d'excitation mais pas de charge. Il existe deux approximations limites différentes de l'exciton, l'une est due à Frenkel (1931) qui considère que le trou et l'électron sont étroitement liés, l'exciton est dit localisé, l'autre est due à Mott et Wannier (1937) pour qui la liaison est faible et la distance entre l'électron et le trou est grande par rapport au paramètre cristallin, l'exciton dans ce cas s'étend sur plusieurs sites atomiques.

Les excitons chargés (ou triions excitoniques) résultent de la liaison d'un exciton avec un trou $\rightarrow X_2^+$ (e, h, h), ou avec un électron $\rightarrow X^-$ (e, e, h), leur existence à été confirmée d'abord théoriquement par Munschy et Stébé (1974,1975) dans les semi-conducteurs massifs et par Stébé et Ainane (1989) dans les semi-conducteurs bidimensionnels, puis expérimentalement par Kheng (1993) et Buhman (1995) dans les puits quantiques. D'autres études expérimentales récentes ont permis leur identification dans les puits quantiques simples $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ (Finkelstein 1996), ou dans $GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As$ en présence d'un champ magnétique (Shields, 1995b,1995c), dans les puits quantiques doubles (Shields 1997) et dans les points quantiques (Arkadiusz 1995).

En présence d'un champ électrique, nous pouvons nous attendre à deux effets : d'une part, une déstabilisation due aux forces des sens contraire s'exerçant sur les particules de charges opposées, comme pour l'exciton, d'autre part un déplacement global du centre de masse affecté de la charge résultante, ce qui peut donner lieu à des propriétés originales par rapport aux complexes excitoniques neutres. Le but de ce travail est d'apporter une contribution à l'étude théorique des complexes excitoniques chargés X^- et X_2^+ dans les semi-conducteurs massifs et bidimensionnels soumis à un champ électrique uniforme.

Le premier chapitre est un rappel de quelques études théoriques et expérimentales sur les excitons et excitons chargés en présence d'un champ électrique uniforme. Nous rappelons aussi l'effet Stark dans les atomes d'hydrogène et d'hélium, qui permettent de faire une analogie avec les cas limites de l'exciton et du trion. Puis nous achevons ce chapitre par une annexe sur le comportement d'un électron dans un solide soumis à un champ électrique uniforme externe.

Dans le second chapitre, nous étudions l'action d'un champ électrique sur un trion dans un semi-conducteur massif (3D) dans le cadre de l'approximation de la masse effective et dans un modèle à deux bandes simples, isotropes et paraboliques. Nous décomposons d'abord le mouvement de X^- en un mouvement relatif et un mouvement associé au centre de masse, nous montrons ainsi que l'énergie du centre de masse présente des niveaux discrets similaires aux niveaux de "Wannier-Stark" déjà connus dans le cas d'un électron. Nous utilisons la méthode variationnelle avec un choix approprié de fonction d'onde pour déterminer l'énergie relative de l'état fondamental du trion X^- en présence d'un champ électrique uniforme. La comparaison avec les résultats de Katih et al. (1993), obtenus en perturbation, nous permet de tester la validité de notre modèle et de montrer que nous pouvons atteindre des champs plus élevés.

Au troisième chapitre, nous calculons l'énergie de liaison de l'exciton chargé X^- (3D) pour différentes valeurs du champ électrique et du rapport des masses effectives des porteurs. Nous montrons qu'un champ électrique faible renforce les énergies de liaison (effet inattendu).

La maîtrise des techniques d'application du champ électrique dans les systèmes strictement bidimensionnels (2D), a permis récemment l'observation de l'effet Franz-Keldysh en (2D) (Schmeller et al. 1994) ce qui était prédit il y a environ 20 ans par Ledermann (1976), mais était resté inobservé malgré une tentative de Miller et al. (1985). Ceci montre que les systèmes strictement bidimensionnels ne sont plus seulement un modèle théorique mais peuvent aussi trouver un support expérimental. Il est alors justifié d'étudier les trions X^- et X_2^+ dans un semi-conducteur (2D) en présence d'un champ électrique uniforme faible, ce qui fera l'objet du dernier chapitre et constitue, à notre connaissance, la première étude réalisée dans ce domaine. Nous calculons ensuite les énergies de liaison des excitons chargés X^- et X_2^+ . Ce travail nous permet de situer le cas d'un puits quantique de largeur L soumis à un champ électrique transversal (perpendiculaire à la direction de croissance). Si la largeur du puits devient infiniment grande nous devons retrouver le cas d'un semi-conducteur massif, et lorsque L tend vers zéro ceux du semi-conducteur strictement bidimensionnel.

Chapitre 1

Généralités.

1.1 Etats excitoniques dans les semi-conducteurs.

Les semi-conducteurs, matériaux de base de l'électronique moderne, sont aussi les matériaux de base de l'optoélectronique, technologie qui envahit notre vie quotidienne avec les lecteurs laser, détecteurs infrarouges...

Le spectre énergétique de l'atome d'hydrogène présente une série de valeurs discrètes. De même, il existe une série de valeurs permises pour l'énergie de l'exciton, mais une grande différence existe dans la valeur de l'énergie de liaison, quelques meV pour l'exciton contre $13,6 eV$ pour l'atome d'hydrogène. Les atomes d'un gaz d'hydrogène ont tendance à se combiner pour former des molécules d'hydrogène (H_2), de même l'énergie de deux excitons se réduit pour former des molécules excitoniques appelées aussi biexcitons et détectées dans plusieurs semi-conducteurs, dont le silicium (Haynes 1966), ainsi que dans les semi-conducteurs composés CuCl (Nikitine 1969) et ZnO (Packard et al. 1967). Il y a une forte ressemblance entre un gaz d'hydrogène et un gaz d'excitons, aussi par analogie avec les systèmes atomiques et moléculaires, Lampert (1958) étudia la possibilité de formation des complexes excitoniques, qui peuvent être mobiles ou localisés autour de centres d'impuretés.

Parmi les complexes mobiles, nous étudions ici les excitons chargés, issus de la liaison d'un électron ou d'un trou avec un exciton, donnant ainsi soit l'exciton chargé négativement ($e + X \rightarrow X^-$) soit l'exciton chargé positivement ($h + X \rightarrow X_2^+$). Il a été très difficile d'identifier la raie correspondante à X^- dans le spectre d'énergie. Il en a été de même pour l'atome d'hydrogène ionisé H^- qui possède un seul état (Bethe et Salpeter 1957): il n'admet donc pas d'états discrets. Stébé et Munchy (1974, 1975) ont calculé les énergies de liaison de ces complexes dans le cas de X^- . Ils ont utilisé un calcul de type atomique et ont confirmé l'existence d'un état stable pour toute valeur du rapport des masses effectives de l'électron et du trou $\sigma = m_e^*/m_h^*$. Pour X_2^+ , ils ont utilisé un calcul de type moléculaire non

adiabatique, plus précis pour $\sigma \leq 0.1$. D'autres études expérimentales ont été menées sur X^- et X_2^+ , nous citons ici Thomas et Rice (1977). En augmentant par dopage la densité de charge des porteurs, ils ont identifié des excitons chargés dans le Ge. Puis Stébé et al. (1978) ont suggéré que la raie ν_2 du spectre de luminescence de CuCl soit attribuée à X_2^+ .

L'avènement des nouvelles techniques de croissance (micro-lithographie, épitaxie à jets moléculaires ...) a permis de fabriquer des puits quantiques de largeur L très petite (lorsque L est inférieure au rayon excitonique, le semi-conducteur est considéré bidimensionnel). Lorsque la dimensionnalité est réduite, il est alors plus facile d'observer des excitons chargés, car leurs énergies de liaison augmentent considérablement (Stébé et al. 1989). Parmi les travaux théoriques, citons Bobrysheva et al. (1982) qui ont utilisé un calcul variationnel, puis Stébé et Ainane qui, eux aussi, ont employé un calcul variationnel utilisant une fonction d'onde d'Hyllerras et un calcul récent de Thilagam (1997) utilisant la méthode des espaces de dimension fractionnels. Les expériences d'électroluminescence sur les puits quantiques $GaAs/AlAs$ ont permis d'observer une forte augmentation du pic de l'exciton chargé X^- très bien défini; 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 et al. 1995). Ce phénomène, déjà connu en astrophysique, qui explique l'opacité des étoiles, quand un atome d'hydrogène de la surface d'une étoile capte un électron provenant de son noyau pour former H^- . Nous pouvons aussi citer Kheng et al. qui ont identifié X^- dans les puits quantiques $CdTe/Cd_xZn_{(1-x)}Te$ (Kheng et al. 1993), Shields et al. dans $GaAs/Al_xGa_{(1-x)}As$ (Shields et al. 1995a) pour X^- et dans $GaAs$ dopé en accepteurs pour l'identification de X_2^+ (Shields et al. 1995b) puis des expériences de photoluminescence de Finkelstein et al. (1996a), qui ont identifié simultanément X^- et X_2^+ dans $GaAs/Al_xGa_{(1-x)}As$. De plus l'existence d'états X_s^- (état singulet) et X_t^- (état triplet) de l'état fondamental ont été identifiés en présence d'un champ magnétique (Shields et al. 1995b); (Finkelstein et al. 1996a, 1996b), alors que ces états n'existent pas dans H^- .

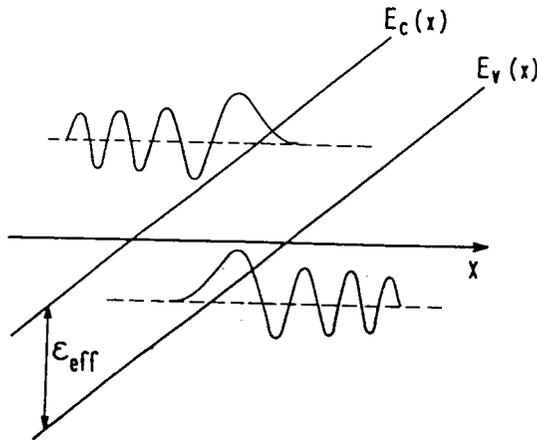


FIG. 1.1: *Modification des bandes de conduction et de valence dans la direction du champ appliqué, l'électron et le trou pénètrent par effet tunnel dans la bande interdite et réduisent l'énergie du gap (Bastard (1988)).*

1.2 Effet du champ électrique sur les semi-conducteurs.

Les premières observations de l'effet du champ électrique sur le spectre optique excitonique ont été mises en évidence par Harrick (1956): lorsque le champ électrique augmente, il y a absorption de photons d'énergie $\hbar\omega$ inférieure à l'énergie du Gap E_g . Ces observations ont été attribuées aux phénomènes de vibrations du réseau et à des effets d'impuretés.

En 1958, Franz et Keldysh (Franz 1958, Keldysh 1958), indépendamment, ont prédit l'effet tunnel entre les bandes et présenté une théorie sur l'électroabsorption en affirmant un décalage vers le rouge du bord de bande en présence du champ électrique (Fig. 1.1); la courbe d'absorption présente une queue en dessous de l'énergie de bande interdite (Fig. 1.2) et une oscillation pour des énergies plus élevées.

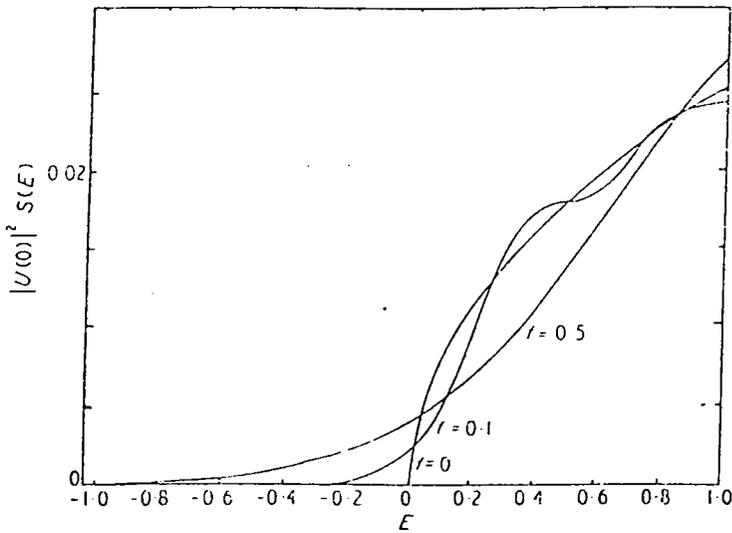


FIG. 1.2: Courbes du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie du photon pour quelques valeurs du champ électrique f , l'absorption en dessous du gap et l'oscillation du coefficient d'absorption pour des champs élevés correspond à l'effet Franz-Keldysh (Ralph (1968)).

Quelques années plus tard, leur théorie a été vérifiée expérimentalement par Böer et al. (1959), puis Williams et al. (1962) sur CdS et Moss (1962) dans le cas de $GaAs$: leurs travaux ont montré qu'il y a déplacement du bord d'absorption vers les basses énergies. Yacoby (1966) a étudié l'effet Franz-Keldysh sur le Silicium massif. Il a montré que le changement d'absorption $\Delta\alpha$ est proportionnel à $F^{1,72}$ (F champ électrique) comme il l'avait prédit lui même en 1965, ainsi que Penchina (1965), et non comme F^2 qui avait été prédit par Chester (1964) et Frova (1965), puis il a conclu qu'une telle différence est peut être à l'origine de champs électriques internes causés par des impuretés ou imperfections du cristal. Cependant, en 1966, Hamakawa et al. suggèrent que les effets excitoniques peuvent expliquer les divergences entre expérience et théorie de l'électroabsorption. Des travaux sur CdS ont montré que la théorie d'une seule particule est inadéquate et que l'absorption excitonique est dominante dans le spectre d'absorption. Tharmalingam (1963), Callaway (1963) et Aspnes et al. (1966) ont utilisé les

1.2. Effet du champ électrique sur les semi-conducteurs.

propriétés de la fonction d'Airy pour étudier les propriétés diélectriques et optiques des solides.

La forme de la courbe d'absorption trouvée est celle prédite par Franz et Keldysh. Penchina a développé les calculs de Tharmalingam pour expliquer le cas d'absorption indirect. Seraphin et Bottka (1965) ont étudié l'effet du champ électrique sur l'indice de réfraction, puis ils ont appliqué leurs résultats sur le *Ge*. Ils ont trouvé que la fonction diélectrique présente aussi des oscillations comme le coefficient d'absorption dans le cas de l'effet Franz-Keldysh.

Tous ces calculs ont été développés dans l'approximation à une particule, cette approximation n'est valable que dans la situation où l'énergie de la paire e-h dans le champ est plus grande que l'énergie excitonique la plus élevée. Duke et Alferieff (1965) sont parmi les premiers à inclure l'influence de l'attraction coulombienne pour le calcul de l'absorption optique dans les semi-conducteurs en présence d'un champ électrique fort. Puis vient le travail de Ralph (1968) qui a amélioré le travail de Duke et Alferieff, en résolvant l'équation de Schrödinger excitonique en présence d'un champ électrique avec la méthode WKB. L'étude des états stationnaires du mouvement relatif de l'exciton (état fondamental) est formellement identique au problème de l'atome d'hydrogène. Dans le cas d'un exciton, l'énergie de liaison est plus faible que l'énergie de liaison de l'atome d'hydrogène. Cela est dû aux valeurs de masses effectives et de la valeur de κ (constante diélectrique) qui réduisent son énergie. Donc de très petits champs peuvent ioniser l'exciton, ce qui rend son observation expérimentalement plus difficile que dans le cas de l'atome d'hydrogène. La théorie de perturbation est alors à utiliser avec précaution ainsi que la méthode variationnelle, puisqu'au delà d'une certaine valeur de F il y a compétition entre l'état liant et l'état antiliant (Dow 1970).

Pour le cas des systèmes bidimensionnels (puits quantique, super-réseaux...), nous faisons un bref rappel concernant l'effet d'un champ électrique uniforme longitudinal (parallèle à la direction de croissance) ou transversal.

Parmi les études qui ont été faites sur l'exciton dans un puits quantique en présence d'un champ électrique, nous citons d'abord Brum et al. (1985a) pour un champ longitudinal et Miller et al. (1985) qui en plus ont étudié le cas d'un champ transversal. Nous déduisons les remarques suivantes : le champ appliqué est assez fort mais limité pour que la notion d'état quasi-lié ait encore un sens. Les effets d'un champ parallèle et d'un champ perpendiculaire ne sont pas les mêmes par raison de symétrie.

Pour un champ longitudinal, la barrière du puits devient triangulaire et l'électron s'échappe du puits par effet tunnel, ce qui induit l'ionisation de l'exciton. Pour un champ transversal le phénomène est analogue à l'exciton 3D (Dow 1970, Blossey 1970): l'espace n'est pas limité dans la direction du champ comme dans le puits, donc il n'y a pas d'effet de confinement et le mouvement relatif de l'exciton est perturbé comme dans le cas de l'effet Stark, avec quelques changements dus à la réduction de dimensionnalité (Lederman et Dow 1976).

Pour un champ longitudinal, l'énergie de confinement de l'électron et du trou est affectée par le champ, les fonctions d'ondes sont délocalisées aux interfaces des barrières, et l'énergie de liaison de l'exciton diminue quand le champ augmente. Pour une impureté hydrogénéoïde, son énergie de liaison augmente ou diminue avec le champ selon la position de cette impureté dans le puits (Brum et al. 1985b). Dans le cas de l'exciton chargé X^- qui fera l'objet de notre étude, nous citons le travail de Katih et al. (1993). Ils avaient étudié l'influence du champ électrique faible par méthode perturbative dans un semi-conducteur massif. Ils ont montré que l'énergie de liaison augmente avec un champ faible. Puis Dujardin et al. (1997), qui ont considéré le cas de l'exciton chargé dans un puits quantique soumis à un champ longitudinal, ont trouvé que l'énergie de liaison de X^- diminue quand le champ augmente. Enfin vient un résultat expérimental de Shields et al. (1997) qui affirment la même chose que Dujardin et al.. Ajoutons encore que dans le cas d'un super-réseau (SR), un effet paradoxal se produit: la localisation des fonctions d'ondes électroniques, ce phénomène avait été prédit par

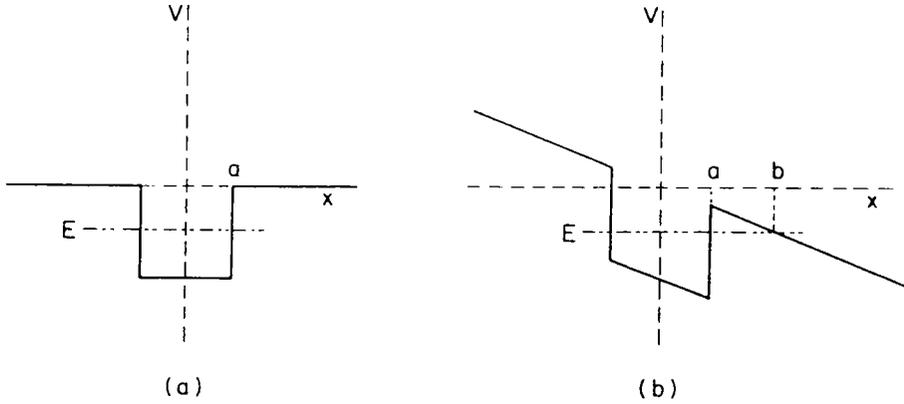


FIG. 1.3: *Modification de la barrière du puits de potentiel en présence du champ, (a) en absence du champ, (b) en présence du champ (Callaway (1974)).*

Wannier (1960, 1962) dans les semi-conducteurs massifs, mais avait été longtemps contesté par plusieurs auteurs, par exemple Zak en 1968, malgré des confirmations théoriques par Shockley (1972) et expérimentales par Koss (1972). Lorsqu'un champ électrique F est appliqué longitudinalement sur un SR de période D , les barrières des puits quantiques deviennent triangulaires (Fig. 1.3), puis il y a un décalage en énergie de eFD entre les puits adjacents (Fig. 1.4, Niveaux de Wannier-Stark). L'effet tunnel des électrons diminue, il se produit alors un effet de localisation des états électroniques.

Un exemple parfait qui décrit ce phénomène est l'augmentation de l'énergie de liaison E_X de l'exciton, passage de la valeur du massif $GaAs$ $E_X = 4meV$ à $E_X = 15meV$ du puits quantique isolé ($L = 30\text{\AA}$) (Mendez et al. 1988, Agullò et al. 1990) (localisation de la paire e-h dans un seul puits Fig. 1.5).

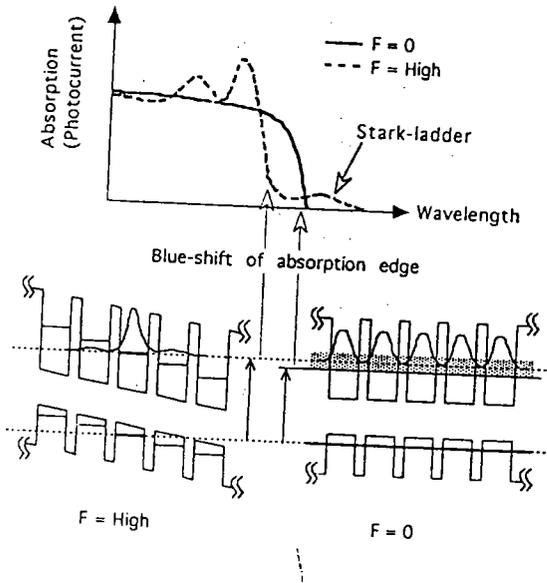


FIG. 1.4: Effet d'un champ électrique sur les fonctions d'onde pour un SR, $F=0$ correspond à 3D, l'électron passe par effet tunnel à travers les barrières, $F= \text{high}$ localise l'électron dans un seul puits 2D (Hosoda (1996)).

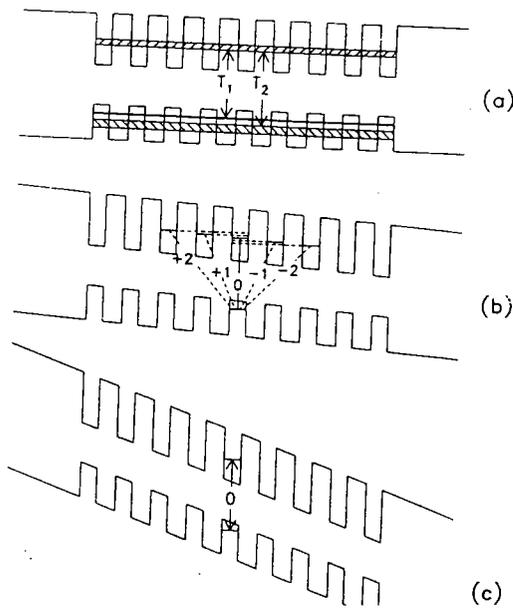


FIG. 1.5: Localisation des fonctions d'ondes dans un super-réseau, pour un champ électrique faible (a), moyen (b) et fort (c) (Mendez (1988)).

1.2. Effet du champ électrique sur les semi-conducteurs.

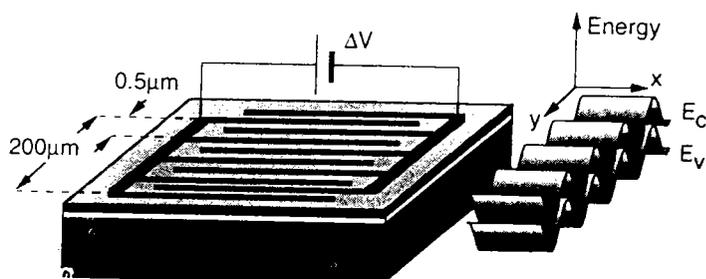


FIG. 1.6: *Echantillon permettant l'observation de l'effet Franz-Keldysh à deux dimensions, $\Delta V = 1.5V$ génère un champ d'intensité $10^5 V/cm$ (Schmeller (1994)).*

1.3 Effet Stark dans l'atome d'hydrogène et d'hélium *.

Introduction.

L'effet Stark est utilisé pour calculer la constante diélectrique ou la polarisabilité des atomes. Il est aussi utilisé dans les modulateurs électro-absorbants utilisant l'effet Franz-Keldysh. Dans cette partie, nous ferons un rappel sur l'effet d'un champ électrique sur l'atome d'hydrogène qui ressemble à l'exciton, puis l'atome d'hélium qui ressemble aux excitons chargés.

1.3.1 Effet Stark dans l'atome d'hydrogène.

1.3.1.1 Effet Stark linéaire.

Considérons un atome d'hydrogène soumis à un champ électrique uniforme d'intensité F et ayant comme direction l'axe oz . Les niveaux de l'atome d'hydrogène subissent une levée de dégénérescence. On définit le champ en unités atomiques par: $f = \frac{ea_H F}{2R_H}$ où a_H représente le rayon de Bohr et R_H le Rydberg.

L'équation de Schrödinger de l'atome d'hydrogène en présence du champ électrique externe est séparable en coordonnées paraboliques. Pour des champs faibles, la théorie de perturbation donne pour la correction du premier ordre qui est linéaire en f (Bethe et Salpeter 1957):

$$E^{(1)} = \frac{3}{2} f n(n_1 - n_2) \quad (1.1)$$

- n : nombre quantique principal.
- n_1, n_2 : nombres quantiques paraboliques.

* Partie traitée dans Bethe and Salpeter (1957).

1.3. Effet Stark dans l'atome d'hydrogène et d'hélium *.

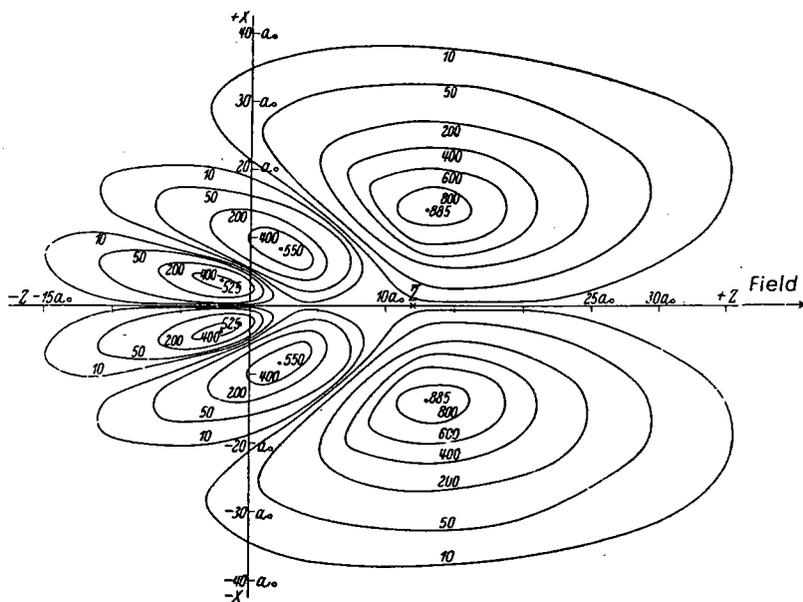


FIG. 1.7: *Distribution de charge de l'état ($n_1 = 2, n_2 = 0, m = 0$) nombres quantiques paraboliques, le noyau est au centre, les courbes sont des lignes de la densité de charge. Notons qu'une forte concentration de charge est localisée vers les z positifs (Bethe (1957)).*

Chaque état stationnaire du spectre discret est déterminé en coordonnées paraboliques par trois entiers, n nombre quantique principal, n_1 et n_2 nombres quantiques paraboliques reliés par l'équation $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$ où m est le nombre quantique magnétique. Les deux composantes extrêmes du niveau désintégré correspondent à $(n_1 = n - 1, n_2 = 0)$ et $(n_1 = 0, n_2 = n - 1)$. La séparation entre ces deux niveaux extrêmes est $3fn(n - 1)$. Cette séparation dépend approximativement de n^2 . Le moment dipolaire augmente lorsque l'électron est éloigné du noyau. La valeur moyenne du moment dipolaire de l'atome est donnée par :

$$\bar{z} = -\frac{3}{2}n(n_1 - n_2) \quad (1.2)$$

Pour $n_1 = n_2$ donc ($\bar{z} = 0$) il n'existe plus d'effet Stark linéaire. Dans le cas $n_1 > n_2$, comme nous pouvons le voir sur la figure (1.7), en coordonnées paraboli-

ques, l'électron se trouve essentiellement du côté des z positifs, contrairement en coordonnées polaires qui sont symétriques par rapport au plan $z = 0$.

La désintégration de Stark atteint de grandes valeurs, spécialement pour les états hautement excités, ainsi pour $n = 5$ la séparation entre les composantes, $(n_1 = 4, n_2 = 0)$ et $(n_2 = 4, n_1 = 0)$ pour un champ de 500.000 V/cm est de même ordre de grandeur que la séparation entre les états de nombre quantique principal $n = 5$ et $n = 6$ en l'absence du champ.

1.3.1.2 Effet Stark quadratique

Avec la croissance du champ un terme quadratique en f apparaît en plus de l'effet Stark linéaire, l'énergie s'écrit en seconde approximation (Landau 1966) :

$$E^{(2)} = \frac{1}{16} f^2 n^4 [17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9n^2 + 19] \quad (1.3)$$

Comme l'effet Stark linéaire, $E^{(2)}$ dépend d'abord de n , n_1 et n_2 mais aussi du nombre quantique magnétique m . La levée de dégénérescence se poursuit dans l'effet de la deuxième approximation. Notons encore que $E^{(2)}$ est inchangé en permutant n_1 et n_2 . Grâce à l'effet quadratique, les termes se déplacent toujours vers le bas car cette quantité est **toujours négative**.

1.3.1.3 Ionisation par le champ électrique

En examinant l'expression de l'énergie potentielle de l'électron :

$$V = -\frac{1}{r} + \vec{f} \cdot \vec{r}, \quad (1.4)$$

nous remarquons que le potentiel V admet deux singularités en $r = 0$ et $r = \infty$. En mécanique ondulatoire, lorsqu'il existe deux potentiels, il est possible que l'électron passe de l'un à l'autre par effet tunnel à travers la barrière triangulaire, l'électron est alors accéléré et l'atome est ionisé. Pour donner un ordre de grandeur du champ qu'il faut appliquer à l'atome d'hydrogène pour l'ioniser, prenons à titre d'exemple l'intensité du champ produite par le champ du proton à une

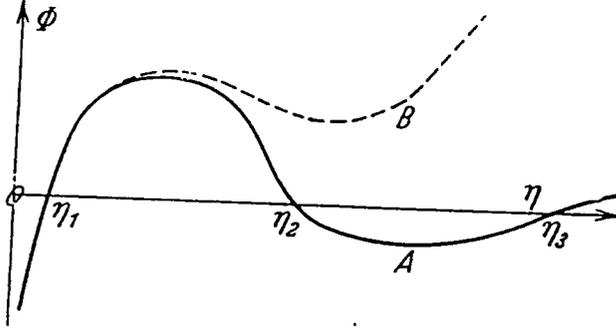


FIG. 1.8: Fonction d'énergie cinétique $\phi(\eta)$, (A) pour un champ intermédiaire, (B) pour un champ très fort (Bethe (1957)).

distance égale au rayon de la première orbite de Bohr de l'atome d'hydrogène, c'est à dire :

$$\frac{e}{a_H^2} = \frac{4,8 \times 10^{-10}}{(5,29 \times 10^{-9})^2} = 5,142 \times 10^9 V/cm \quad (1.5)$$

Cette quantité est utilisée en physique atomique comme unité atomique du champ et correspond à $1 u.a.$ Ce champ est extrêmement fort, mais dans les solides, les excitons sont facilement ionisés à cause de leur énergie de liaison très petite devant R_H d'un facteur égal à $\frac{\mu}{\kappa^2}$ (μ masse réduite de la paire électron-trou, κ permittivité diélectrique du solide). Soit $\phi(\eta)$ ($\eta = r - z$) la fonction énergie cinétique de l'électron (ϕ est obtenue lors de la séparation de l'équation de Schrödinger en coordonnées paraboliques).

$$\phi(\eta) = -\frac{1}{4}\varepsilon^2 + \frac{C}{\eta} - \frac{m^2 - 1}{4\eta^2} + \frac{1}{4}\varepsilon\eta \quad (1.6)$$

avec $\varepsilon = \sqrt{-2E}$, E est l'énergie totale de l'électron, C paramètre introduit au moment de la séparation de l'équation de Schrödinger en coordonnées paraboliques. Sur la courbe de ϕ en fonction de η (Fig. 1.8), entre les deux points de rebroussement

($\eta_1 < \eta < \eta_2$) la fonction d'onde est oscillatoire. A l'intérieur de la barrière de potentiel ($\eta_2 < \eta < \eta_3$) la fonction d'onde décroît exponentiellement.

$$\chi(\eta) = \frac{1}{2}A |\phi(\eta)|^{-\frac{1}{4}} \exp \left[\int_{\eta_2}^{\eta} \sqrt{|\phi(x)|} dx \right] \quad (1.7)$$

où A est la constante de normalisation

En dehors de la barrière ($\eta > \eta_3$) l'énergie cinétique est positive et la fonction d'onde est oscillatoire. La barrière de potentiel s'amincit lorsque le champ croît, l'expulsion de l'électron de la région interne de l'atome à l'extérieur à travers la barrière n'est autre que l'ionisation de l'atome. Comme il existe toujours une probabilité P pour que l'électron s'échappe de l'atome, par le moyen de la méthode W.K.B, nous exprimons cette probabilité d'ionisation (Bethe et Salpeter 1957) :

$$P = \frac{\exp \left[-2 \int_{\eta_2}^{\eta_3} \sqrt{|\phi(\eta)|} d\eta \right]}{4 \int_{\eta_1}^{\eta_2} |\phi(\eta)|^{-\frac{1}{2}} d\eta} \quad (1.8)$$

Dans le cas des champs faibles, la probabilité d'une telle ionisation est insignifiante; à titre d'exemple considérons le cas suivant :

il existe une valeur de champ critique F_c telle que pour F proche de F_c , P est de l'ordre de 1 et pour une valeur légèrement inférieure, la probabilité est de l'ordre de 10^{-2} . Donc un léger changement de F au voisinage de F_c produit un grand changement de la probabilité d'ionisation, par exemple 3% de changement de F entraîne un changement de P d'un facteur 2 (Bethe et Salpeter 1957).

