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

VB 69044

THESE

présentée à

l'UNIVERSITE de METZ

pour obtenir le titre de

DOCTEUR de l'UNIVERSITE de METZ

en SCIENCES PHYSIQUES

Spécialité Physique du Solide

par

Abdelmajid AINANE

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ
N° inv. 19910105
Cote S/M3 91/5
Loc Magasin

Sujet de la thèse :

PROPRIETES ELECTRONIQUES ET OPTIQUES DES TRIONS EXCITONIQUES DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS ETUDE DE L'ACTION D'UN CHAMP MAGNETIQUE UNIFORME

Soutenue le 14 Mai 1991

Devant les Membres du Jury :

Messieurs :

J. HUGEL, Professeur à l'Université de Metz (Rapporteur)

R. RIEDINGER, Professeur à l'Université de Haute-Alsace (Rapporteur)

M. CERTIER, Professeur à l'Université de Metz

E. KARTHEUSER, Professeur à l'Université de Liège

M. PIECUCH, Directeur de Recherche au CNRS

B. STEBE, Professeur à l'Université de Metz (Directeur de Thèse)

A mes Parents

Aux miens, qui me sont très chers et qui m'ont soutenu durant toute la période de préparation de cette thèse.

REMERCIEMENTS

Ce travail a été préparé sous la direction de Monsieur le Professeur B. STEBE au sein du groupe de Photoélectronique Théorique du Centre Lorrain d'Optique et d'Electronique des Solides (C.L.O.E.S) de l'Université de Metz.

Je le prie de bien vouloir trouver ici l'expression de ma profonde gratitude et de ma reconnaissance pour l'esprit avec lequel il m'a conseillé et guidé au cours de ce travail. Je lui suis reconnaissant d'avoir bien voulu me faire profiter de ses compétences scientifiques.

Je remercie vivement Monsieur R. RIEDINGER, Professeur à l'Université de Haute-Alsace, Monsieur J. HUGEL, Professeur à l'Université de Metz d'avoir bien voulu juger ce travail.

Je remercie également Monsieur E. KARTHEUSER, Professeur à l'Université de Liège, Monsieur M. PIECUCH, Directeur de Recherche au CNRS, Monsieur le Professeur M. CERTIER, Directeur du Centre Lorrain d'Optique et d'Electronique des Solides (C.L.O.E.S) pour l'honneur qu'ils me font en acceptant de participer au jury de cette thèse.

Je remercie Monsieur F. DUJARDIN, Maître de Conférence à l'Université de Metz de son aide efficace et compétente.

J'exprime ma sincère et amicale gratitude pour l'aide et le soutien à l'égard de Monsieur et Madame MOUTAHIR.

Mes remerciements vont aussi à tous les collègues qui ont contribué à une ambiance amicale durant la période de préparation de cette thèse. En particulier H. ERGUIG, M. KEMICHE, B. MOHAMADOU, H. AHRA, M. SOLTANI et A. DINAR trouvent ici le témoignage de ma sincère amitié.

Enfin je remercie Madame J. ZAYER pour son aide et sa sympathie.

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE 1

CHAPITRE I THEORIE GENERALE DES EXCITONS ET DES TRIONS DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE 6

I.1 INTRODUCTION 7

I.2 HAMILTONIEN D'INTERACTION ELECTRON-TROU A DEUX DIMENSIONS DANS UN MODELE A DEUX BANDES 9

I.2.1 Hamiltonien électronique du cristal 9

I.2.2 Modèle à deux bandes 12

I.3 ETATS EXCITONIQUES DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE . 15

I.3.1 Etats excitoniques 15

I.3.2 Equation effective des coefficients $C_{\lambda_1\lambda_2}$ 17

I.3.3 Equation effective de la fonction enveloppe dans l'approximation de la masse effective 18

I.4 ETATS DES TRIONS DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE . 22

I.4.1 Etats des trions excitoniques 22

I.4.2 Equation effective des coefficients $C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}$ 24

I.4.3 Equation effective de la fonction enveloppe dans l'approximation de la masse effective 26

CHAPITRE II ENERGIE DE LIAISON DES EXCITONS CHARGES DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS 29

II.1 INTRODUCTION 30

II.2 PROPRIETES DE L'HAMILTONIEN EFFECTIF 32

II.3 ENERGIE DE L'ETAT FONDAMENTAL DES TRIONS X^- ET X_2^+ . . 35
II.3.1 Invariants du système 35
II.3.2 Méthode variationnelle de résolution 36

II.4 RESULTATS NUMERIQUES ET DISCUSSION 42
II.4.1 Méthode de calcul 42
II.4.2 Résultats numériques et conclusion 44

CHAPITRE III ENERGIE DES EXCITONS CHARGES DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE 53

III.1 INTRODUCTION 54

III.2 PROPRIETES DE L'HAMILTONIEN EFFECTIF 56
III.2.1 Hamiltonien effectif dans l'approximation de la masse effective 56
III.2.2 Transformation canonique de l'Hamiltonien effectif 59

III.3 ENERGIE DE L'ETAT FONDAMENTAL DANS L'APPROXIMATION ADIABATIQUE 64
III.3.1 Approximation adiabatique 64
III.3.2 Fonction d'onde variationnelle pour le mouvement relatif 66
III.3.3 Energie relative de l'état fondamental 67

III.4 RESULTATS NUMERIQUES ET DISCUSSION 70

CHAPITRE IV MAGNETO-ABSORPTION DES TRIONS EXCITONIQUES DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS . 76

IV.1 INTRODUCTION 77

IV.2 FORMALISME GENERAL 80

IV.2.1 Interaction rayonnement-matière avec un système électron-trou à deux dimensions dans le modèle à deux bandes 80

IV.2.2 Approximation dipolaire électrique 85

IV.2.3 Transition à un photon 86

IV.3 ABSORPTION PAR LES TRIONS EXCITONIQUES A CHAMP NUL . 88

IV.3.1 Eléments de matrice des transitions dipolaires électriques 88

IV.3.2 Expression de I_{X^-} (K_0) 91

IV.3.3 Détermination de la probabilité de transition à champ nul 93

IV.3.4 Coefficient d'absorption 95

IV.4 ABSORPTION OPTIQUE DU TRION NEGATIF EN CHAMP 97

IV.4.1 Coefficient d'absorption pour un champ perpendiculaire au plan 97

- Expression des coefficients C_{λ_i} 97
- Probabilité de transition et coefficient d'absorption 103

IV.4.2 Coefficient d'absorption pour un champ parallèle au plan 106

- Expression des coefficients C_{λ_i} 106
- Probabilité de transition et coefficient d'absorption 109

IV.5 RESULTATS NUMERIQUES ET DISCUSSION 112

CONCLUSION GENERALE 119

APPENDICES 121

APPENDICE IA QUANTIFICATION DE L'ENERGIE D'UNE PARTICULE LIBRE SOUMISE A L'ACTION D'UN CHAMP MAGNETIQUE UNIFORME DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS 122

- Champ perpendiculaire au plan 123
- Champ parallèle au plan 125

APPENDICE IB RESOLUTION DE L'EQUATION EFFECTIVE DE L'EXCITON EN PRESENCE DU CHAMP MAGNETIQUE DANS LES MILIEUX BIDIMENSIONNELS 127

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES 132

INTRODUCTION GENERALE

Le présent travail est consacré à l'étude des trions excitoniques dans les semiconducteurs bidimensionnels.

Les trions excitoniques sont des complexes excitoniques pouvant résulter, dans certaines conditions, de la liaison d'un exciton (paire électron-trou liée) avec un électron ou un trou dans les semiconducteurs. Ils se distinguent des autres complexes excitoniques par leur mobilité et leur charge. Ces deux caractéristiques sont susceptibles de donner lieu à des propriétés originales, notamment dans les semiconducteurs quasi-bidimensionnels (super-réseaux semiconducteurs, puits quantiques, ...).

De façon générale, les complexes excitoniques sont bien connus dans les semiconducteurs massifs depuis les premiers travaux de LAMPERT (1958). Ce dernier, généralisant le concept d'exciton de WANNIER (1937), a suggéré l'existence d'une variété de "complexes excitoniques" pouvant résulter d'une liaison stable entre un exciton et d'autres quasi-particules ou impuretés. Ces complexes peuvent être mobiles ou localisés, chargés ou neutres.

Parmi les complexes excitoniques localisés résultant de la liaison d'un exciton avec une impureté chargée ou neutre, nous citons à titre d'exemple les complexes exciton-donneur-neutre (D^0,X), exciton-accepteur-neutre (A^0,X) ou exciton-donneur-ionisé (D^+,X) qui ont été abondamment étudiés depuis les premières observations de HAYNES (1960) dans les spectres de photoluminescence du Silicium ainsi que les travaux de THOMAS et HOPFIELD (1962), NASSAU et al. (1970), DEAN et al. (1967) et REYNOLDS et al. (1969) dans CdS, GaP, CdSe et ZnSe. Pour une revue plus complète, le lecteur intéressé pourra se référer à l'article de revue de DEAN et HERBERT (1979).

Dans certaines conditions, deux excitons peuvent également se lier pour former un complexe excitonique mobile et neutre, le biexciton ou molécule excitonique X_2 observé pour la première fois dans le Silicium par HAYNES (1966), puis dans CuCl par MYSYROWICZ et al. (1968), GRUN et al. (1970), et dans le Germanium par BENOIT A LA GUILLAUME et al. (1969).

L'étude de ces complexes excitoniques présente un très grand intérêt, tant du point de vue pratique que théorique. Elle permet de comprendre les mécanismes des recombinaisons radiatives contrôlant le fonctionnement de certains dispositifs utilisés en optoélectronique et dans le domaine des télécommunications. Elle fournit également à la physique fondamentale des nouveaux modèles de systèmes formés de quasi-particules en interaction mutuelle, susceptibles d'une analyse expérimentale et théorique très précise.