1.3.2 Effet Stark dans l'atome d'hélium.

Dans le cas de l'hélium (Bethe et Salpeter 1957) et pour des champs faibles, l'effet Stark produit est proportionnel au carré de l'intensité du champ et l'effet linéaire est absent. Nous avons besoin de calculer le second ordre du niveau fondamental de l'hélium. Soit E l'énergie d'un atome placé dans un champ électrique faible \vec{F} . E s'écrit sous forme de développement en champ :

$$E = E_0 + E_1 f + E_2 f^2 + \dots \quad (1.9)$$

1.3. Effet Stark dans l'atome d'hydrogène et d'hélium *.

La constante diélectrique est évaluée à partir de la relation (Atanasoff 1930) :

$$\varepsilon = 1 - 8 \pi N E_2 \quad (1.10)$$

où N est le nombre d'atomes par unité de volume. L'Hamiltonien non perturbé s'écrit en double Rydberg :

$$H_0 = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (1.11)$$

L'élément de perturbation, résultant de la contribution due au champ électrique, s'écrit $(z_1 + z_2) f$; donc la perturbation de H_0 est :

$$H_1 = (z_1 + z_2) f \quad (1.12)$$

Slater et Kirkwood (Slater 1930) ont proposé une fonction d'onde de la forme :

$$\psi = \phi_0 \alpha r_1^\nu r_2^\nu (z_1 + z_2) \quad (1.13)$$

où $\phi_0 = e^{-(2-\frac{5}{16})(r_1+r_2)/2}$ est la fonction d'onde de l'état fondamental en absence de champ et α est un paramètre variationnel, le minimum de l'énergie est obtenu pour $\nu = \frac{1}{2}$, leur calcul donne $E_2 = -0.715$ et la constante diélectrique $\varepsilon = 1.0000715$, valeur en très bon accord de la valeur expérimentale $\varepsilon = 1.000074$. L'effet Stark est utilisé aussi dans le calcul de la polarisabilité des atomes, par exemple He et Li^+ .

Nous nous sommes inspirés de l'étude de Chung et al. (1965) pour traiter le cas des excitons chargés. Ils ont étudié la polarisabilité des états 2^3S_1 et 2^1S_0 de He et de Li^+ au moyen d'un calcul variationnel. Leur fonction d'onde comportait 72 termes dans le développement: 96 termes ont été utilisés pour l'état 2^1S_0 de l'He, du fait de la faible convergence pour cet état. L'énergie d'interaction ΔE en u.a s'écrit :

$$-\Delta E = \frac{1}{2!}\alpha f^2 + \frac{1}{4!}\beta f^4 + \dots \quad (1.14)$$

où f et α sont respectivement le champ électrique et la polarisabilité dipolaire.

$$\alpha = \lim_{f \rightarrow 0} - \left(2 \frac{\Delta E}{f^2} \right) \quad (1.15)$$

En l'absence du champ électrique, les fonctions d'onde pour les états 2^3S_1 et 2^3S_0 ont une symétrie sphérique et un moment dipolaire nul. Quand un champ uniforme est appliqué, la fonction d'onde perd sa symétrie sphérique et la polarisabilité est donnée par :

$$\alpha = \lim_{f \rightarrow 0} - \left(\frac{\langle \psi | (z_1 + z_2) | \psi \rangle}{f \langle \psi | \psi \rangle} \right) \quad (1.16)$$

Ils ont conçu une fonction d'onde simple ψ construite à partir de la fonction d'onde proposée par Hylleraas et Undheim. En présence du champ elle est "déformable" , en son absence , elle coïncide avec ψ^0 fonction d'Hylleraas et Undheim.

$$\begin{aligned} \psi &= \psi^0 + (z_1 + z_2)\psi_1^+ + (z_1 - z_2)\psi_1^- \\ &= \psi^0 + \psi^I + \psi^{II} \end{aligned} \quad (1.17)$$

La polarisabilité s'écrit :

$$\alpha = \lim_{f \rightarrow 0} - \left(\frac{\langle \psi | H_1 | \psi \rangle}{f \langle \psi | \psi \rangle} \right) \quad (1.18)$$

L'Hamiltonien non perturbé s'écrit en unités atomiques :

$$H_0 = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \quad (1.19)$$

L'élément de perturbation résulte de la contribution due au champ électrique s'écrit $(z_1 + z_2)f$, donc la perturbation de H_0 est :

$$H_1 = (z_1 + z_2) \quad (1.20)$$

Ils ont utilisé une fonction d'onde exprimée en coordonnées elliptiques s , t , u et définie par :

$$\psi^0(ks, kt, ku) = \sum_{i=1}^N c_i e^{-\frac{kcs}{2}} k^{l_i+m_i+n_i} s^{l_i} u^{m_i} t^{n_i} \times \left\{ \begin{array}{l} \sinh(\frac{1}{2}kt) \\ \cosh(\frac{1}{2}kt) \end{array} \right\} \quad (1.21)$$

$$= \sum_{i=1}^N c_i \phi_i^0(ks, kt, ku). \quad (1.22)$$

1.3. Effet Stark dans l'atome d'hydrogène et d'hélium *

ψ^I et ψ^{II} sont exprimées comme suit :

$$\begin{aligned}\psi^I(ks, kt, ku, kz_1, kz_2) &= (z_1 + z_2) \sum_{i=1}^N d_i \phi_i^0(ks, kt, ku) \\ &= \sum_{i=1}^N d_i \phi_i^I(ks, kt, ku, kz_1, kz_2).\end{aligned}\quad (1.23)$$

$$\begin{aligned}\psi^{II}(ks, kt, ku, kz_1, kz_2) &= (z_1 - z_2) \sum_{i=1}^N e_i \phi_i^0(ks, kt, ku) \\ &= \sum_{i=1}^N e_i \phi_i^{II}(ks, kt, ku, kz_1, kz_2).\end{aligned}\quad (1.24)$$

où k est un paramètre d'échelle, c un coefficient non linéaire, c_i , d_i et e_i sont des coefficients variationnels. Les fonctions sinh et cosh sont choisies pour maintenir la symétrie de la fonction d'onde.

Chung et al. (1965) ont utilisé un développement de la fonction d'onde à 42 termes et même jusqu'à 96 termes pour le cas de H^- et He , cela à cause de la faible convergence de la polarisabilité pour ces deux types d'atomes. Leurs résultats sont en bon accord avec plusieurs travaux, théoriques et expérimentaux (utilisant un développement jusqu'à 252 termes et parfois 715 termes). Dans leurs calculs de $\langle r^2 \rangle$ (sans champ électrique) avec une fonction à 26 termes, leurs résultats étaient nettement meilleurs que les résultats de Pekeris (1959) utilisant un développement à 252 termes, leur fonction d'onde assure alors une convergence très rapide.

Chapitre 2

Etat fondamental du trion X^- dans
un semi-conducteur massif en
présence d'un champ électrique
uniforme faible.

2.1 Introduction

Ce chapitre est consacré au calcul variationnel de l'énergie de l'état fondamental du trion négatif X^- en présence d'un champ électrique uniforme. Dans le paragraphe (2.2), nous exprimons l'Hamiltonien dans le cadre de l'approximation de la masse effective, ensuite nous séparons le mouvement du trion en un mouvement associé au centre de masse et un autre au mouvement relatif, puis avec un choix approprié de la fonction d'onde qui tient compte de la présence du champ électrique, nous résolvons l'équation de Schrödinger effective du mouvement relatif au moyen de la méthode variationnelle utilisant une fonction d'onde à 68 termes. Nous déterminons l'énergie de l'état fondamental du trion en fonction du rapport des masses effectives σ et de l'intensité du champ F . Nous ferons aussi une comparaison avec des travaux de physique atomique reportant des résultats sur les ions hydrogénoïdes.

Dans la suite, nous montrons que l'énergie du centre de masse est quantifiée suivant la direction associée au champ, et comme les trions sont chargés, ils deviennent mobiles en présence du champ (X^- et X_2^+) comme dans le cas d'un électron dans un semi-conducteur. La fonction d'onde du centre de masse est proportionnelle à la fonction d'Airy, on peut alors s'attendre à une oscillation¹ du coefficient d'absorption comme dans le cas de l'effet Franz-Keldysh.

1. Propriétés de la fonction d'Airy.

2.2 Equation de la masse effective

Dans cette étude, nous traitons explicitement le cas du trion négatif X^- formé de deux électrons et un trou liés par l'interaction coulombienne, nous en déduisons ensuite les résultats dans le cas du trion positif X_2^+ , pour lequel il suffit d'échanger les électrons et les trous. Nous nous proposons d'étudier l'influence d'un champ électrique uniforme sur l'état fondamental. Nous dénombrons les électrons par les chiffres 1 et 2, le trou sera noté h .

En se plaçant dans l'approximation de la masse effective dans un modèle à deux bandes simples, paraboliques et isotropes, et en négligeant l'interaction d'échange électron-trou devant l'interaction coulombienne, l'Hamiltonien effectif de l'exciton chargé X^- s'écrit :

$$H = \left(\frac{P_1^2}{2 m_1^*} + U_1 \right) + \left(\frac{P_2^2}{2 m_2^*} + U_2 \right) + \left(\frac{P_h^2}{2 m_h^*} + U_h \right) + V_c + 2\varepsilon_{c0} - \varepsilon_{v0} \quad (2.1)$$

où \vec{P}_1 , \vec{P}_2 et \vec{P}_h sont respectivement les quantités de mouvement des électrons et du trou et m_i^* la masse effective de la particule ($m_1^* = m_2^* = m_e^*$). Les énergies ε_{c0} et ε_{v0} correspondent respectivement au bas de la bande de conduction et au sommet de la bande de valence au centre de la zone de Brillouin et en présence du champ électrique. V_c est le potentiel coulombien et U_i est l'énergie potentielle due au champ électrique \vec{F} :

$$V_c = \frac{e^2}{\kappa} \left\{ \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1h}} - \frac{1}{r_{2h}} \right\} \quad (2.2)$$

$$U_1 = -e\vec{r}_1 \cdot \vec{F} ; \quad U_2 = -e\vec{r}_2 \cdot \vec{F} ; \quad U_h = e\vec{r}_h \cdot \vec{F} \quad (2.3)$$

où κ est une constante diélectrique effective tenant compte de tous les effets de polarisation. \vec{r}_1 , \vec{r}_2 et \vec{r}_h , sont respectivement les vecteurs positions des électrons et du trou et les distances inter-particules sont définies par :

$$r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \quad \text{avec} \quad i = 1, 2, h \quad ; \quad j = 1, 2, h.$$

2.3. Energie fondamentale des trions en présence d'un champ électrique uniforme

L'équation de Schrödinger du complexe X^- soumis à un champ électrique uniforme s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_1 - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \Delta_h - e \vec{F} \cdot (\vec{r}_1 + \vec{r}_2 - \vec{r}_h) + V_c \right] \times \varphi_{X^-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_h) \\ = H_{X^-} \varphi_{X^-} = E_{X^-} \varphi_{X^-} = (E - 2 \varepsilon_{c0} + \varepsilon_{v0}) \varphi_{X^-} \quad (2.4)$$

où E représente la valeur propre minimale de l'opérateur H et φ_{X^-} est la fonction d'onde enveloppe associée.

2.3 Energie fondamentale des trions en présence d'un champ électrique uniforme

2.3.1 Séparation du mouvement du centre de masse et du mouvement relatif

En l'absence de toute perturbation, nous savons que l'équation de Schrödinger du trion est séparable en deux équations (Stébé 1977), l'une pour le centre de masse (c.m.), l'autre pour le mouvement relatif. Nous allons montrer que cette séparation reste possible en présence d'un champ électrique uniforme, et pour cela nous utilisons les coordonnées définies par :

$$\vec{r}(x, y, z) = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{R}(X, Y, Z) = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} - \vec{r}_h \\ \vec{R}_0(X_0, Y_0, Z_0) = (m_e^* \vec{r}_1 + m_e^* \vec{r}_2 + m_h^* \vec{r}_h) / M_0 \quad (2.5)$$

où $M_0 = 2m_e^* + m_h^*$ est la masse du c.m. de X^- . En posant $\sigma = m_e^*/m_h^*$ on en déduit :

$$\vec{r}_1 = \frac{\vec{r}}{2} + \frac{1}{2\sigma + 1} \vec{R} + \vec{R}_0. \\ \vec{r}_2 = -\frac{\vec{r}}{2} + \frac{1}{2\sigma + 1} \vec{R} + \vec{R}_0. \\ \vec{r}_h = -\frac{2\sigma}{2\sigma + 1} \vec{R} + \vec{R}_0. \quad (2.6)$$

L'Hamiltonien H_{X^-} s'écrit alors :

$$H_{X^-} = \left[\frac{P_1^2}{2m_e^*} + \frac{P_2^2}{2m_e^*} + \frac{P_h^2}{2m_h^*} + V_c - e\vec{F} \cdot \left[2 \left(\frac{\sigma + 1}{1 + 2\sigma} \right) \vec{R} + \vec{R}_0 \right] \right] \quad (2.7)$$

avec

$$V_c = \frac{e^2}{\kappa} \left\{ \frac{1}{|\vec{r}|} - \frac{1}{|\vec{R} - \vec{r}/2|} - \frac{1}{|\vec{R} + \vec{r}/2|} \right\} \quad (2.8)$$

La fonction d'onde du trion excitonique dépend des trois vecteurs \vec{r} , \vec{R} et \vec{R}_0 qui définissent la position du trion. L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$H_{X^-} \varphi_{X^-}(\vec{r}, \vec{R}, \vec{R}_0) = E_{X^-} \varphi_{X^-}(\vec{r}, \vec{R}, \vec{R}_0). \quad (2.9)$$

L'Hamiltonien H_{X^-} s'écrit comme la somme des Hamiltoniens du centre de masse $H_{cm}(\vec{R}_0)$ et du mouvement relatif $H_{rel}(\vec{r}, \vec{R})$. En supposant que le champ électrique \vec{F} est dirigé suivant l'axe oz , les expressions deviennent :

$$H_{cm} = \left(-\frac{\hbar^2}{2M_0} \Delta_{R_0} - eFZ_0 \right) \quad (2.10)$$

$$H_{rel} = \left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V_c - 2 \frac{\sigma + 1}{1 + 2\sigma} eFZ \right) \quad (2.11)$$

avec $\mu = \frac{m_e^*}{2}$ et $M = \frac{2m_e^*m_h^*}{M_0}$. La fonction d'onde est alors donnée par un produit :

$$\varphi_{X^-}(\vec{r}, \vec{R}, \vec{R}_0) = \varphi_{rel}(\vec{r}, \vec{R}) \varphi_{cm}(\vec{R}_0) \quad (2.12)$$

et l'énergie totale par :

$$E_{X^-} = E_{cm} + E_{rel} \quad (2.13)$$

où E_{cm} représente l'énergie du centre de masse du trion et E_{rel} l'énergie associée au mouvement relatif. D'autre part, nous remarquons que l'Hamiltonien H_{X^-}

2.3. Energie fondamentale des trions en présence d'un champ électrique uniforme

commute avec les composantes dans le plan horizontal de l'opérateur impulsion \vec{P}_0 du centre de masse :

$$[H_{X-}, P_{0X}] = [H_{X-}, P_{0Y}] = 0 \quad (2.14)$$

donc P_{0X} et P_{0Y} sont des constantes du mouvement et H_{X-} peut s'écrire sous la forme :

$$H_{X-} = H_{cm\perp}(X_0, Y_0) + H_{cm\parallel}(Z_0) + H_{rel}(\vec{r}, \vec{R}) \quad (2.15)$$

La fonction d'onde est alors à variables séparables :

$$\varphi_{X-}(\vec{r}, \vec{R}, \vec{R}_0) = e^{iK_{0x}X_0} e^{iK_{0y}Y_0} \varphi_{cm\parallel}(Z_0) \varphi_{rel}(\vec{r}, \vec{R}) \quad (2.16)$$

Les fonctions $\varphi_{cm\parallel}$ et φ_{rel} sont alors respectivement solutions de :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_0} \Delta_{Z_0} - eFZ_0 \right] \varphi_{cm\parallel}(Z_0) = E_{cm\parallel} \varphi_{cm\parallel}(Z_0) \quad (2.17)$$

et

$$H_{rel}(\vec{r}, \vec{R}) \varphi_{rel}(\vec{r}, \vec{R}) = E_{rel} \varphi_{rel}(\vec{r}, \vec{R}) \quad (2.18)$$

L'équation (2.17) est analogue à celle d'un électron soumis à un champ électrique dans un solide et sa solution $\varphi_{cm\parallel}(Z_0)$ est donnée (Abramowitz et Stegun 1965) par :

$$\varphi_{cm\parallel}(Z_0) = C \text{Ai} \left(-\frac{E_{cm\parallel} - eFZ_0}{\beta} \right) \quad (2.19)$$

où C est une constante de normalisation et $\beta = \left(\frac{\hbar^2}{2M_0} \right)^{\frac{1}{3}} (eF)^{\frac{2}{3}}$. Ai est la fonction d'Airy définie par (Abramowitz et Stegun 1965) :

$$\text{Ai}(-x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} du \exp \left[i \left(\frac{u^3}{3} - xu \right) \right]. \quad (2.20)$$

L'énergie correspondante est donnée par :

$$E_{cm} = E_{cm\parallel}^n + \frac{\hbar^2 K_{0x}^2}{2M_0} + \frac{\hbar^2 K_{0y}^2}{2M_0} \quad (2.21)$$

où $E_{cm\parallel}^n$ est déterminée par les conditions aux limites du cristal (Haug et Koch, 1990), $\varphi_{cm\parallel}(L_z) = 0$ ($L_z \rightarrow \infty$), où L_z est la longueur du cristal dans la direction du champ \vec{F} . Ainsi nous obtenons :

$$E_{cm\parallel}^n = -e F L_z + \frac{\hbar^2}{2 M_0} \left[\frac{3\pi e M_0}{\hbar^2} F \left(n - \frac{1}{4} \right) \right]^{\frac{2}{3}}. \quad (2.22)$$

Il apparaît donc que le spectre énergétique du centre de masse en présence de champ électrique consiste en une série de niveaux discrets que nous appellerons "Niveaux de Wannier-Stark" par analogie avec le cas d'un électron dans un solide (Wannier 1960, Koss 1972, Bentosella 1991) et dans le cas de H^- (Effet Stark) (Bethe et Salpeter 1957). Le mouvement relatif est donné par la résolution de l'équation suivante :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_r + V_c - \frac{2(\sigma + 1)}{2\sigma + 1} e F Z \right] \varphi_{rel}(\vec{r}, \vec{R}) = E_{rel} \varphi_{rel}(\vec{r}, \vec{R}) \quad (2.23)$$

Par la suite, nous utiliserons les unités atomiques du donneur, c'est-à-dire a_D pour la longueur, $2R_D$ pour l'énergie, et le paramètre sans dimension f pour l'intensité du champ électrique. Ces unités sont définies par :

$$a_D = \frac{\hbar^2 \kappa}{m_e^* e^2}, \quad 2R_D = \frac{\hbar^2}{m_e^* a_D^2}, \quad f = \frac{e a_D}{2 R_D} F. \quad (2.24)$$

Dans ces unités, l'équation (2.23) devient :

$$\left[-\frac{\sigma + 1}{4} \Delta_R - \frac{1}{2} \Delta_r + V_c - \frac{(1 + \sigma)}{(1 + 2\sigma)} (z_{1h} + z_{2h}) f \right] \varphi_{rel}(\vec{r}, \vec{R}) = E_{rel} \varphi_{rel}(\vec{r}, \vec{R}). \quad (2.25)$$

La résolution de cette équation fera l'objet du paragraphe suivant.

2.3.2 Calcul variationnel de l'énergie fondamentale.

2.3.2.1 Choix de la fonction d'onde d'essai.

Afin de décrire le mouvement relatif des trois particules, nous pouvons utiliser les coordonnées elliptiques s, t, u définissant le triangle $12h$ (voir Fig. (2.1)). L'orientation du triangle dans l'espace est précisée par les coordonnées z_{1h} ,

2.3. Energie fondamentale des trions en présence d'un champ électrique uniforme

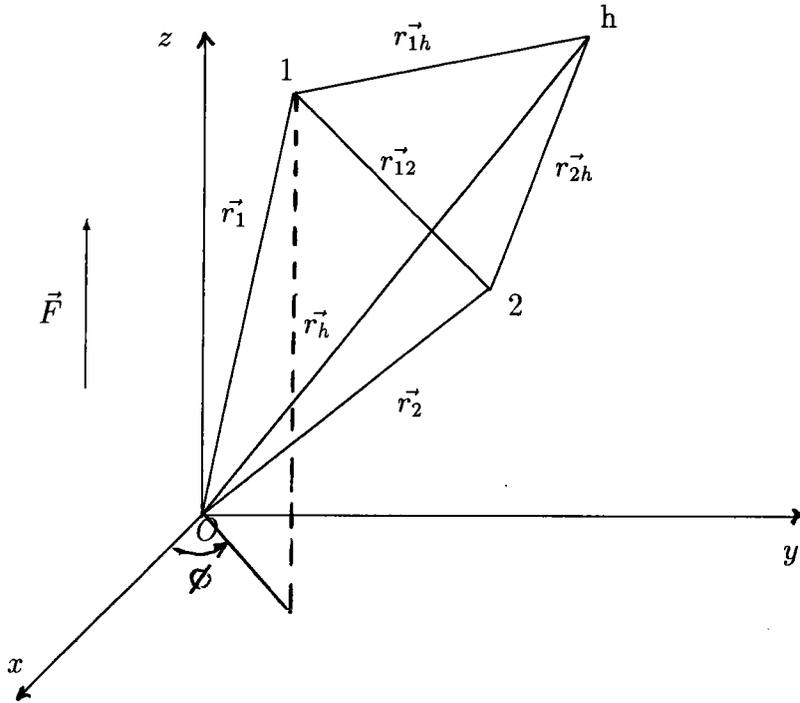


FIG. 2.1: Coordonnées du trion X^- dans le repère absolu.

z_{2h} et l'angle ϕ notant la rotation autour de l'axe oz . Par raison de symétrie, l'état fondamental est invariant par rotation autour de l'axe parallèle au champ électrique \vec{F} , nous pouvons donc ignorer la variable ϕ . Les coordonnées elliptiques sont définies par :

$$s = r_{1h} + r_{2h}, \quad t = r_{1h} - r_{2h}, \quad u = r_{12} \quad (2.26)$$

où

$$r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \quad \text{et} \quad z_{ij} = z_i - z_j \quad \text{avec} \quad i = 1, 2, h \quad ; \quad j = 1, 2, h$$

Dans ce système de coordonnées, l'Hamiltonien relatif H_{rel} s'écrit alors :

$$H_{rel} = T + V + W \quad (2.27)$$

avec

$$\begin{aligned}
 T = & \left[-\frac{\partial^2}{\partial s^2} - \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{\partial^2}{\partial u^2} + 2\frac{t}{u} \left(\frac{u^2 - s^2}{s^2 - t^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial t \partial u} \right. \\
 & - 2\frac{s}{u} \left(\frac{u^2 - t^2}{s^2 - t^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial s \partial u} - \frac{2}{u} \frac{\partial}{\partial u} - \frac{4}{s^2 - t^2} \left(s \frac{\partial}{\partial s} - t \frac{\partial}{\partial t} \right) \\
 & \left. - 2 \left(\frac{z_{1h}}{s+t} \right) \frac{\partial^2}{\partial s \partial z_{1h}} - 2 \left(\frac{z_{1h}}{s+t} \right) \frac{\partial^2}{\partial t \partial z_{1h}} - \frac{z_{1h} - z_{2h}}{u} \frac{\partial^2}{\partial u \partial z_{1h}} \right] \\
 + \sigma & \left[-2 \left(\frac{s^2 - u^2}{s^2 - t^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial s^2} - 2 \left(\frac{u^2 - t^2}{s^2 - t^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{4}{s^2 - t^2} \left(s \frac{\partial}{\partial s} - t \frac{\partial}{\partial t} \right) \right. \\
 & - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_{1h}^2} - 2 \left(\frac{z_{1h}}{s+t} + \frac{z_{2h}}{s-t} \right) \frac{\partial^2}{\partial s \partial z_{1h}} - 2 \left(\frac{z_{1h}}{s+t} - \frac{z_{2h}}{s-t} \right) \frac{\partial^2}{\partial t \partial z_{1h}} \\
 & \left. - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_{2h}^2} - 2 \left(\frac{z_{1h}}{s+t} + \frac{z_{2h}}{s-t} \right) \frac{\partial^2}{\partial s \partial z_{2h}} - 2 \left(\frac{z_{1h}}{s+t} - \frac{z_{2h}}{s-t} \right) \frac{\partial^2}{\partial t \partial z_{2h}} - \frac{\partial^2}{\partial z_{1h} \partial z_{2h}} \right]
 \end{aligned}$$

$$V = \frac{1}{u} - \frac{4s}{s^2 - t^2}$$

et

$$W = -\frac{\sigma + 1}{2\sigma + 1} f(z_{1h} + z_{2h})$$

2.3. Energie fondamentale des trions en présence d'un champ électrique uniforme

Le choix de la fonction d'essai doit tenir compte de l'existence de toutes ces variables. Nous choisissons une fonction d'onde variationnelle, symétrique par rapport à la permutation des coordonnées des deux électrons, c'est-à-dire :

$$\varphi_{rel}(s, t, u, z_{1h}, z_{2h}) = \varphi_{rel}(s, -t, u, z_{2h}, z_{1h})$$

Notre fonction est inspirée de celles utilisées pour le calcul de la constante diélectrique de l'hélium (Atanasoff 1930), ou pour l'étude de la polarisabilité de H^- et He (Chung 1965) :

$$\Psi(s, t, u, z_{1h}, z_{2h}) = \Psi^0(s, t, u) + \Psi^I(s, t, u, z_{1h}, z_{2h}) \quad (2.28)$$

avec

$$\Psi^0(s, t, u) = \sum_{mnp} c_{mnp} |mnp\rangle \quad (2.29)$$

et

$$\Psi^I(s, t, u, z_{1h}, z_{2h}) = (z_{1h} + z_{2h}) \sum_{mnp} d_{mnp} |mnp\rangle \quad (2.30)$$

où $|mnp\rangle = e^{-\frac{s}{2}} s^m t^n u^p$. La fonction d'onde variationnelle s'écrit alors :

$$\varphi_{rel}(s, t, u, z_{1h}, z_{2h}) = \Psi(ks, kt, ku, kz_{1h}, kz_{2h}) \quad (2.31)$$

où k est un paramètre d'échelle, dont l'introduction dans la fonction $e^{-(s/2)}$ permet de prendre en compte l'effet d'écrantage entre les deux électrons. Ce facteur est important pour obtenir de bonnes valeurs d'énergie (Bethe et Salpeter 1957). Les coefficients c_{mnp} , d_{mnp} ainsi que k sont des paramètres variationnels, obtenus lors de la minimisation de l'énergie :

$$E(k) = \frac{\langle \varphi_{rel} | H | \varphi_{rel} \rangle}{\langle \varphi_{rel} | \varphi_{rel} \rangle} \quad (2.32)$$

Notre fonction tient compte de l'influence du champ :

- Quand le champ est absent ($F \rightarrow 0$), la fonction d'onde se réduit à $\Psi^0(ks, kt, ku)$ qui représente la fonction d'onde de l'état fondamental du trion en l'absence du champ électrique (Feddi et Stébé 1987).

| ω | m | n | p | ω | m | n | p |
|----------|-----|-----|-----|----------|-----|-----|-----|
| 0 | 0 | 0 | 0 | 2 | 0 | 1 | |
| 1 | 0 | 0 | 1 | 3 | 0 | 0 | |
| | 1 | 0 | 0 | 4 | 0 | 0 | 4 |
| 2 | 0 | 0 | 2 | 0 | 2 | 2 | |
| | 0 | 2 | 0 | 0 | 4 | 0 | |
| | 1 | 0 | 1 | 1 | 0 | 3 | |
| | 2 | 0 | 0 | 1 | 2 | 1 | |
| 3 | 0 | 0 | 3 | 2 | 0 | 2 | |
| | 0 | 2 | 1 | 2 | 2 | 0 | |
| | 1 | 0 | 2 | 3 | 0 | 1 | |
| | 1 | 2 | 0 | 4 | 0 | 0 | |

TAB. 2.1: Indices des coefficients de la fonction d'onde pour $\omega = 4$

- Quand le champ est appliqué, les particules de charges contraires tendent à s'éloigner l'une de l'autre dans la direction du champ et la contribution de Ψ^I dépendant de z va augmenter.

Nous supposons que l'état fondamental du système est obtenu pour une fonction d'onde enveloppe symétrique par rapport à la permutation des deux électrons. Donc pour assurer la parité de la fonction d'onde, il faut que l'entier n soit pair. Les entiers m, n, p sont choisis tels que :

$$m + n + p \leq \omega \quad (2.33)$$

où ω est un entier fixant le nombre de termes du développement. La fonction d'onde contient (2×22) termes avec n pair (voir tableau 2.1).

2.3.2.2 Élément de volume

L'élément de volume $d\tau$ (Appendice B) s'exprime en fonction des variables s, t, u, z_{1h} et z_{2h} définissant la position du trion dans l'espace tridimensionnel :

$$d\tau = \frac{\pi}{2} \frac{(s^2 - t^2)}{D} u ds dt du dz_{1h} dz_{2h} \quad (2.34)$$

2.3. Energie fondamentale des trions en présence d'un champ électrique uniforme

où le dénominateur D s'écrit :

$$D = \sqrt{z_{1h}z_{2h}(2s^2 + 2t^2 - 4u^2) - (s+t)^2z_{2h}^2 - (s-t)^2z_{1h}^2 - u^4 + (s^2 + t^2)u^2 - s^2t^2} \quad (2.35)$$

Les bornes d'intégration des différentes coordonnées sont définies par :

$$\int d\tau = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_{-u}^{+u} dt \int_{-\frac{s-t}{2}}^{\frac{s-t}{2}} dz_{1h} \int_\alpha^\beta dz_{2h}$$

où α et β sont les racines de l'équation $D = 0$ (Appendice B).

2.3.2.3 Méthode de résolution

Le problème consiste à déterminer le minimum de l'équation (2.32) en faisant varier le paramètre k et les coefficients c_{mnp} et d_{mnp} . Des solutions non triviales existent uniquement si le déterminant de la matrice $(k^2\tilde{T} - k\tilde{V} - \tilde{W}/k)$ est nul, nous obtenons alors le déterminant séculaire d'ordre (2×22) termes exprimé ci-dessous en quatre blocs :

$$\begin{vmatrix} (k^2T - kV - EN)_{mnp0}^{m'n'p'0} & \frac{1}{k}W_{mnp1}^{m'n'p'0} \\ \frac{1}{k}W_{mnp0}^{m'n'p'1} & (k^2T - kV - EN)_{mnp1}^{m'n'p'1} \end{vmatrix} = 0 \quad (2.36)$$

avec :

$$T_{mnpq}^{m'n'p'q'} = \langle m'n'p' | (z_{1h} + z_{2h})^q T (z_{1h} + z_{2h})^q | mnp \rangle$$

$$V_{mnpq}^{m'n'p'q'} = \langle m'n'p' | (z_{1h} + z_{2h})^q V (z_{1h} + z_{2h})^q | mnp \rangle$$

$$W_{mnpq}^{m'n'p'q'} = \langle m'n'p' | (z_{1h} + z_{2h})^q W (z_{1h} + z_{2h})^q | mnp \rangle$$

$$N_{mnpq}^{m'n'p'q'} = \langle m'n'p' | (z_{1h} + z_{2h})^{q+q'} | mnp \rangle$$

Toutes les intégrales intervenant dans ces éléments de matrice ont été calculées analytiquement. Les expressions explicites en sont données à l'appendice C. La condition $\partial E/\partial c_{mnp} = \partial E/\partial d_{mnp} = \partial E/\partial k = 0$ pour toute combinaison valide des entiers m, n, p permet d'obtenir la valeur propre minimale de (2.36).

2.3.2.4 Présentation des résultats

Dans tous les calculs présentés ici, nous faisons varier le paramètre k dans un intervalle $[k_m, k_M]$ afin de trouver le minimum relatif de l'équation (2.32), car lorsque k tend vers zéro le potentiel dû au champ électrique augmente indéfiniment² et par suite il n'y aura plus d'états liés.

Sur la figure (2.2), nous avons montré un exemple qui illustre ce phénomène pour différentes valeurs du champ et pour la même valeur de σ . La valeur de k_m a dû être estimée pour toute combinaison de f et σ .

La figure (2.3) représente les variations des valeurs moyennes de l'énergie cinétique, potentielle et totale des électrons et du trou pour une valeur de $\sigma = 0.1$. Cette figure montre d'une part que lorsque f augmente l'énergie cinétique totale $T_e + T_h$ diminue. D'autre part, l'énergie potentielle $V + W$ diminue rapidement en valeur absolue de sorte que l'énergie moyenne totale H augmente en valeur absolue. Il faut s'attendre alors à une augmentation des distances moyennes entre les particules. Lorsque f tend vers zéro, l'énergie totale H du complexe X^- tend vers H_0 en absence de champ. Comme nous l'avons énoncé ci-dessus, H est une fonction strictement décroissante de F conformément au théorème de Hellman-Feynman (Lévy-Leblond 1969) en l'appliquant à l'équation (2.11) :

$$\frac{dH_m}{dF} = \frac{\langle \psi | \frac{dH}{dF} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

$$-2e \frac{\sigma + 1}{2\sigma + 1} \langle Z \rangle \leq 0$$

Comme nous le constatons, au fur et à mesure que le champ augmente, le minimum se déplace vers les basses énergies, ce qui permet de dire que E_{rel} augmente en valeur absolue; nous remarquons aussi que ce minimum disparaît complètement à partir d'une certaine valeur du champ que l'on notera f_c .

Finalement, nous pouvons affirmer que la méthode variationnelle n'est plus bien adaptée à partir d'une valeur f supérieure à f_c . Sur la figure (2.4) nous présentons la variation de l'énergie relative du trion X^- en fonction de σ et pour différentes

2. voir éléments extra-diagonaux du déterminant séculaire.

2.3. *Energie fondamentale des trions en présence d'un champ électrique uniforme*

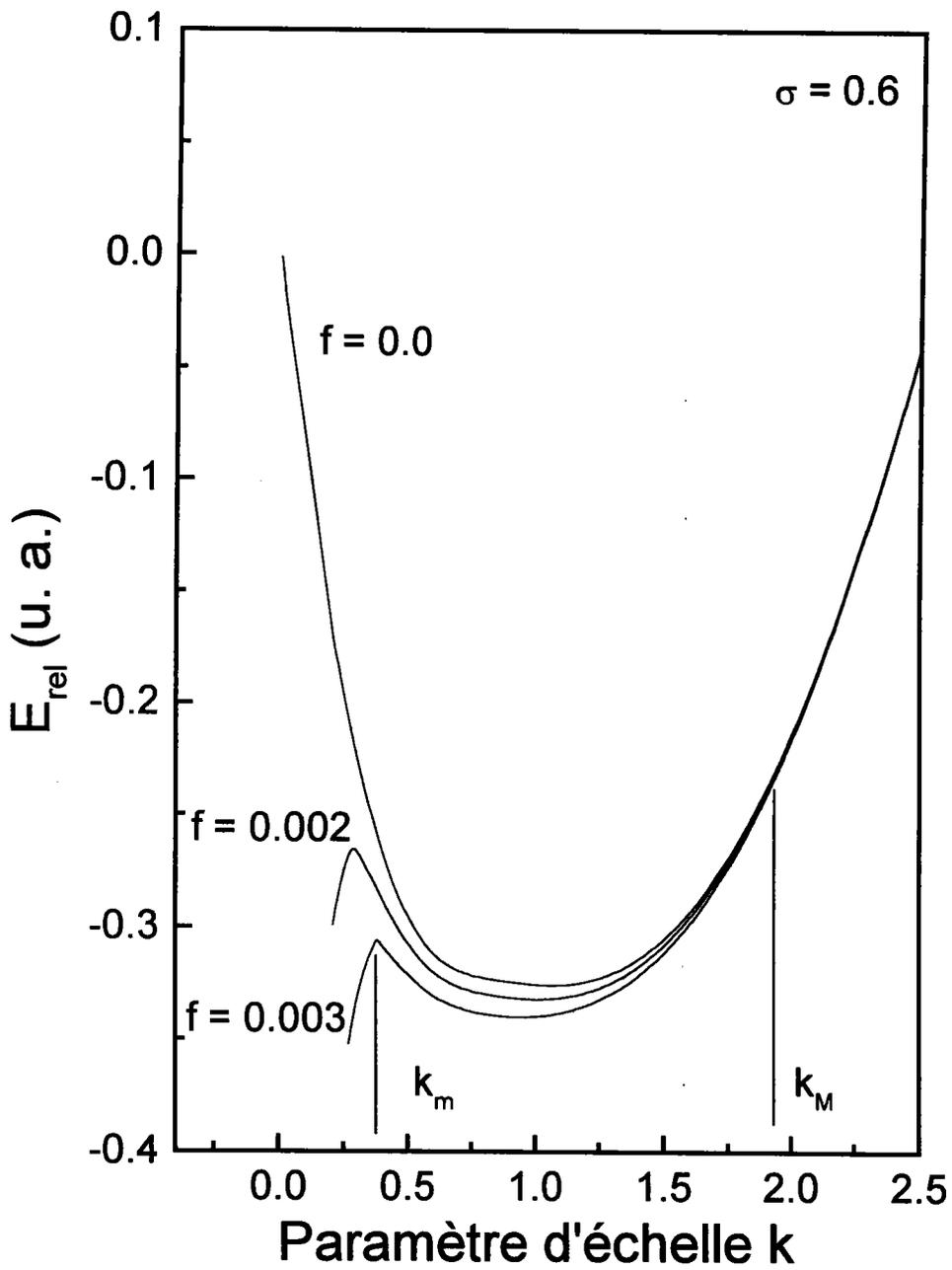


FIG. 2.2: *Energie relative du trion X^- en fonction du paramètre d'échelle k .*

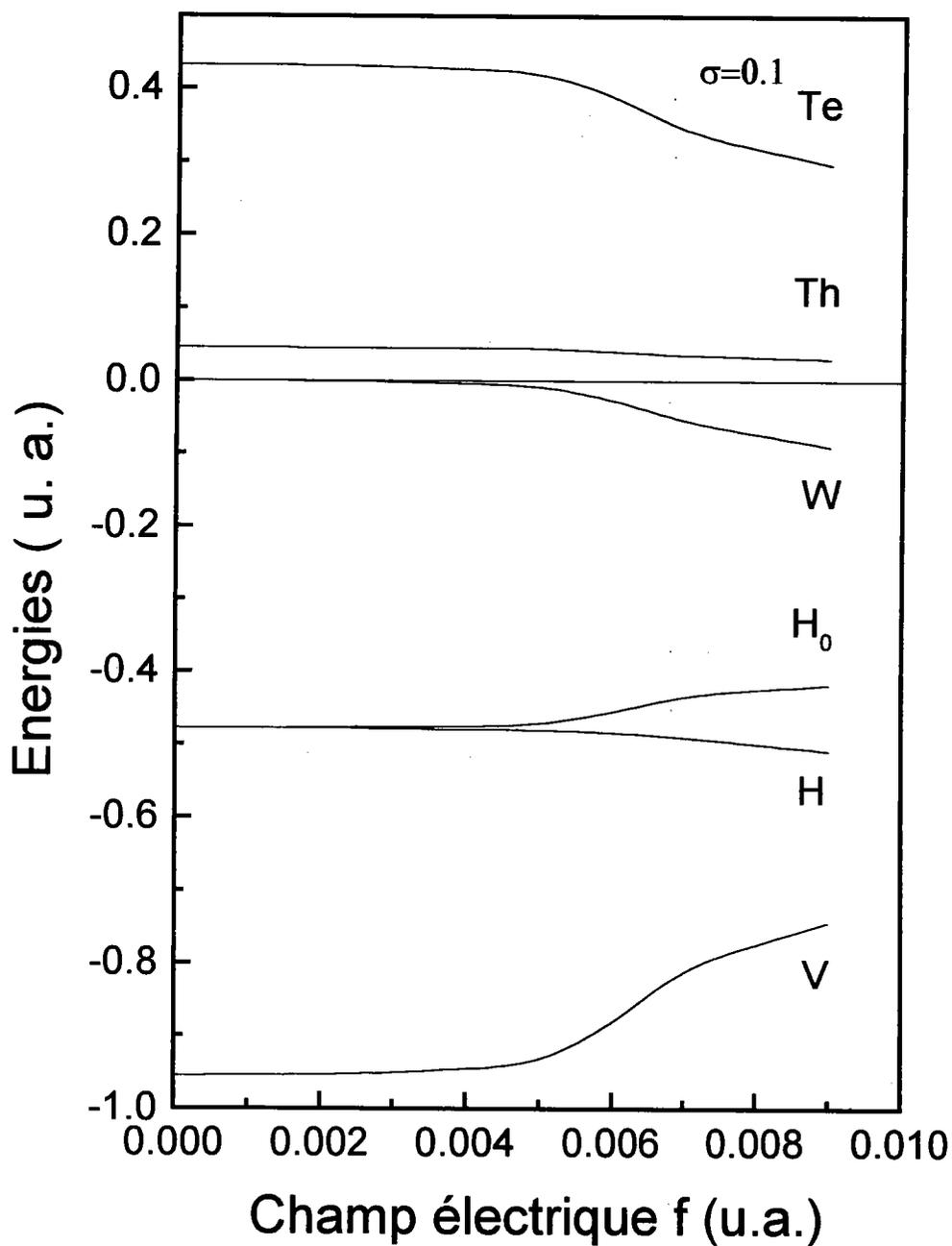


FIG. 2.3: Tracé des énergies moyennes totales H_0 et H , cinétiques T_e et T_h , potentielles V et W en fonction du champ électrique pour une valeur de $\sigma = 0.1$.

2.3. Energie fondamentale des trions en présence d'un champ électrique uniforme

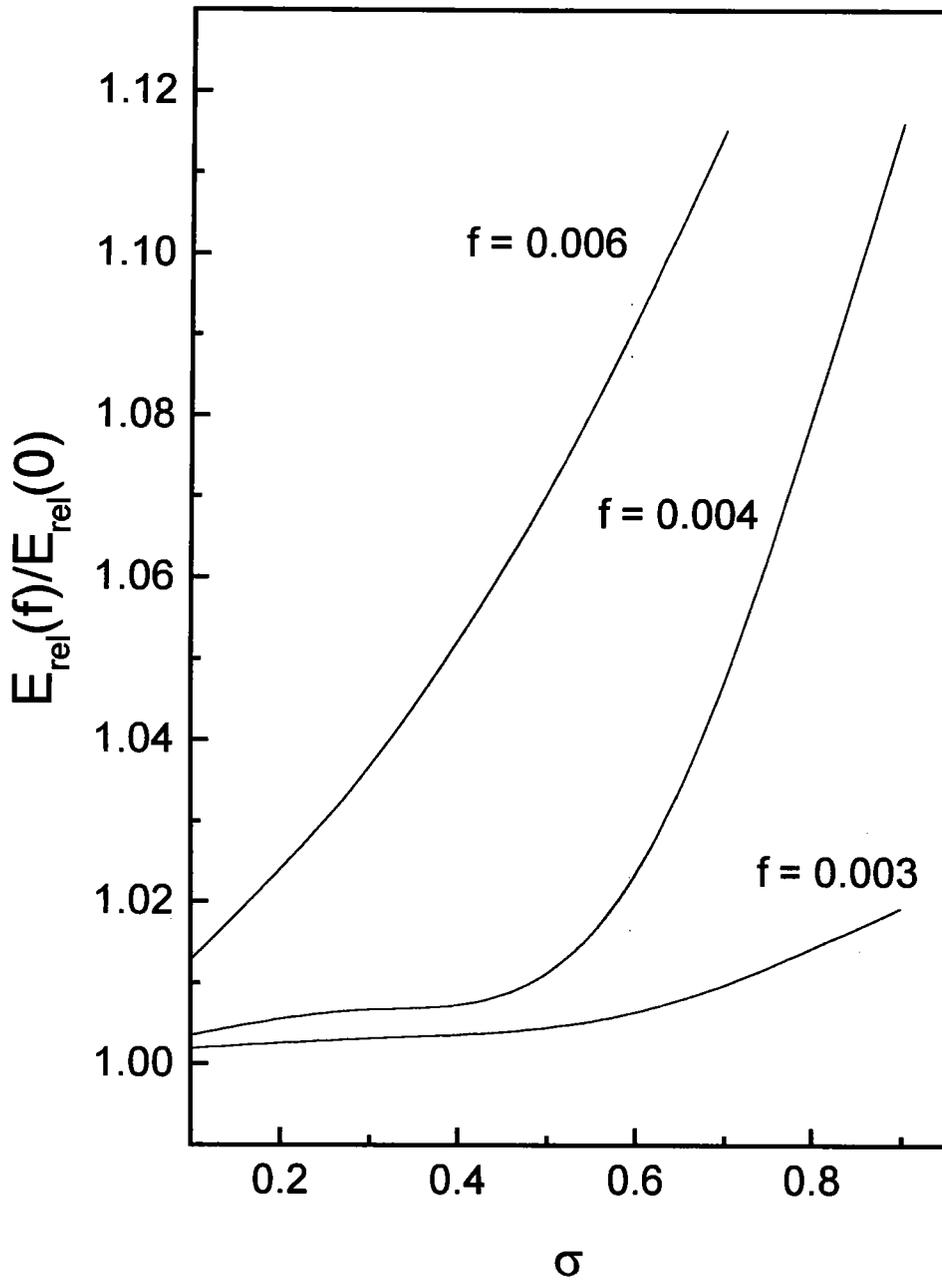


FIG. 2.4: Energie relative de l'exciton chargé X^- en fonction du rapport de masse σ pour différentes valeurs de champs.

valeurs de champ f . Nous remarquons que l'énergie relative augmente (en valeur absolue) avec le champ cette croissance est d'autant plus forte que σ est proche de 1.

2.4 Comparaison avec la physique atomique.

Lorsque $\sigma = 0$, l'équation de Schrödinger du trion X^- ressemble formellement à celle de l'ion H^- . Nous nous proposons donc de faire une comparaison avec les travaux de Chung et al. (1965). Rappelons l'expression de la fonction d'onde utilisée par Chung :

$$\Psi = \psi^0 + \psi^I + \psi^{II} \quad (2.37)$$

avec

$$\psi^I = (z_{1h} + z_{2h})\psi_1 \quad \text{et} \quad \psi^{II} = (z_{1h} - z_{2h})\psi_2 \quad (2.38)$$

$$\psi^0(ks, kt, ku) = \sum_{i=1}^N c_i e^{-\frac{kcs}{2}} k^{l_i+m_i+n_i} s^{l_i} u^{m_i} t^{n_i} \times \begin{cases} \sinh(\frac{1}{2}kt) \\ \cosh(\frac{1}{2}kt) \end{cases}$$

$$\psi^I(ks, kt, ku, kz_{1h}, kz_{2h}) = (z_{1h} + z_{2h}) \sum_{i=1}^N d_i e^{-\frac{kcs}{2}} k^{l_i+m_i+n_i+1} s^{l_i} u^{m_i} t^{n_i} \times \begin{cases} \sinh(\frac{1}{2}kt) \\ \cosh(\frac{1}{2}kt) \end{cases}$$

$$\psi^{II}(ks, kt, ku, kz_{1h}, kz_{2h}) = (z_{1h} - z_{2h}) \sum_{i=1}^N e_i e^{-\frac{kcs}{2}} k^{l_i+m_i+n_i+1} s^{l_i} u^{m_i} t^{n_i} \times \begin{cases} \sinh(\frac{1}{2}kt) \\ \cosh(\frac{1}{2}kt) \end{cases}$$

Les variables s, t, u, z_{1h} et z_{2h} ont la même signification que celles utilisées dans notre cas. Kwong et al. ont introduit les fonctions \sinh et \cosh pour imposer la parité de la fonction d'onde du trion; par exemple pour l'état fondamental de H^- la fonction \cosh est utilisée lorsque n_i est pair et \sinh lorsque n_i est impair. Dans notre cas, le terme t^n avec n pair suffit pour assurer la parité, ce qui réduit le nombre de termes dans la fonction d'onde, et par suite le temps de calcul. Nous vérifions que même en absence de ψ^{II} dans notre fonction d'onde, nous avons atteint une convergence très satisfaisante (voir Tableau (2.2)). Ce tableau montre la différence minimale entre l'énergie obtenue par Kwong et notre énergie relative de X^- . Le nombre de termes choisi dans le développement de notre fonction d'onde est certainement suffisant pour calculer les énergies relatives et

| $f(\times 10^{-5})$ | $E(H^-)^a$ | $E(X^-)^b(\sigma = 0)$ | $\Delta E = E(X^-) - E(H^-)$ |
|---------------------|-------------|------------------------|------------------------------|
| 0 | -0.52769913 | -0.52766973 | 3×10^{-5} |
| 2 | -0.52769917 | -0.52766976 | 3×10^{-5} |
| 4 | -0.52769929 | -0.52766985 | 3×10^{-5} |
| 6 | -0.52769949 | -0.52767000 | 3×10^{-5} |

- a. Chung pour (3×14 termes).
b. nos résultats pour (2×22 termes).

TAB. 2.2: Comparaison entre les énergies relatives de H^- et X^- pour $\sigma = 0$.

les énergies de liaison de X^- , puisque la différence comme nous le constatons dans le tableau (2.2) est de l'ordre de $3 \times 10^{-5} u.a.$. Le bon accord observé sur ce tableau témoigne de la bonne qualité de l'approximation de la fonction d'onde.

2.4.1 Calcul des rayons moyens.

Nous avons calculé les valeurs moyennes des distances inter-particules du trion X^- , ceci pour toutes les valeurs de σ comprises entre 0 et 1. Cette étude a été réalisée afin de comprendre les variations d'énergies cinétique et potentielle en présence d'un champ électrique faible, puis de souligner l'influence du champ sur les différentes distances r_{1h} , r_{2h} et r_{12} . La valeur moyenne de r_{ij} s'écrit :

$$\langle r_{ij} \rangle = \frac{\sum_{mnpqm'n'p'q'} e_{mnpq} e_{m'n'p'q'}^* \langle m'n'p'q' | r_{ij} (z_{1h} + z_{2h})^{q+q'} | mnp \rangle}{\sum_{mnpqm'n'p'q'} e_{mnpq} e_{m'n'p'q'}^* N_{mnpq}^{m'n'p'q'}} \quad (2.39)$$

avec

$$e_{mnp0} = c_{mnp} \quad \text{et} \quad e_{mnp1} = d_{mnp} \quad (2.40)$$

Les valeurs trouvées sont regroupées dans le tableau (2.3).

Sur la figure (2.5), nous avons illustré la variation de r_{1h} pour un champ nul et un champ de l'ordre de 4.10^{-3} pour différentes valeurs de σ . Nous remarquons combien r_{1h} est affecté par un champ modeste et cela au fur et à mesure que σ augmente, par exemple pour $\sigma = 1$, la valeur de r_{1h} a quadruplé. La valeur moyenne de r_{2h} , est bien sûr égale à celle de r_{1h} , puisque les deux électrons

2.4. Comparaison avec la physique atomique.

| σ | $r_{1h}, r_{2h} (f = 0)$ | $r_{1h}, r_{2h} (f = 0.004)$ | $r_{12} (f = 0)$ | $r_{12} (f = 0.004)$ |
|-----------|--------------------------|------------------------------|------------------|----------------------|
| 0.100E+00 | 3.01510E+00 | 3.35741E+00 | 4.87402E+00 | 5.51799E+00 |
| 0.200E+00 | 3.32636E+00 | 3.93967E+00 | 5.34956E+00 | 6.50977E+00 |
| 0.300E+00 | 3.62219E+00 | 4.77809E+00 | 5.79675E+00 | 7.99484E+00 |
| 0.400E+00 | 3.90517E+00 | 6.40138E+00 | 6.22005E+00 | 1.09924E+01 |
| 0.500E+00 | 4.17745E+00 | 9.48942E+00 | 6.62333E+00 | 1.68214E+01 |
| 0.600E+00 | 4.44075E+00 | 1.23990E+01 | 7.00970E+00 | 2.23166E+01 |
| 0.700E+00 | 4.69650E+00 | 1.45714E+01 | 7.38177E+00 | 2.63897E+01 |
| 0.800E+00 | 4.94583E+00 | 1.64573E+01 | 7.74165E+00 | 2.99048E+01 |
| 0.900E+00 | 5.18966E+00 | 1.83391E+01 | 8.09106E+00 | 3.34031E+01 |
| 1.000E+00 | 5.42877E+00 | 2.04070E+01 | 8.43145E+00 | 3.72461E+01 |

TAB. 2.3: *Distances inter-particules moyennes dans le complexe X^-*

sont supposés indiscernables. Nous avons également reporté sur la figure (2.6) la valeur moyenne de r_{12} , qui est supérieure à r_{1h} à cause de l'effet de répulsion des deux électrons. De plus cette valeur augmente considérablement à mesure que σ augmente.

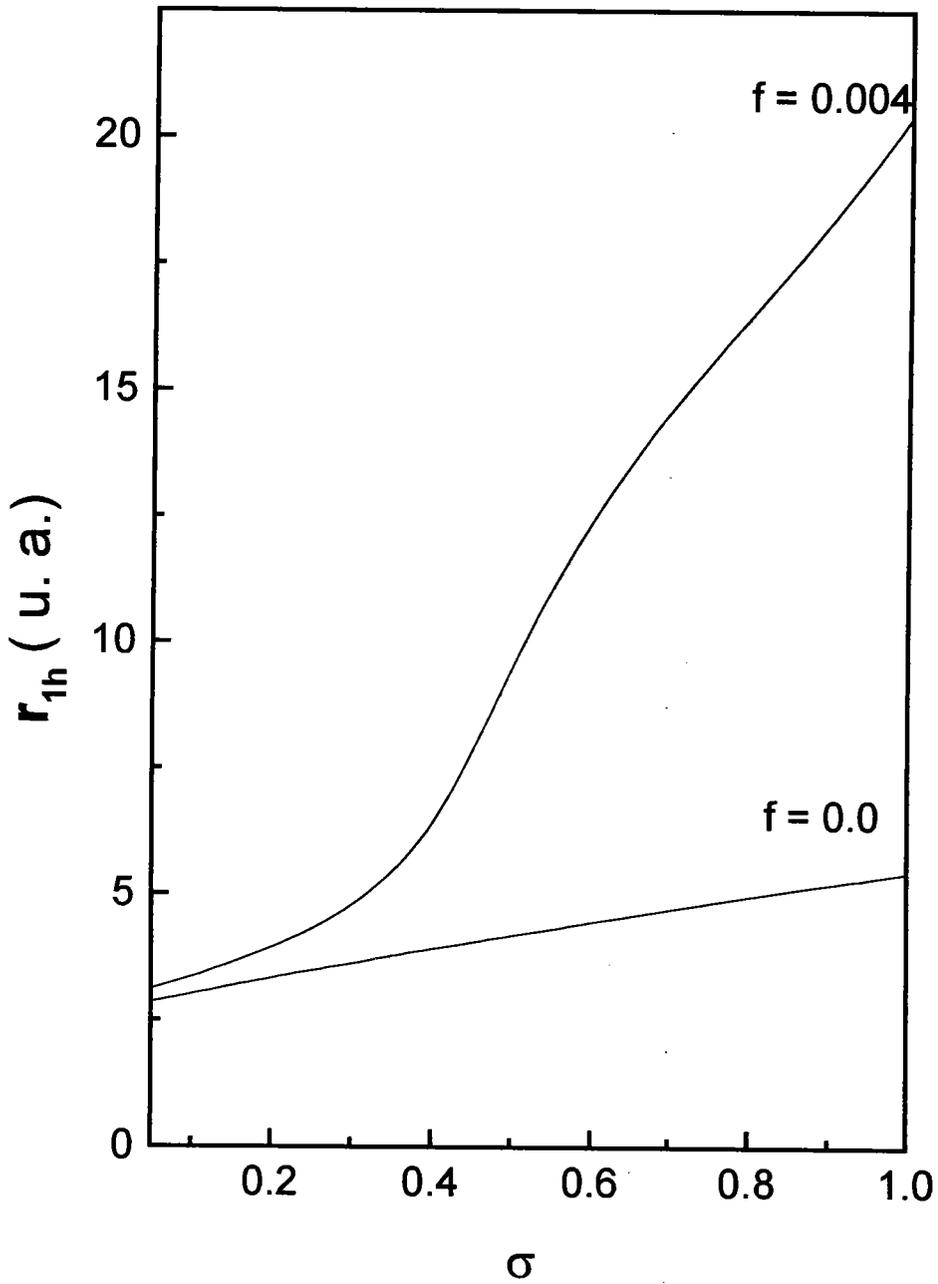


FIG. 2.5: Distance moyenne r_{1h} du trion X^- en présence d'un champ électrique.

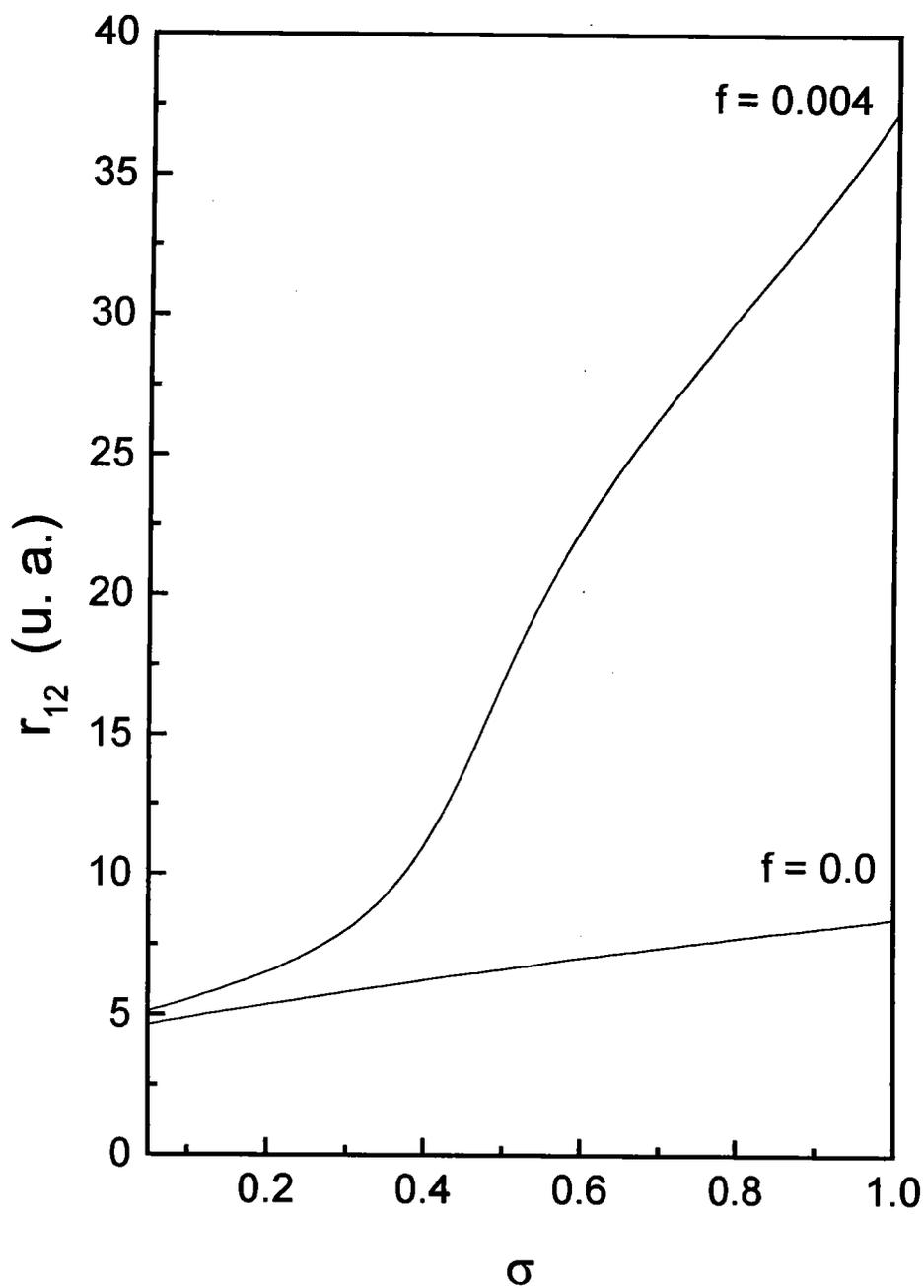


FIG. 2.6: Distance moyenne r_{12} du trion X^- en présence d'un champ électrique.

2.5 Conclusion

Nous avons montré qu'en présence d'un champ électrique, le mouvement du trion peut encore être séparé en un mouvement du centre de masse et en un mouvement relatif. Le mouvement du centre de masse est alors analogue à celui d'un électron dans un solide. L'énergie associée à ce mouvement est quantifiée. A partir de l'équation de la masse effective, et en utilisant la méthode variationnelle avec un choix de fonction d'onde inspirée des travaux concernant le calcul de polarisabilité des atomes hydrogénoïdes, nous avons calculé l'énergie fondamentale du trion X^- (3D) en présence d'un champ électrique uniforme. Dans le cas $\sigma = 0$ qui correspond au cas limite de l'ion H^- , nous avons comparé nos résultats avec ceux de Chung (1965), avec un très bon accord. Cette première étude nous a permis de tester les limites de la méthode variationnelle, car au delà d'une certaine valeur de champ que nous avons appelé f_c , nous n'obtenons plus d'état stable.

Chapitre 3

Etude de la stabilité du trion X^-
en présence d'un champ électrique
dans un semi-conducteur massif.

E. Feddi, F. Dujardin, J. Diouri, A. Elhassani M. Katih and B. Stébé *phys. stat. sol. (b)*
201, 521 (1997).

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous nous proposons de prouver la stabilité de l'exciton chargé X^- en présence d'un champ électrique uniforme. Nous montrerons qu'une condition suffisante pour obtenir la stabilité est que la différence des énergies relatives du trion et de l'exciton soit négative. C'est cette différence que nous appellerons énergie de liaison. Par souci de cohérence, l'énergie relative de l'exciton sera déterminée par la méthode variationnelle comme dans le cas du trion. Nous rappellerons les résultats obtenus par Blossey (1970, 1971) en perturbation, et par Lederman (1976) par la méthode WKB pour des champs plus élevés. Nous comparerons nos résultats avec ceux obtenus en perturbation dans la limite des champs faibles. Nous calculerons l'énergie de liaison et la comparerons aux résultats de Katih et al. (1993). Enfin, nous calculerons les rayons moyens; nous montrerons que ces derniers augmentent en présence du champ.

3.2 Energie relative de l'exciton en présence d'un champ électrique.

Dans ce paragraphe nous étudions le comportement de l'exciton sous l'influence d'un champ électrique faible; nous calculons aussi l'énergie relative de l'exciton qui servira dans la suite pour déterminer l'énergie de liaison du trion.

3.2.1 Comparaison des méthodes utilisées pour déterminer l'état $1s$ de l'exciton.

Comme nous l'avons signalé au chapitre 1, la présence du champ électrique, supposé dirigé suivant Oz , brise l'invariance par translation de l'Hamiltonien effectif:

$$H_{eff} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_h^*}\Delta_h - \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} - e(z_e - z_h)F + \varepsilon_c - \varepsilon_v \quad (3.1)$$

où ε_v et ε_c sont respectivement les énergies des bandes de valence et de conduction en présence du champ électrique, au centre de la zone de Brillouin. L'exciton en présence d'un champ électrique a été l'objet de nombreuses études tant expérimentales que théoriques. Parmi les premiers travaux, citons ceux de Duke et Alferieff (1965 et 1966) qui ont inclus pour la première fois l'attraction coulombienne entre la paire electron-trou en présence d'un champ électrique pour tenter d'expliquer l'effet Franz-Keldysh (1958). Ensuite viennent Blossey et al. (1970 et 1971) qui furent les premiers à résoudre l'équation de Schrödinger de l'exciton pour les états liés et ceux du continuum, puis Dow et al. (1970 et 1976) ont étudié l'électroabsorption en incluant l'effet excitonique. Ces auteurs ont utilisé les coordonnées paraboliques pour séparer l'équation de Schrödinger de l'exciton, puis ils ont appliqué la méthode WKB pour résoudre les deux équations obtenues. Cela permet d'étendre la validité de leur calcul à des champs forts. Nous rappelons que la méthode WKB est adaptée pour les états hautement excités (Bethe et Salpeter).

3.2. Energie relative de l'exciton en présence d'un champ électrique.

Les coordonnées paraboliques sont utilisées lorsqu'une direction de l'espace est privilégiée (Bethe et Salpeter 1957), ici la direction du champ électrique \vec{F} . Elles sont définies par :

$$\zeta = r + z \quad \eta = r - z \quad \varphi = \tan^{-1} \left(\frac{y}{x} \right) \quad (3.2)$$

où

$$x = \sqrt{\zeta\eta} \cos(\varphi) \quad y = \sqrt{\zeta\eta} \sin(\varphi) \quad z = \frac{1}{2}(\zeta - \eta).$$

Les surfaces définies par $\zeta = cte$ et $\eta = cte$ sont des paraboloïdes d'axe oz ayant pour foyer l'origine, d'où la dénomination de coordonnées paraboliques.

Les unités excitoniques sont obtenues à partir des unités du donneur en remplaçant m_e^* par la masse réduite de l'exciton μ . La figure (3.2) montre que pour des champs $f_X = 0.1$ et 0.32 (en unités excitoniques) il y a déplacement du niveau $1s$ vers les basses énergies, il s'agit du déplacement quadratique de Stark, ici l'effet linéaire est absent comme dans le cas de l'atome d'hydrogène (voir Chapitre 1), le même phénomène est observé chez Ralph (1968) pour tenter d'expliquer l'effet Franz-Keldysh. Par contre pour les autres états excités, où l'effet linéaire est présent, le déplacement de l'énergie s'effectue vers les hautes énergies (Blossey 1972) au fur et à mesure que f_X augmente. Leurs résultats sont en très bon accord avec l'énergie obtenue par la méthode perturbative au troisième ordre (Ishida et al. 1928). Cette énergie peut être obtenue en unités excitoniques (R_X) à partir des résultats connus pour l'atome d'hydrogène (Landau 1966) :

$$\begin{aligned} E_{nim} &= -\frac{1}{n^2} - \frac{3}{2} f_X n(n - 2i - m + 1) \\ &- \frac{1}{32} f_X^2 n^4 [17n^2 - 3(n - 2i - m + 1)^2 - 9m^2 + 19] \\ &- \frac{3}{128} f_X^3 n^7 (n - 2i - m + 1) \times [23n^2 - (n - 2i - m + 1)^2 + 11m^2 + 39]. \end{aligned} \quad (3.3)$$

où $i = l + 1$ et n, l, m sont les nombres quantiques. L'état fondamental est obtenu pour : $n = 1, l = m = 0$.

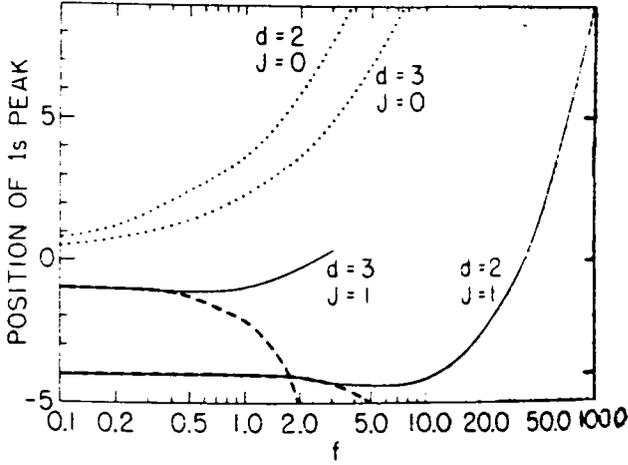


FIG. 3.1: Positions des pics d'absorption excitonique (trait plein), limite de champ faible (tirets), limite de l'effet Franz-Keldysh (pointillés). $d=3$ SC massif, $d=2$ SC bidimensionnel, $J=0$ sans interaction coulombienne, $J=1$ avec interaction coulombienne. (d'après Lederman (1976)).

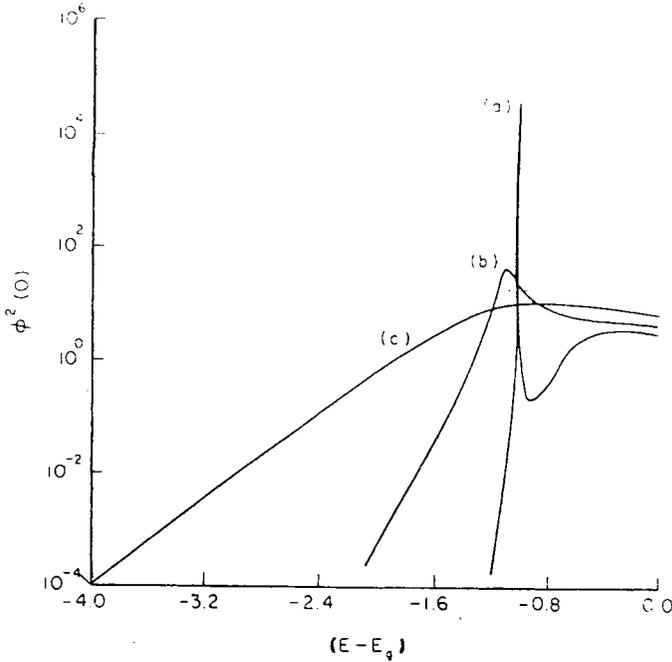


FIG. 3.2: Effet du champ électrique sur l'état fondamental de l'exciton ((a) $f=0.1$, (b) $f=0.32$, (c) $f=1.0$)(d'après Blossey (1972)).