Les trions excitoniques sont les plus petits complexes à trois particules à la fois mobiles et chargés. On distingue deux types : les trions négatifs X^- (eeh), résultant de l'interaction coulombienne d'un exciton et d'un électron, et les trions positifs X_2^+ (ehh), résultant de l'interaction d'un exciton et d'un trou.

Ils ont été observés pour la première fois dans les semiconducteurs massifs par des expériences de résonance cyclotronique à basse température dans le Silicium (KAWABATA et al., 1977), de luminescence dans le Germanium (THOMAS et RICE, 1977), et d'absorption et de luminescence dans CuCl (STEBE et al., 1978).

Les trions excitoniques sont susceptibles de donner lieu à des propriétés très originales résultant de leur mobilité et de leurs charges. Toutefois, leur existence n'a été établie que dans un nombre limité de semiconducteurs massifs. En effet, dans ce cas, leur observation expérimentale est compliquée par le fait que dans les spectres optiques, les raies d'excitons, de biexcitons et de trions sont souvent très proches. De plus, leurs énergies de liaison sont relativement faibles, comme le montrent les calculs théoriques (MUNSCHY et STEBE, 1974, 1975, STEBE et MUNSCHY, 1975, INSEPOV et NORMAN, 1975, STEBE et COMTE, 1977). Par conséquent, leur observation n'est possible qu'aux très basses températures, ce qui limite, dans une certaine mesure, leur intérêt pratique dans les semiconducteurs massifs.

Il existe toutefois une classe de semiconducteurs pour lesquels on peut prévoir une observation beaucoup plus favorable des trions excitoniques : les milieux bidimensionnels (surfaces, interfaces) et quasi-bidimensionnels (super-réseaux semiconducteurs et puits quantiques de semiconducteurs), dans lesquels les porteurs de charges se trouvent confinés dans des couches quasi-bidimensionnelles dont l'épaisseur est typiquement de l'ordre d'une centaine d'Angströms. Cet effet de confinement a pour conséquence une augmentation notable de l'énergie de liaison des complexes excitoniques, jusqu'à un facteur dix, par rapport aux cristaux massifs. Dans le cas des trions excitoniques, la situation est encore plus favorable du fait de la présence, aux basses excitations optiques, des porteurs de charge (électrons ou trous) intervenant dans les transitions vers ou à partir d'états de trions excitoniques. Cette augmentation de l'énergie de liaison permet de prévoir l'observation des trions à température ambiante dans ce type de nouveaux composés. L'intérêt est évident : du fait de leur charge, mais aussi du fait de leur confinement dans des couches quasi-bidimensionnelles, les trions excitoniques devraient donner lieu à des propriétés très originales, en particulier, sous l'influence d'un champ magnétique. On peut, notamment spéculer sur la possibilité d'observer un effet Hall quantique lié aux trions excitoniques chargés.

L'action d'un champ magnétique sur une quasi-particule mobile et chargée conduit à un renforcement et une quantification supplémentaire des énergies. Les premières études théoriques (STEBE et al., 1986, 1987; E. FEDDI, 1987) de l'action d'un champ magnétique sur les trions excitoniques dans les semiconducteurs massifs ont permis de mettre en évidence d'une part, l'augmentation de l'énergie de liaison fonction de l'intensité du champ magnétique, et d'autre part l'apparition d'une magnéto-absorption oscillatoire résultant de l'existence des niveaux de Landau associés à la charge du centre de masse des trions. Dans les milieux quasi-bidimensionnels, nous nous attendons à un renforcement de ces effets par suite du confinement géométrique (passage de 3D à 2D). De plus, on peut aussi s'attendre à une influence déterminante de l'orientation du champ magnétique par rapport à la surface du semiconducteur sur le degré de quantification. Cette dernière sera totale pour un champ perpendiculaire au plan et minimale pour un champ parallèle au plan. Cet effet devrait pouvoir être mis à profit pour identifier les trions excitoniques dans les hétérostructures de semiconducteurs à température ambiante et pour les distinguer des

autres complexes excitoniques.

Au premier chapitre, nous présentons le formalisme général des trions excitoniques en présence ou non d'un champ magnétique dans les milieux strictement bidimensionnels. Nous étendons essentiellement le formalisme développé par HAKEN (1976) pour les excitons dans les milieux tridimensionnels en l'absence de champ magnétique. Nous obtenons ainsi une équation de Schrödinger pour la fonction d'onde enveloppe dans le cadre de l'approximation de la masse effective.

Au chapitre II nous déterminons l'énergie de liaison des trions excitoniques 2D à champ nul. A cet effet, nous développons une méthode originale de résolution variationnelle de l'équation de Schrödinger pour l'état fondamental. Les résultats de nos calculs avec une fonction d'onde à vingt deux termes nous permettent de conclure à la stabilité des deux types de trions pour toute valeur du rapport des masses effectives de l'électron et du trou. La comparaison de nos résultats avec ceux obtenus dans les mêmes conditions dans le cas 3D nous permet d'affirmer que les trions sont plus stables à 2D qu'à 3D. Les énergies de liaison sont environ dix fois supérieures à celles que nous obtenons à 3D avec la même fonction d'onde. Nos résultats nous permettent d'estimer les énergies des trions dans les puits quantiques, intermédiaires entre ceux obtenus dans les deux cas limites précédents, du moins dans l'hypothèse d'un puit quantique infini. Ces résultats généralisent ceux obtenus précédemment avec une fonction d'onde plus simple à trois termes (BOBRYSHEVA et al., 1981, 1983).

Au chapitre III, nous déterminons l'énergie des trions en présence d'un champ magnétique uniforme, parallèle ou perpendiculaire au plan. Dans un premier temps, nous discutons des invariants du problème, et en déduisons les propriétés spécifiques de l'Hamiltonien. Nous montrons, en particulier, comment le mouvement du centre de masse peut être séparé de celui du mouvement relatif dans la limite de champs magnétiques suffisamment faibles. Ensuite, nous présentons les résultats du calcul variationnel des énergies des trions dans les milieux bidimensionnels soumis à l'action d'un champ magnétique uniforme faible, perpendiculaire ou parallèle aux surfaces. Nous estimons les énergies des trions dans les semiconducteurs à puits quantiques en comparant les résultats des cas limites 2D et 3D. Les calculs sont menés dans l'approximation de masses effectives isotropes. En présence d'un champ

magnétique, les énergies d'interaction coulombienne augmentent, comme prévu, avec l'intensité du champ. De plus, chaque niveau d'énergie est décomposé en niveaux de Landau dont la séparation augmente avec la valeur du champ ainsi qu'avec le rapport des masses effectives des électrons et des trous. Les effets du confinement magnétique dépendent de l'orientation du champ. Les énergies de liaison sont les plus importantes dans le cas de champs perpendiculaires aux plans. Ces effets sont spécifiques aux trions excitoniques. Leur observation devrait permettre de distinguer les spectres d'excitons et de trions excitoniques dans les super-réseaux semiconducteurs.

Au chapitre IV nous développons la théorie de l'absorption monophotonique dipolaire électrique des trions excitoniques 2D en présence ou non d'un champ magnétique extérieur. Nous établissons les expressions des coefficients d'absorption à champ nul et pour des champs magnétiques parallèles ou perpendiculaires à la surface du semiconducteur. Nous calculons ces coefficients d'absorption en fonction de la fréquence d'excitation. A champ nul, la forme de la raie d'absorption est caractérisée par un pic associé à une "queue" décroissante vers les basses fréquences. Ce phénomène est analogue à celui observé à 3D pour les trions et les molécules excitoniques. Toutefois, les intensités d'oscillateurs sont plus importantes à 2D qu'à 3D, du fait du confinement géométrique qui a pour effet de rapprocher les électrons des trous. En présence d'un champ magnétique, la situation varie en fonction de l'orientation du champ. Pour un champ parallèle, nous observons une magnéto-absorption oscillatoire analogue à celle déjà mise en évidence à 3D (STEBE et al., 1986) essentiellement due aux niveaux de Landau associés au centre de masse chargé. Pour un champ perpendiculaire, la situation est tout à fait différente du fait du confinement total (d'origine magnétique et géométrique) simulant une géométrie 0D. Dans ce cas, le spectre d'absorption se réduit à une série de pics de Dirac, séparés par l'énergie de résonance cyclotronique associée au centre de masse. Ces effets sont originaux et devraient pouvoir être mis à profit pour distinguer les trions excitoniques des autres complexes excitoniques.

CHAPITRE I

THEORIE GENERALE DES EXCITONS ET DES TRIONS DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE

I.1 INTRODUCTION

I.2 HAMILTONIEN D'INTERACTION ELECTRON-TROU A DEUX DIMENSIONS DANS UN MODELE A DEUX BANDES

I.2.1 Hamiltonien électronique du cristal

I.2.2 Modèle à deux bandes

I.3 ETATS EXCITONIQUES DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE

I.3.1 Etats excitoniques

I.3.2 Equation effective des coefficients $C_{\lambda_1\lambda_2}$

I.3.3 Equation effective de la fonction enveloppe dans l'approximation de la masse effective

I.4 ETATS DES TRIONS DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE

I.4.1 Etats des trions excitoniques

I.4.2 Equation effective des coefficients $C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}$

I.4.3 Equation effective de la fonction enveloppe dans l'approximation de la masse effective

CHAPITRE I

THEORIE GENERALE DES EXCITONS ET DES TRIONS DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE

I.1 INTRODUCTION

Dans ce chapitre, nous présentons la théorie des trions excitoniques dans les semiconducteurs bidimensionnels en présence d'un champ magnétique uniforme.

Le présent formalisme constitue une extension aux semiconducteurs bidimensionnels de celui développé précédemment pour les trions dans le cas des semiconducteurs massifs, avec ou sans champ magnétique (STEBE et COMTE, 1977; STEBE et FEDDI, 1987).