3.2. Energie relative de l'exciton en présence d'un champ électrique.

Pour obtenir l'énergie de l'exciton par méthode perturbative en unités atomiques du donneur, il suffit de remplacer dans l'expression ci-dessus R_X par $\frac{R_D}{2(\sigma+1)}$ et f_X par $2(\sigma+1)^2 f$. Pour l'état fondamental, E_{1s} s'écrit en unités atomiques :

$$E_{1s} = -\frac{0.5}{(\sigma+1)} - \frac{9}{4}(\sigma+1)^3 f^2 \quad (3.4)$$

Parmi les travaux expérimentaux, nous pouvons citer ceux de Williams (1960 et 1962), de Yacoby (1966) et celui de Koss (1972), mais le champ appliqué nécessaire pour observer l'effet Franz-Keldysh est très fort par rapport au champ que nous utilisons.

3.2.2 Résolution de l'équation de la fonction enveloppe excitonique.

Afin de calculer l'énergie de liaison du trion, nous déterminons l'énergie de l'exciton par méthode variationnelle. Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, l'Hamiltonien d'un exciton dans un semiconducteur massif en présence d'un champ électrique uniforme \vec{F} appliqué suivant la direction (oz) s'écrit :

$$H_X = H_{eff} - E_g = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \Delta_h - \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} - e(z_e - z_h)F \quad (3.5)$$

\vec{r}_e et \vec{r}_h sont respectivement les vecteurs positions de l'électron et du trou. Montrons que l'équation de Schrödinger de l'exciton est séparable en présence du champ électrique. Nous posons :

$$\vec{r}(x, y, z) \quad \text{vecteur du mouvement relatif,}$$

$$\vec{R}_0(X_0, Y_0, Z_0) \quad \text{vecteur du centre de masse.}$$

définis par :

$$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_h \quad ; \quad M_X \vec{R}_0 = m_e^* \vec{r}_e + m_h^* \vec{r}_h. \quad (3.6)$$

L'Hamiltonien H_X peut se mettre sous forme de somme de deux Hamiltoniens H_{rel} et H_{cm} avec :

$$\begin{aligned} H_X &= H_{cm} + H_{rel} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M_X} \Delta_{\vec{R}_0} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} - \frac{e^2}{\kappa r} - e z F \end{aligned} \quad (3.7)$$

avec :

$$H_{cm} = -\frac{\hbar^2}{2M_X} \Delta_{\vec{R}_0} \quad \text{et} \quad H_{rel} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} - \frac{e^2}{\kappa r} - e z F \quad (3.8)$$

où $\mu = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*}$ est la masse réduite de la paire électron-trou et $M_X = m_e^* + m_h^*$ la masse du centre de masse.

La charge totale de l'exciton étant nulle le mouvement du centre de masse de l'exciton n'est alors pas affecté par le champ. Son énergie cinétique s'écrit alors :

$$E_{cm} = \frac{\hbar^2 K_X^2}{2M_X} \quad \text{où} \quad \vec{K}_X = \vec{k}_e + \vec{k}_h \quad (3.9)$$

Pour le choix d'une fonction d'onde d'essai, nous adoptons une fonction d'onde similaire à celle utilisée pour le calcul de polarisabilité de l'atome d'hydrogène. Soit ψ_X la fonction d'onde excitonique, le mouvement relatif et celui du centre de masse étant séparables, alors la fonction d'onde s'écrit :

$$\psi_X(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \psi_{rel}(\vec{r}) \psi_{cm}(\vec{R}_0) \quad (3.10)$$

avec $\psi_{rel}(\vec{r})$ fonction enveloppe relative qui correspond à l'énergie relative E_{rel} . L'équation de Schrödinger de l'exciton s'écrit alors :

$$H_X \psi_X(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = E_X \psi_{rel}(\vec{r}) \psi_{cm}(\vec{R}_0) \quad (3.11)$$

avec :

$$E_X = E_{cm} + E_{rel} \quad (3.12)$$

3.2. Energie relative de l'exciton en présence d'un champ électrique.

L'énergie de l'exciton sera déterminée par l'évaluation de E_{rel} puisque dans le cas d'une transition directe on a $K_X = 0$ et par suite $E_{cm} = 0$. L'équation de Schrödinger du mouvement relatif de l'exciton s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} - \frac{e^2}{\kappa r} - ezF \right] \psi_{rel}(\vec{r}) = E_{rel} \psi_{rel}(\vec{r}) \quad (3.13)$$

Exprimons maintenant l'équation (3.13) en unités excitoniques a_X et $2R_X$, elle devient alors :

$$\left[-\frac{1}{2} \Delta_{\vec{r}} - \frac{1}{r} - f \right] \psi_{rel}(\vec{r}) = E_{rel} \psi_{rel}(\vec{r}). \quad (3.14)$$

Nous choisissons une fonction inspirée de l'étude de la polarisabilité de l'atome d'hydrogène :

$$\psi_{rel}(\vec{r}) = \sum_l c_l \psi_l^0(\vec{r}) + \sum_l d_l \psi_l^1(\vec{r}) \quad (3.15)$$

avec $\psi_l^0(\vec{r}) = r^l e^{-\alpha r}$ et $\psi_l^1(\vec{r}) = z \psi_l^0(\vec{r})$ où c_l , d_l et α sont des paramètres variationnels déterminés par la condition du principe variationnel, c'est-à-dire :

$$E(\alpha) = \frac{\langle \psi_{rel} | H | \psi_{rel} \rangle}{\langle \psi_{rel} | \psi_{rel} \rangle} \quad \text{est minimale.} \quad (3.16)$$

Le nombre de termes dans la fonction d'onde est fixé par $l = 5$, car au delà de 12 termes, le minimum obtenu devient insensible au nombre de termes (8 chiffres significatifs). Nos résultats sont en bon accord avec ceux de Blossey et al. (1971) et Dow et al. (1970), pour un champ $f \ll 1$, ainsi qu'avec ceux obtenus par Froelich (1975) (5 chiffres significatifs) avec la méthode variationnelle appliquée aux états pseudoliés. Dans la figure (3.3), nous avons tracé la variation de l'énergie relative en fonction du paramètre de champ f . Nous constatons que l'énergie relative de l'exciton augmente en valeur absolue avec le champ électrique. Mais au-delà d'une certaine valeur du champ critique f_c , nous ne trouvons plus de minimum de l'équation (3.16). Nous avons aussi reporté les résultats obtenus par Ledermann (Fig. 3.1) et Blossey (Fig. 3.2), calculés par la méthode perturbative pour le

cas des champs faibles. En négligeant le terme du troisième ordre E_{rel} de l'état fondamental s'écrit (équation 3.3):

$$E_{rel} = -\frac{0.5}{(\sigma + 1)} - \frac{9}{4}(\sigma + 1)^3 f^2 \quad (3.17)$$

Nous remarquons que E_{rel} est quadratique en f et que le déplacement est toujours négatif, résultat attendu, compte tenu de l'effet Stark dans l'atome d'hydrogène (Chapitre 1). Blossey (1972) et Ralph (1966) ont montré qu'au-delà de $f_X = 0.5$ l'état $1s$ de l'exciton se déplace vers les hautes énergies et cela est dû au chevauchement avec les états du continuum, l'énergie relative diminue et l'exciton est ionisé. Blossey (1972) a mentionné que ces résultats obtenus par la méthode WKB sont en bon accord avec la méthode perturbative jusqu'à la valeur $f_X = 1.0$ qui correspond au champ d'ionisation³ de l'exciton alors que la méthode perturbative devrait être utilisée pour des champs $f \ll 1$! Ci-dessus, nous reportons un tableau (3.1) de correspondance entre f en unités atomiques du donneur et F en V/cm pour différents semiconducteurs.

3. *f*ionisation est obtenue en posant $R_X = e F a_X$

3.2. Energie relative de l'exciton en présence d'un champ électrique.

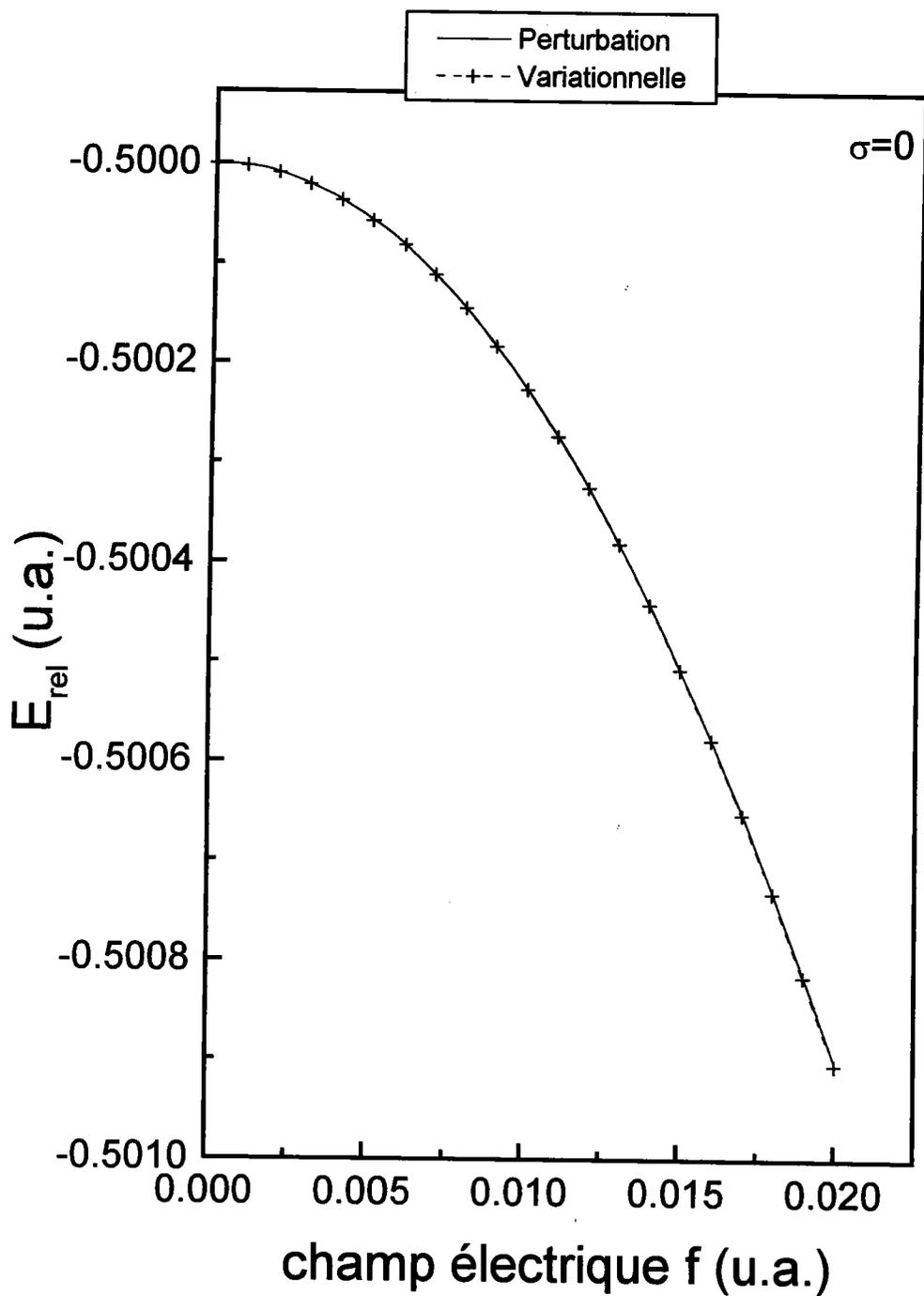


FIG. 3.3: Energie relative de l'exciton (perturbative et variationnelle).

| Semi-conducteur | $\frac{m^*}{m_0}$ | ϵ_0 | F(V/cm) |
|-----------------|-------------------|--------------|---------|
| AlAs | 0.15 | 10.06 | 2276 |
| AlSb(direct) | 0.18 | 12.04 | 1930 |
| CdS | 0.17 | 9.83 | 3130 |
| CdTe | 0.35 | 9.7 | 13825 |
| GaAs | 0.0665 | 12.53 | 230 |
| GaP | 0.34 | 11.11 | 8680 |
| GaSb | 0.045 | 15.7 | 54 |
| InAs | 0.023 | 14.6 | 18 |
| InP | 0.077 | 12.1 | 340 |
| ZnSe | 0.14 | 8.7 | 3060 |
| ZnS | 0.28 | 8.3 | 14120 |
| ZnTe | 0.15 | 9.7 | 2540 |

TAB. 3.1: Correspondance entre unités atomiques et V/cm du champ électrique pour $f = 0.02$ u.a.

3.3 Energie de liaison du trion X^- .

Le trion X^- peut être décomposé de deux façons :

- $X^- \rightarrow e + e + h.$
- $X^- \rightarrow e + X.$

C'est la seconde décomposition qui fera l'objet de notre étude.

Nous définissons l'énergie de liaison du trion X^- en présence d'un champ électrique par :

$$E_l = E_{tot}(X^-) - E_{tot}(X) - E_e \quad (3.18)$$

L'énergie totale du trion s'écrit :

$$E_{tot}(X^-) = E_{rel} + E_{cm} \quad (3.19)$$

$$= E_{rel} + E_{||}^0 + \frac{\hbar^2 K_0^2}{2M_0} \quad (3.20)$$

et l'énergie totale de l'exciton est définie par :

$$E_{tot}(X) = E_{rel}(X) + E_{cm}(X) \quad (3.21)$$

$$= E_{rel}(X) + \frac{\hbar^2 K_X^2}{2M_X}. \quad (3.22)$$

Enfin l'énergie de l'électron E_e en présence du champ électrique est définie dans l'appendice A, nous rappelons ici son expression finale dans le cas de bandes paraboliques (Wannier 1959, 1960, 1962; et Argyres 1968) :

$$E_e^n = -n \left(\frac{2\pi eF}{\theta} \right) + C \frac{\theta^2}{12} + C(k_y^2 + k_z^2). \quad (3.23)$$

où $\theta = \frac{2\pi}{a}$, a paramètre de maille.

Le spectre d'énergie contient une série de niveaux discrets séparés par eFa , mais vu l'ordre de grandeur de ce terme, ces niveaux sont restés pratiquement inobservables dans les semiconducteurs massifs, car l'énergie de vibration du réseau suffit à masquer ce phénomène (Kane 1959). Par exemple elle vaut 0.5meV pour des champs très forts de l'ordre de $10^5 V/cm$ (Callaway 1974). Il a fallu attendre l'avènement des super-réseaux où la périodicité d des couches est largement plus grande que le paramètre de maille a d'un semi-conducteur massif; la séparation des niveaux est alors plus importante et controlable pour un choix approprié de d (Mendez 1988).

Dans le calcul de l'énergie de liaison, l'énergie de gap E_g' en présence du champ est prise égale à E_g dans le cas de champ faible. L'énergie de liaison de X^- est définie alors par :

$$E_l = E_{tot}(X^-) - E_{tot}(X) - E_e \quad (3.24)$$

$$= E_{cm}(X^-) + E_{rel}(X^-) - E_{cm}(X) - E_{rel}(X) - E_e$$

$$= E_{rel}(X^-) - E_{rel}(X) + E_{cm}(X^-) - E_{cm}(X) - E_e.$$

On rappelle que pour des transitions directes, l'énergie du centre de masse de l'exciton est nulle. Celle du centre de masse du trion est quantifiée :

$$E_{cm\parallel}^n(X^-) = -eFL_x + \frac{\hbar^2}{2M_0} \left(\frac{3\pi M_0}{\hbar^2} eF(n - \frac{1}{4}) \right)^{\frac{2}{3}}$$

il en est de même pour l'électron :

$$E_e = -eFL_x + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{3\pi m_e^*}{\hbar^2} eF(n - \frac{1}{4}) \right)^{\frac{2}{3}}.$$

La différence $E_{cm\parallel}^n(X^-) - E_e$ s'écrit :

$$E_{cm\parallel}^n(X^-) - E_e = \frac{\hbar^2}{2M_0} \left[\frac{3\pi M_0}{\hbar^2} eF(n - \frac{1}{4}) \right]^{\frac{2}{3}} - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{3\pi m_e^*}{\hbar^2} eF(n' - \frac{1}{4}) \right]^{\frac{2}{3}} \quad (3.25)$$

pour l'état fondamental, nous avons $n = n' = 0$, l'expression ci-dessus s'écrit alors :

$$E_{cm\parallel}^n(X^-) - E_e = \left[\frac{\hbar^2}{2M_0} \left(\frac{3\pi e M_0}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{3\pi e m_e^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \times \sqrt[3]{\frac{F^2}{16}}$$

M_0 peut être mise sous la forme :

$$M_0 = 2m_e^* + m_h^* = m_e^* \left(2 + \frac{1}{\sigma} \right) = m_e^* \frac{2\sigma + 1}{\sigma}$$

donc

$$E_{cm\parallel}^n(X^-) - E_e = \frac{1}{4} \left(3\pi e \hbar \right)^{\frac{2}{3}} \sqrt[3]{\frac{F^2}{2}} \left[\left(\frac{1}{m_e^*} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\left(\frac{\sigma}{2\sigma + 1} \right)^{\frac{1}{3}} - 1 \right) \right] \quad (3.26)$$

cette expression est une fonction de σ , on peut montrer qu'elle est toujours négative pour toute valeur de σ . On définit alors W_{X^-} qui majore l'énergie de liaison E_l :

$$W_{X^-} = E_{rel}(X^-) - E_{rel}(X) \geq E_l \quad (3.27)$$

Tant que $W_{X^-} \leq 0$, l'énergie de liaison E_l est négative et le trion est stable.

3.4 Résultats et discussions

Nous avons tracé sur la figure (3.4) les variations des énergies de liaison du trion négatif en fonction de σ pour différentes valeurs du champ f . Nous allons comparer nos résultats avec ceux de Katih et al.(1993) Leur modèle est un calcul de type perturbation-variationnel (méthode de RITZ) que nous allons présenter ici en bref. Considérons en général l'équation d'Hamilton (Bethe et Salpeter 1957):

$$(H_0 + \lambda H_1 - E)\varphi = 0 \quad (3.28)$$

où H_0 et H_1 sont deux opérateurs hermitiques et λ un paramètre très petit devant 1, dans notre cas il correspond au champ f . Nous considérons que la valeur propre E et la fonction d'onde φ sont développables en série en fonction de λ :

$$E = \sum_i^{\infty} \lambda^i E_i \quad \varphi = \sum_i^{\infty} \lambda^i \phi_i \quad (3.29)$$

A partir de (3.28) et (3.29) nous pouvons calculer les corrections du premier ordre, du second et ainsi de suite. Katih et al. se sont limités au second ordre; leurs énergie et fonction d'onde s'écrivent respectivement :

$$\begin{aligned} E &= E_0 + E_1 f + E_2 f^2 + O(f^3) \\ \varphi &= \varphi_0 + \varphi_1 f + \varphi_2 f^2 + O(f^3) \end{aligned} \quad (3.30)$$

La limitation au second ordre dans le développement correspond à l'approximation pour laquelle l'interaction coulombienne domine encore l'énergie potentielle due au champ électrique ($f \leq 0.01$). Le premier et second ordre sont donnés par :

$$E_1 = \int \phi_0 H_1 \phi_0 d\tau \quad \text{et} \quad E_2 = \int \phi_0 H_1 \phi_1 d\tau \quad (3.31)$$

La correction du premier ordre E_1 est nulle (Katih et al. 1993), car la fonction d'onde décrivant l'état fondamental est symétrique; celle du second ordre est

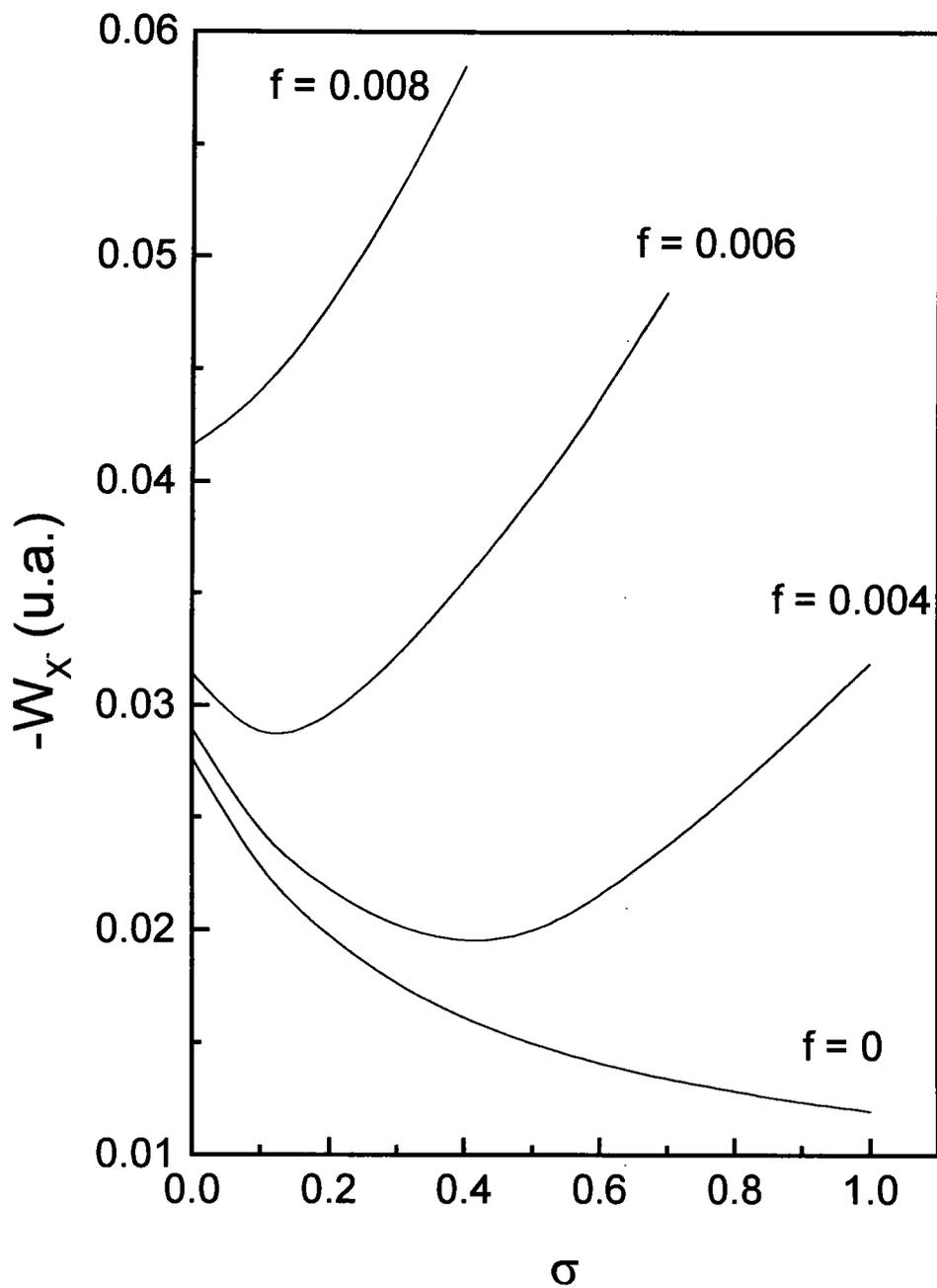


FIG. 3.4: Energie de liaison du trion X^- en fonction de σ pour différentes valeurs de champs f (u.a.).

donnée par (3.31). L'énergie de liaison du trion s'écrit :

$$W_{X^-} = E_{X^-} - E_X \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} &= [E_0(X^-) + E_2(X^-) \times f^2] - [E_0(X) + E_2(X) \times f^2] \\ &= [E_0(X^-) - E_0(X)] - [E_2(X^-) - E_2(X)] \times f^2 \\ &= -W_0 + W_2 \times f^2 \end{aligned}$$

$$(3.33)$$

$E_0(X^-)$ est l'énergie à champ nul calculée par Stébé et Munsch (1974), tandis que l'énergie de l'exciton est donnée par l'équation (3.17) :

$$\begin{aligned} E(X) &= -\frac{1}{2(\sigma + 1)} - \frac{9}{4}(\sigma + 1)^3 f^2 \\ &= E_0(X) + E_2(X) f^2. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Les valeurs de W_0 et W_2 sont recueillies du tableau (1) de la référence (Katih et al. 1993). Sur la figure (3.5), nous illustrons la comparaison avec les résultats de Katih et al. (1993). Les courbes notées par (a, a', a'') sont calculées par la méthode actuelle, celles notées par b, b', b'' sont calculées par Katih et al.. Nous remarquons deux caractéristiques :

- 1 Pour des champs très faibles ($f = 0.004$), la méthode perturbative-variationnelle (b') est légèrement meilleure que la méthode variationnelle (a') pour de petites valeurs de σ .
- 2 Pour des champs plus élevés ($f = 0.006$), l'énergie électrique devient importante et ne peut être traitée comme perturbation, nous remarquons alors que la méthode variationnelle (b'') est nettement meilleure que la méthode perturbative (a'') surtout pour les grandes valeurs de σ .

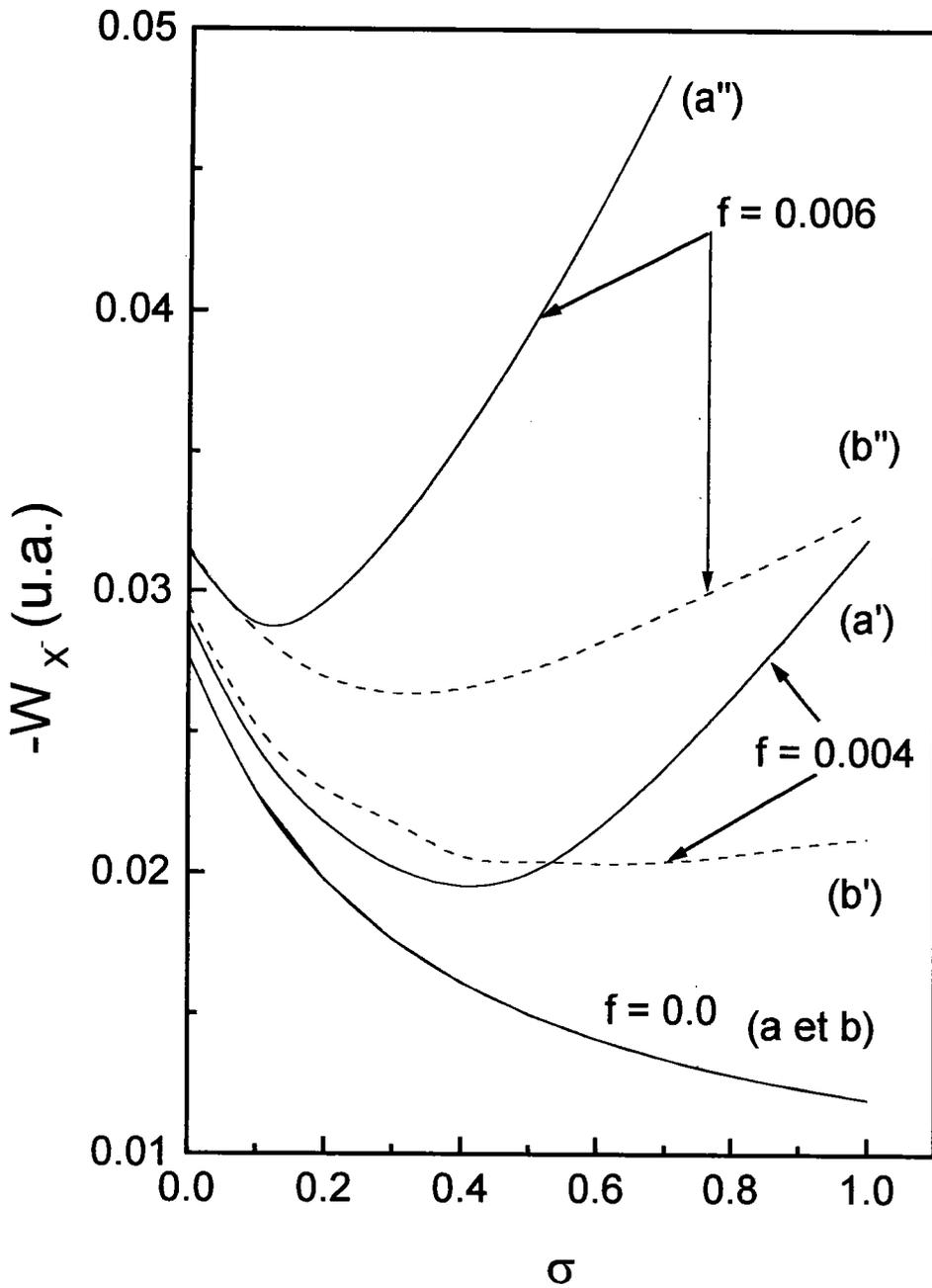


FIG. 3.5: Comparaison entre nos résultats (a, a', a'' en traits pleins) et ceux de Katih et al. (b, b', b'' en pointillés).

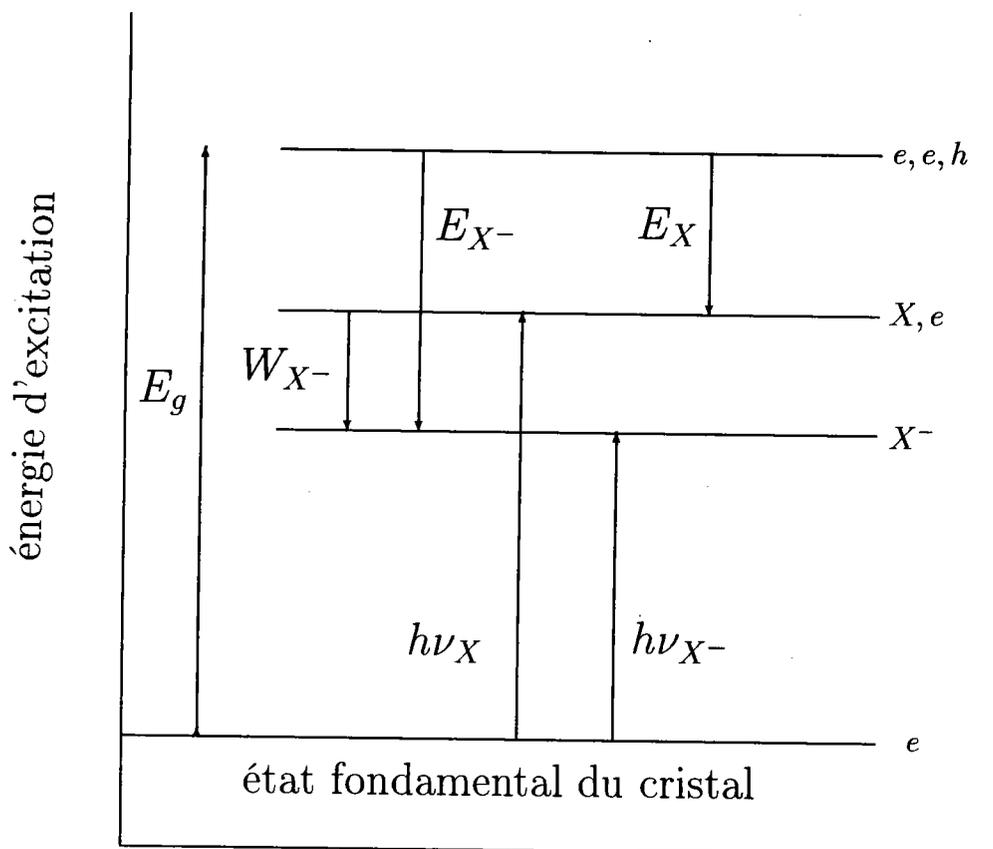


FIG. 3.6: Diagramme des transitions.

3.5 Conclusion

Notre étude confirme qu'avec une méthode variationnelle de RITZ ou une méthode variationnelle pure, la stabilité de ces complexes chargés est établie pour une large gamme de champ $f(u.a)$. En vue d'une mise en évidence expérimentale, nous proposons une estimation de l'énergie de transition entre un état d'un électron libre et un état d'exciton chargé (voir Fig. 3.6) :

$$h\nu_{X^-} = h\nu_X + W_{X^-} - \frac{\hbar^2 K_0^2}{2m_e^*} \left(\frac{\sigma + 1}{2\sigma + 1} \right) + E_{cm\parallel}^n - E_e^{n'} \quad (3.35)$$

où $h\nu_X$ est l'énergie de transition d'un exciton en présence de champ électrique.

Chapitre 4

Energie de liaison de X^- dans un
semi-conducteur bidimensionnel
soumis à un champ électrique
uniforme.

F. Dujardin, A. Elhassani, E. Feddi, and B. Stébé Solid State Communications, Vol. 103,
p 515, 1997.

4.1 Introduction

Les systèmes bidimensionnels (2D) promettent des applications très intéressantes en électro-optique. Ils ont permis d'observer pour la première fois l'effet Franz-Keldysh dans les 2D (Schmeller 1994). L'existence des trions a longtemps été contestée car, dans les semi-conducteurs massifs, leur énergie de liaison est très faible. Cependant, elle augmente considérablement lorsqu'on passe d'un semi-conducteur massif à un semi-conducteur bidimensionnel (Ainane et Stébé 1989), il est alors plus facile de les observer dans ces structures. Récemment, des expériences ont prouvé leur existence dans les puits quantiques (Kheng et al. 1993; Shields et al. 1995a et 1995b).

Dans ce chapitre, nous résolvons l'équation de Schrödinger du trion X^- (2D) pour une valeur faible du champ électrique. Nous étudions l'influence du champ sur la stabilité du complexe X^- . Ensuite nous donnons la relation qui permet d'obtenir les énergies relatives de X_2^+ pour un σ donné à partir des résultats obtenus pour X^- . Nous montrons que l'état pseudo-lié existe pour une plus large gamme de champs que celle obtenue dans le cas d'un semi-conducteur massif, nous montrons aussi que le champ est capable de diminuer l'effet de confinement. Le dernier paragraphe est consacré à l'étude des rayons moyens en présence du champ.

4.2 Structures bidimensionnelles.

Nous appellerons ici structures bidimensionnelles, les structures laissant aux particules leur liberté de mouvement dans deux directions (Ox et Oy), tandis que, selon la direction Oz , une hétérogénéité du matériau fait obstacle au mouvement des particules.

On peut classer les structures bidimensionnelles en trois catégories :

- Les puits quantiques simples.
- Les puits quantiques multiples.
- Les superréseaux.

On peut en particulier fabriquer un " puits quantique " par l'insertion, entre deux couches d'un matériau donné A , un semi-conducteur B dont la largeur de bande interdite est plus petite que celle de A (Fig. 4.1).

Lorsque l'épaisseur du semi-conducteur B est plus petite que le rayon excitonique, nous parlerons alors de semi-conducteur strictement bidimensionnel qui sera l'objet de notre étude.

4.3 Séparation de l'équation de la masse effective.

Nous reprenons l'Hamiltonien (2.1), en supposant maintenant que le champ électrique \vec{F} est dirigé suivant la direction ox . Ici nous supposons que le semi-conducteur est isotrope suivant x et y :

$$m_{ex}^* = m_{ey}^* = m_e^* \quad m_{hx}^* = m_{hy}^* = m_h^* \quad (4.1)$$

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, l'Hamiltonien du trion X^- s'écrit :

$$H_{X^-} = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_h^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_h^2} \right) + V_c - e F(x_1 + x_2 - x_h) \quad (4.2)$$

4.3. Séparation de l'équation de la masse effective.

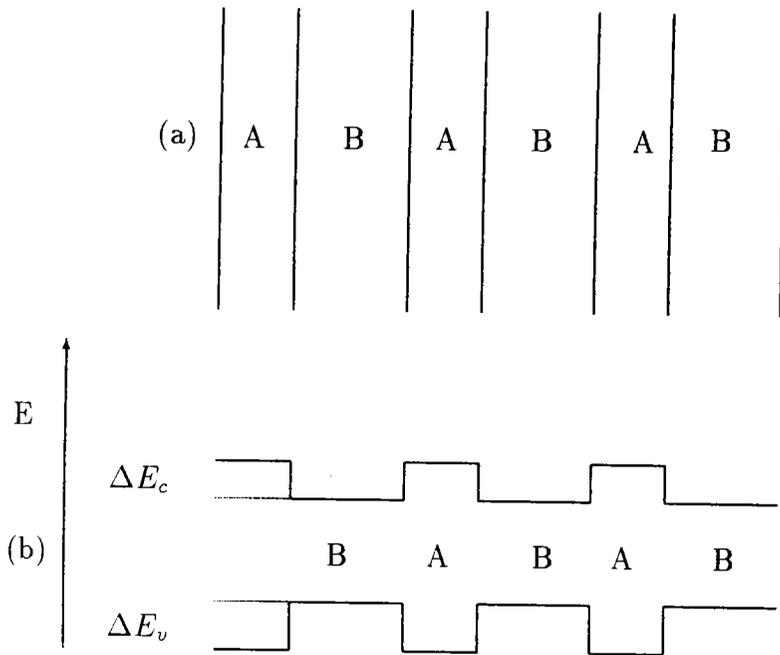


FIG. 4.1: (a) Empilement de couches semi-conductrices, (b) Disposition relative des bandes.

En utilisant les coordonnées suivantes dans le plan xoy :

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2, \quad \vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} - \vec{r}_h, \quad \text{et} \quad \vec{R}_0 = \sum_i m_i \vec{r}_i / M_0 \quad (4.3)$$

avec $M_0 = 2 m_e^* + m_h^*$ et à partir de la relation (4.3) nous obtenons :

$$\begin{cases} M_0 X_0 = m_e^*(x_1 + x_2) + m_h^* x_h \\ X = \frac{x_1 + x_2}{2} - x_h \\ x = x_1 - x_2 \end{cases} \quad \text{et} \quad \begin{cases} M_0 Y_0 = m_e^*(y_1 + y_2) + m_h^* y_h \\ Y = \frac{y_1 + y_2}{2} - y_h \\ y = y_1 - y_2 \end{cases} \quad (4.4)$$

Le système (4.4) permet d'obtenir les expressions de x_1, x_2 et x_h en fonction de X_0, X et x . En remplaçant par leurs nouvelles expressions, la somme $x_1 + x_2 - x_h$ devient :

$$x_1 + x_2 - x_h = 2 \frac{m_e^*}{M_0} X + 2 \frac{m_h^*}{M_0} X + X_0 = X_0 + 2 \left(\frac{\sigma + 1}{2\sigma + 1} \right) X \quad (4.5)$$

avec $\sigma = \frac{m_e^*}{m_h^*}$.

Maintenant nous exprimons les différentes dérivées partielles $\frac{\partial^2}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2}{\partial x_2^2}$ et $\frac{\partial^2}{\partial x_h^2}$ en fonction des dérivées partielles de X_0, X et x pour obtenir la séparation de l'Hamiltonien H_{X^-} :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X} + \left(\frac{m_e^*}{M_0} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X_0^2} \\ &+ 2 \frac{m_e^*}{M_0} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{m_e^*}{M_0} \frac{\partial}{\partial X} \frac{\partial}{\partial X_0} \end{aligned} \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} &= \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{4} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X} + \left(\frac{m_e^*}{M_0} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X_0^2} \\ &+ 2 \frac{m_e^*}{M_0} \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{m_e^*}{M_0} \frac{\partial}{\partial X} \frac{\partial}{\partial X_0} \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x_h^2} &= \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{m_h^{*2}}{M_0} \frac{\partial^2}{\partial X_0^2} \\ &- 2 \frac{m_h^*}{M_0} \frac{\partial}{\partial X} \frac{\partial}{\partial X_0} \end{aligned} \quad (4.8)$$

4.3. Séparation de l'équation de la masse effective.

Nous ferons la même chose pour $\frac{\partial^2}{\partial y_1^2}$, $\frac{\partial^2}{\partial y_2^2}$ et $\frac{\partial^2}{\partial y_h^2}$. En remplaçant ces expressions dans (4.2) nous avons alors :

$$\begin{aligned}
 H_{X^-} = & -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} \right) \\
 & - \frac{\hbar^2}{2M_0} \left(\frac{\partial^2}{\partial X_0^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y_0^2} \right) + \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial X_0} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial Y_0} \right) \\
 & + V_c - e F \left[X_0 + 2 \left(\frac{\sigma + 1}{2\sigma + 1} \right) X \right]
 \end{aligned} \tag{4.9}$$

avec $M = \frac{2m_e^* m_h^*}{M_0}$ et $\mu = \frac{m_e^*}{2}$. L'Hamiltonien H_{X^-} s'écrit alors comme la somme de l'Hamiltonien du centre de masse et de l'Hamiltonien du mouvement relatif :

$$H_{X^-} = H_{cm} + H_{rel} \tag{4.10}$$

avec

$$H_{cm} = -\frac{\hbar^2}{2M_0} \Delta_{\vec{R}_0} - e F X_0 \tag{4.11}$$

et

$$H_{rel} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} - \frac{\hbar^2}{2M} \Delta_{\vec{R}} + V_c - 2 e F \frac{\sigma + 1}{2\sigma + 1} X \tag{4.12}$$

4.3.1 Mouvement du centre de masse.

L'équation du centre de masse du trion X^- s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M_0} (\Delta_{X_0} + \Delta_{Y_0}) - e F X_0 \right] \psi_{cm} = E_{cm} \psi_{cm} \tag{4.13}$$

La solution générale de cette équation est de la forme :

$$\psi_{cm} = e^{iK_{0y}Y_0} \varphi(X_0) \tag{4.14}$$

Les valeurs propres de ψ_{cm} sont de la forme :

$$E_{cm} = E_{X_0} + \frac{\hbar^2 K_{0y}^2}{2M_0} \tag{4.15}$$

et l'équation (4.13) implique :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2 M_0} \frac{d^2}{dX_0^2} - e F X_0 \right] \varphi(X_0) = E_{X_0} \varphi(X_0) \quad (4.16)$$

que nous pouvons mettre sous la forme :

$$\left[\frac{d^2 \varphi(X_0)}{dX_0^2} + \frac{2 M_0}{\hbar^2} e F \left(X_0 + \frac{E_{X_0}}{e F} \right) \right] \varphi(X_0) = 0 \quad (4.17)$$

en introduisant la variable $\eta = \left(X_0 + \frac{E_{X_0}}{e F} \right) \left(\frac{2 M_0 e F}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}}$ l'équation (4.17) se réduit à :

$$\frac{d^2 \varphi(\eta)}{d\eta^2} + \eta \varphi(\eta) = 0 \quad (4.18)$$

La solution de (4.18) est donnée dans (Abramowitz et Stegun 1965) et $\varphi(X_0)$ s'écrit alors :

$$\varphi(X_0) = C Ai \left(-\frac{E_{X_0} - e F X_0}{\beta} \right) \quad (4.19)$$

où C est une constante de normalisation et $\beta = \left(\frac{\hbar^2}{2 M_0} \right)^{\frac{1}{3}} (e F)^{\frac{2}{3}}$.

Pour de grandes valeurs négatives de x , $Ai(-x)$ décroît exponentiellement et pour de grandes valeurs positives, $Ai(-x)$ a un comportement oscillatoire. Ce qui explique l'accélération du mouvement du centre de masse du trion. Le centre de masse du trion qui est soumis au champ électrique se comportera alors comme un électron dans un solide soumis au même champ. E_{X_0} est déterminé par les conditions aux limites du cristal, $\varphi(L_x) = 0$ où L_x est la longueur du cristal le long de la direction x qui est celle du champ \vec{F} , ce qui donne lieu à une quantification :

$$E_{X_0}^n = -e F L_x + \frac{\hbar^2}{2 M_0} \left(\frac{3\pi M_0}{\hbar^2} F e \left(n - \frac{1}{4} \right) \right)^{\frac{2}{3}} \quad (4.20)$$

où n est un entier naturel, qui dénombre les niveaux de Wannier-Stark (Wannier 1960, Fredkin 1962, Bentosella 1991). Le spectre d'énergie du centre de masse en présence d'un champ électrique contient alors des niveaux discrets.

4.3.2 Mouvement relatif.

Nous présentons ici un calcul variationnel de l'énergie relative de l'état fondamental du trion X^- dans un semi-conducteur bidimensionnel soumis à un champ électrique uniforme. L'Hamiltonien du mouvement relatif du trion X^- s'écrit :

$$H_{rel} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{\vec{R}} + \frac{e^2}{\kappa} \left(\frac{1}{|\vec{r}|} - \frac{1}{|\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2}|} - \frac{1}{|\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}|} \right) - 2eF \left(\frac{\sigma + 1}{2\sigma + 1} \right) X \quad (4.21)$$

Nous utilisons les unités atomiques du donneur 3D, pour la longueur $a_D = \kappa\hbar^2/m_e^*e^2$, pour l'énergie $2R_D = e^2/\kappa a_D$, et pour le champ électrique $f = eFa_D/2R_D$. L'Hamiltonien devient :

$$H_{rel} = \left[-\frac{2\sigma + 1}{4}\Delta_{\vec{R}} - \Delta_{\vec{r}} + \frac{e^2}{\kappa} \left(\frac{1}{|\vec{r}|} - \frac{1}{|\vec{R} - \frac{\vec{r}}{2}|} - \frac{1}{|\vec{R} + \frac{\vec{r}}{2}|} \right) - 2\frac{(1 + \sigma)}{(1 + 2\sigma)}Xf \right] \quad (4.22)$$

Il faut résoudre l'équation de Schrödinger correspondant au mouvement relatif :

$$H_{rel} \psi_{rel} = E \psi_{rel} \quad (4.23)$$

La méthode variationnelle consiste à utiliser une fonction d'essai ψ_{rel} , afin de minimiser la valeur de E . Comme le champ électrique casse la symétrie du problème, nous devons conserver 4 variables dans la fonction d'onde d'essai. Nous avons utilisé une fonction d'onde centrée sur le trou, en choisissant les variables r_{1h} , r_{2h} , x_{1h} et x_{2h} . L'absence de r_{12} dans la fonction d'onde diminue la qualité de la fonction, mais permet de réaliser le calcul de toutes les intégrales d'une manière analytique. La fonction choisie s'écrit :

$$\psi_{rel} = \psi(r_{1h}, r_{2h}, x_{1h}, x_{2h}) = \sum_{mnp} C_{mnp} (1 + P_{12}) |mnp\rangle \quad (4.24)$$

où

$$|mnp\rangle = e^{-\alpha(r_{1h} + r_{2h})} r_{1h}^m r_{2h}^n (x_{1h} + x_{2h})^p$$

avec $m + n \leq w$, entier naturel qui fixe le nombre de termes de la fonction d'onde, et p prend la valeur 0 ou 1. P_{12} est un opérateur de permutation agissant sur les coordonnées des deux électrons pour préserver la symétrie de la fonction d'onde. Maintenant, nous exprimons l'Hamiltonien H_{rel} en fonction des variables choisies :

$$\begin{aligned}
 H_{rel} = & -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_{1h}} \frac{\partial}{\partial r_{1h}} + \frac{\partial^2}{\partial r_{1h}^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_{1h}^2} + 2 \frac{x_{1h}}{r_{1h}} \frac{\partial^2}{\partial r_{1h} \partial x_{1h}} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_{2h}} \frac{\partial}{\partial r_{2h}} \right. \\
 & + \frac{\partial^2}{\partial r_{2h}^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_{2h}^2} + 2 \frac{x_{2h}}{r_{2h}} \frac{\partial^2}{\partial r_{2h} \partial x_{2h}} \left. \right) - \frac{\sigma}{2} \left(\frac{1}{r_{1h}} \frac{\partial}{\partial r_{1h}} + \frac{\partial^2}{\partial r_{1h}^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_{1h}^2} \right. \\
 & + 2 \frac{x_{1h}}{r_{1h}} \frac{\partial^2}{\partial r_{1h} \partial x_{1h}} + \frac{1}{r_{2h}} \frac{\partial}{\partial r_{2h}} + \frac{\partial^2}{\partial r_{2h}^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_{2h}^2} + 2 \frac{x_{2h}}{r_{2h}} \frac{\partial^2}{\partial r_{2h} \partial x_{2h}} \\
 & + 2 \frac{\partial^2}{\partial x_{1h} \partial x_{2h}} + 2 \frac{x_{1h}}{r_{1h}} \frac{\partial^2}{\partial r_{1h} \partial x_{2h}} + 2 \frac{x_{2h}}{r_{2h}} \frac{\partial^2}{\partial r_{2h} \partial x_{1h}} + \frac{\vec{r}_{1h} \vec{r}_{2h}}{r_{1h} r_{2h}} \frac{\partial^2}{\partial r_{1h} \partial r_{2h}} \left. \right) \\
 & + \frac{1}{\sqrt{(x_{1h} - x_{2h})^2 + (y_{1h} - y_{2h})^2}} - \frac{1}{r_{1h}} - \frac{1}{r_{2h}} \\
 & - \left(\frac{1 + \sigma}{1 + 2\sigma} \right) (x_{1h} + x_{2h}) f
 \end{aligned} \tag{4.25}$$

L'énergie fondamentale relative est donnée par :

$$E_{rel} = \min \left\{ \frac{\langle \psi_{rel} | H_{rel} | \psi_{rel} \rangle}{\langle \psi_{rel} | \psi_{rel} \rangle} \right\} \tag{4.26}$$

La condition (4.26) est obtenue de manière variationnelle en cherchant les paramètres α , C_{mnp} , tels que :

$$\frac{\partial E_{rel}}{\partial \alpha} = 0, \quad \frac{\partial E_{rel}}{\partial C_{mnp}} = 0, \quad \forall (m, n, p) \tag{4.27}$$

4.4 Résultats et discussions

4.4.1 Cas de l'exciton chargé négativement X^- .

Dans notre calcul numérique, nous avons utilisé une fonction d'onde dont le développement contient 24 termes caractérisés par $m + n \leq w$, 12 termes ont été

utilisés pour le cas sans champ. Nous avons tracé sur la figure (4.2) la variation du rapport des énergies relatives du trion négatif X^- avec et sans champ en fonction de σ pour différentes valeurs du champ. Comme nous le constatons, cette variation de l'énergie relative en 2D est moins forte que dans le cas (3D) (voir fig 2.1). Ce rapport augmente avec l'accroissement du champ. Le même phénomène peut être vérifié dans le cas de l'exciton où le terme quadratique dû à l'effet Stark devient très grand dans le cas d'un exciton 3D au fur et à mesure que σ augmente. Pour montrer la variation de l'énergie de liaison W de l'état fondamental de X^- en présence du champ, il est nécessaire de calculer l'énergie relative de l'exciton E_X en présence du champ. On définit alors $W = E_{rel} - E_X$. Nous avons calculé E_X au moyen d'un calcul variationnel et nos valeurs numériques sont en bon accord avec les résultats de Lederman et al. (1976) obtenues par un calcul en perturbation, que nous exprimons en unités atomiques du donneur ($2R_D$):

$$E_X = -\frac{2}{1+\sigma} - \frac{21}{256}(\sigma+1)^3 f^2. \quad (4.28)$$

Sur la figure (4.3), nous avons tracé la variation de la différence $\Delta W_{2D} = W(f) - W(0)$ des énergies de liaison en présence et en absence du champ en fonction de σ . Nous observons que l'énergie de liaison augmente avec l'intensité du champ électrique, tout au moins dans la limite d'un champ faible ($f \leq 0.02$). Ce phénomène est aussi observé dans le cas des excitons 3D (Dow et al. 1970; Blossey et al. 1970), des excitons chargés (Katih 1993) et des excitons 2D (Lederman 1976). L'énergie de liaison augmente rapidement avec le champ lorsque $\sigma \rightarrow 1$. Sur la figure (4.4) nous comparons les énergies de liaison de l'exciton chargé en 2D et 3D en traçant le rapport W_{2D}/W_{3D} pour deux valeurs fixes de σ correspondant aux cas limites des semi-conducteurs. Nous remarquons que ce rapport diminue brutalement à partir d'une certaine valeur de f et que la pente devient moins prononcée avec la croissance de σ . En l'absence de champ, l'exciton chargé admet une énergie de liaison dix fois plus grande que celle d'un exciton chargé 3D à cause du confinement (Ainane et Stébé 1989). Quand le champ électrique augmente,

l'énergie potentielle due au champ devient grande et domine l'énergie potentielle d'interaction coulombienne entre les différentes particules. L'effet du confinement diminue et le rapport W_{2D}/W_{3D} décroît avec l'augmentation du champ.

4.4.2 Cas de l'exciton chargé positivement X_2^+ .

Par analogie avec la molécule ionisée H_2^+ , Lampert (1958) a prédit l'existence du complexe X_2^+ . Comme le trion négatif X^- , son observation dans les semi-conducteurs massifs est très difficile, car son énergie de liaison est très faible et de plus sa force d'oscillateur est énorme $f_{X_2^+}/f_X \approx 1,4 \times 10^3$ (Stébé 1977). Par conséquent, plusieurs porteurs seront nécessaires pour induire une telle absorption, qui s'avère très sensible à la concentration des porteurs (Stébé et al. 1978). Pourtant ils ont suggéré d'attribuer la raie ν_2 à X_2^+ dans le spectre de CuCl (Stébé 1978). Cependant, l'énergie de liaison des trions augmente avec la réduction de dimensionnalité (Ainane et Stébé 1989) et avec le confinement introduit par le champ magnétique (Kheng et al. 1993). Une étude récente de Shields (1995a) reportant sur la photoluminescence dans les puits quantiques de GaAs dopé avec des accepteurs a permis d'observer une raie de luminescence attribuée à X_2^+ . Ecrivons maintenant l'Hamiltonien du mouvement relatif du trion X^- en unités atomiques du donneur R_D et a_D :

$$H_{X^-}(\sigma, f)/2R_D = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{\sigma}{2}\Delta_h + V_c - f(x_1 + x_2 - x_h) \quad (4.29)$$

En permutant les masses ainsi que les charges, l'ion X^- se transforme en la molécule ionisée X_2^+ et l'Hamiltonien du mouvement relatif du trion positif s'écrit en unités atomiques de l'accepteur R_A et a_A :

$$H_{X_2^+}(\sigma, f')/2R_A = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{\sigma^{-1}}{2}\Delta_e + V_c + f'(x_1 + x_2 - x_e) \quad (4.30)$$

avec $f' = \frac{eFa_A}{2R_A}$, ce qui donne $\frac{f'}{f} = -\sigma^2$.

Soit $E_{X^-}(\sigma, f)$ la valeur propre associée à l'Hamiltonien $H_{X^-}(\sigma, f)$ et soit $E_{X_2^+}(\sigma, f')$ la valeur propre associée à l'Hamiltonien $H_{X_2^+}(\sigma, f')$. En remplaçant σ par σ^{-1}

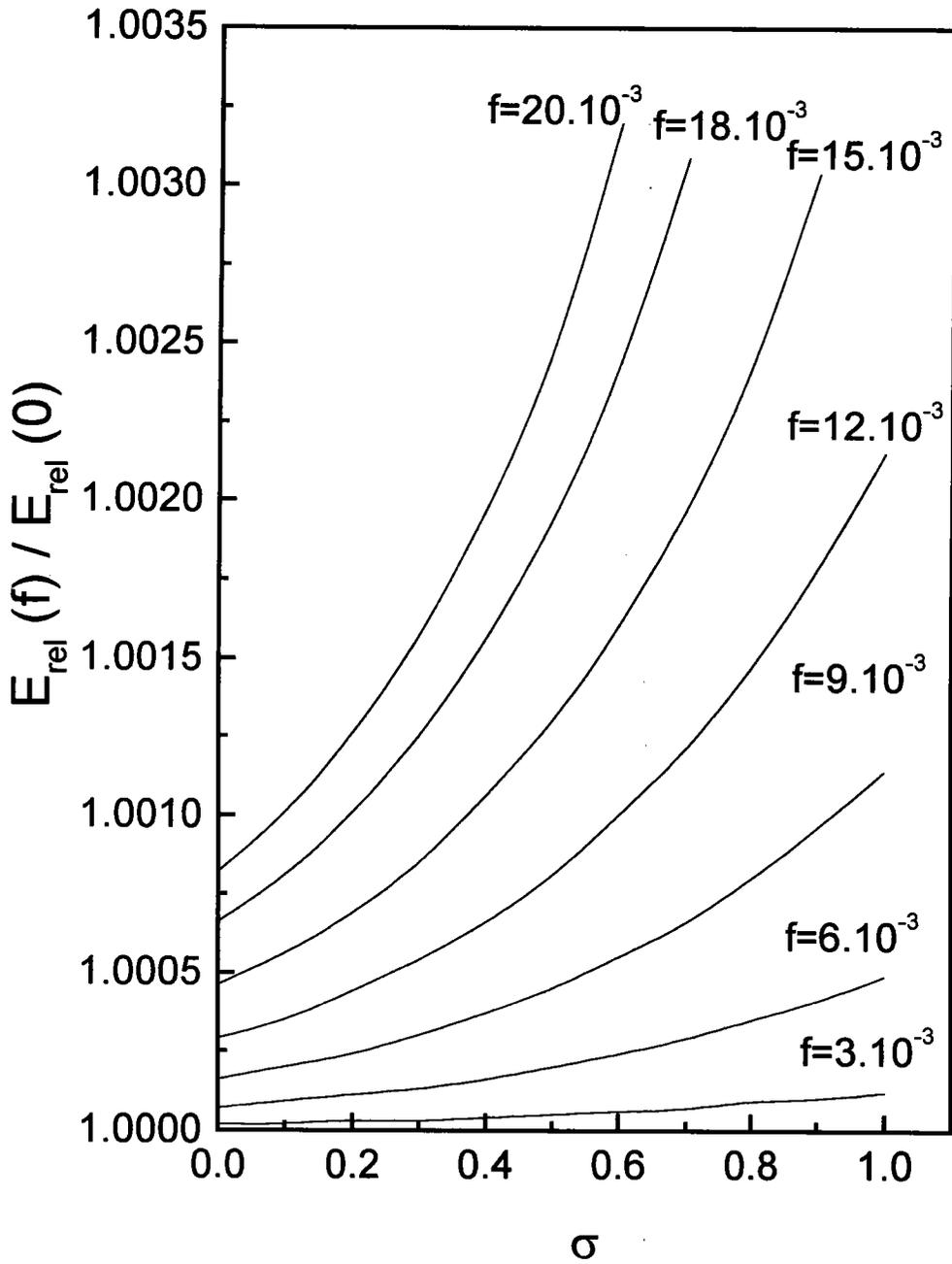


FIG. 4.2: Variation du rapport de l'énergie relative du trion X^- en fonction de σ pour différentes valeurs de f (u.a.).

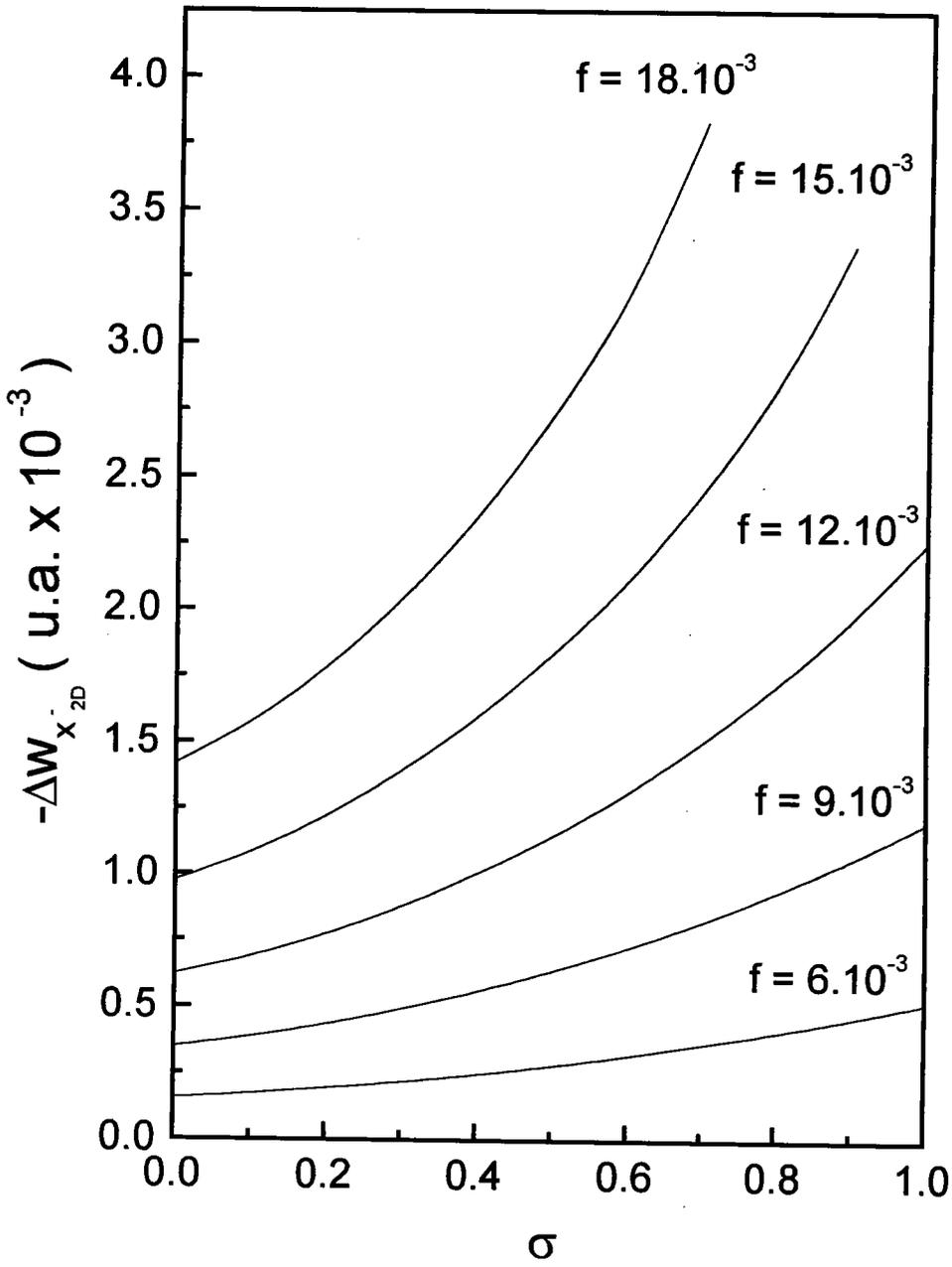


FIG. 4.3: Variation de $\Delta W_{X^-} = W(f) - W(0)$ en fonction de σ .

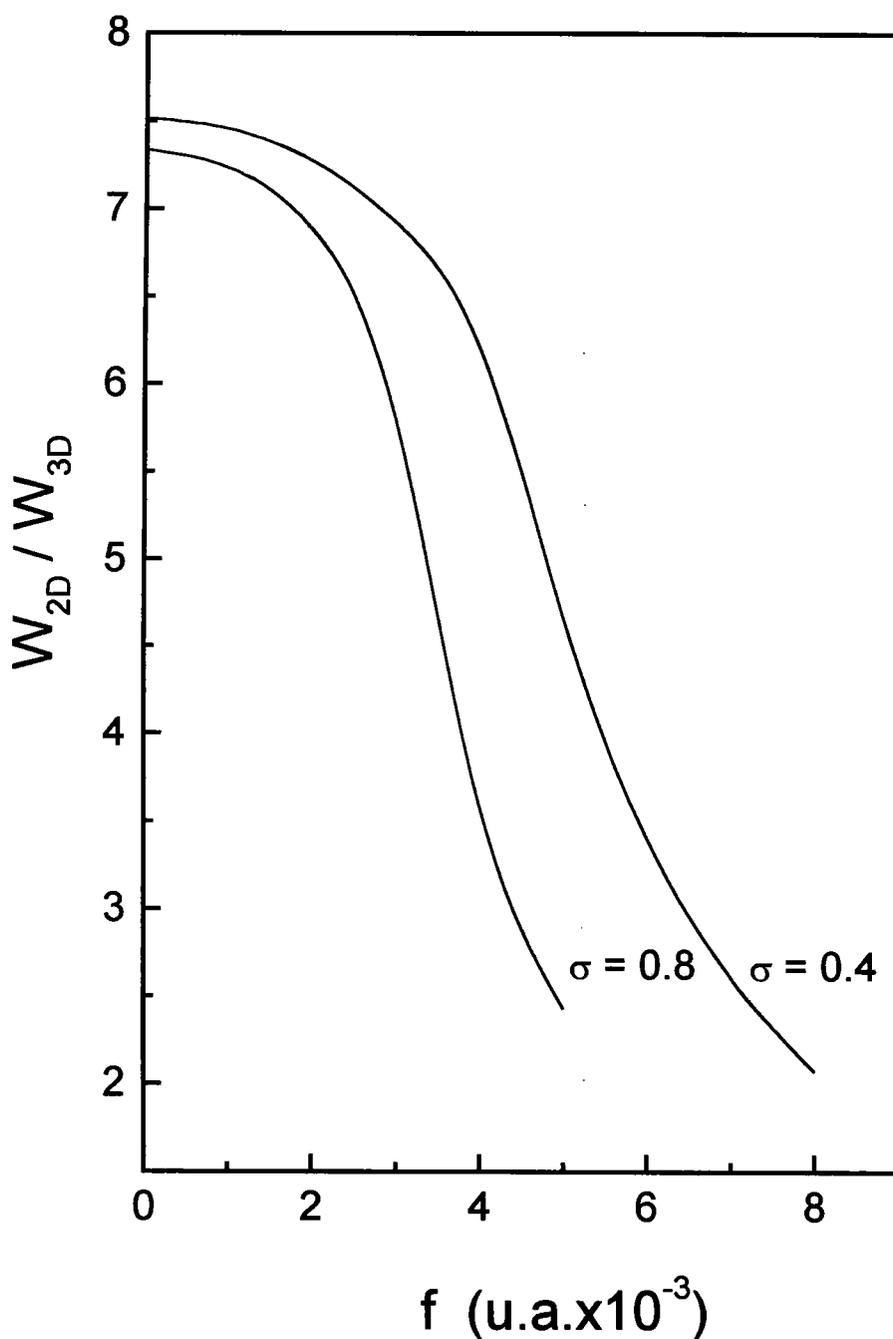


FIG. 4.4: Comparaison entre les énergies de liaison du trion X^- (3D) et (2D) en fonction du paramètre de champ f (u.a.) pour $\sigma = 0.4$ et $\sigma = 0.8$.

dans l'équation (4.29) nous obtenons :

$$H_{X^-}(\sigma^{-1}, f)/2R_D = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{\sigma^{-1}}{2}\Delta_h + V_c - f(x_1 + x_2 - x_h) \quad (4.31)$$

L'Hamiltonien (4.31) ressemble formellement à l'Hamiltonien (4.30). Pour obtenir numériquement les mêmes valeurs propres de ces deux Hamiltoniens, il faut que les coefficients des opérateurs soient les mêmes numériquement on aura alors :

$$E_{X^-}(\sigma^{-1}, f) = \frac{R_D}{R_A} E_{X_2^+}(\sigma, f') \quad (4.32)$$

le rapport $\frac{f'}{f}$ donne $-\sigma^2$, l'énergie du trion positif $E_{X_2^+}(\sigma, f)$ s'exprime alors en fonction de l'énergie du trion négatif $E_{X^-}(\sigma, f)$ par la relation suivante :

$$E_{X_2^+}(\sigma, f) = \frac{1}{\sigma} E_{X^-}(\frac{1}{\sigma}, -\sigma^2 f) \quad (4.33)$$

Tous les résultats obtenus de l'énergie relative de X_2^+ ont été calculés pour $\sigma > 0.1$, car pour $\sigma \leq 0.1$ le calcul de type atomique n'est plus précis. Il faut alors procéder par le calcul de type moléculaire non adiabatique (Stébé 1977), c'est pour cela que nous avons éliminé la valeur $\sigma \leq 0.1$ sur les courbes de X_2^+ . Sur la figure (4.5), nous reportons les variations des rapports des énergies relatives $E_{X_2^+}(\sigma, f)/E_{X_2^+}(\sigma, 0)$ pour différentes valeurs de f en fonction de σ . Nous constatons que $E_{rel}(X_2^+)$ augmente avec σ et le champ électrique est majoré ($f \leq 0.012$). La figure (4.6) illustre les variations des rapports d'énergies relatives pour le cas du trion négatif et positif ($0 \leq \sigma \leq 2$). Les courbes de X^- et X_2^+ se croisent en $\sigma = 1.0$, résultat attendu en remplaçant la valeur de σ par 1 dans l'équation (4.33)⁴. Pour $\sigma < 1$ nous constatons que $E_{rel}(X^-) < E_{rel}(X_2^+)$ et pour $\sigma > 1$ la situation s'inverse.