Ce formalisme est très général. Il permet en principe de prendre en compte toutes les spécificités du matériau utilisé. Toutefois, et dans un souci de simplicité, nous serons amené à effectuer et justifier un certain nombre d'approximations qui ne limitent pas la portée essentielle de nos résultats.

Nous montrons en particulier comment les énergies de l'état fondamental des trions peuvent, dans le cadre de l'approximation de la masse effective, être obtenues à partir d'équations de Schrödinger effectives à trois particules.

Dans le paragraphe I.2, nous établissons tout d'abord un Hamiltonien effectif d'interaction électron trou dans un modèle à deux bandes, bien justifié dans l'hypothèse d'excitations électroniques d'origine optique. Les états d'excitation électronique sont construits à partir des états à électron au sens de l'approximation de

HARTREE et FOCK. Nous supposons que les températures sont suffisamment basses de sorte que les effets dûs aux vibrations du réseau cristallin peuvent être négligés. Nous négligeons également les effets de polarisation, tant ionique qu'électronique, qui n'apportent de contribution sensible que dans le cas de cristaux ioniques.

Dans le paragraphe I.3, nous développons la théorie de l'exciton dans un milieu strictement bidimensionnel soumis à l'action d'un champ magnétique. A cet effet, nous généralisons le formalisme de HAKEN (1976) valable pour les excitons dans les semiconducteurs massifs en l'absence de tout champ extérieur.

Au paragraphe I.4, nous étendons ce formalisme au cas des trions excitoniques, en suivant les mêmes approximations et établissons une équation de Schrödinger effective pour la fonction enveloppe, dont la résolution nous permettra d'obtenir par la suite les énergies de liaison des trions, avec ou sans champ magnétique.

I.2 HAMILTONIEN D'INTERACTION ELECTRON-TROU A DEUX DIMENSIONS DANS UN MODELE A DEUX BANDES

I.2.1 Hamiltonien électronique du cristal

Nous décrivons l'état fondamental du gaz d'électrons à température nulle dans l'approximation de HARTREE-FOCK, en négligeant le mouvement des ions, les interactions électron-ion, ainsi que les effets spécifiques dûs au spin. L'Hamiltonien des électrons d'un semiconducteur bidimensionnel en présence d'un champ magnétique s'écrit :

$$H^{el} = \int d^2r\, \Psi^\dagger(r) \left[\frac{1}{2m} \left(p + \frac{e}{c} A \right)^2 + V_{eff} \right] \Psi(r)$$
$$+ \frac{1}{2} \int d^2r\, d^2r'\, \Psi^\dagger(r)\, \Psi^\dagger(r')\, V_c(r, r')\, \Psi(r')\, \Psi(r). \qquad (1.1)$$

$\Psi^\dagger(r)$ et $\Psi(r)$ sont les opérateurs champ de fermions, m est la masse d'un électron au repos de charge e (valeur arithmétique), (p + e/cA) désigne l'opérateur quantité de mouvement en présence du champ magnétique de potentiel vecteur A et c représente la vitesse de la lumière dans le vide. V_{eff} désigne l'opérateur énergie potentielle d'un électron dans le champ des noyaux supposés fixes tandis que V_c décrit l'interaction coulombienne entre deux électrons dans l'approximation non relativiste.

Nous pouvons développer les opérateurs champ de fermions dans une base complète de fonctions orthonormées :

$$\Psi^\dagger(r) = \sum_\lambda a_\lambda^\dagger\, \phi_\lambda^*(r)$$

$$\Psi(r) = \sum_\lambda a_\lambda\, \phi_\lambda(r), \qquad (1.2)$$

où $a_\lambda^\dagger$ et a_λ sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation d'un électron dans les états λ que nous préciserons par la suite. Les états électroniques du cristal sont construits à partir de l'application successive des opérateurs de création $a_\lambda^\dagger$ sur l'état $| \Phi_0 >$, qui correspond à la bande de valence pleine en présence d'un champ magnétique.

$$| \Phi_{crist} > = \prod_{i=1}^{N} a_{\lambda_i}^\dagger | \Phi_0 > , \qquad (1.3)$$

où N est le nombre d'électrons dans le semiconducteur.

Les fonctions $\phi_\lambda (r)$ sont obtenues en résolvant l'equation effective d'une particule en présence d'un champ magnétique (LUTTINGER et KOHN, 1955). Au premier ordre d'approximation, elles s'écrivent sous la forme :

$$\phi_\lambda (r) = \phi_{kN} (r) = u_k (r) f_\lambda (r), \qquad (1.4)$$

où $u_k (r)$ sont les fonctions de Bloch au centre de la zone de Brillouin. Les fonctions $f_\lambda (r)$, avec $\lambda \equiv (k, N)$, correspondent au mouvement d'une particule de masse effective m_e^* dans un champ magnétique (Appendice IA). Pour les semiconducteurs bidimensionnels ces fonctions s'écrivent, pour les deux orientations particulières du champ magnétique :

- <u>champ magnétique perpendiculaire au plan</u> :

$$f_\lambda (r) = \mathcal{A} \exp (ik_x x) \exp (-ixy/2l^2) .$$

$$. \exp [-(y - y_0)^2/2l^2] H_N [(y - y_0) /l] ,$$

-<u>champ magnétique parallèle au plan</u> :

$$f_\lambda (r) = \mathcal{A} \exp (ik_x x) \exp (- e\mathcal{H}/4\hbar c\, y^2) H_N (\sqrt{e\mathcal{H}/2\hbar c}\, y), \qquad (I.5)$$

où $\quad l^2 = c\hbar / e\mathcal{H}, \qquad y_0 = c\hbar k_x / e\mathcal{H}.$ (1.6)

$\mathcal{A}$ est une constante de normation et H_N correspond à un polynôme d'Hermite de degré N.

Les niveaux d'énergies de Landau de la particule de masse effective m_e^* en présence du champ magnétique s'écrivent alors :

- champ magnétique perpendiculaire au plan :

$$E_N = E_c (0) + \hbar\omega_c (N + 1/2),$$

-champ magnétique parallèle au plan :

$$E_N = E_c (0) + \hbar\omega_c (N + 1/2) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e^*}. \qquad (I.7)$$

$E_c (0)$ désigne l'énergie à $k = 0$, $\omega_c = e\mathcal{H}/m_e^*$ c est la pulsation de résonance cyclotronique due aux oscillations de la particule dans le cas d'un champ magnétique perpendiculaire au plan. Pour un champ parallèle à la surface, elle est égale à la moitié de cette dernière.

I.2.2 Modèle à deux bandes

Nous simplifions le problème en considérant seulement les états de la dernière bande de valence et ceux de la première bande de conduction pour construire les états excités du cristal. Cette approximation est justifiée dans la mesure où les énergies de liaison des excitations considérées sont petites en comparaison de celle de la bande interdite ainsi que de celle correspondant à la décomposition des deux dernières bandes de valence par suite du couplage spin orbite, négligé ici. Nous nous limitons de plus aux semiconducteurs à bandes interdites directes au point $\mathbf{k} = 0$ et nous ne nous intéressons qu'aux états excités dont les vecteurs d'onde sont petits.

Dans ces conditions, et en l'absence de tout champ magnétique, les parties périodiques des fonctions de Bloch des deux bandes peuvent être approchées par leurs expressions $c(\mathbf{r})$ et $v(\mathbf{r})$ au centre de la zone de Brillouin. En présence d'un champ magnétique perpendiculaire à la surface semiconductrice, les fonctions d'onde des électrons s'écrivent :

$$\phi_{ckN}(\mathbf{r}) = c(\mathbf{r})\, f^{e}_{kN}(\mathbf{r}) = \phi_{ekN}(\mathbf{r})$$

$$\phi_{vkN}(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r})\, f^{h}_{kN}(\mathbf{r}) = \phi^{*}_{hkN}(\mathbf{r}), \qquad (1.8)$$

où les fonctions $f_{kN}(\mathbf{r})$ ont été définies ci-dessus par les relations (1.5). Le vecteur $\mathbf{k}$ est défini par : $\mathbf{k} = (k_x, 0)$. Les fonctions d'onde $\phi_{ekN}(\mathbf{r})$ et $\phi_{hkN}(\mathbf{r})$ sont définies comme étant les fonctions d'électrons de la bande de conduction et de trous de la bande de valence. Les énergies associées s'écrivent :

$$E_c(\mathbf{k},N) = E_g + \hbar\omega_e\,(N + 1/2)$$

$$E_v(\mathbf{k},N) = -\hbar\omega_h\,(N + 1/2). \qquad (1.9)$$

où ω_e et ω_h désignent les pulsations de résonance cyclotroniques de l'électron et du trou.