4. Le signe du champ n'a pas d'effet, puisque les variables $x_i \in]-\infty, +\infty[$.

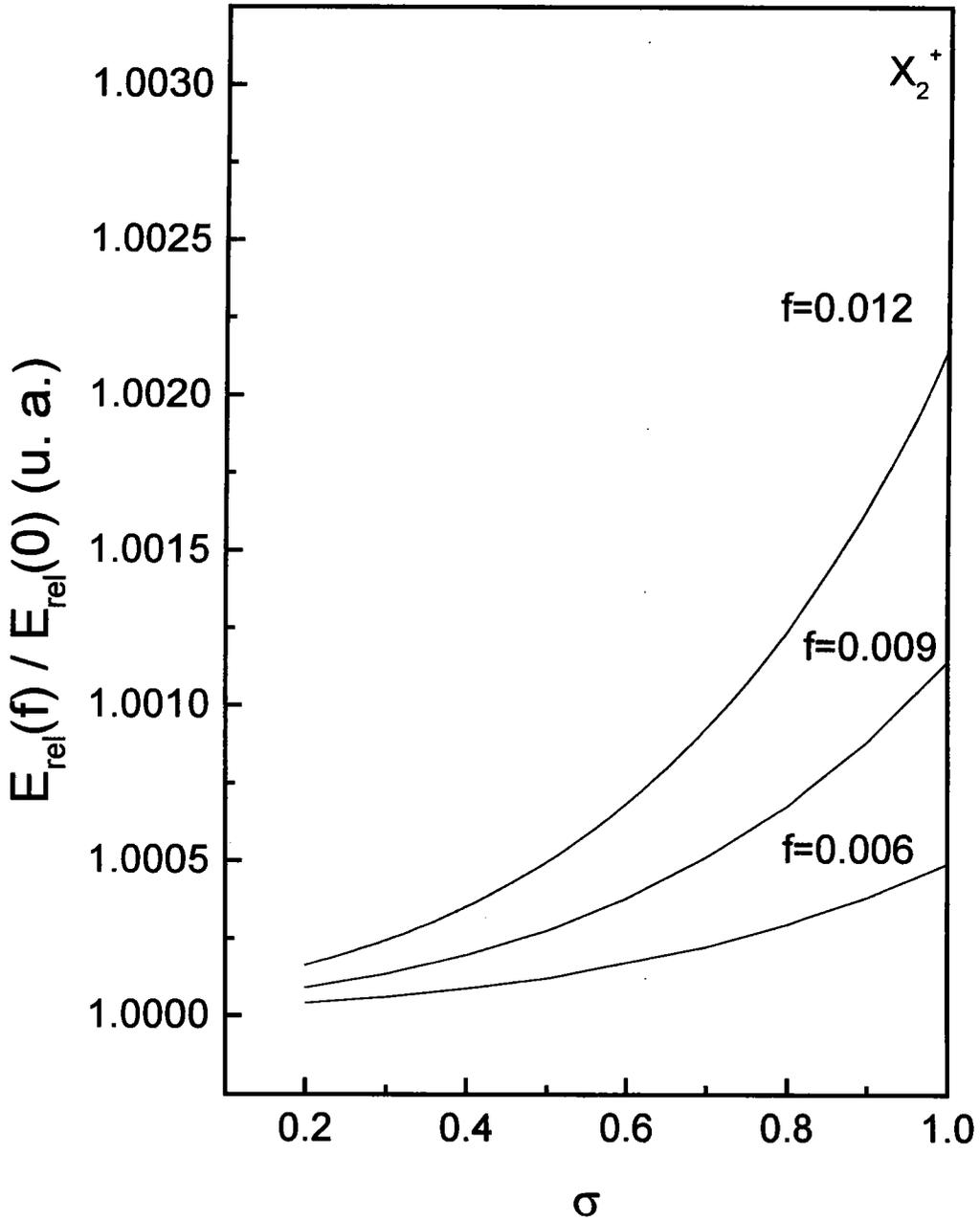


FIG. 4.5: Variations du rapport des énergies relatives $E_{X_2^+}(f)/E_{X_2^+}(0)$ en fonction du rapport des masses σ pour différentes valeurs de f (u.a.).

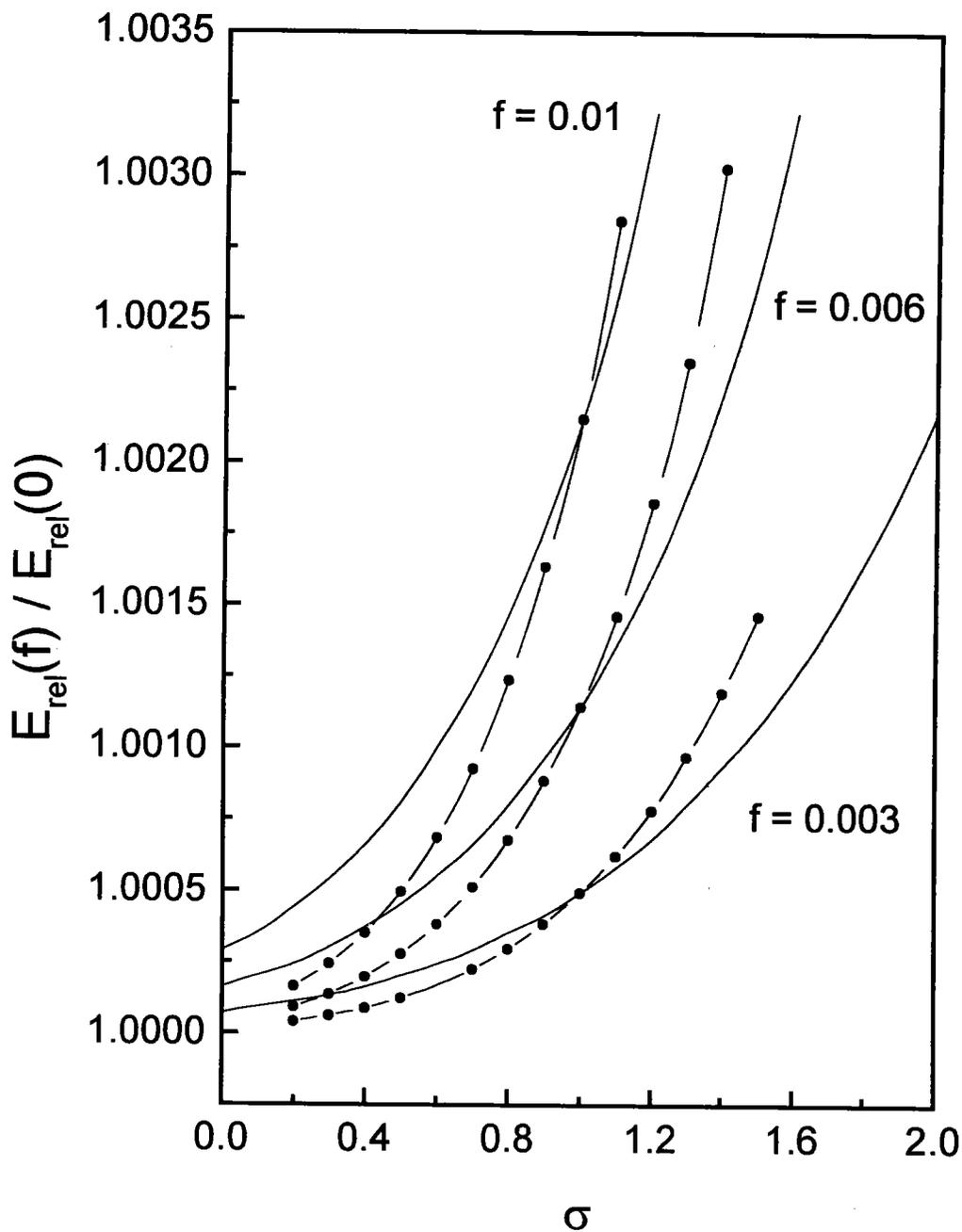


FIG. 4.6: Variations du rapport des énergies relatives $E_{X^-}(f)/E_{X^-}(0)$ et $E_{X_2^+}(f)/E_{X_2^+}(0)$ en fonction du rapport des masses σ pour différentes valeurs de f (u.a.).

4.5 Calcul des rayons moyens.

Comme dans le cas d'un semi-conducteur massif, nous avons calculé les valeurs moyennes des distances inter-particules du trion X^- en 2D, ceci pour toutes les valeurs de σ comprises entre 0 et 1. Ici nous étudions l'influence du confinement sur les distances interparticules en présence d'un champ électrique uniforme parallèle aux couches. La valeur moyenne de r_{ij} à l'état φ_{rel} s'écrit :

$$\langle r_{ij} \rangle = \frac{\sum_{mnp} C_{mnp} C_{m'n'p'}^* \langle m'n'p' | (1 + P_{12}) r_{ij} (x_{1h} + x_{2h})^{p+p'} (1 + P_{12}) | mnp \rangle}{\sum_{mnp} C_{mnp} C_{m'n'p'}^* N_{mnp}^{m'n'p'}} \quad (4.34)$$

avec $N_{mnp}^{m'n'p'} = \langle m'n'p' | (1 + P_{12})(x_{1h} + x_{2h})^{p+p'}(1 + P_{12}) | mnp \rangle$

Nous avons utilisé les méthodes Gauss-Laguerre, Gauss-Legendre et Simpson pour calculer toutes les intégrales quadruples nécessaires aux calculs des éléments de matrice de $\langle r_{ij} \rangle$. Les coefficients C_{mnp} utilisés sont ceux obtenus lors de la minimalisation de l'énergie. Nous présentons sur la figure (4.7) les variations des distances moyennes $\langle r_{1h} \rangle$ et $\langle r_{12} \rangle$ en fonction de σ en absence de champ et pour une valeur de champ $f = 0.015 u.a.$. En absence de champ les valeurs moyennes $\langle r_{1h} \rangle$ et $\langle r_{12} \rangle$ varient linéairement en fonction de σ . Lorsque le champ est présent, cette linéarité disparaît et l'accroissement des valeurs moyennes devient plus prononcé avec σ proche de 1. Quand $\sigma \ll 1$, le champ n'a pratiquement aucun effet sur ces distances moyennes.

L'augmentation des rayons moyens avec le champ n'est pas en contradiction avec l'augmentation de l'énergie de liaison, la valeur moyenne $\langle T \rangle$ diminue très rapidement avec le champ et le potentiel moyen $|\langle V + W \rangle|$ diminue légèrement avec le champ, ce qui implique que les particules s'éloignent entre elles.

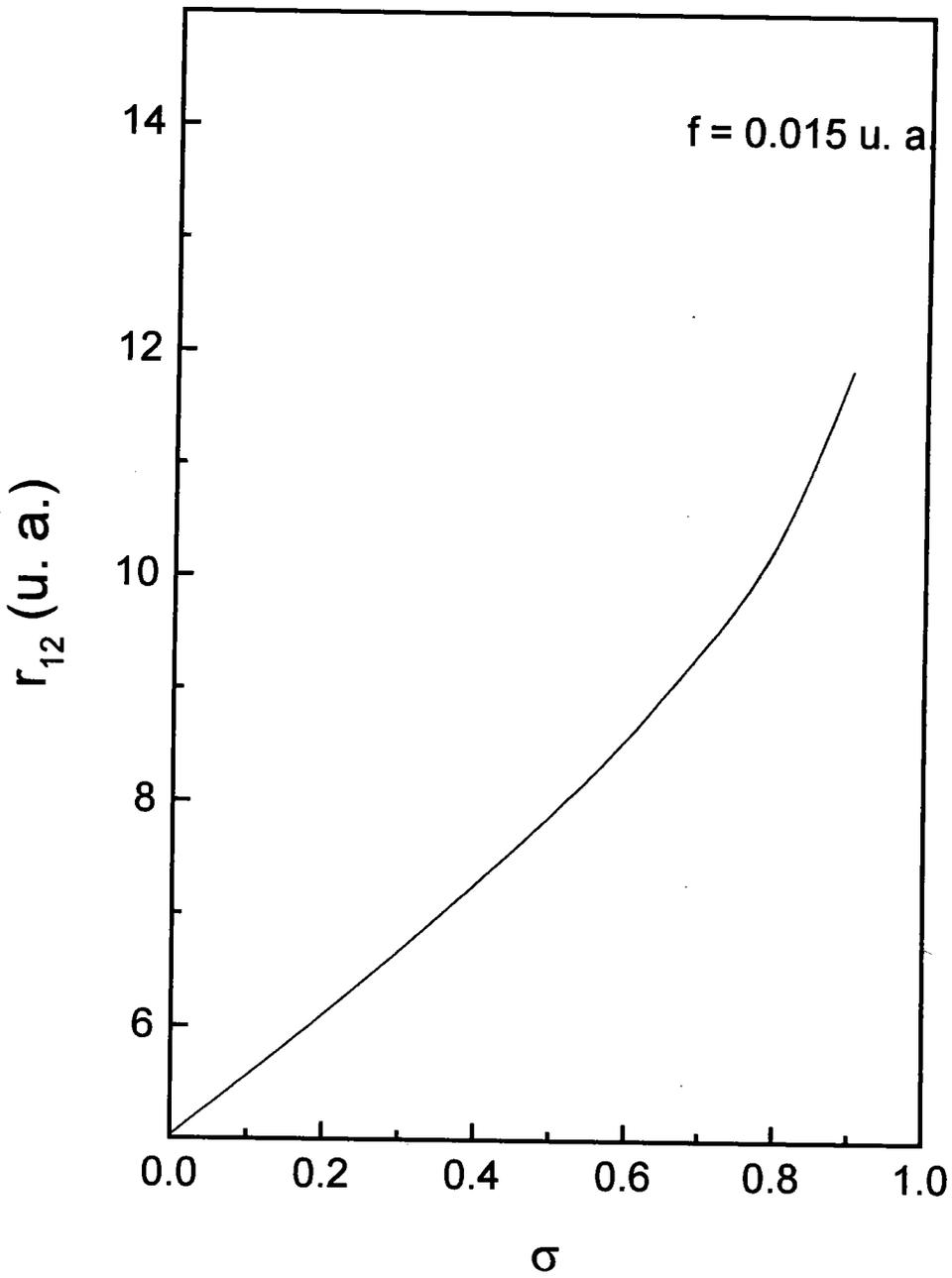


FIG. 4.7: Distance moyenne r_{12} pour une valeur de champ $f = 0.015 \text{ u. a.}$

4.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons calculé les énergies de liaison des excitons chargés X^- et X_2^+ dans un semi-conducteur (2D). Comme dans le cas (3D), l'énergie de liaison W_{2D} augmente légèrement avec le champ. Nous avons aussi comparé l'énergie de liaison de X^- avec celle obtenue dans le cas d'un matériau massif du chapitre précédent. Il s'avère que le champ électrique tend à réduire l'effet du confinement.

Conclusion générale.

Nous avons étudié l'état fondamental des excitons chargés ou trions excitoniques dans les semi-conducteurs massifs et bidimensionnels en présence d'un champ électrique uniforme faible.

Dans le premier chapitre, nous avons rappelé l'effet d'un champ électrique sur les systèmes atomiques (H^- , He), qui permettent de faire une analogie avec les complexes excitoniques dans les cas limites où les masses effectives de l'électron et du trou deviennent très différentes.

Au second chapitre, nous avons étudié l'action d'un champ électrique sur les excitons chargés négativement X^- dans les semi-conducteurs massifs. Nous avons montré que le mouvement du centre de masse et le mouvement relatif des particules peuvent encore être séparés en présence du champ. Le mouvement du centre de masse est défini par une équation analogue à celle obtenue pour un électron dans un solide en présence d'un champ électrique. Les solutions sont données par les fonctions d'Airy et l'introduction de conditions aux limites du cristal induit alors une quantification de l'énergie du mouvement du centre de masse, faisant apparaître des niveaux de Wannier-Stark. Au moyen de la méthode variationnelle, et en construisant une fonction d'onde d'essai adéquate, nous avons déterminé l'énergie du mouvement relatif de X^- et comparé avec celle de l'ion H^- (Chung 1965) dans le cas limite où le rapport σ des masses effectives électron/trou tend vers 0. Nous avons également mis en évidence les limites de la méthode variationnelle, lorsque le champ dépasse une certaine valeur, que nous

avons appelée champ critique, cette méthode n'est plus adaptée à la résolution de l'équation de Schrödinger.

Dans le troisième chapitre, nous avons étudié l'influence d'un champ électrique faible sur la stabilité du trion X^- dans les semi-conducteurs massifs. Nous avons d'abord déterminé l'énergie de l'exciton de manière variationnelle et comparé avec un bon accord avec les résultats obtenus en perturbation dans la littérature. Nous avons montré que dans la limite des champs faibles utilisés, le champ électrique renforce légèrement l'énergie de liaison du trion X^- , ce phénomène s'accroissant au fur et à mesure que σ augmente. Nous avons aussi comparé nos résultats avec d'autres travaux utilisant une méthode basée sur une approche variationnelle-perturbative, montrant que notre méthode permet d'atteindre des champs plus élevés.

Au dernier chapitre, nous avons étudié les trions X^- et X_2^+ dans un semi-conducteur bidimensionnel (2D) soumis à un champ électrique uniforme faible. Après avoir discuté le choix de la fonction d'onde, notamment l'absence de la distance r_{12} dans la fonction, nous avons donné les principales étapes du calcul variationnel. Nous avons calculé l'énergie fondamentale de X^- et montré qu'elle augmente en valeur absolue avec le champ, donc en accord avec le théorème de Hellmann-Feynmann (Levy-Leblond 1969). Comme dans le cas du semi-conducteur massif (3D), l'énergie de liaison de X^- augmente légèrement avec le champ électrique. Le cas de X_2^+ se déduit de X^- en échangeant les masses et les charges des particules. L'étude du rapport des énergies de liaison en 2D et 3D nous permet de conclure que l'effet du confinement diminue lorsque le champ augmente.

Nous envisageons de poursuivre ce travail par l'étude des propriétés optiques. Comme dans le cas de l'exciton, on s'attend à une oscillation du coefficient d'absorption et un déplacement du pic d'absorption vers de basses énergies.

Annexe A

Effet d'un champ électrique sur les états électroniques.

A.1 Effet d'un champ électrique sur les niveaux d'énergie de l'électron.

A.1.1 Mouvement du paquet d'onde

L'étude du mouvement de l'électron soumis à l'action du champ électrique statique s'avère difficile, puisque pour de faibles valeurs du champ, l'énergie potentielle de l'électron devient importante pour de grandes valeurs de r . Par conséquent la théorie de perturbation n'est pas applicable, cela veut dire qu'il n'existe plus d'états liés quand l'Hamiltonien contient le terme $U = e\vec{F} \cdot \vec{r}$.

Nous allons nous baser sur l'étude de l'électron de Bloch dans un champ électrique extérieur uniforme et constant en utilisant l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Nous supposons que le champ est appliqué dans la direction x qui sera aussi la direction du vecteur du réseau réciproque. Nous résolvons l'équation de Schrödinger dépendante du temps qui est sous la forme :

$$(H_0 + U)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (\text{A.1})$$

où H_0 est l'Hamiltonien du cristal contenant le potentiel périodique V et U le potentiel dû au champ extérieur. Nous développons la fonction d'onde de l'électron dans la base des fonctions de Bloch $\psi_{n_0}(\vec{k}, \vec{r})$ qui sont fonctions propres de H_0 .

$$H_0 \psi_{n_0}(\vec{k}, \vec{r}) = E_{n_0}(\vec{k}) \psi_{n_0}(\vec{k}, \vec{r}) \quad (\text{A.2})$$

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n \int d^3k \varphi_n(\vec{k}, t) \psi_n(\vec{k}, \vec{r}) \quad (\text{A.3})$$

Les coefficients du développement $\varphi_n(\vec{k}, t)$ décrivent la fonction d'onde dans la représentation des moments dans le cristal. Après avoir injecté l'expression de Ψ dans (A.1), nous multiplions l'équation obtenue par $\psi_{n'}^*(\vec{k}', \vec{r})$ et nous obtenons après intégration :

$$\begin{aligned} \sum_n \int \int \psi_{n'}^*(\vec{k}', \vec{r}) \left\{ [E_n(\vec{k}) + U] \varphi_n(\vec{k}, t) - i\hbar \frac{\partial \varphi_n(\vec{k}, t)}{\partial t} \right\} \psi_n(\vec{k}, \vec{r}) d^3k d^3r \quad (\text{A.4}) \\ = \left[E_{n'}(\vec{k}') - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \varphi_{n'}(\vec{k}', t) + \sum_n \int d^3k \langle n' \vec{k}' | U | n \vec{k} \rangle \varphi_n(\vec{k}, t) = 0 \end{aligned}$$

où

$$\langle n' \vec{k}' | U | n \vec{k} \rangle = \int \psi_{n'}^*(\vec{k}', \vec{r}) U \psi_n(\vec{k}, \vec{r}) d^3r \quad (\text{A.5})$$

et

$$\psi_n(\vec{k}, \vec{r}) = \langle \vec{r} | n \vec{k} \rangle \quad (\text{A.6})$$

La forme indépendante du temps de l'équation (A.4) s'écrit en tenant compte du fait que \vec{F} est dirigé suivant la direction x :

$$\left[E_{n'}(\vec{k}') - E \right] \varphi_{n'}(\vec{k}', t) - e F \sum_n \int d^3k \langle n' \vec{k}' | x | n \vec{k} \rangle \varphi_n(\vec{k}, t) = 0 \quad (\text{A.7})$$

Il est donc nécessaire de calculer les éléments de matrice de la coordonnée x .

$$\langle n' \vec{k}' | x | n \vec{k} \rangle = \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} u_{n'}^*(\vec{k}', \vec{r}) x u_n(\vec{k}, \vec{r}) d^3r$$

A.1. Effet d'un champ électrique sur les niveaux d'énergie de l'électron.

$$= \frac{1}{i} \left[\frac{\partial}{\partial k_x} \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} u_{n'}^*(\vec{k}', \vec{r}) u_n(\vec{k}, \vec{r}) d^3 r - \int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} u_{n'}^*(\vec{k}', \vec{r}) \frac{\partial}{\partial k_x} u_n(\vec{k}, \vec{r}) d^3 r \right] \quad (\text{A.8})$$

La première intégrale de (A.8) est déduite de la condition d'orthonormalisation des fonctions de Bloch.

$$\int e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\vec{r}} u_{n'}^*(\vec{k}', \vec{r}) u_n(\vec{k}, \vec{r}) d^3 r = \delta_{n'n} \delta(\vec{k}' - \vec{k}) \quad (\text{A.9})$$

Comme la fonction $u_{n'}(\frac{\partial}{\partial k_x})u_n$ est périodique, la seconde intégrale se ramène après avoir sommé sur toutes les cellules élémentaires du cristal à :

$$\begin{aligned} & \sum_{\vec{m}} \int_{\Omega_m} e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{m}} u_{n'}^*(\vec{k}', \vec{m}) \frac{\partial}{\partial k_x} u_n(\vec{k}, \vec{m}) d^3 m \quad (\text{A.10}) \\ &= \sum_{\vec{m}} e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{m}} \int_{\Omega_0} u_{n'}^*(\vec{k}', \vec{r}) \frac{\partial}{\partial k_x} u_n(\vec{k}, \vec{r}) d^3 r \\ &= \sum_{\vec{m}} e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{m}} X_{n'n}(\vec{k}') \\ &= X_{n'n}(\vec{k}') \sum_{\vec{m}} e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{m}} \end{aligned}$$

avec

$$X_{n'n} = \frac{(2\pi)^3}{\Omega_0} i \int u_{n'}^*(\vec{k}', \vec{r}) \frac{\partial}{\partial k_x} u_n(\vec{k}, \vec{r}) d^3 r$$

Ω_0 volume d'une cellule élémentaire.

$X_{n'n}(\vec{k})$ désigne le terme interbande, il représente le transfert d'un électron entre les bandes.

Comme la somme :

$$\sum_{\vec{m}} e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\vec{m}}$$

se réduit à $\frac{1}{\Omega_0} \delta(\vec{k}' - \vec{k})$, l'élément de matrice devient alors :

$$\langle n' \vec{k}' | x | n \vec{k} \rangle = i \frac{\partial}{\partial k_x} \left[\delta(\vec{k}' - \vec{k}) \delta_{n'n} \right] + X_{n'n} \delta(\vec{k}' - \vec{k}) \quad (\text{A.11})$$

L'équation de Schrödinger s'écrit maintenant sous la forme suivante :

$$\left[E_n(\vec{k}) - ieF \frac{\partial}{\partial k_x} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \varphi_n(\vec{k}) - eF \sum_{n'} X_{nn'}(\vec{k}) \varphi_{n'}(\vec{k}) = 0 \quad (\text{A.12})$$

Un résultat important est obtenu immédiatement, si nous multiplions l'équation (A.12) par $\varphi_n^*(\vec{k})$, puis soustrayons le résultat par son conjugué :

$$eF \left[\varphi_n^*(\vec{k}) \frac{\partial}{\partial k_x} \varphi_n(\vec{k}) + \varphi_n(\vec{k}) \frac{\partial}{\partial k_x} \varphi_n^*(\vec{k}) \right] + \hbar \left[\varphi_n^*(\vec{k}) \frac{\partial}{\partial t} \varphi_n(\vec{k}) + \varphi_n(\vec{k}) \frac{\partial}{\partial t} \varphi_n^*(\vec{k}) \right] \\ - eF \left[\varphi_n^*(\vec{k}) X_{nn'} \varphi_{n'}(\vec{k}) - \varphi_n(\vec{k}) X_{nn'}^* \varphi_{n'}^*(\vec{k}) \right] = 0 \quad (\text{A.13})$$

en sommant sur la bande d'indice n nous obtenons :

$$\left[eF \frac{\partial}{\partial k_x} + \hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \sum_n |\varphi_n(\vec{k})|^2 - eF \sum_{nn'} \left[\varphi_n^*(\vec{k}) X_{nn'} \varphi_{n'}(\vec{k}) - \varphi_n(\vec{k}) X_{nn'}^* \varphi_{n'}^*(\vec{k}) \right] = 0 \quad (\text{A.14})$$

puisque $X_{nn'}^* = X_{n'n}$ alors l'équation ci dessus devient :

$$\left[eF \frac{\partial}{\partial k_x} + \hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \sum_n |\varphi_n(\vec{k})|^2 = 0 \quad (\text{A.15})$$

Posons

$$\sum_n |\varphi_n(\vec{k})|^2 = G(k_x, k_y, k_z) \quad (\text{A.16})$$

nous avons

$$eF \frac{\partial G}{\partial k_x} = \hbar \frac{\partial G}{\partial t} = \hbar \frac{\partial G}{\partial k_x} \frac{\partial k_x}{\partial t} \quad (\text{A.17})$$

donc

$$\frac{\partial k_x}{\partial t} = \frac{eF}{\hbar} \Rightarrow k_x = k_{x0} + \frac{eF}{\hbar} t \quad (\text{A.18})$$

La solution de l'équation (A.15) est de la forme :

$$\sum_n |\varphi_n(\vec{k})|^2 = G\left(k_x - \frac{eFt}{\hbar}, k_y, k_z\right) \quad (\text{A.19})$$

A.1. Effet d'un champ électrique sur les niveaux d'énergie de l'électron.

où G est une fonction arbitraire. Considérons la valeur moyenne de \vec{k} à l'état Ψ , elle est définie par :

$$\langle \vec{k} \rangle = \sum_n \int |\varphi_n(\vec{k})|^2 \vec{k} d^3k \quad (\text{A.20})$$

Seule la composante suivant la direction des x est affectée par le champ, nous écrivons alors :

$$\langle k_x \rangle = \langle k_x \rangle_0 + \frac{eFt}{\hbar} \quad (\text{A.21})$$

où $\langle k_x \rangle_0$ la valeur moyenne de \vec{k}_x à l'instant $t=0$. Ce résultat implique que le mouvement du paquet d'onde de l'électron est centré dans l'espace des \vec{k} avec la condition : $\frac{dk_x}{dt} = \frac{eF}{\hbar}$

A.1.2 Niveaux de Wannier

L'existence de ces niveaux a été mise en évidence par Wannier (Wannier, 1960,1962). Reprenons l'équation (A.12), l'élément de matrice diagonal X_{nn} s'annule lorsque le groupe d'opérations de symétrie contient une inversion. Cet élément de matrice donne une augmentation au déplacement de la structure de bande qui est linéaire par l'application du champ. Nous pouvons définir cela par le premier terme :

$$E_n^{(1)}(\vec{k}) = E_n(\vec{k}) + eFX_{nn} \quad (\text{A.22})$$

et l'équation devient :

$$\left[E_n^{(1)}(\vec{k}) + ieF \frac{\partial}{\partial k_x} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \varphi_n(\vec{k}) - eF \sum_{n \neq n'} X_{nn'} \varphi_{n'}(\vec{k}) = 0$$

Le mouvement de l'électron est défini par les termes entre crochets, les éléments non diagonaux traduisent les transitions bande à bande. Ces transitions regroupent aussi l'effet tunnel.

Pour l'instant nous négligeons le second terme de l'équation et nous appelons

Annexe A. Effet d'un champ électrique sur les états électroniques.

la fonction $\varphi_n(\vec{k})$ par $\varphi_n^{(1)}(\vec{k})$. Suivant Kane (1959) et Argyres (1962), nous pouvons obtenir une solution stationnaire de (A.12) qui peut être utilisée dans la discussion de l'effet tunnel. Les fonctions $\varphi_n^{(1)}$ sont prises dépendantes du temps et sont multipliées par $\exp[-\frac{iEt}{\hbar}]$ nous obtenons :

$$\left[E_n^{(1)}(\vec{k}) + ieF \frac{\partial}{\partial k_x} \right] \varphi_n^{(1)}(\vec{k}) = E \varphi_n^{(1)}(\vec{k}) \quad (\text{A.23})$$

la solution de cette équation est :

$$\varphi_n^{(1)}(\vec{k}) = \frac{1}{A} \exp\left\{-\frac{i}{eF} \int_0^{k_x} [E - E_n^{(1)}(\vec{k}')] dk'_x\right\} \delta(k_y - k_{y0}) \delta(k_z - k_{z0}) \quad (\text{A.24})$$

La constante de normalisation A est la longueur de la ligne (k_x, k_{y0}, k_{z0}) le long de la zone de Brillouin. Pour simplifier le problème nous choisissons cette ligne dans la direction d'un vecteur du réseau réciproque. La valeur propre de l'énergie est déterminée par le fait que la fonction d'onde est la même aux points extrêmes de la ligne. Le changement de phase en parcourant la distance A est un multiple de 2π , il vient alors :

$$\frac{1}{eF} \int_{-\frac{A}{2}}^{\frac{A}{2}} [E - E_n^{(1)}(\vec{k}')] dk'_x = 2n\pi \quad (\text{A.25})$$

où n est un entier relatif. Désormais nous désignons les valeurs propres en présence du champ par l'indice n :

$$E_n = \frac{2n\pi eF}{A} + \frac{1}{A} \int_{-\frac{A}{2}}^{\frac{A}{2}} E_n^{(1)}(\vec{k}') dk'_x \quad (\text{A.26})$$

Le spectre d'énergie en présence du champ contient une série de niveaux discrets (Stark ladders) séparé par $\frac{2\pi eF}{A}$. Si le paramètre du réseau est a , la séparation des niveaux est de l'ordre de eaF .

Cas de bandes paraboliques :

$$E = \gamma A^2 \quad (\text{A.27})$$

$$E_n = \frac{2\pi eFn}{A} + \frac{1}{A} \int_{-\frac{A}{2}}^{\frac{A}{2}} \gamma k_x^2 dk_x + \frac{1}{A} \int_{-\frac{A}{2}}^{\frac{A}{2}} \gamma(k_y^2 + k_z^2) dk_x \quad (\text{A.28})$$

A.1. Effet d'un champ électrique sur les niveaux d'énergie de l'électron.

$$E_n = \frac{2\pi eFn}{A} + \gamma(k_y^2 + k_z^2) + \gamma \frac{A^2}{12} \quad (\text{A.29})$$

La structure de bandes est détruite dans la direction du champ, par contre elle reste inchangée dans les directions perpendiculaires au champ. Le temps nécessaire à l'électron pour franchir la zone de Brillouin est obtenue d'après l'équation :

$$k_x = k_{0x} + \frac{eF}{\hbar}t \quad (\text{A.30})$$

Les bords de la zone de Brillouin sont $-\frac{A}{2}$ et $\frac{A}{2}$

$$\frac{A}{2} = -\frac{A}{2} + \frac{eF}{\hbar}t \Rightarrow t = \frac{\hbar A}{eF} \quad (\text{A.31})$$

quand le vecteur d'onde de l'électron atteint la limite de la zone de Brillouin, les nouvelles valeurs du vecteur d'onde sont changées par l'addition du vecteur du réseau réciproque. Si la direction du champ électrique est parallèle au vecteur du réseau réciproque, le vecteur d'onde apparaît dans un point opposé de la zone de Brillouin. Dans ce cas l'électron oscille à l'intérieur d'une seule bande, et l'équation $t = \frac{\hbar A}{eF}$ donne la période des oscillations. Dans ce cas, la structure de bande n'est pas altérée dans la direction perpendiculaire au champ électrique, mais elle a été détruite et remplacée par des niveaux discrets dans le cas d'un mouvement parallèle au champ. L'existence de ces niveaux peut être mise en évidence de la manière suivante; d'après (A.30) le temps que met l'électron pour traverser la zone de Brillouin suivant une direction donnée de longueur A est :

$$t = \frac{\hbar A}{eF} \quad (\text{A.32})$$

Quand le vecteur d'onde atteint le bord de la zone de Brillouin, un processus apparaît, le vecteur d'onde est changé par un vecteur du réseau réciproque.

Dans nos calculs, nous avons négligé l'effet tunnel qui permet à un électron d'effectuer une transition bande à bande.

Pour un système à plusieurs bandes, nous pouvons considérer que la conséquence

de l'effet tunnel serait d'élargir les niveaux de Stark d'une quantité :

$$\delta_t = \frac{\hbar}{\tau_t} \quad (\text{A.33})$$

où τ_t est la durée de vie de l'effet tunnel, un élargissement supplémentaire serait causé par la diffusion de l'électron (τ_s) par des phonons ou des impuretés et par un mauvais alignement du champ électrique appliqué (qui permettra à l'électron de s'échapper du mouvement périodique entre les portions planes parallèles de dimensions finies de la zone), ce qui donne la durée de vie τ_m . Nous devrions rajouter la durée de vie réciproque de ces phénomènes :

$$\tau^{-1} = \tau_t^{-1} + \tau_s^{-1} + \tau_m^{-1} \quad \text{et} \quad \delta = \frac{\hbar}{\tau} \quad (\text{A.34})$$

et calculer la largeur totale.