Dans le modèle à deux bandes, les opérateurs champ de fermions s'écrivent :

$$\Psi^{\dagger}(r) = \Psi_e^{\dagger}(r) + \Psi_v^{\dagger}(r)$$

$$\Psi(r) = \Psi_e(r) + \Psi_v(r), \qquad (1.10)$$

où :

$$\Psi_e^{\dagger}(r) = \Psi_c^{\dagger}(r) = \sum_{\lambda} a_{\lambda}^{\dagger} \phi_{e\lambda}^{*}(r)$$

$$\Psi_v^{\dagger}(r) = \Psi_h(r) = \sum_{\lambda} d_{\lambda} \phi_{h\lambda}(r). \qquad (1.11)$$

$a_{\lambda}^{\dagger}$ et d_{λ} sont les opérateurs de création et d'annihilation d'électrons et de trous. Nous admettons que les fonctions d'électrons et de trous forment une base orthonormale. Dans ces conditions, ces opérateurs s'expriment par les relations :

$$a_{\lambda}^{\dagger} = \int d^2r \, \phi_{e\lambda}(r) \, \Psi_e^{\dagger}(r)$$

$$d_{\lambda} = \int d^2r \, \phi_{h\lambda}^{*}(r) \, \Psi_h(r). \qquad (1.12)$$

En reportant les relations (1.10) et (1.11) dans l'expression (1.1), nous obtenons l'expression de l'Hamiltonien effectif d'interaction électron-trou dans notre modèle à deux bandes (HAKEN, 1976). Dans cette expression, un certain nombre de termes peuvent être éliminés si nous pouvons négliger toutes les transitions virtuelles entre les bandes. Cette approximation est justifiée si la largeur de bande interdite est suffisamment grande comparativement aux énergies de liaison des excitons et des trions. Cela revient à supposer qu'en l'absence de perturbation extérieure, le nombre d'électrons et de trous reste fixé. Nous supposerons ces conditions réalisées dans ce qui suit. L'Hamiltonien d'interaction électron-trou s'écrit alors :

$$H = H_0 + H_c, \qquad (1.13)$$

où

$$H_0 = \mathcal{E}_0 + \sum_{\lambda} (E_c (k, N) a_\lambda^\dagger a_\lambda - E_v (k, N) d_\lambda^\dagger d_\lambda) \qquad (1.14)$$

H_0 désigne l'Hamiltonien du système électrons-trous en l'absence de toute interaction coulombienne. $\mathcal{E}_0$ correspond à l'énergie de la bande de valence pleine pour une température $T = 0$ K. H_c résulte de la contribution des différentes interactions coulombiennes et s'écrit :

$$H_c = \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} a_{\lambda_1}^\dagger a_{\lambda_4} d_{\lambda_3}^\dagger d_{\lambda_2} .$$

$$. [< e\lambda_1; h\lambda_2 \mid V_c \mid h\lambda_3; e\lambda_4 >_\phi - < h\lambda_2; e\lambda_1 \mid V_c \mid h\lambda_3; e\lambda_4 >_\phi]$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} a_{\lambda_1}^\dagger a_{\lambda_2}^\dagger a_{\lambda_3} a_{\lambda_4} < e\lambda_1; e\lambda_2 \mid V_c \mid e\lambda_3; e\lambda_4 >_\phi$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3\lambda_4} d_{\lambda_3}^\dagger d_{\lambda_4}^\dagger a_{\lambda_1} a_{\lambda_2} < h\lambda_1; h\lambda_2 \mid V_c \mid h\lambda_3; h\lambda_4 >_\phi ,$$

(1.15a)

avec

$$< \lambda_1; \lambda_2 \mid V_c \mid \lambda_3; \lambda_4 >_\phi \equiv \int d^2r\, d^2r'\, \phi_{\lambda_1}^*(r) \phi_{\lambda_2}^*(r') V_c \; \phi_{\lambda_3}(r') \phi_{\lambda_4}(r).$$

(1.15b)

Les deux premiers termes décrivent les interactions coulombiennes directes et d'échange électron-trou, tandis que les deux derniers traduisent les interactions coulombiennes directes entre électrons de la bande de conduction et trous de la bande de valence.

I.3 ETATS EXCITONIQUES DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE

I.3.1 Etats excitoniques

En présence du champ magnétique, les états de paires d'électrons et de trous non liés peuvent être construits à partir de l'application des opérateurs de création d'états d'électrons et de trous sur l'état "vide" (bande de valence pleine) :

$$| \Phi_{eh} > = a^{\dagger}_{\lambda_1} d^{\dagger}_{\lambda_2} | \Phi_0 >, \qquad (1.16)$$

où $| \Phi_{eh} >$ sont les états propres de l'Hamiltonien H_0 (1.14), correspondant aux énergies :

$$E_1 = \mathcal{E}_0 + E_c (k_1, N_1) - E_v (k_2, N_2), \qquad (1.17)$$

E_c et E_v étant les énergies des électrons et des trous en présence d'un champ magnétique.

Les états de paires d'électrons et de trous liés, ou états excitoniques $| \Phi_X >$, sont des états propres de l'Hamiltonien total (1.13), et peuvent être construits à partir de combinaisons linéaires des états non liés $| \Phi_{eh} >$:

$$| \Phi_X > = \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} a^{\dagger}_{\lambda_1} d^{\dagger}_{\lambda_2} | \Phi_0 >. \qquad (1.18)$$

où $C_{\lambda_1 \lambda_2}$ est la fonction d'onde excitonique en représentation du nombre d'occupation. Son expression en représentation de Schrödinger s'obtient en remplaçant les opérateurs $a^{\dagger}_{\lambda_1}$ et $d^{\dagger}_{\lambda_2}$ par des développements de type (1.12). On obtient ainsi :

$$| \Phi_X > = \int d^2 r_1 \, d^2 r_2 \, F_X (r_1, r_2) \, \Psi^{\dagger}_e (r_1) \, \Psi^{\dagger}_h (r_2) | \Phi_0 >, \qquad (1.19)$$

où

$$F_X (r_1, r_2) = \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} \phi_{e\lambda_1} (r_1) \phi_{h\lambda_2} (r_2). \qquad (1.20)$$

Dans (1.19) l'intégration est limité au plan du semiconducteur, F_X représente la fonction d'onde excitonique. Elle s'interprète comme étant l'amplitude de probabilité de présence d'un électron et d'un trou aux points r_1 et r_2 respectivement.

Dans le cas d'excitons faiblement liés et d'orbites assez grandes (excitons de WANNIER) crées par absorption optique classique dans un semiconducteur à transitions directes, les vecteurs k_1 et k_2 sont peu différents l'un de l'autre et voisins de zéro. Les fonctions $\phi_{e\lambda_1}$ et $\phi_{h\lambda_2}$ peuvent alors être approchées par leur développement (1.4) au voisinage de $k = 0$:

$$\phi_{e\lambda} \simeq c (r) f_{e\lambda} (r)$$

$$\phi_{h\lambda} \simeq v (r) f_{h\lambda} (r) \qquad (1.21)$$

La fonction d'onde excitonique se décompose alors en un produit d'une fonction " enveloppe " ϕ_X et d'une fonction " cristalline " f_{crist} :

$$F_X (r_1, r_2) = S \phi_X (r_1, r_2) f_{crist} (r_1, r_2), \qquad (1.22)$$

où

$$\phi_X (r_1, r_2) = S^{-1} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} f_{e\lambda_1} (r_1) f_{h\lambda_2} (r_2), \qquad (1.23)$$

et

$$f_{crist} (r_1, r_2) = c (r_1) v^* (r_2), \qquad (1.24)$$

où $S = N S_0$ représente la surface du cristal contenant N cellules élémentaires de surface S_0.

I.3.2 Equation effective des coefficients $C_{\lambda_1\lambda_2}$

Dans ces conditions, les coefficients $C_{\lambda_1\lambda_2}$ sont solutions du système d'équations linéaires :

$$[H - \mathcal{E}_0] \mid \Phi_X > = \mathcal{E}_{crist} \mid \Phi_X >, \qquad (1.25)$$

où $\mathcal{E}_{crist}$ désigne l'énergie d'excitation du semiconducteur. Le système (1.25) peut s'écrire :

$$\sum_{\lambda_1\lambda_2} C_{\lambda_1\lambda_2} \{ \left[\sum_{\lambda} a^{\dagger}_{\lambda} a_{\lambda} E_c (k, N) - \sum_{\lambda} d^{\dagger}_{\lambda} d_{\lambda} E_v (k, N) \right]$$

$$- \sum_{\lambda_1'\lambda_2'\lambda_3\lambda_4} a^{\dagger}_{\lambda_1'} a_{\lambda_4} d^{\dagger}_{\lambda_3} d_{\lambda_2'} [< e\lambda_1' ; h\lambda_2' \mid V_c \mid h\lambda_3 ; e\lambda_4 >_{\phi}$$

$$- < h\lambda_2' ; e\lambda_1' \mid V_c \mid h\lambda_3 ; e\lambda_4 >_{\phi}] \} a^{\dagger}_{\lambda_1} d^{\dagger}_{\lambda_2} \mid \Phi_0 >$$

$$= \mathcal{E}_{crist} \sum_{\lambda_1\lambda_2} C_{\lambda_1\lambda_2} a^{\dagger}_{\lambda_1} d^{\dagger}_{\lambda_2} \mid \Phi_0 >. \qquad (1.26)$$

Il est à remarquer que ce système ne fait plus intervenir de termes de corrélation électron-électron ou trou-trou du fait que la fonction d'onde excitonique ne fait intervenir qu'une seule paire électron-trou.

En multipliant à gauche les deux membres du système par $< \Phi_0 \mid d_{\lambda_2'} a_{\lambda_1'}$ et en utilisant les règles de commutation, nous obtenons l'équation effective pour les coefficients $C_{\lambda_1\lambda_2}$:

$$[E_c (k_1, N_1) - E_v (k_2, N_2) - \mathcal{E}_{crist}] C_{\lambda_1\lambda_2}$$

$$- \sum_{\lambda_3\lambda_4} C_{\lambda_3\lambda_4} \{ < e\lambda_1 ; h\lambda_4 \mid V_c \mid h\lambda_2 ; e\lambda_3 >_\phi - < h\lambda_4 ; e\lambda_1 \mid V_c \mid h\lambda_2 ; e\lambda_3 >_\phi \} = 0. \qquad (1.27)$$

I.3.3 Equation effective de la fonction enveloppe dans l'approximation de la masse effective

Nous avons vu ci-dessus que pour un champ magnétique orienté perpendiculairement par rapport à la surface, les énergies des bandes de conduction et de valence près du point $\mathbf{k} = 0$, s'écrivent :

$$E_c (k_1 , N_1) = E_c (0) + (N_1 + \tfrac{1}{2}) \hbar\omega_c$$

$$E_v (k_2 , N_2) = E_v (0) - (N_2 + \tfrac{1}{2}) \hbar\omega_v , \qquad (1.28)$$

En reportant ces expressions ainsi celles des fonctions $\phi (r)$ données par les relations (1.5) et (1.8), dans l'équation (1.27), nous obtenons :

$$C_{\lambda_1\lambda_2} [E_g + (N_1 + \tfrac{1}{2}) \hbar\omega_c + (N_2 + \tfrac{1}{2}) \hbar\omega_v]$$

$$- \sum_{\lambda_3\lambda_4} \{ < e\lambda_1 ; h\lambda_4 \mid V_c \mid h\lambda_2 ; e\lambda_3 >_f - < h\lambda_4 ; e\lambda_1 \mid V_c \mid h\lambda_2 ; e\lambda_3 >_f \}$$

$$= E_{crist} C_{\lambda_1\lambda_2}, \qquad (1.29)$$

où

$$< e\lambda_1 ; h\lambda_4 \mid V_c \mid h\lambda_2 ; e\lambda_3 >_f =$$

$$\int d^2r\, d^2r'\, f^*_{e\lambda_1}(r)\, f_{h\lambda_4}(r')\, V_c\, f^*_{h\lambda_2}(r')\, f_{e\lambda_3}(r).$$

$$. f^*_{crist}(r, r')\, f_{crist}(r, r'), \qquad (1.30)$$

tandis que

$$< h\lambda_4 ; e\lambda_1 \mid V_c \mid h\lambda_2 ; e\lambda_3 >_f =$$

$$\int d^2r\, d^2r'\, f_{h\lambda_4}(r)\, f^*_{e\lambda_1}(r')\, V_c\, f^*_{h\lambda_2}(r')\, f_{e\lambda_3}(r).$$

$$. f^*_{crist}(r, r')\, f_{crist}(r, r'). \qquad (1.31)$$

$E_g = E_c(0) - E_v(0)$ représente l'énergie de la bande interdite.

Pour les excitons peu liés, nous pouvons négliger le troisième terme de la relation (1.29) qui représente l'interaction d'échange électron-trou proportionnelle à la probabilité pour que la distance électron-trou soit nulle.

Par ailleurs, si le champ magnétique est suffisament faible, les variations des parties périodiques des fonctions de Bloch c (r) et v (r) sont rapides par rapport à celles des fonctions d'oscillateur harmonique f_λ (r) définies en (1.5) et de pulsation $\omega_c = \frac{e\mathcal{H}}{m_e^* c}$, condition que nous supposerons réalisée par la suite. De plus, elles sont également rapides par rapport à celles du potentiel coulombien dans l'hypothèse des excitons de WANNIER faiblement liés.

Nous pouvons alors remplacer l'intégration du terme d'interaction coulombienne dans (1.30) sur la surface totale S par une somme d'intégrations sur les cellules élémentaires de surface S_0 :

$$< e\lambda_1 ; h\lambda_4 \mid V_c \mid h\lambda_2 ; e\lambda_3 >_f =$$

$$\sum_{m,m'} f^*_{e\lambda_1} (R_m) f_{h\lambda_4} (R_{m'}) V_c f^*_{h\lambda_2} (R_{m'}) f_{e\lambda_3} (R_m).$$

$$\int_{S_0 m} \int_{S_0 m'} d^2r \, d^2r' \mid c (r) \mid^2 \mid v (r) \mid^2 , \qquad (1.32)$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{m,m'} f^*_{e\lambda_1} (R_m) f_{h\lambda_4} (R_{m'}) V_c f^*_{h\lambda_2} (R_{m'}) f_{e\lambda_3} (R_m), \qquad (1.33)$$

où nous avons tenu compte de la périodicité des fonctions c et v supposées normées à l'unité.

En remplaçant la sommation discrète sur les cellules élémentaires de surface S_0 par une intégration sur toute la surface, l'équation effective (1.29) s'écrit :

$$C_{\lambda_1\lambda_2} [E_g + (N_1 + \tfrac{1}{2}) \hbar\omega_c + (N_2 + \tfrac{1}{2}) \hbar\omega_v]$$

$$- \sum_{\lambda_3\lambda_4} C_{\lambda_3\lambda_4} \frac{1}{S^2} < e\lambda_1 ; h\lambda_4 \mid V_c \mid h\lambda_2 ; e\lambda_3 >_f$$

$$= E_{cris} C_{\lambda_1\lambda_2}. \qquad (1.34)$$

En vue d'obtenir une équation effective pour la fonction enveloppe $\phi_X (r_1, r_2)$, nous multiplions la relation (1.34) par le produit des fonctions d'oscillateurs d'électron et de trou normées :

$$\frac{1}{S} f_{e\lambda_1} (r_1) f_{h\lambda_2} (r_2). \qquad (1.35)$$

Nous effectuons la somme sur les états $\lambda_1 \equiv (k_1, N_1)$ et $\lambda_2 \equiv (k_2, N_2)$ en remarquant que :

$$f_{e\lambda_1} (r_1) [(N_1 + \frac{1}{2}) \hbar\omega_c] = \frac{1}{2m_e^*} (p_1 + \frac{e}{c} A_1)^2 f_{e\lambda_1} (r_1). \qquad (1.36)$$

Nous obtenons finalement :

$$\left[\frac{1}{2m_e^*} (p_1 + \frac{e}{c} A_1)^2 + \frac{1}{2m_h^*} (p_2 - \frac{e}{c} A_2)^2 - \frac{e^2}{\epsilon | r_1 - r_2 |} \right] \phi_X (r_1, r_2)$$

$$= E_X \phi_X (r_1, r_2). \qquad (1.37)$$

où

$$E_X = \mathcal{E}_{cris} - E_g. \qquad (1.38)$$

La résolution de l'équation (1.37), sera traitée en détail dans l'Appendice IB. E_X correspond à l'énergie relative de l'exciton. La constante diélectrique ϵ a été introduite de façon quelque peu phénoménologique afin de rendre compte des effets de polarisation électronique et ionique qui peuvent intervenir dans les semiconducteurs à caractère ionique.

I.4 ETATS DES TRIONS DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE

I.4.1 Etats des trions excitoniques

Nous traitons explicitement le cas du trion chargé négativement X^- résultant de la liaison d'un exciton et d'un électron. Celui du trion positif X_2^+ s'en déduisant immédiatement par échange des électrons et des trous. Comme pour l'exciton, nous définissons tout d'abord un état de trion non lié $| \Phi_{eeh} >$ par application des opérateurs $a^+_{\lambda_1}$, $a^+_{\lambda_2}$ et $d^+_{\lambda_3}$ sur l'état de la bande de valence pleine en présence du champ magnétique perpendiculaire au plan :

$$| \Phi_{eeh} > = a^+_{\lambda_1} a^+_{\lambda_2} d^+_{\lambda_3} | \Phi_0 >, \qquad (1.39)$$

$\lambda_1 \equiv (k_1, N_1)$, $\lambda_2 \equiv (k_2, N_2)$ et $\lambda_3 \equiv (k_3, N_3)$ représentent les états d'électrons et de trous. Les états $| \Phi_{eeh} >$ sont les vecteurs propres de l'Hamiltonien H_0 (1.14), dont les valeurs propres sont :

$$\mathcal{E}_0 + E_c (\lambda_1) + E_c (\lambda_2) - E_v (\lambda_3). \qquad (1.40)$$

Les états propres de l'Hamiltonien total (1.13) sont construits à partir de combinaisons linéaires des états à trois particules non liées (1.39) :

$$| \Phi_{X^-} > = 1/\sqrt{2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3} a^\dagger_{\lambda_1} a^\dagger_{\lambda_2} d^\dagger_{\lambda_3} | \Phi_0 > . \qquad (1.41)$$

Les coefficients $C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}$ désignent la fonction enveloppe du trion X^- dans l'espace réciproque. Nous introduisons une fonction d'exciton chargé dans l'espace des coordonnées en utilisant les relations (1.11) et (1.12) :

$$| \Phi_{X^-} > = 1/\sqrt{2} \int d^2r_1 \, d^2r_2 \, d^2r_3 \, F_{X^-} (r_1, r_2, r_3) \, \Psi^\dagger_e (r_1) \, \Psi^\dagger_e (r_2) \, \Psi^\dagger_h (r_3) \, | \Phi_0 > ,$$

(1.42)

où

$$F_{X^-}(r_1, r_2, r_3) = \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} \phi_{e\lambda_1}(r_1)\,\phi_{e\lambda_2}(r_2)\,\phi_{h\lambda_3}(r_3)\,. \qquad (1.43)$$

Pour des trions d'orbites assez grandes, la fonction F_{X^-} se décompose en un produit de deux facteurs ϕ_{X^-} et f_{eeh} :

$$F_{X^-}(r_1, r_2, r_3) = S^{3/2}\,\phi_{X^-}(r_1, r_2, r_3)\,f_{eeh}(r_1, r_2, r_3), \qquad (1.44)$$

où

$$\phi_{X^-}(r_1, r_2, r_3) = S^{-3/2} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} f_{e\lambda_1}(r_1)\,f_{e\lambda_2}(r_2)\,f_{h\lambda_3}(r_3), \qquad (1.45)$$

désigne la fonction enveloppe, tandis que :

$$f_{eeh}(r_1, r_2, r_3) = c(r)\,c(r_2)\,v^*(r_3), \qquad (1.46)$$

représente la fonction cristalline.