L'observation des niveaux demande que δ soit inférieure à l'espacement ΔE . En d'autres termes l'électron doit être capable de faire au moins une oscillation à travers la zone avant qu'il ne soit éjecté.

Toutefois cette condition est difficilement satisfaite expérimentalement (la durée de vie est de l'ordre de 10^{-12} s ou plus longue pour un champ de 10^7 V/m). L'argument ci-dessus néglige le fait que dans un cristal moléculaire dans lequel la probabilité de mouvement d'un électron d'une région à une autre est petite, un champ électrique, génère une différence d'énergie $\sim e F a$ entre deux états d'énergies équivalentes de molécules voisines distantes de a . La situation alors ne pouvait pas être convenablement décrite par la théorie des bandes.

Wannier et Fredkin (1962) avaient montré qu'on peut trouver des bandes fermées en présence d'un champ électrique toutefois ces bandes ne sont pas nécessairement liées de manière simple aux bandes qui existent dans un champ nul. Considérons la nature de la fonction d'onde formée par la superposition de fonctions φ_n donnée par (A.24) pour former le paquet d'onde $\Psi(\vec{r}, t)$. Construisons la superposition de telle manière que les états de différents n aient une même amplitude alors :

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int \varphi^{(1)}(\vec{k}, t) \psi(\vec{r}, \vec{k}) d^3 k \quad (\text{A.35})$$

A.1. Effet d'un champ électrique sur les niveaux d'énergie de lélectron.

$$= A^{-\frac{1}{2}} \sum_n \int \exp \left\{ \frac{i}{-eF} \left[\int_0^{k_x} E_n - E^{(1)}(\vec{k}') \right] dk'_x - i \frac{E_n t}{\hbar} \right\} \Psi(\vec{k}_x, \vec{k}_{y0}, \vec{k}_{z0}, \vec{r}) dk_x \quad (\text{A.36})$$

En interchangeant la sommation avec l'intégrale, la sommation sur n donne :

$$\sum_n \exp \left\{ i \left[\frac{2\pi n}{A} \left(k_x + \frac{eFt}{\hbar} \right) \right] \right\} = A \sum_m \delta \left[\left(k_x + \frac{eFt}{\hbar} \right) - mA \right] \quad (\text{A.37})$$

Comme k_x est dans la zone ($k_x A$), pour une valeur de t donnée, une seule valeur de m contribue. Pour simplifier, prenons cette valeur $m = 0$ correspondant à des petits temps. Nous obtenons :

$$\Psi(\vec{r}, t) = A^{\frac{1}{2}} \psi\left(-\frac{eF}{\hbar}, k_{y0}, k_{z0}\right) \exp \left[\frac{i}{eF} \int_0^{-\frac{eF}{\hbar}} E^{(1)}(\vec{k}') dk'_x \right] \quad (\text{A.38})$$

Cette fonction est connue sous le nom de fonction de Houston(1940), elle peut être étendue pour de grandes valeurs de t en sommant sur m la relation (A.37).

Annexe B

Calcul de l'élément de volume $d\tau$

En coordonnées cartésiennes l'élément de volume $d\tau$ s'écrit :

$$d\tau = (dx_1 dy_1 dz_1)(dx_2 dy_2 dz_2) = d\tau_1 d\tau_2 \quad (\text{B.1})$$

en coordonnées sphériques $d\tau$ devient :

$$d\tau = |J| dr_1 d\theta_1 d\phi_1 dr_2 d\theta_2 d\phi_2 \quad (\text{B.2})$$

avec

$$J = r_1^2 \sin^2 \theta_1 r_2^2 \sin^2 \theta_2 \quad (\text{B.3})$$

nous avons :

$$z_1 = r_1 \cos \theta_1 \Rightarrow dz_1 = -r_1 \sin \theta_1 d\theta_1 \quad (\text{avec } r_1 \text{ fixe})$$

$$z_2 = r_2 \cos \theta_2 \Rightarrow dz_2 = -r_2 \sin \theta_2 d\theta_2 \quad (\text{avec } r_2 \text{ fixe})$$

$d\tau$ peut alors se mettre sous la forme :

$$d\tau = r_1 r_2 dr_1 dr_2 dz_1 dz_2 d\phi_1 d\phi_2. \quad (\text{B.4})$$

posons $\phi = \frac{\phi_1 + \phi_2}{2}$

$$d\tau = |J'| r_1 r_2 dr_1 dr_2 d\phi dz_1 dz_2 \quad (\text{B.5})$$

Annexe B. Calcul de l'élément de volume $d\tau$

avec $J' = \frac{D(\phi_1, \phi_2)}{D(\phi, r_{12})}$

$$\frac{1}{J'} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial r_{12}}{\partial \phi_2} - \frac{\partial r_{12}}{\partial \phi_1} \right)$$

nous avons $\rho_{12}^2 = \rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2\cos(\phi_1 - \phi_2)$ où ρ_{12} est la composante de \vec{r}_{12} dans le plan vectoriel (O, \vec{i}, \vec{j})

soit alors :

$$\rho_{12}^2 = r_{12}^2 - z_{12}^2 = (r_1^2 - z_1^2) + (r_2^2 - z_2^2) - 2\sqrt{r_1^2 - z_1^2}\sqrt{r_2^2 - z_2^2}\cos(\phi_1 - \phi_2)$$

$$\frac{\partial r_{12}}{\partial \phi_2} = \frac{\sqrt{r_1^2 - z_1^2}\sqrt{r_2^2 - z_2^2}\sin(\phi_2 - \phi_1)}{r_{12}}$$

$$\frac{\partial r_{12}}{\partial \phi_1} = -\frac{\sqrt{r_1^2 - z_1^2}\sqrt{r_2^2 - z_2^2}\sin(\phi_2 - \phi_1)}{r_{12}}$$

d'où $|J'|^{-1} = \frac{\sqrt{r_1^2 - z_1^2}\sqrt{r_2^2 - z_2^2}}{r_{12}} |\sin(\phi_2 - \phi_1)|$

ou encore $|J'| = \frac{r_{12}}{\sqrt{r_1^2 - z_1^2}\sqrt{r_2^2 - z_2^2}} |\sin(\phi_2 - \phi_1)|$

avec $\frac{1}{\sin(\phi_2 - \phi_1)} = \frac{2\sqrt{r_1^2 - z_1^2}\sqrt{r_2^2 - z_2^2}}{\sqrt{4(r_1^2 - z_1^2)(r_2^2 - z_2^2) - (r_1^2 + r_2^2 - z_1^2 - z_2^2 + z_{12}^2 - r_{12}^2)^2}}$
d'où

$$d\tau = \frac{2r_1r_2r_{12}dr_1dr_2dz_1dz_2dr_{12}d\phi}{D} \quad (\text{B.6})$$

avec

$$D = \sqrt{4(r_1^2 - z_1^2)(r_2^2 - z_2^2) - (r_1^2 + r_2^2 - z_1^2 - z_2^2 + z_{12}^2 - r_{12}^2)^2}. \quad (\text{B.7})$$

Exprimons maintenant $d\tau$ en coordonnées elliptiques s, t, u définies à partir des trois coordonnées relatives.

$$s = r_1 + r_2, \quad t = r_1 - r_2, \quad u = r_{12} \quad (\text{B.8})$$

$d\tau$ s'écrit maintenant en fonction de s, t, u :

$$d\tau = |J''| \frac{2r_1 r_2 r_{12} ds dt du dz_1 dz_2 d\phi}{D} \quad (\text{B.9})$$

avec

$$|J''| = \left| \frac{D(r_1, r_2)}{D(s, t)} \right| \quad (\text{B.10})$$

et D que l'on peut exprimer en fonction de s, t, u, z_1 et z_2 comme suit :

$$D = \sqrt{z_1 z_2 (2s^2 + 2t^2 - 4u^2) - (s+t)^2 z_2^2 - (s-t)^2 z_1^2 - u^4 + (s^2 + t^2)u^2 - s^2 t^2} \quad (\text{B.11})$$

d'où après intégration sur ϕ

$$d\tau = \frac{\pi (s^2 - t^2)}{2} \frac{u ds dt du dz_1 dz_2}{D} \quad (\text{B.12})$$

Les bornes d'intégration des coordonnées elliptiques sont définies par :

$$\int d\tau = \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_{-u}^u dt \int_{-\frac{s-t}{2}}^{\frac{s-t}{2}} dz_1 \int_{z_1'}^{z_2'} dz_2 \quad (\text{B.13})$$

où z_1' et z_2' sont les racines de l'équation $D = 0$.

Pour le calcul des éléments de matrice de la norme S et des opérateurs $\hat{T}, \hat{V}, \hat{W}$, qui sera l'objet de l'annexe suivant, nous utilisons le résultat des intégrales suivantes (Atanasoff 1930) :

$$I_1 = \int_{-\frac{s+t}{2}}^{\frac{s-t}{2}} \int_{z_1'}^{z_2'} \frac{(s^2 - t^2) u}{D} z_2^2 dz_1 dz_2 = \frac{\pi}{12} u (s-t)^3 (s+t)$$

$$I_2 = \int_{-\frac{s+t}{2}}^{\frac{s-t}{2}} \int_{z_1'}^{z_2'} \frac{(s^2 - t^2) u}{D} z_1 z_2 dz_1 dz_2 = \frac{\pi}{12} u (s^2 - t^2) (s^2 + t^2 - 2u^2)$$

$$I_3 = \int_{-\frac{s+t}{2}}^{\frac{s-t}{2}} \int_{z_1'}^{z_2'} \frac{(s^2 - t^2) u}{D} z_1^2 dz_1 dz_2 = \frac{\pi}{12} u (s+t)^3 (s-t)$$

$$I_4 = \int_{-\frac{s+t}{2}}^{\frac{s-t}{2}} \int_{z_1'}^{z_2'} \frac{(s^2 - t^2) u}{D} dz_1 dz_2 = \pi u (s^2 - t^2)$$

Annexe C

Calcul des éléments de matrice des différents opérateurs.

Rappelons l'expression de la fonction d'onde du trion (équation 2.28) :

$$\Psi(s, t, u, z_{1h}, z_{2h}) = \Psi^0(s, t, u) + \Psi^I(s, t, u, z_{1h}, z_{2h}) \quad (\text{C.1})$$

$$\Psi^0(s, t, u) = \sum_{mnp} c_{mnp} |mnp\rangle \quad (\text{C.2})$$

et

$$\Psi^I(s, t, u, z_{1h}, z_{2h}) = (z_{1h} + z_{2h}) \sum_{mnp} d_{mnp} |mnp\rangle. \quad (\text{C.3})$$

avec $|mnp\rangle = e^{-\frac{s}{2}} s^m t^n u^p$. Pour le calcul des éléments de matrice de la norme N et des opérateurs \hat{T} , \hat{V} , \hat{W} nous utilisons le résultat des intégrales suivantes :

$$I_1 = \int_{-\frac{s+t}{2}}^{\frac{s-t}{2}} \int_{z'_{1h}}^{z'_{2h}} \frac{(s^2 - t^2) u}{D} z_2^2 dz_1 dz_2 = \frac{\pi}{12} u (s-t)^3 (s+t)$$

$$I_2 = \int_{-\frac{s+t}{2}}^{\frac{s-t}{2}} \int_{z'_{1h}}^{z'_{2h}} \frac{(s^2 - t^2) u}{D} z_1 z_2 dz_1 dz_2 = \frac{\pi}{12} u (s^2 - t^2) (s^2 + t^2 - 2u^2)$$

$$I_3 = \int_{-\frac{s+t}{2}}^{\frac{s-t}{2}} \int_{z'_{1h}}^{z'_{2h}} \frac{(s^2 - t^2) u}{D} z_1^2 dz_1 dz_2 = \frac{\pi}{12} u (s+t)^3 (s-t)$$

$$I_4 = \int_{-\frac{s-t}{2}}^{\frac{s+t}{2}} \int_{z'_{1h}}^{z'_{2h}} \frac{(s^2 - t^2) u}{D} dz_1 dz_2 = \pi u (s^2 - t^2)$$

La norme de la fonction d'onde (C.1) s'écrit :

$$N = \langle \Psi^0 | \Psi^0 \rangle + 2\langle \Psi^0 | (z_{1h} + z_{2h}) | \Psi^0 \rangle + \langle \Psi^0 | (z_{1h} + z_{2h})^2 | \Psi^0 \rangle \quad (C.4)$$

que l'on peut écrire à la manière suivante :

$$N = \langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{m n p q} \sum_{m' n' p' q'} e_{m n p q} e_{m' n' p' q'}^* N_{m n p q}^{m' n' p' q'} \quad (C.5)$$

avec

$$e_{m n p 0} = c_{m n p} \quad e_{m n p 1} = d_{m n p}$$

et

$$N_{m n p q}^{m' n' p' q'} = \langle m' n' p' | (z_{1h} + z_{2h})^{q+q'} | m n p \rangle.$$

Nous évaluons les termes des éléments de matrice de la norme pour chaque couple (q, q') appartenant à $\{0, 1\}$.

* $q = q' = 0$

$$\begin{aligned} N_{m n p 0}^{m' n' p' 0} &= \langle m' n' p' | m n p \rangle \\ &= \int e^{-s} s^{m+m'} t^{n+n'} u^{p+p'} d\tau \end{aligned}$$

avec

$$d\tau = \frac{\pi (s^2 - t^2)}{2 D} u ds dt du dz_{1h} dz_{2h}$$

et

$$D = \sqrt{z_1 z_2 (2s^2 + 2t^2 - 4u^2) - (s+t)^2 z_2^2 - (s-t)^2 z_1^2 - u^4 + (s^2 + t^2)u^2 - s^2 t^2}$$

on intègre sur z'_{1h} et z'_{2h} on obtient alors :

$$\begin{aligned} \langle m' n' p' | m n p \rangle &= \frac{\pi^2}{2} \left[\int e^{-s} s^{m+m'+1} t^{n+n'} u^{p+p'+1} ds dt du \right. \\ &\quad \left. - \int e^{-s} s^{m+m'} t^{n+n'+2} u^{p+p'+1} ds dt du \right] \\ &= \frac{\pi^2}{2} \{ I(m+m'+2, n+n', p+p'+1) - I(m+m', n+n'+2, p+p'+1) \} \end{aligned}$$

où l'on a utilisé la notation suivante :

$$I(m, n, p) = \int e^{-s} s^m t^n u^p ds dt du \quad (\text{C.6})$$

* ($q = 0$ et $q' = 1$) ou ($q = 1$ et $q' = 0$)

$$N_{mnp0}^{m'n'p'1} = N_{mnp1}^{m'n'p'0} = \langle m'n'p' | (z_{1h} + z_{2h}) | mnp \rangle = 0$$

* $q = q' = 1$

$$\begin{aligned} N_{mnp1}^{m'n'p'1} &= \langle m'n'p' | (z_{1h} + z_{2h})^2 | mnp \rangle \\ &= \langle m'n'p' | z_{1h}^2 | mnp \rangle + \langle m'n'p' | z_{2h}^2 | mnp \rangle \\ &\quad + 2 \langle m'n'p' | z_{1h}z_{2h} | mnp \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle m'n'p' | z_{1h}^2 | mnp \rangle &= \int e^{-s} s^{m+m'} t^{n+n'} u^{p+p'} z_{1h}^2 d\tau \\ &= \frac{\pi^2}{24} \int e^{-s} s^{m+m'} t^{n+n'} u^{p+p'+1} (s-t)(s+t)^3 ds dt du \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle m'n'p' | z_{2h}^2 | mnp \rangle &= \int e^{-s} s^{m+m'} t^{n+n'} u^{p+p'} z_{2h}^2 d\tau \\ &= \frac{\pi^2}{24} \int e^{-s} s^{m+m'} t^{n+n'} u^{p+p'+1} (s-t)^3 (s+t) d\tau \end{aligned}$$

$$\langle m'n'p' | z_{1h} z_{2h} | mnp \rangle = \frac{\pi^2}{24} \int e^{-s} s^{m+m'} t^{n+n'} u^{p+p'+1} (s^2 - t^2)(s^2 + t^2 - 2u^2) d\tau$$

on trouve alors :

$$\begin{aligned} \langle m'n'p' | (z_{1h} + z_{2h})^2 | mnp \rangle &= \frac{\pi^2}{6} [I(m+m'+4, n+n', p+p'+1) \\ &\quad - I(m+m', n+n'+4, p+p'+1) \\ &\quad + I(m+m', n+n'+2, p+p'+3) \\ &\quad - I(m+m'+2, n+n', p+p'+3)] \end{aligned}$$

Pour alléger encore la notation on pose :

$$I(m+m'+\alpha, n+n'+\beta, p+p'+\gamma) = I(\alpha, \beta, \gamma) \quad (\text{C.7})$$

En sommant sur q et q' , l'élément de matrice $N_{mnp}^{m'n'p'}$ de la norme N s'écrit finalement :

$$\begin{aligned}
 N_{mnp}^{m'n'p'} &= \langle m'n'p' | (z_{1h} + z_{2h})^2 | mnp \rangle + \langle m'n'p' | mnp \rangle \\
 &= \frac{\pi^2}{6} \{ 3I(2, 0, 1) - 3I(0, 2, 1) + I(4, 0, 1) - I(0, 4, 1) + I(0, 2, 3) - I(2, 0, 3) \}
 \end{aligned} \tag{C.8}$$

La valeur moyenne de l'énergie cinétique à l'état Ψ s'écrit :

$$\langle \Psi | \hat{T} | \Psi \rangle = \sum_{mnpq} \sum_{m'n'p'q'} e_{mnpq} e_{m'n'p'q'}^* T_{mnpq}^{m'n'p'q'} \tag{C.9}$$

avec :

$$T_{mnpq}^{m'n'p'q'} = \langle m'n'p' | (z_{1h} + z_{2h})^{q'} T (z_{1h} + z_{2h})^q | mnp \rangle . \tag{C.10}$$

Dans tout qui suit, nous donnons les expressions de $T_{mnpq}^{m'n'p'q'}$ pour chaque valeur de q et q' .

$$\begin{aligned}
\langle m' n' p' 1 | \hat{T} | m n p 1 \rangle = & \frac{\pi^2}{24} \left\{ -\frac{1}{4} [I(4, 0, 1) + 2I(3, 1, 1) - 2I(1, 3, 1) - I(0, 4, 1)] \right. \\
& -m(m-1) [I(2, 0, 1) + 2I(1, 1, 1) - 2I(-1, 3, 1) - I(-2, 4, 1)] + m [I(3, 0, 1) \\
& + 2I(2, 1, 1) - 2I(0, 3, 1) - I(-1, 4, 1)] - p(p-1) [I(4, 0, 1) + 2I(3, 1, -1) \\
& - 2I(1, 3, -1) - I(0, 4, -1)] + 2pn [I(2, 0, 1) + 2I(1, 1, 1) + I(0, 2, 1)] \\
& -n(n-1) [I(4, -2, 1) + 2I(3, -1, 1) - 2I(1, 1, 1) - I(0, +2, 1)] - 2pn [I(4, 0, -1) \\
& + 2I(3, 1, -1) + I(2, 2, -1)] - 2pm [I(2, 0, 1) + 2I(1, 1, 1) + I(0, 2, 1)] \\
& + p [I(3, 0, 1) + 2I(2, 1, 1) + I(1, 2, 1)] + 2pm [I(2, 2, -1) + 2I(1, 3, -1) \\
& + I(0, 4, -1)] - p [I(3, 2, -1) + 2I(2, 3, -1) + I(1, 4, -1)] \\
& 2p [I(4, 0, -1) + 2I(3, 1, -1) - 2I(1, 3, -1) - I(0, 4, -1)] \\
& -4m [I(2, 0, 1) + 2I(1, 1, 1) + I(0, 2, 1)] + 2 [I(3, 0, 1) + 2I(2, 1, 1) \\
& + I(1, 2, 1)] + 4n [I(2, 0, 1) + 2I(1, 1, 1) + I(0, 2, 1)] - 2m [I(2, 0, 1) \\
& - I(0, 2, 1) + I(1, 1, 1) - I(-1, 3, 1)] - 2n [I(3, -1, 1) - I(1, 1, 1) \\
& + I(2, 0, 1) - I(0, 2, 1)] + I(3, 0, 1) - I(1, 2, 1) + I(2, 1, 1) - I(0, 3, 1) \left. \right\} \\
& + \sigma \frac{\pi^2}{24} \left\{ -\frac{1}{2} [I(4, 0, 1) + I(2, 2, 1) + 2I(3, 1, 1)] - 2m(m-1) [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) \right. \\
& + 2I(1, 1, 1)] + 2m [I(3, 0, 1) + I(1, 2, 1) + 2I(2, 1, 1)] + \frac{1}{2} [I(2, 0, 3) + I(0, 2, 3) \\
& + 2I(1, 1, 3)] + 2m(m-1) [I(0, 0, 3) + I(-2, 2, 3) + 2I(-1, 1, 3)] - 2m [I(1, 0, 3) \\
& + I(-1, 2, 3) + 2I(0, 1, 3)] - 2n(n-1) [I(2, -2, 3) + I(0, 0, 3) + 2I(1, -1, 3)] \\
& + 2n(n-1) [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) + 2I(1, 1, 1)] - 4m [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) \\
& + 2I(1, 1, 1)] + 2 [I(3, 0, 1) + I(1, 2, 1) + 2I(2, 1, 1)] \\
& + 4n [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) + 2I(1, 1, 1)] - 2n [I(3, -1, 1) - I(1, 1, 1) \\
& + I(2, 0, 1) - I(0, 2, 1)] + 2n [I(3, -1, 1) + I(0, 2, 1) + I(1, 1, 1) \\
& + I(2, 0, 1) - 2I(1, -1, 3) - 2I(0, 0, 3)] - 2m [I(2, 0, 1) - I(0, 2, 1) \\
& + I(1, 1, 1) - I(-1, 3, 1)] - 2m [I(2, 0, 1) + I(-1, 3, 1) + I(0, 2, 1) \\
& + I(1, 1, 1) - 2I(0, 0, 3) - 2I(-1, 1, 3)] + I(3, 0, 1) - I(1, 2, 1) \\
& + I(2, 1, 1) - I(0, 3, 1) + I(3, 0, 1) + I(0, 3, 1) + I(1, 2, 1) + I(2, 1, 1) \\
& \left. - 2I(1, 0, 3) - 2I(0, 1, 3) \right\}
\end{aligned}$$

Annexe C. Calcul des éléments de matrice des différents opérateurs.

$$\begin{aligned}
 \langle m'n'p'2 | \hat{T} | mnp1 \rangle = & \frac{\pi^2}{24} \left\{ -\frac{1}{4} [I(4, 0, 1) - I(0, 4, 1) - 2I(2, 0, 3) + 2I(0, 2, 3)] \right. \\
 & -m(m-1) [I(2, 0, 1) - I(-2, 4, 1) - 2I(0, 0, 3) + 2I(-2, 2, 3)] \\
 & +m [I(3, 0, 1) - I(-1, 4, 1) - 2I(1, 0, 3) + 2I(-1, 2, 3)] \\
 & -p(p-1) [I(4, 0, -1) - I(0, 4, -1) - 2I(2, 0, 1) + 2I(0, 2, 1)] \\
 & +2pn [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) - 2I(0, 0, 3)] - n(n-1) [I(4, -2, 1) \\
 & - I(0, +2, 1) - 2I(2, -2, 3) + 2I(0, 0, 3)] - 2pn [I(4, 0, -1) + I(2, 2, -1) \\
 & - 2I(2, 0, 1)] - 2pm [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) - 2I(0, 0, 3)] + p [I(3, 0, 1) \\
 & + I(1, 2, 1) - 2I(1, 0, 3)] + 2pm [I(2, 2, -1) + I(0, 4, -1) - 2I(0, 2, 1)] \\
 & -p [I(3, 2, -1) + I(1, 4, -1) - 2I(1, 2, 1)] - 2p [I(4, 0, -1) - I(0, 4, -1) \\
 & - 2I(2, 0, 1) + 2I(0, 2, 1)] - 4m [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) - 2I(0, 0, 3)] \\
 & +2 [I(3, 0, 1) + I(1, 2, 1) - 2I(1, 0, 3)] + 4n [I(2, 0, 1) \\
 & + I(0, 2, 1) - 2I(0, 0, 3)] - 2m [I(2, 0, 1) - I(-1, 3, 1) + I(0, 2, 1) \\
 & - I(1, 1, 1) + 2I(-1, 1, 3) - 2I(0, 0, 3)] + [I(3, 0, 1) - I(0, 3, 1) \\
 & + I(1, 2, 1) - I(2, 1, 1) + 2I(0, 1, 3) - 2I(1, 0, 3)] \\
 & -2n [I(3, -1, 1) - I(0, 2, 1) + I(1, 1, 1) - I(2, 0, 1) + 2I(0, 0, 3) \\
 & - 2I(1, -1, 3)] - p [I(4, 0, -1) - I(0, 4, -1) - 2I(2, 0, 1) \\
 & + 2I(0, 2, 1)] + p [I(4, 0, -1) - 2I(3, 1, -1) + 2I(1, 3, -1) - I(0, 4, -1)] \left. \right\} \\
 & +\sigma \frac{\pi^2}{24} \left\{ -\frac{1}{2} [I(4, 0, 1) + I(2, 2, 1) - 2I(2, 0, 3)] - 2m(m-1) [I(2, 0, 1) \right. \\
 & + I(0, 2, 1) - 2I(0, 0, 3)] + 2m [I(3, 0, 1) + I(1, 2, 1) - 2I(1, 0, 3)] \\
 & +\frac{1}{2} [I(2, 0, 3) + I(0, 2, 3) - 2I(0, 0, 5)] + 2m(m-1) [I(0, 0, 3) + I(-2, 2, 3) \\
 & - 2I(-2, 0, 5)] - 2m [I(1, 0, 3) + I(-1, 2, 3) - 2I(-1, 0, 5)] \\
 & -2n(n-1) [I(2, -2, 3) + I(0, 0, 3) - 2I(0, -2, 5)] + 2n(n-1) [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) \\
 & - 2I(0, 0, 3)] - 4m [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) - 2I(0, 0, 3)] \\
 & +2 [I(3, 0, 1) + I(1, 2, 1) - 2I(1, 0, 3)] + 4n [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) \\
 & - 2I(0, 0, 3)] - 2n [I(3, -1, 1) - I(0, 2, 1) + I(1, 1, 1) - I(2, 0, 1) \\
 & + I(0, 0, 3) - 2I(1, -1, 3)] + 2n [I(3, -1, 1) - I(2, 0, 1) - I(1, 1, 1)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + I(0, 2, 1)] - 2m [I(2, 0, 1) - I(-1, 3, 1) + I(0, 2, 1) - I(1, 1, 1) \\
& + 2I(-1, 1, 3) - 2I(0, 0, 3)] - 2m [I(2, 0, 1) + I(-1, 3, 1) - I(0, 2, 1) \\
& - I(1, 1, 1)] + I(3, 0, 1) - I(0, 3, 1) + I(1, 2, 1) - I(2, 1, 1) \\
& + 2I(0, 1, 3) - 2I(1, 0, 3) - I(0, 3, 1) - I(1, 2, 1) - I(2, 1, 1) + I(3, 0, 1) \}
\end{aligned}$$

Annexe C. Calcul des éléments de matrice des différents opérateurs.

$$\begin{aligned}
 \langle m' n' p' 2 | \hat{T} | mnp2 \rangle = & \frac{\pi^2}{24} \left\{ -\frac{1}{4} [I(4, 0, 1) - 2I(3, 1, 1) + 2I(1, 3, 1) - I(0, 4, 1)] \right. \\
 & - m(m-1) [I(2, 0, 1) - 2I(1, 1, 1) + 2I(-1, 3, 1) - I(-2, 4, 1)] \\
 & + m [I(3, 0, 1) - 2I(2, 1, 1) + 2I(1, 1, 1) - I(0, 2, 1)] \\
 & - p(p-1) [I(4, 0, -1) - 2I(3, 1, -1) + 2I(1, 3, -1) - I(0, 4, -1)] \\
 & + 2pn [I(2, 0, 1) - 2I(1, 1, 1) + I(0, 2, 1)] - n(n-1) [I(4, -2, 1) \\
 & - 2I(3, -1, 1) - 2I(1, 1, 1) - I(0, 2, 1)] - 2pn [I(4, 0, -1) - 2I(3, 1, -1) \\
 & + I(2, 2, -1)] - 2pm [I(2, 0, 1) - 2I(1, 1, 1) + I(0, 2, 1)] + p [I(3, 0, 1) \\
 & - 2I(2, 1, 1) + I(1, 2, 1)] + 2pm [I(2, 2, -1) - 2I(1, 3, -1) + I(0, 4, -1)] \\
 & - p [I(3, 2, -1) - 2I(2, 3, -1) + I(1, 4, -1) - I(3, 0, 1) - I(1, 2, 1) \\
 & + 2I(2, 1, 1) + 2I(4, 0, -1) - 6I(3, 1, -1) + 6I(1, 3, -1) - 2I(0, 4, -1) \\
 & + 2I(2, 0, 1) - 2I(0, 2, 1)] - 4m [I(2, 0, 1) - 2I(1, 1, 1) + I(0, 2, 1)] \\
 & + 2n [2I(2, 0, 1) - 4I(1, 1, 1) + 2I(0, 2, 1) + I(3, -1, 1) - I(1, 1, 1) \\
 & - I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1)] - 2m [I(2, 0, 1) - I(0, 2, 1) - I(1, 1, 1) \\
 & + I(-1, 3, 1)] + I(3, 0, 1) - I(1, 2, 1) - I(2, 1, 1) + I(0, 3, 1) \left. \right\} \\
 & + \sigma \frac{\pi^2}{24} \left\{ -\frac{1}{2} [I(4, 0, 1) + I(2, 2, 1) - 2I(3, 1, 1)] - 2m(m-1) [I(2, 0, 1) \right. \\
 & + I(0, 2, 1) - 2I(1, 1, 1)] + 2m [I(3, 0, 1) + I(1, 2, 1) - 2I(2, 1, 1)] \\
 & + \frac{1}{2} [I(2, 0, 3) + I(0, 2, 3) - 2I(1, 1, 3)] + 2m(m-1) [I(0, 0, 3) \\
 & + I(-2, 2, 3) - 2I(-1, 1, 3)] - 2m [I(1, 0, 3) + I(-1, 2, 3) \\
 & - 2I(0, 1, 3)] - 2n(n-1) [I(2, -2, 3) + I(0, 0, 3) - 2I(1, -1, 3)] \\
 & + 2n(n-1) [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) - 2I(1, 1, 1)] - 4m [I(2, 0, 1) \\
 & + I(0, 2, 1) - 2I(1, 1, 1)] + 2 [I(3, 0, 1) + I(1, 2, 1) \\
 & - 2I(2, 1, 1)] + 4n [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) - 2I(1, 1, 1)] \\
 & - 2m [I(2, 0, 1) - I(-1, 3, 1) + I(0, 2, 1) - I(1, 1, 1) + 2I(-1, 1, 3) - 2I(0, 0, 3) \\
 & + I(2, 0, 1) - I(0, 2, 1) - I(1, 1, 1) + I(-1, 3, 1)] \\
 & - 2n [-2I(0, 2, 1) + 2I(1, 1, 1) - 2I(1, -1, 3) + 2I(0, 0, 3)] \\
 & \left. + 3I(3, 0, 1) - 5I(2, 1, 1) + I(1, 2, 1) + I(0, 3, 1) \right\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle m'n'p'1 | \hat{T} | mnp2 \rangle = & \frac{\pi^2}{24} \left\{ -\frac{1}{4} [I(4, 0, 1) - I(0, 4, 1) - 2I(2, 0, 3) + 2I(0, 2, 3)] \right. \\
& - m(m-1) [I(2, 0, 1) - I(-2, 4, 1) - 2I(0, 0, 3) + 2I(-2, 2, 3)] \\
& + m [I(3, 0, 1) - I(-1, 4, 1) - 2I(1, 0, 3) + 2I(-1, 2, 3)] \\
& - p(p-1) [I(4, 0, -1) - I(0, 4, -1) - 2I(2, 0, 1) + 2I(0, 2, 1)] \\
& + 2pn [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) - 2I(0, 0, 3)] - n(n-1) [I(4, -2, 1) \\
& - I(0, +2, 1) - 2I(2, -2, 3) + 2I(0, 0, 3)] - 2pn [I(4, 0, -1) \\
& + I(2, 2, -1) - 2I(2, 0, 1)] - 2pm [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) \\
& - 2I(0, 0, 3)] + p [I(3, 0, 1) + I(1, 2, 1) - 2I(1, 0, 3)] \\
& + 2pm [I(2, 2, -1) + I(0, 4, -1) - 2I(0, 2, 1)] - p [I(3, 2, -1) \\
& + I(1, 4, -1) - 2I(1, 2, 1)] - 2p [I(4, 0, -1) - I(0, 4, -1) \\
& - 2I(2, 0, 1) + 2I(0, 2, 1)] - 4m [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) \\
& - 2I(0, 0, 3)] + 2 [I(3, 0, 1) + I(1, 2, 1) - 2I(1, 0, 3)] \\
& + 4n [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) - 2I(0, 0, 3)] - 2m [I(2, 0, 1) \\
& + I(-1, 3, 1) + I(0, 2, 1) + I(1, 1, 1) - 2I(-1, 1, 3) - 2I(0, 0, 3)] \\
& + [I(3, 0, 1) + I(0, 3, 1) + I(1, 2, 1) + I(2, 1, 1) \\
& - 2I(0, 1, 3) - 2I(1, 0, 3)] + 2n [I(3, -1, 1) + I(0, 2, 1) \\
& + I(1, 1, 1) + I(2, 0, 1) - 2I(0, 0, 3) - 2I(1, -1, 3)] \\
& - p [I(4, 0, -1) - I(0, 4, -1) - 2I(2, 0, 1) + 2I(0, 2, 1)] \\
& + p [I(4, 0, -1) + 2I(3, 1, -1) - 2I(1, 3, -1) - I(0, 4, -1)] \left. \right\} \\
& + \sigma \frac{\pi^2}{24} \left\{ -\frac{1}{2} [I(4, 0, 1) + I(2, 2, 1) - 2I(2, 0, 3)] \right. \\
& - 2m(m-1) [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) - 2I(0, 0, 3)] + 2m [I(3, 0, 1) \\
& + I(1, 2, 1) - 2I(1, 0, 3)] + \frac{1}{2} [I(2, 0, 3) + I(0, 2, 3) \\
& - 2I(0, 0, 5)] + 2m(m-1) [I(0, 0, 3) + I(-2, 2, 3) - 2I(-2, 0, 5)] \\
& - 2m [I(1, 0, 3) + I(-1, 2, 3) - 2I(-1, 0, 5)] - 2n(n-1) [I(2, -2, 3) \\
& + I(0, 0, 3) - 2I(0, -2, 5)] + 2n(n-1) [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) \\
& - 2I(0, 0, 3)] - 4m [I(2, 0, 1) + I(0, 2, 1) - 2I(0, 0, 3)]
\end{aligned}$$

Annexe C. Calcul des éléments de matrice des différents opérateurs.

$$\begin{aligned}
 & + 2[I(3, 0, 1) + I(1, 2, 1) - 2I(1, 0, 3)] + 4n[I(2, 0, 1) \\
 & + I(0, 2, 1) - 2I(0, 0, 3)] - 2n[I(3, -1, 1) - I(0, 2, 1) \\
 & + I(1, 1, 1) - I(2, 0, 1) + 2I(0, 0, 3) - 2I(1, -1, 3)] \\
 & + 2n[I(3, -1, 1) - I(2, 0, 1) - I(1, 1, 1) + I(0, 2, 1)] \\
 & - 2m[I(2, 0, 1) - I(-1, 3, 1) + I(0, 2, 1) - I(1, 1, 1) \\
 & + 2I(-1, 1, 3) - 2I(0, 0, 3)] - 2m[I(2, 0, 1) + I(-1, 3, 1) \\
 & - I(0, 2, 1) - I(1, 1, 1)] + I(3, 0, 1) - I(0, 3, 1) \\
 & + I(2, 1, 1) - I(1, 2, 1) - 2I(0, 1, 3) - 2I(1, 0, 3) \\
 & + I(0, 3, 1) + I(1, 2, 1) + I(2, 1, 1) + I(3, 0, 1) \}
 \end{aligned}$$

Annexe D

Séparation des mouvements du centre de masse et relatif de l'exciton.