I.4.2 Equation effective des coefficients $C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}$

En suivant la méthode décrite au paragraphe (I.3.2), nous pouvons établir une équation effective pour les coefficients $C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}$ en résolvant le système d'équations :

$$H_{tot} \mid \Phi_{X^-} > = E_{tot} \mid \Phi_{X^-} >. \qquad (1.47)$$

De façon explicite :

$$\sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} \{ \sum_{\lambda} a^{\dagger}_{\lambda} a_{\lambda} E_c (\lambda) - \sum_{\lambda} d^{\dagger}_{\lambda} d_{\lambda} E_v (\lambda)$$

$$- \sum_{\lambda'_e \lambda_e} \sum_{\lambda_d \lambda'_d} a^{\dagger}_{\lambda_e} a_{\lambda'_e} d^{\dagger}_{\lambda_d} d_{\lambda'_d} < \lambda_e ; \lambda'_d \mid V_c \mid \lambda_d ; \lambda'_e >_f$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\lambda_e \lambda'_e} \sum_{\lambda_d \lambda'_d} a^{\dagger}_{\lambda_e} a^{\dagger}_{\lambda'_d} a_{\lambda_d} a_{\lambda'_e} < \lambda_e ; \lambda'_d \mid V_c \mid \lambda_d ; \lambda'_e >_f \} a^{\dagger}_{\lambda_1} a^{\dagger}_{\lambda_2} d^{\dagger}_{\lambda_3} \mid \Phi_0 >$$

$$= \mathcal{E}_{crist} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} a^{\dagger}_{\lambda_1} a^{\dagger}_{\lambda_2} d^{\dagger}_{\lambda_3} \mid \Phi_0 >, \qquad (1.48)$$

où $\mathcal{E}_{crist} = E_{tot} - \mathcal{E}_0$ correspond à l'énergie d'excitation du semiconducteur.

Dans (1.48), le troisième terme correspond aux interactions coulombiennes électron-trou, le quatrième terme désigne les interactions coulombiennes électron-électron dans la bande de conduction. Afin d'obtenir l'équation relative aux coefficients $C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}$ nous faisons les mêmes approximations et les mêmes développements que dans le cas de l'exciton. En particulier, nous avons également négligé la contribution provenant de l'interaction d'échange électron-trou. Nous

obtenons ainsi :

$$\sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} (C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} [E_c (\lambda_1) + E_c (\lambda_2) - E_v (\lambda_3)] a^\dagger_{\lambda_1} a^\dagger_{\lambda_2} d^\dagger_{\lambda_3}$$

$$- \sum_{\lambda'_e \lambda'_d} C_{\lambda'_e \lambda'_2 \lambda'_d} a^\dagger_{\lambda_1} a^\dagger_{\lambda_2} d^\dagger_{\lambda_3} < c\lambda_1 ; v\lambda'_d \mid V_c \mid v\lambda_3 ; c\lambda'_e >_f$$

$$- \sum_{\lambda'_e \lambda'_d} C_{\lambda_1 \lambda'_e \lambda'_d} a^\dagger_{\lambda_1} a^\dagger_{\lambda_2} d^\dagger_{\lambda_3} < c\lambda_2 ; v\lambda'_d \mid V_c \mid v\lambda_3 ; c\lambda'_e >_f$$

$$+ \sum_{\lambda'_e \lambda_d} C_{\lambda'_e \lambda_d \lambda_3} a^\dagger_{\lambda_1} a^\dagger_{\lambda_2} d^\dagger_{\lambda_3} < c\lambda_1 ; c\lambda_2 \mid V_c \mid c\lambda_d ; c\lambda'_e >_f) \mid \Phi_0 >$$

$$= \mathcal{E}_{crist} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} a^\dagger_{\lambda_1} a^\dagger_{\lambda_2} d^\dagger_{\lambda_3} \mid \Phi_0 >. \qquad (1.49)$$

Nous obtenons l'équation effective pour les coefficients $C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}$, en multipliant à gauche les deux membres de l'équation (1.49) par $< \Phi_0 \mid d_{\lambda''_3} a_{\lambda''_2} a_{\lambda''_1}$ et en tenant compte des relations de commutation :

$$C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} [E_c (\lambda_1) + E_c (\lambda_2) - E_v (\lambda_3)]$$

$$- \sum_{\lambda'_e \lambda'_d} C_{\lambda'_e \lambda_2 \lambda'_d} < c\lambda_1 ; v\lambda'_d \mid V_c \mid v\lambda_3 ; c\lambda'_e >_f$$

$$- \sum_{\lambda'_e \lambda'_d} C_{\lambda_1 \lambda'_e \lambda'_d} < c\lambda_2 ; v\lambda'_d \mid V_c \mid v\lambda_3 ; c\lambda'_e >_f$$

$$+ \sum_{\lambda'_e \, \lambda_d} C_{\lambda'_e \, \lambda_d \, \lambda_3} < c\lambda_1 ; c\lambda_2 \mid V_c \mid c\lambda_d ; c\lambda'_e >_f$$

$$= \mathcal{E}_{crist} \, C_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}. \qquad (1.50)$$

I.4.3 Equation effective de la fonction enveloppe dans l'approximation de la masse effective

Nous établissons l'équation effective pour la fonction enveloppe ϕ_{X^-}, en suivant la méthode utilisée au paragraphe (I.3.3) et en nous limitant aux excitons chargés de rayons assez grands pour que l'approximation de la masse effective s'applique. Les énergies des extrema des bandes de conduction et de valence au centre de zone ($\mathbf{k} = 0$), en présence d'un champ magnétique perpendiculaire à la surface s'écrivent :

$$E_c (\lambda_1) = E_c (0) + (N_1 + 1/2) \hbar\omega_e$$

$$E_c (\lambda_2) = E_c (0) + (N_2 + 1/2) \hbar\omega_e$$

$$E_v (\lambda_3) = E_v (0) - (N_3 + 1/2) \hbar\omega_h. \qquad (1.51)$$

Par analogie avec le traitement de l'exciton, nous effectuons tout d'abord une somme sur les états λ_1, λ_2 et λ_3 et multiplions les deux membres de l'égalité (1.51) par la quantité :

$$S^{-3/2} \, f_{\lambda_1} (r_1) \, f_{\lambda_2} (r_2) \, f^*_{\lambda_3} (r_3). \qquad (1.52)$$

Les termes de l'interaction coulombienne s'écrivent respectivement :

$$S^{-3/2}\left[\sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} < c\lambda_1;\, v\lambda'_d \mid V_c \mid v\lambda_3\,;\, c\lambda'_e >_f f_{\lambda_1}(r_1)\, f_{\lambda_2}(r_2)\, f^*_{\lambda_3}(r_3)\right]\phi_{X^-}$$

$$= \frac{e^2}{|r_1 - r_3|}\,\phi_{X^-}$$

$$S^{-3/2}\left[\sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} < c\lambda_2;\, v\lambda'_d \mid V_c \mid v\lambda_3\,;\, c\lambda'_e >_f f_{\lambda_1}(r_1)\, f_{\lambda_2}(r_2)\, f^*_{\lambda_3}(r_3)\right]\phi_{X^-}$$

$$= \frac{e^2}{|r_2 - r_3|}\,\phi_{X^-}$$

$$S^{-3/2}\left[\sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} < c\lambda_1;c\lambda_2 \mid V_c \mid c\lambda_d\,;\, c\lambda'_e >_f f_{\lambda_1}(r_1)\, f_{\lambda_2}(r_2)\, f^*_{\lambda_3}(r_3)\right]\phi_{X^-}$$

$$= \frac{e^2}{|r_1 - r_2|}\,\phi_{X^-}\,. \qquad (1.53)$$

En utilisant la même technique que dans le cas de l'exciton, nous obtenons finalement l'équation de Schrödinger effective pour la fonction enveloppe du trion excitonique $\phi_{X^-}(r_1, r_2, r_3)$:

$$\left\{\frac{1}{2m_e^*}\left(p_1 + \frac{e}{c}A_1\right)^2 + \frac{1}{2m_e^*}\left(p_2 + \frac{e}{c}A_2\right)^2\right.$$

$$\left. + \frac{1}{2m_h^*}\left(p_3 - \frac{e}{c}A_3\right)^2 + V_c\right\}\phi_{X^-}(r_1, r_2, r_3)$$

$$= E_{X^-}\,\phi_{X^-}(r_1, r_2, r_3)\,, \qquad (1.54)$$

où

$$V_c = \frac{e^2}{\epsilon}\left\{ \frac{1}{|r_1 - r_2|} - \frac{1}{|r_1 - r_3|} - \frac{1}{|r_2 - r_3|} \right\}, \qquad (1.55)$$

tandis que :

$$E_{X^-} = \mathcal{E}_{cris} - 2\,E_c(0) + E_v(0), \qquad (1.56)$$

désigne l'énergie totale du trion excitonique dans un champ magnétique. la résolution de l'équation (1.54) sera étudiée en détail au chapitre III.

CHAPITRE II

ENERGIE DE LIAISON DES EXCITONS CHARGES DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS

II.1 INTRODUCTION

II.2 PROPRIETES DE L'HAMILTONIEN EFFECTIF

II.3 ENERGIE DE L'ETAT FONDAMENTAL DES TRIONS X^- ET X_2^+

II.3.1 Invariants du système

II.3.2 Méthode variationnelle de résolution

II.4 RESULTATS NUMERIQUES ET DISCUSSION

II.4.1 Méthode de calcul

II.4.2 Résultats numériques et conclusion

CHAPITRE II

ENERGIE DE LIAISON DES EXCITONS CHARGES DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS

II.1 INTRODUCTION

Dans ce chapitre, nous résolvons de façon variationnelle l'équation de Schrödinger effective des trions excitoniques dans un milieu strictement bidimensionnel en l'absence de champ magnétique. Nous démontrons la stabilité des deux types de trions quant à leur dissociation en un exciton et un porteur de charge libre. Nous comparons les énergies obtenues à celles résultant de précédentes études (STEBE et MUNSCHY 1975) effectuées pour les semiconducteurs tridimensionnels. Nous généralisons, par l'utilisation d'une fonction d'onde plus élaborée, les premières études dues à BOBRYSHEVA et al. (1981, 1983). Nos fonction d'onde plus précises nous permettrons ultérieurement l'étude des propriétés optiques des trions.

Nous montrons en particulier comment les effets de confinement augmentent les énergies de liaison rendant ainsi possible l'existence des trions à température ambiante, ouvrant ainsi le champ aux applications pratiques.

Par un choix adéquat d'unités "atomiques", l'étude des trions se ramène à celle de certains systèmes à trois particules rencontrés en physique atomique ou moléculaire. Le paramètre caractéristique de notre étude sera le rapport des masses

effectives de l'électron et du trou $\sigma = m_e^* / m_h^*$. Pour $\sigma = 0$, le trion négatif X^- se ramène à l'ion hydrogène H^-, tandis que le trion positif X_2^+ devient analogue à la molécule d'hydrogène ionisée H_2^+. La situation est inversée lorsque le rapport des masses effectives tend vers l'infini. Lorsque $\sigma = 1$, les deux trions deviennent comparables aux complexes polyélectroniques $e^+e^-e^-$ et $e^+e^+e^-$.

A notre connaissance, il n'existe pas d'études théoriques de ces cas limites dans le cas de milieux strictement bidimensionnels. Le présent travail trouve donc aussi son intérêt en physique atomique et moléculaire dans la mesure où les énergies des différents agrégats peuvent être déduites de nos résultats en affectant la valeur adéquate au paramètre σ.

Au paragraphe II.2, nous établissons tout d'abord quelques propriétés de l'énergie des trions relatives à sa variation en fonction de σ. Nous montrons que l'énergie totale des quasi-particules X^- et X_2^+ reste toujours négative quelle que soit la valeur de σ. Nous confirmons ainsi l'existence d'états liés pour les trions excitoniques dans les milieux bidimensionnels.

Au paragraphe II.3, nous précisons d'abord les invariants de notre système à partir de l'expression de l'Hamiltonien effectif. Dans un deuxième temps, nous détaillons notre méthode variationnelle de résolution de l'équation de Schrödinger. Nous déterminons l'énergie de liaison de l'état fondamental du mouvement relatif des trions X^- en fonction du rapport des masses effectives de l'électron et du trou. Nous précisons en particulier la forme de notre fonction d'onde, exprimée dans un système de coordonnées elliptiques bien adapté à la géométrie de notre système. Nous développons une méthode itérative originale et très performante pour la détermination variationnelle de l'énergie. Enfin au paragraphe II.4, nous présentons la méthode de calcul numérique et nous analysons nos résultats en les comparant à ceux obtenus dans les semiconducteurs tridimensionnels.

II.2 PROPRIETES DE L'HAMILTONIEN EFFECTIF

Au chapitre précédent, nous avons montré comment, dans le cadre de l'approximation de la masse effective, les fonctions enveloppes des excitons chargés étaient solutions d'une équation de Schrödinger effective à trois particules. Nous traitons ici le problème à champ magnétique nul. L'expression de l'Hamiltonien du trion négatif s'obtient alors en annulant les potentiels vecteurs A_i ; i = (1,2,3), dans la relation (1.54) :

$$H_{X^-} = \frac{p^2_1 + p^2_2}{2m^*_e} + \frac{p^2_3}{2m^*_h} + \frac{e^2}{\epsilon}\left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1h}} - \frac{1}{r_{2h}} \right), \qquad (2.1)$$

que nous pouvons réécrire sous la forme suivante :

$$H_{X^-} = -\frac{\hbar^2}{2m^*_e}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{\hbar^2}{2m^*_h}\Delta_h + \frac{e^2}{\epsilon}\left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1h}} - \frac{1}{r_{2h}} \right). \qquad (2.2)$$

Celui du trion positif s'en déduit :

$$H_{X_2^+} = -\frac{\hbar^2}{2m^*_h}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{\hbar^2}{2m^*_e}\Delta_e + \frac{e^2}{\epsilon}\left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1e}} - \frac{1}{r_{2e}} \right). \qquad (2.3)$$

Par la suite, nous adoptons les unités atomiques $a = \frac{\epsilon\hbar^2}{e^2 m^*_e}$ pour la longueur et $\frac{e^2}{2\epsilon a}$ pour l'énergie. Les deux Hamiltoniens s'expriment alors uniquement en fonction du rapport des masses effectives $\sigma = m^*_e / m^*_h$:

$$H_{X^-}(\sigma) = -\frac{1}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{\sigma}{2}\Delta_h + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1h}} - \frac{1}{r_{2h}}$$

et

$$H_{X_2^+}(\sigma) = -\frac{\sigma}{2}(\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{1}{2}\Delta_e + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1e}} - \frac{1}{r_{2e}} . \qquad (2.4)$$

Les énergies et fonctions d'onde des états fondamentaux des trions X^- et X_2^+ satisfont aux équations aux valeurs propres suivantes :

$$H_{X^-}(\sigma) \mid \phi_{X^-}(\sigma) > = E_{X^-}(\sigma) \mid \phi_{X^-}(\sigma) >$$

et

$$H_{X_2^+}(\sigma) \mid \phi_{X_2^+}(\sigma) > = E_{X_2^+}(\sigma) \mid \phi_{X_2^+}(\sigma) > . \qquad (2.5)$$

Ces relations nous permettent d'exprimer $E_{X_2^+}$ en fonction de E_{X^-} :

$$E_{X_2^+}(\sigma) = \sigma^{-1} E_{X^-}(\sigma^{-1}). \qquad (2.6)$$

Dans ce qui suit, nous supposons que les fonctions d'onde enveloppes ϕ qui interviennent dans les équations de type (2.5) :

$$H(\sigma) \mid \phi(\sigma) > = E(\sigma) \mid \phi(\sigma) >, \qquad (2.7)$$

sont normées à l'unité :

$$< \phi(\sigma) \mid \phi(\sigma) > = 1. \qquad (2.8)$$

En différenciant l'équation (2.7), par rapport à σ et en la multipliant à gauche par le vecteur $< \phi(\sigma) \mid$, nous obtenons :

$$\partial_\sigma E(\sigma) = < \phi(\sigma) \mid \partial_\sigma H(\sigma) \mid \phi(\sigma) >. \qquad (2.9)$$

Comme l'Hamiltonien H ne dépend de σ que par l'intermédiaire du terme d'énergie cinétique, qui est positif, nous pouvons écrire que :

$$\partial_\sigma E_{X^-}(\sigma) > 0 \quad ; \quad \partial_\sigma E_{X_2^+}(\sigma) > 0. \qquad (2.10)$$

En différenciant à nouveau la relation (2.9) par rapport à σ, nous obtenons encore :

$$\partial^2_{\sigma^2} E(\sigma) = -2 < \partial_\sigma \phi(\sigma) \mid H(\sigma) - E(\sigma) \mid \partial_\sigma \phi(\sigma) >, \qquad (2.11)$$

puisque $E(\sigma)$ représente l'énergie de l'état fondamental du trion. De plus, comme la

différence H (σ) - E (σ) est toujours positive, le deuxième membre de l'équation (2.11) est toujours négatif. Il en résulte que :

$$\partial^2_{\sigma^2} E_{X^-} (\sigma) < 0 \quad ; \quad \partial^2_{\sigma^2} E_{X_2^+} (\sigma) < 0. \qquad (2.12)$$

Par conséquent, les énergies des mouvements relatifs des excitons chargés X^- et X_2^+ sont donc des fonctions croissantes de σ qui sont toutes deux convexes en fonction du rapport des masses effectives. Ces propriétés sont analogues à celles déjà mises en évidence par STEBE et MUNSCHY (1975), dans l'étude des semiconducteurs massifs, et par BOBRYSHEVA et al. (1981 , 1983) dans celle des trions de surface.

II.3 ENERGIE DE L'ETAT FONDAMENTAL DES TRIONS X^- ET X_2^+

II.3.1 Invariants du système

L'Hamiltonien effectif du trion excitonique défini en (2.2) dépend de six coordonnées repérant les trois particules (e,e,h) dans le plan. Ces coordonnées engendrent six degrés de liberté qui peuvent ainsi être représentés par les coordonnées relatives et celles du centre de masse (r, R, R_0) :

$$r = r_1 - r_2 \quad , \quad R = \frac{r_1 + r_2}{2} - r_h$$

et

$$R_0 = \frac{m_e^* r_1 + m_e^* r_2 + m_h^* r_h}{2m_e^* + m_h^*}. \qquad (2.13)$$

En utilisant ces dernières, nous obtenons l'expression suivante pour l'Hamiltonien du trion négatif :

$$H_{X^-} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2M_0}\Delta_{R_0} + V_C$$

$$= H_{X^-}^{rel} + H_{X^-}^{cm} , \qquad (2.14)$$

où

$$\mu = \frac{m_e^*}{2} \quad , \quad M = \frac{2m_e^* m_h^*}{2m_e^* + m_h^*} \quad \text{et} \quad M_0 = 2m_e^* + m_h^* . \qquad (2.15)$$

En l'absence de toute perturbation extérieure, l'invariance par translation dans le plan nous permet de séparer le mouvement du centre de masse du mouvement relatif. Dans ces conditions, la fonction d'onde enveloppe peut s'écrire :

$$\phi (r_1, r_2, r_h) = \phi_{rel} (r, R) \phi_{cm} (R_0), \qquad (2.16)$$

où $\phi_{cm} (R_0)$ désigne la fonction d'onde du centre de masse, solution de l'équation suivante :

$$H_{X^-}^{cm} \phi_{cm} (R_0) = E_{cm} \phi_{cm} (R_0), \qquad (2.17)$$

où E_{cm} représente l'énergie du centre de masse :

$$E_{cm} = \frac{\hbar^2 K_0^2}{2M_0} . \qquad (2.18)$$

L'énergie correspondant au mouvement relatif est donnée par :

$$H_{X^-}^{rel} \phi_{rel} (r, R) = E_{rel} \phi_{rel} (r, R) . \qquad (2.19a)$$

Ce dernier est caractérisé par quatre degrés de liberté. Mais comme pour l'état fondamental la valeur propre associée au moment angulaire est nulle, nous pouvons nous limiter à trois degrés de liberté. Dans le paragraphe suivant nous préciserons notre choix de coordonnées. L'énergie du trion X^- s'écrit finalement :

$$E_{X^-} = E_{rel} + E_{cm} . \qquad (2.19b)$$

II.3.2 Méthode variationnelle de résolution

Dans ce paragraphe, nous présentons le détail de notre méthode variationnelle, analogue à celle utilisée par HYLLERRAS (1929) et PEKERIS (1962) dans le cas de l'Hélium et par MUNSCHY et STEBE (1974) dans celui des trions excitoniques X^- et X_2^+ dans les semiconducteurs massifs.