L'Hamiltonien d'un exciton en présence d'un champ électrique uniforme \vec{F} appliqué suivant la direction oz s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_h^*}\Delta_h - \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} - e(z_e - z_h)F \quad (\text{D.1})$$

\vec{r}_e , \vec{r}_h vecteur position de l'électron et du trou respectivement. κ constante diélectrique du matériau considéré. Nous allons séparer le mouvement de l'exciton en un mouvement du centre de masse et un mouvement relatif.

Posons $\vec{r}(x, y, z)$ coordonnées du mouvement relatif, $\vec{R}(X, Y, Z)$ coordonnées du mouvement du centre de masse.

$$M\vec{R} = m_e^*\vec{r}_e + m_h^*\vec{r}_h \quad (\text{D.2})$$

$$\vec{r} = \vec{r}_e - \vec{r}_h \quad (\text{D.3})$$

La projection des vecteurs \vec{r}_e , \vec{r}_h et de $\vec{R}(X, Y, Z)$ sur les directions du repère orthonormé $(O, \vec{e}_x, \vec{e}_y, \vec{e}_z)$ donnent :

$$\begin{cases} MX = m_e^*x_e + m_h^*x_h \\ MY = m_e^*y_e + m_h^*y_h \\ MZ = m_e^*z_e + m_h^*z_h \end{cases}$$

Annexe D. Séparation des mouvements du centre de masse et relatif de l'exciton.

$M = (m_e^* + m_h^*)$ est masse du centre de masse de l'exciton.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_e} &= \frac{m_e^*}{M} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial x_h} &= \frac{m_h^*}{M} \frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y_e} &= \frac{m_e^*}{M} \frac{\partial}{\partial Y} + \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial y_h} &= \frac{m_h^*}{M} \frac{\partial}{\partial Y} - \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z_e} &= \frac{m_e^*}{M} \frac{\partial}{\partial Z} + \frac{\partial}{\partial z} & \frac{\partial}{\partial z_h} &= \frac{m_h^*}{M} \frac{\partial}{\partial Z} - \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned}$$

puis en remplaçant ces expression dans (D.1) nous obtenons :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_e &= -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[\left(\frac{m_e^*}{M} \right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) \right. \\ &\quad \left. + 2 \frac{m_e^*}{M} \left(\frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial Y \partial y} + \frac{\partial^2}{\partial Z \partial z} \right) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \end{aligned}$$

de même pour l'opérateur $-\frac{\hbar^2}{2m_h^*} \Delta_h$:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_h^*} \Delta_h &= -\frac{\hbar^2}{2m_h^*} \left[\left(\frac{m_h^*}{M} \right)^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) \right. \\ &\quad \left. - 2 \frac{m_h^*}{M} \left(\frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial Y \partial y} + \frac{\partial^2}{\partial Z \partial z} \right) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \Delta_h &= -\frac{\hbar^2(m_e^* + m_h^*)}{M^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) - \left(\frac{\hbar^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \right) \\ &\quad \times \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2M} \vec{\nabla}_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}_r^2 \end{aligned}$$

avec $\mu^{-1} = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$ la masse réduite de la paire e-h.

L'Hamiltonien (D.1) devient alors :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \vec{\nabla}_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}_r^2 - \frac{e^2}{\kappa r} - e z F \quad (\text{D.4})$$

que l'on écrira sous la forme $H = H_{CM} + H_{rel}$.

L'équation de Schrödinger de l'exciton s'écrit :

$$H_X \psi_X = E_X \psi_X \quad (D.5)$$

cette équation se découple en posant $\psi_X(\vec{R}, \vec{r}) = e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} \psi_{rel}(\vec{r})$ de sorte que $\psi_{rel}(\vec{r})$ soit solution d'une équation hydrogéoïde où la masse et la charge de lélectron seraient respectivement μ et $\frac{e}{\kappa}$. Soit ψ une fonction d'onde d'essai du mouvement relatif de l'exciton :

L'équation de Schrödinger du mouvement relatif de l'exciton s'écrit :

$$H_{rel} \psi = E_{rel} \psi \quad (D.6)$$

Ecrivons l'équation (D.6) en unités excitoniques $a_{ex} = \frac{\hbar^2 \kappa}{\mu e^2}$ rayon de Bohr excitonique pour la distance et $R_{ex} = \frac{e^2}{2\kappa a_{ex}}$ le Rydberg excitonique pour l'énergie. L'équation (D.6) devient :

$$\frac{\hbar^2}{\mu a_{ex}^2} \left(-\frac{1}{2} \Delta - \frac{e^2}{\kappa a_{ex} r} \frac{\mu a_{ex}^2}{\hbar^2} - e z F a_{ex} \frac{\mu a_{ex}^2}{\hbar^2} \right) \psi = E_{rel} \psi \quad (D.7)$$

En unités double Rydberg ($2R_{ex}$), nous obtenons :

$$\left(-\frac{1}{2} \Delta - \frac{1}{r} - f z \right) \psi = E'_{rel} \psi \quad (D.8)$$

avec $R_{ex} = \frac{\hbar^2}{2\mu a_{ex}^2}$ et $f = \frac{e a_{ex}}{2R_{ex}} F$. La résolution de cette équation donnera l'énergie relative de l'exciton notée par $E_{rel}(X)$ dans le chapitre 3.

Annexe E

Expression de l'équation du mouvement relatif en unités atomiques.

Rappelons l'équation de Schrödinger du mouvement relatif de l'exciton :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{\vec{r}} - \frac{e^2}{\varepsilon r} - ezF \right] \psi_{rel}(\vec{r}) = E_{rel} \psi_{rel}(\vec{r}) \quad (\text{E.1})$$

μ étant la masse réduite de l'exciton et ε constante diélectrique du matériau. Nous récrivons l'équation (E.1) en unités atomiques du donneur (3D), nous prenons a_{ex} rayon de Bohr excitonique pour la longueur et R_{ex} le Rydberg excitonique pour l'énergie, pour cela nous effectuons la transformation suivante :

$$(\vec{\nabla}, \vec{r}, z, F, E) \rightarrow (a_{ex}^{-1} \vec{\nabla}, a_{ex} \vec{r}, a_{ex} z, f \frac{R_{ex}}{e a_{ex}}, E a_{ex})$$

avec $R_{ex} = \frac{\hbar^2}{2\mu a_{ex}^2}$, $a_{ex} = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{\mu e^2}$ et $f = \frac{e a_{ex}}{R_{ex}}$ l'équation (E.1) devient :

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu a_{ex}^2} \left(-\Delta_{\vec{r}} - \frac{e^2}{\varepsilon a_{ex} r} \frac{2\mu a_{ex}^2}{\hbar^2} + eF a_{ex} z \frac{2\mu a_{ex}^2}{\hbar^2} \right) \psi_{rel} = E \psi_{rel}(\vec{r}) \quad (\text{E.2})$$

en divisant l'équation (E.2) par R_{ex} , elle se réduit alors sous la forme suivante :

$$\left(-\Delta_{\vec{r}} - \frac{2}{r} + f z \right) \psi_{rel}(\vec{r}) = E \psi_{rel}(\vec{r}) \quad (\text{E.3})$$

Passage du champ électrique f en unités atomiques à F en unités S.I.

Nous avons $f = \frac{ea_{ex}}{R_{ex}} F$, dégageons maintenant les paramètres caractéristiques du matériau.

$$\begin{aligned} \frac{ea_{ex}}{R_{ex}} &= \frac{2\mu ea_{ex}^3}{\hbar^2} \\ &= \frac{2\mu e \hbar^6 \varepsilon^3}{\hbar^2 \mu^3 e^6} \\ &= 2 \frac{\hbar^4 \varepsilon^3}{e^5 \mu^2}. \end{aligned}$$

Multiplications ce facteur par le terme suivant $\left(\frac{m_0 \varepsilon_0}{m_0 \varepsilon_0}\right)^2$ où m_0 est la masse de l'électron dans le vide et ε_0 permittivité absolue du vide.

$$\begin{aligned} \frac{ea_{ex}}{R_{ex}} &= 2 \frac{\hbar^4 \varepsilon_0^3}{e^5 m_0^2} \left(\frac{m_0}{\mu}\right)^2 \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right)^3 \\ &= 2 \frac{\hbar^4 \varepsilon_0^3}{e^5 m_0^2} \left(\frac{m_0}{\mu}\right)^2 \varepsilon_r^3. \end{aligned}$$

La dimensionnalité du facteur α est donnée par $\frac{\hbar^4 \varepsilon_0^3}{e^5 m_0^2}$.

$$\begin{aligned} [E] &= M L^2 T^{-2} \\ [\alpha] &= \frac{M^4 L^8 T^{-4}}{Q^5} [\varepsilon_0]^3 \end{aligned}$$

comme la force électrique $\zeta = \frac{qq'}{4\pi\varepsilon_0 r^2}$ donc :

$$[[\varepsilon_0] = \frac{Q^2}{ML^3T^{-2}}].$$

$$\begin{aligned} [\alpha] &= \frac{M^2 L^8 T^{-4}}{Q^5} \\ &= \frac{Q^6}{M^3 L^9 T^{-6}} \\ &= \frac{Q}{MLT^{-2}}. \end{aligned}$$

Puisque f est sans dimension alors F doit être en V/cm .

Calculons maintenant la valeur du coefficient de passage entre le champ électrique

en V/cm vers le champ exprimé en unités atomiques. [$\alpha = \frac{\hbar^4 \epsilon_0^3}{e^5 m_0^2}$] nous prenons toutes les constantes en S.I sauf ϵ_0 qui sera exprimée en C. G. S non rationalisé.

$\hbar = 1.054 \times 10^{-34}$ J.S constante de Planck divisée par 2π .

$m_0 = 9.109 \times 10^{-31}$ Kg masse de l'électron au repos.

$\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12}$ permittivité du vide en S.I.

$e = 1.602 \times 10^{-19}$ C charge de l'électron au repos.

finalement on trouve :

$$\alpha = 1.94158 \times 10^{-10} cm/V \tag{E.4}$$

Annexe F

Calcul de l'énergie d'interaction coulombienne.

Calcul de $\langle m' n' 0 \mid \frac{1}{r_{12}} \mid m n 0 \rangle$

Afin d'évaluer l'élément de matrice :

$$\langle m' n' 0 \mid \frac{1}{r_{12}} \mid m n 0 \rangle \quad (\text{F.1})$$

nous utilisons la représentation intégrale suivante (Gradshteyn and Ryzhik 1965) :

$$\frac{1}{r_{12}} = \int_0^\infty J_0(t r_{12}) dt \quad (\text{F.2})$$

et le second théoreme des fonctions de Bessel :

$$J_0(t r_{12}) = J_0(t r_1) J_0(t r_2) + 2 \sum_{l=1}^\infty J_l(t r_1) J_l(t r_2) \cos [l(\theta_2 - \theta_1)] \quad (\text{F.3})$$

l'élément de matrice (F.1) devient alors :

$$\langle m' n' 0 \mid \frac{1}{r_{12}} \mid m n 0 \rangle = I_0 + 2 \sum_{l=1}^\infty I_l \quad (\text{F.4})$$

avec

$$I_0 = \int_S e^{-\alpha(r_1+r_2)} r_1^{m+m'+1} r_2^{n+n'+1} dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2 \times \int_0^\infty dt J_0(t r_1) J_0(t r_2) \quad (\text{F.5})$$

et

$$I_l = \int_S e^{-\alpha(r_1+r_2)} r_1^{m+m'+1} r_2^{n+n'+1} dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2 \times \int_0^\infty dt J_l(t r_1) J_l(t r_2) \cos [l(\theta_2 - \theta_1)]. \quad (F.6)$$

La fonction à intégrer étant une fonction de θ_2 périodique de période $2k\pi + \theta_1$, nous pouvons effectuer l'intégration sur la période $[\theta_1, 2k\pi + \theta_1]$ au lieu de $[0, \pi]$ sans changer la valeur de l'intégrale. Posons $\theta = \theta_2 - \theta_1$, nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} \int \int d\theta_1 d\theta_2 \cos [l(\theta_2 - \theta_1)] &= \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_{-\theta_1}^{2\pi-\theta_1} \cos(l\theta) d\theta \\ &= \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} \cos(l\theta) d\theta = 0 \end{aligned} \quad (F.7)$$

l'élément de matrice (F.1) est réduit à :

$$\langle m' n' 0 | \frac{1}{r_{12}} | m n 0 \rangle = I_0 \quad (F.8)$$

En utilisant la relation suivante (Gradshteyn and Ryzhik 1965) :

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x} J_0(\beta x) x^{\mu-1} dx = (\alpha^2 + \beta^2)^{-\frac{\mu}{2}} \Gamma(\mu) P_{\mu-1} \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \right] \quad (F.9)$$

où Γ est la fonction Gamma et P_n le polynôme de Legendre, I_0 s'écrit :

$$\begin{aligned} I_0 &= 4\pi^2 \int_0^\infty dt \int_0^\infty dr_1 e^{-\alpha r_1} J_0(t r_1) r_1^{m+m'+1} \\ &\quad \times \int_0^\infty dr_2 e^{-\alpha r_2} J_0(t r_2) r_2^{n+n'+1} \\ &= 4\pi^2 \Gamma(m + m' + 2) \Gamma(n + n' + 2) \\ &\quad \times \int_0^\infty dt \frac{P_{m+m'+1} \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2+t^2}} \right] P_{n+n'+1} \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2+t^2}} \right]}{\sqrt{(\alpha^2 + t^2)^{m+m'+n+n'+4}}} \\ &= \frac{4\pi^2 \Gamma(m + m' + 2) \Gamma(n + n' + 2)}{\alpha^{m+m'+n+n'+3}} \\ &\quad \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} x^{m+m'+n+n'+2} P_{m+m'+1}(x) P_{n+n'+1}(x) \end{aligned}$$

le polynome de Legendre peut s'écrire sous la forme d'un développement polinomial :

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n} \sum_{s=0}^{E(\frac{n}{2})} \frac{(-1)^s (2n-2s)!}{s!(n-s)!(n-2s)!} x^{n-2s} \quad (\text{F.10})$$

en remplaçant cette expression dans, I_0 devient :

$$I_0 = \frac{4\pi^2 \Gamma(p+1) \Gamma(q+1)}{\alpha^{p+q+1} 2^{p+q}} \times \sum_{s=0}^{E(\frac{p}{2})} \sum_{s'=0}^{E(\frac{q}{2})} \frac{-(-1)^{s+s'} (2p-2s)!(2q-2s')!}{s!s'!(p-s)!(q-s')!(p-2s)!(q-2s')!} \times \int_0^1 \frac{x^{2(p+q)-2(s+s')}}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad (\text{F.11})$$

avec $p = m + m' + 1$ et $q = n + n' + 1$ l'intégrale restante est facile à évaluer (Gradshteyn and Ryzhik 1965) :

$$\int_0^1 \frac{x^{2n}}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{(2n-1)!! \pi}{(2n)!!} \frac{1}{2} \quad (\text{F.12})$$

l'élément de matrice $\langle m' n' 1 | \frac{1}{r_{12}} | m n 1 \rangle$ peut être calculé avec la methode décrite ci dessus et les autres éléments de matrice sont nuls :

$$\langle m' n' 0 | \frac{1}{r_{12}} | m n 1 \rangle = \langle m' n' 1 | \frac{1}{r_{12}} | m n 0 \rangle = 0 \quad (\text{F.13})$$

Calcul de $\langle m' n' 1 | \frac{1}{r_{12}} | m n 1 \rangle$

Maintenant nous évaluons la dernière intégrale :

$$\langle m' n' 1 | \frac{1}{r_{12}} | m n 1 \rangle \quad (\text{F.14})$$

$$\begin{aligned} \langle m' n' 1 | \frac{1}{r_{12}} | m n 1 \rangle &= \int_S e^{-\alpha(r_1+r_2)} r_1^{m+m'+1} r_2^{n+n'+1} \\ &\times \left(\frac{x_1^2 + 2x_1x_2 + x_2^2}{r_{12}} \right) dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2 \\ &= J_1 + J_2 + 2K \end{aligned} \quad (\text{F.15})$$

Annexe F. Calcul de l'énergie d'interaction coulombienne.

avec

$$J_1 = \int_S e^{-\alpha(r_1+r_2)} r_1^{m+m'+1} r_2^{n+n'+1} \times \left(\frac{x_1^2}{r_{12}} \right) dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2$$

$$J_2 = \int_S e^{-\alpha(r_1+r_2)} r_1^{m+m'+1} r_2^{n+n'+1} \times \left(\frac{x_2^2}{r_{12}} \right) dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2$$

$$K = \int_S e^{-\alpha(r_1+r_2)} r_1^{m+m'+1} r_2^{n+n'+1} \times \left(\frac{x_1 x_2}{r_{12}} \right) dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2$$

En remplaçant $x_1 = r_1 \cos \theta_1$ et $x_2 = r_2 \cos \theta_2$ les expressions ci-dessus deviennent alors :

$$\begin{aligned} J_1 &= \int_S e^{-\alpha(r_1+r_2)} r_1^{m+m'+3} r_2^{n+n'+1} \times \cos^2(\theta_1) dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2 \\ &= 2\pi^2 \int_0^{+\infty} dt \int_0^{+\infty} dr_1 e^{-\alpha r_1} J_0(t r_1) r_1^{m+m'+3} \\ &\times \int_0^{+\infty} dr_2 e^{-\alpha r_2} J_0(t r_2) r_2^{n+n'+1} \\ &= \frac{2\pi^2 \Gamma(M_1 + 1) \Gamma(N_1 + 1)}{\alpha^{M_1+N_1+1}} \int_0^1 \frac{x^{(M_1+N_1)}}{\sqrt{1-x^2}} P_{M_1}(x) P_{N_1}(x) dx \end{aligned}$$

avec $M_1 = m + m' + 3$ et $N_1 = n + n' + 1$

$$\begin{aligned} J_2 &= \int_S e^{-\alpha(r_1+r_2)} r_1^{m+m'+1} r_2^{n+n'+3} \times \cos^2(\theta_2) dr_1 dr_2 d\theta_1 d\theta_2 \\ &= \frac{2\pi^2 \Gamma(M_2 + 1) \Gamma(N_2 + 1)}{\alpha^{M_2+N_2+1}} \int_0^1 \frac{x^{(M_2+N_2)}}{\sqrt{1-x^2}} P_{M_2}(x) P_{N_2}(x) dx \end{aligned}$$

avec $M_2 = m + m' + 1$ et $N_2 = n + n' + 3$.

Pour l'intégrale K , nous utilisons en plus un résultat

$$\begin{aligned} K &= 2\pi^2 \int_0^{+\infty} dt \int_0^{+\infty} dr_1 e^{-\alpha r_1} r_1^{m+m'+2} J_1(t r_1) \\ &\times \int_0^{+\infty} dr_2 e^{-\alpha r_2} r_2^{n+n'+2} J_1(t r_2) \end{aligned}$$

en utilisant la relation suivante (Gradshteyn and Ryzhik 1965) :

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha x} J_0(\beta x) x^{\mu-1} dx = (\alpha^2 + \beta^2)^{-\frac{\mu}{2}} \Gamma(\mu) P_{\mu-1} \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2}} \right] \quad (\text{F.16})$$

et en plus le résultat suivant (Abramowitz and Stegun 1965) :

$$P_\nu^{-\mu}(x) = \frac{\Gamma(\nu - \mu + 1)}{\Gamma(\nu + \mu + 1)} \left[P_\nu^\mu(x) - \frac{2}{\pi} \exp(-i\mu\pi) \sin(\mu\pi) Q_\nu^\mu(x) \right]$$

pour $\mu = 1$ on a :

$$P_\nu^{-1}(x) = \frac{\Gamma(\nu)}{\Gamma(\nu + 2)} P_\nu^1(x)$$

donc

$$\int_0^{+\infty} dr_1 e^{-\alpha r_1} r_1^{m+m'+2} J_1(t r_1) = (\alpha^2 + t^2)^{-\frac{1}{2}(M'+1)} \Gamma(M') P_{M'}^1 \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + t^2}} \right]$$

et

$$\int_0^{+\infty} dr_2 e^{-\alpha r_2} r_2^{n+n'+2} J_1(t r_2) = (\alpha^2 + t^2)^{-\frac{1}{2}(N'+1)} \Gamma(N') P_{N'}^1 \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + t^2}} \right]$$

avec $M = m + m' + 2$ et $N = n + n' + 2$. d'où :

$$\begin{aligned} K &= 2\pi^2 \Gamma(M') \Gamma(N') \int_0^{+\infty} dt (\alpha^2 + t^2)^{-\frac{1}{2}(M'+N'+2)} \\ &\times P_{M'}^1 \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + t^2}} \right] P_{N'}^1 \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + t^2}} \right] \end{aligned} \quad (\text{F.17})$$

En faisant le changement de variable $x = \frac{\alpha}{\sqrt{\alpha^2 + t^2}}$ K devient :

$$K = \frac{2\pi^2 \Gamma(M') \Gamma(N')}{\alpha^{M'+N'+1}} \int_0^1 dx \frac{x^{M'+N'}}{\sqrt{1-x^2}} P_{M'}^1(x) P_{N'}^1(x) \quad (\text{F.18})$$

encore, une dernière relation (Abramowitz and Stegun 1965) :

$$P_\nu^\mu(x) = (-1)^\mu (1-x^2)^{\frac{\mu}{2}} \frac{d^\mu P_\nu(x)}{dx^\mu}$$

avec $\mu = 1$, $P_\nu(x) = -\sqrt{1-x^2} \frac{dP_\nu(x)}{dx}$, en utilisant (F.10) l'intégrale (F.17)

Annexe F. Calcul de l'énergie d'interaction coulombienne.

s'écrit finalement :

$$\begin{aligned}
 K &= \frac{2\pi^2\Gamma(M')\Gamma(N')}{\alpha^{M'+N'+1} 2^{M'+N'}} \\
 &\times \sum_{s=0}^{E\left(\frac{M'-1}{2}\right)} \sum_{s'=0}^{E\left(\frac{N'-1}{2}\right)} \frac{(-1)^{s+s'}(2M'-2s)!(2N'-2s')!}{s!s'!(M'-s)!(N'-s')!(M'-2s-1)!(N'-2s'-1)!} \\
 &\quad \times \int_0^1 x^{2(M'+N')-2(s+s'+1)} \sqrt{1-x^2} dx .
 \end{aligned}
 \tag{F.19}$$

Bibliographie

- Abramowitz, M. and Stegun, I. A. *Handbook of Mathematical Functions*, edited by M. (Dover, New York) (1965).
- Agullò-Rueda, F., Brum, J. A., Mendez, E. E. and Hong, J. M., Phys. Rev. **B41** 1676 (1990).
- Aspnes, A. S. Phys. Rev. **147**, 554 (1966).
- Atanasoff, J. V. Phys. Rev. **36**, 1232 (1930).
- Bastard, G. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*.
- Benoit à la Guillaume, C. B., Debever, J. and Salvan, F., Phys. Rev. **177**, 567 (1969).
- Bentosella, F. and Grecchi, V., Commun. Math. phy. **142**, 169 (1991).
- Bethe H. A. and Salpeter, E. E. *in Quantum Mechanics of one – Two – Electron Atoms* (Springer, Berlin, 1957).
- Blossey, D. F. Phys. Rev. **2**, 3976 (1970).
- Blossey, D. F. Phys. Rev. **3**, 1382 (1971).
- Blossey, D. F. and Paul Handler. *Semiconductors and Semimetals*, Vol 9 p257 edité par R. K. Willardson (1972).
- Bobrysheva, A. I., Grodetskii, M. V. and Zyukov, V. T., J. Phys. C **16** 5723 (1983).
- Böer, K. W., Hansche, H. J. and Kummel, V., Z. Physik **155**, 170 (1959).
- Brum, J. A. and Bastard, G., Phys. Rev. **B31** 3893 (1985a).
- Brum, J. A., Priester, C. and Allan, G., Phys. Rev. **B32** 2378 (1985b).
- Buhman, H. et al., Phys. Rev. **B51**, 7969 (1995).
- Callaway, J., Phys. Rev. **130**, 549 (1963).
- Callaway, J., Phys. Rev. **134**, A998 (1964).

- Quantum Theory of the Solid State*, by Joseph Callaway, Academic Press, New York London 1974.
- Chester, M. and Wendland, P. H., Phys. Rev. Letters **13**, 193 (1964).
- Chung, K. T. and Hurst, R. P., Phys. Rev. **152**, 35 (1966).
- Dow, J. D. and Redfield, D., Phys. Rev **B1**, 3358 (1970).
- Dresselhaus, G., Phys. Chem. Solids. **1**,14 (1956).
- Dujardin, F. Thèse d'état (1992).
- Dujardin, F., Azaitouni, M. and Stébé, B., Solid. State. Comm. **102**, 579 (1997).
- Duke, C. B., Phys. Rev. Lett. **15**, 625 (1965).
- Duke, C. B. and Alferieff, M. E., Phys. Rev. **145**, 583 (1966).
- Feddi, E., Thèse de l'Université de METZ, (1987).
- Feddi, E., Dujardin, F., Diouri, J., Elhassani, A., Katih, M. and B. Stébé. Phys. Stat. Sol (b) 201, 1997.
- Katih, M., Diouri, J. and Feddi, E., Phys. Stat. Solid (b) **175**, 349 (1993).
- Finkelstein, G. et al., Phy. Rev. **B53**, R1709 (1996a).
- Finkelstein, G. et al., Phy. Rev. **B53**, 12593 (1996b).
- Franz, W., Z. Naturforsch. **13a**, 484 (1958).
- Frenkel, J, Phys. Rev. **37**, 1276 (1931).
- Frova, A. and Handler, P., Phys. Rev. Letters **14**, 178 (1965).
- Froelich, P. and Brändas, E., Phys. Rev. **A12**, 1 (1975).
- Gradshteyn, I. S. and Ryzhik, I. M., *Table of integrals, series and Products*, Academic Press, New York and London (1965).
- Harrick, N. J., Phys. Rev. **103**, 1173 (1956).
- Haug, H., Koch, S. W., *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, World Scientific (1990).
- Haynes, J. R., Phys. Rev. Letters **4**, 866 (1966).
- Hosoda, M. et al. J. Appl. Phys. **80** 5094 (1996).
- Ishida, Y. and Hiyama, S., Sci. Pap. Inst. Phys and Chem. Res. Tokyo **152**, (1928).

-
- Kane, E. O., J. Phys. Chem. Solids **12**, 181 (1959).
- Keldysh, L. V., J. Exptl. Theoret. Phys. (U.S.S.R) **34**, 1138 (1958)
[translation: Soviet Phys.-JETP 7, 788 (1958)].
- K. Kheng et al., Phys. Rev. Lett. **71**, 11 1752 (1993).
- Kittel, C., *Introduction à la physique de l'état solide, Dunod université.*
- Koss, R. W. and Lambert, L. M., Phys. Rev. **5**, 1479 (1972).
- Lampert, M. A., Phys. Rev. Lett. **1**, 450 (1958).
- Landau, L. and Lifchitz, E., *Mécanique quantique* édition MIR (1966).
- Lederman, F. L. and Dow, J. D., Phys. Rev. **B13**, 1633 (1976).
- Lelong, P. and Bastard, G., Solid. State. Com. **98**, 9- 819 (1996).
- Le goff, S. Thèse d'Université de Metz (1992).
- Lévy-Leblond, J. M., Phys. Rev. **178**, 1526 (1969).
- Mendez, E. E., Agullò-Rueda, F. and Hong, J. M., Phys. Rev. Lett **60**, 23
2426 (1988).
- Miller, A. A. B. et al. Phys. Rev. **B32**, 1043 (1985).
- Moss, T. S., J. Appl. Phys **32**, 2136 (1962).
- Munsch, G. and Stébé, B., Phys. Stat. Sol. (b) **64**, 213 (1974).
- Munsch, G. and Stébé, B., Phys. Stat. Sol. (b) **72**, 135 (1975).
- Nikitine, S., *Optical Properties of Solids, Nudelman et Mitra editions
Plenum press, New York, (1969).*
- Packard, J. R., Campbell, D. A. and Tait, W. C., J. App. Phys. **38**, 5255
(1967).
- Pavlov, P. et Khokhlov, A., *Physique du Solide, Editions Mir Moscou 1989.*
- Pekeris, C. L., Phys. Rev. **115**, 1216 (1959).
- Penchina, C. M., Phys. Rev. **138**, A924 (1965).
- Ohyama, T., Phys. Stat. Sol. (b) **98**, 373 (1980).
- Ralph, H. I., J. Phys. C. Ser **2**, 378 (1968).
- Schmeller, A., Hansen, W. and Kotthaus, J. P., Appl. Phys. Lett. **64**, 330
(1994).
- Seraphin, B. O. and Bottka, N., Phys. Rev. **139**, A560 (1965).

- Shields, A. J. et al., Phys. Rev. **B51**, 18049 (1995a).
- Shields, A. J., Osborne, J. L., Simmons, M. Y., Pepper, M. and Ritchie, D. A., Phys. Rev. **B52**, R5523 (1995b).
- Shields, A. J. et al., Phys. Rev. **B52**, 7841 (1995c).
- Shields, A. J. et al., Phys. Rev. **B55**, 1318 (1997).
- Shockley, W., Phys. Rev. Lett. **28** 349 (1972).
- Stébé, B. and Munschy, G., Solid. State. Commun. **17**, 1051 (1975).
- Stébé, B., Thèse d'état (1977).
- Stébé, B., Sauder, T., Certier, M. and Comte, C., Solid. State. Commun. (1978).
- Stébé, B. and Ainane, A., Superlattices Microstructures. **5**, 545 (1989).
- Tharmalingam, Phys. Rev. **130**, 2204 (1963).
- Thilagam, A., Phys. Rev. **B12**, 7804 (1997).
- Thomas, D. G. and Rice, T. M., Solid. State. Commun. **23**, 359 (1977).
- Wannier, G. H., Phys. Rev. **52**, 191 (1937).
- Wannier, G. H., *Elements of Solid State Theory*. Cambridge Univ. Press, London and New York.
- Wannier, G. H., Phys. Rev. **117**, 432 (1960).
- Wannier, G. H. and Fredkin, D. R., Phys. Rev. **125**, 1910 (1962).
- Wang, D. P., Chen, C. T. and Hsu, T. M., J. Appl. Phys. **79** 7183 (1996).
- Weinstein, F. C., Dow, J. D., and Lao, B. Y., Phys. Rev **4**, 3502 (1971).
- Williams, R., Phys. Rev. **117**, 1487 (1960).
- Williams, R., Phys. Rev. **126**, 442 (1962).
- Yacoby, Y., Phys. Rev. **140** A263 (1965).
- Yacoby, Y., Phys. Rev. **142** 445 (1966).
- Zak, J., Phys. Rev. Lett. **20** 1477 (1968).

Résumé

Les excitons chargés résultent de la liaison d'un exciton (paire électron-trou liée) avec un électron $\rightarrow X^- (e, e, h)$, ou avec un trou $\rightarrow X_2^+ (e, h, h)$. Dans ce travail, nous avons étudié l'état fondamental des excitons chargés dans les semi-conducteurs massifs (3D) et bidimensionnels (2D) en présence d'un champ électrique uniforme faible. Dans le cadre de l'approximation de la masse effective et en utilisant un modèle simple à deux bandes non dégénérées, la séparation des mouvements du centre de masse et relatif reste encore possible en présence du champ électrique. L'introduction des conditions aux limites du cristal induit une quantification de l'énergie du mouvement du centre de masse. Des niveaux discrets apparaissent alors, similaires aux niveaux de " Wannier-Stark " connus dans le cas d'un électron dans un solide. L'état fondamental du complexe X^- est déterminé en utilisant la méthode variationnelle. Nous mettons en évidence une valeur de champ critique au delà de laquelle la méthode variationnelle n'est plus adaptée. Dans le cas limite où σ , le rapport des masses effectives électron/trou tend vers zéro, nos résultats sont en bon accord avec ceux obtenus pour l'ion H^- en physique atomique.

Dans les semi-conducteurs massifs, nous avons étudié la stabilité de l'exciton chargé X^- . Il s'avère que l'énergie de liaison augmente légèrement avec le champ. En comparaison avec des résultats antérieurs obtenus en perturbation (Katih, 1993), nous trouvons un bon accord dans le cas de champs très faibles, par ailleurs, notre méthode permet d'atteindre des champs plus grands. Dans le cas d'un semi-conducteur bidimensionnel, les énergies de liaison de X^- et X_2^+ augmentent aussi légèrement avec le champ et en plus le champ critique est plus élevé qu'en 3D. Pour toute valeur de σ , le rapport des énergies de liaison W_{2D}/W_{3D} du trion chargé négativement diminue lorsque le champ augmente, l'effet relatif du confinement tend alors à disparaître.