Nous choisissons un système de coordonnées elliptique (s, u, t) défini à partir des trois coordonnées relatives :

$$s = r_{1h} + r_{2h} \; ; \; t = r_{1h} - r_{2h} \; ; \; u = r_{12}$$

$$s \geq 0 \; ; \; -u \leq t \leq +u \; ; \; 0 \leq u \leq s \, . \qquad (2.20)$$

Ce système présente l'avantage de conduire à des valeurs précises de l'énergie avec des fonctions d'onde comportant un nombre limité de termes dans leur développement.

L'Hamiltonien du mouvement relatif s'écrit alors :

$$H(\sigma) = -\left[\partial^2_{s^2} + \partial^2_{t^2} + \partial^2_{u^2} + \frac{2s}{s^2 - t^2} \partial_s - \frac{2t}{s^2 - t^2} \partial_t \right.$$

$$\left. + \frac{1}{u} \partial_u + \frac{2s}{u} \frac{u^2 - t^2}{s^2 - t^2} \partial^2_{su} + \frac{2t}{u} \frac{s^2 - u^2}{s^2 - t^2} \partial^2_{tu} \right]$$

$$-2\sigma \left[\frac{s^2 - u^2}{s^2 - t^2} \partial^2_{s^2} + \frac{u^2 - t^2}{s^2 - t^2} \partial^2_{t^2} + \frac{s}{s^2 - t^2} \partial_s - \frac{t}{s^2 - t^2} \partial_t \right] + \frac{1}{u} - \frac{4s}{s^2 - t^2} \, . \qquad (2.21)$$

Pour résoudre l'équation (2.7), nous choisissons une fonction d'onde variationnelle qui ne dépend que des trois coordonnées s, u et t :

$$\phi(s,u,t) = \mathcal{N} \, \Phi(s,u,t)$$

où

$$\Phi(s,u,t) = \exp(-ks/2) \sum_{lmn} c_{lmn} \, k^{l+m+n} \, s^l \, u^m \, t^n$$

$$= \psi(ks, ku, kt) \, , \qquad (2.22)$$

avec :

$$\psi(s,u,t) = \sum_{lmn} c_{lmn} \, | \, lmn > \,$$

où

$$| \, lmn > = \exp(-s/2) \, s^l \, u^m \, t^n \, . \qquad (2.23)$$

Les coefficients c_{lmn} ainsi que le facteur d'échelle k seront déterminés de façon

variationnelle en fonction de σ. Nous nous limitons aux valeurs paires de n, puisque la fonction d'onde choisie ϕ (s, u, t) est symétrique quant à l'échange des deux électrons. $\mathcal{N}$ désigne la constante de normation qui satisfait à la condition :

$$< \phi (s,u,t) \mid \phi (s,u,t) > = \int dS \, \phi^* \, \phi = 1, \qquad (2.24)$$

où l'intégration porte à la fois sur les coordonnées elliptiques (s, u, t), ainsi que les deux angles qui orientent le triangle (eeh) dans le plan. Il est facile de vérifier que l'élément de surface dS s'écrit :

$$dS = \frac{\pi u(s^2 - t^2) \, ds \, du \, dt}{\sqrt{(s^2 - u^2)(u^2 - t^2)}} . \qquad (2.25)$$

L'énergie moyenne du trion négatif s'obtient en réalisant la condition :

$$E = \frac{< \psi \mid H \mid \psi >}{< \psi \mid \psi >} = \min , \qquad (2.26)$$

où :

$$E = \frac{\int \psi^* (ks, ku, kt) [T + V] \psi (ks, ku, kt) \, dS}{\int \mid \psi (ks, ku, kt) \mid^2 dS} . \qquad (2.27)$$

Nous remarquons que les opérateurs énergie cinétique T et potentielle V, obéissent aux relations suivantes :

$$T (s,u,t) = k^2 \, T (ks, ku, kt)$$

$$V (s,u,t) = k \, V (ks, ku, kt). \qquad (2.28)$$

L'énergie moyenne à minimiser par rapport aux paramètres k et c_{lmn} s'écrit alors :

$$E = \frac{k^2 M - kL}{N} , \qquad (2.29)$$

où M, L et N sont des formes quadratiques relatives aux opérateurs énergie cinétique, énergie potentielle et au facteur de normation qui ne dépendent plus du facteur

d'échelle k. Elles s'écrivent :

$$M = c^{\dagger}\, T\, c$$

$$L = -\, c^{\dagger}\, V\, c$$

$$N = c^{\dagger}\, S\, c\,. \qquad (2.30)$$

$c^{\dagger}$ représente la transposée de la matrice colonne formée par les coefficients c_{lmn} . Les matrices T et V correspondent à la représentation des opérateurs énergie cinétique et potentielle dans la base de vecteurs $|\, lmn >$. S désigne la matrice de normation. Leurs éléments s'écrivent :

$$T_{lmn}^{l'm'n'} = < l'm'n' \,|\, T \,|\, lmn >$$

$$V_{lmn}^{l'm'n'} = < l'm'n' \,|\, V \,|\, lmn >$$

$$S_{lmn}^{l'm'n'} = < l'm'n' \,|\, lmn >\,. \qquad (2.31)$$

Tous les éléments de matrice dépendent d'une intégrale notée $J_{lmn}^{l'm'n'}$. En introduisant les notations $i \equiv (\, lmn\,)$ et $j \equiv (\, l'm'n'\,)$, cette dernière s'écrit :

$$J_i^j(\lambda,\mu,\nu) = 2\pi \int_0^{\infty} \exp(-ks)\, s^{l+l'+\lambda}\, ds \int_0^{s} \frac{u^{m+m'+\mu}}{\sqrt{s^2-u^2}}\, du \int_0^{u} \frac{t^{n+n'+\nu}}{\sqrt{u^2-t^2}}\, dt$$

$$= \frac{2\pi[\, l+l'+\lambda+m+m'+\mu+n+n'+\nu\,]!}{k^{l+l'+\lambda+m+m'+\mu+n+n'+\nu+1}}\, I_{m+m'+\mu+n+n'+\nu}\, I_{n+n'+\nu}\,, \qquad (2.32)$$

où

$$I_{2n} = \frac{\pi(2n!)}{(n!)^2\, 2^{2n+1}} \quad \text{et} \quad I_{2n+1} = \frac{(n!)^2\, 2^{2n}}{(2n+1)!}\,. \qquad (2.33)$$

Les éléments de matrice s'écrivent alors :

$$T_{lmn}^{l'm'n'} = \frac{k^2}{4}\left[J_i^j (0,1,2) - J_i^j (2,1,0) \right]$$

$$+k (l + m + 1) J_i^j (1,1,0) - kl J_i^j (-1,1,2)$$

$$+l (l - 1) J_i^j (-2,1,2) + (n - 1) (n + l + 2m + 1) J_i^j (0,1,0)$$

$$-n (n - 1) J_i^j (2,1,-2) + m (m + 2l) J_i^j (0,-1,2)$$

$$-m (m + 2n) J_i^j (2,-1,0) - mk J_i^j (1,-1,2)$$

$$+\sigma \frac{k^2}{2}\left[J_i^j (0,3,0) - (2,1,0) \right]$$

$$+\sigma k (2l + 1) J_i^j (1,1,0) - 2\sigma kl J_i^j (-1,3,0)$$

$$+2\sigma l (l - 1) J_i^j (-2,3,0) + 2\sigma (n^2 - l^2) J_i^j (0,1,0)$$

$$-2\sigma n (n - 1) J_i^j (0,3,-2)$$

$$V_{lmn}^{l'm'n'} = J_i^j (2,0,0) J_i^j (0,0,2) - 4 J_i^j (1,1,0)$$

$$S_{lmn}^{l'm'n'} = J_i^j (2,1,0) - J_i^j (0,1,2) . \qquad (2.34)$$

Nous réalisons la condition (2.26) en minimisant l'expression (2.29) par rapport aux paramètres variationnels c_{lmn} et le facteur d'échelle k :

$$\frac{\partial E}{\partial k} = 0 ; \qquad \frac{\partial E}{\partial c_{lmn}} = 0 . \qquad (2.35)$$

La première condition conduit à :

$$k = \frac{L}{2M} .$$

(2.36).

En reportant cette expression dans (2.29), nous obtenons :

$$E = - \frac{L^2}{4MN} = - k^2 \frac{M}{N}. \qquad (2.37)$$

La deuxième condition s'écrit :

$$k^2 \frac{\partial M}{\partial c_{lmn}} - k \frac{\partial L}{\partial c_{lmn}} - E \frac{\partial N}{\partial c_{lmn}} = 0 . \qquad (2.38)$$

Compte tenu de l'expression des formes quadratiques M, L et N, nous obtenons finalement le système d'équations linéaires relatif aux coefficients c_{lmn} :

$$[k^2 T + k V - E S] c = 0 , \qquad (2.39)$$

dont la résolution sera discutée au paragraphe suivant.

II.4 RESULTATS NUMERIQUES ET DISCUSSION

II.4.1 Méthode de calcul

Nous avons résolu l'équation (2.39) par une méthode itérative originale à convergence rapide qui évite la détermination numérique du paramètre variationnel non linéaire k. Le processus itératif est contrôlé par l'utilisation du théorème du viriel, ce qui assure la conformité des résultats avec les principes fondamentaux de la mécanique quantique.

Le point de départ des itérations est relatif à la situation asymptotique où les trois particules constituantes du trion sont éloignées à l'infini. Dans cette situation, la fonction enveloppe tend vers sa limite asymptotique Φ_{as} :

$$\Phi_{as} \simeq \lim (r_{1h\to\infty} , r_{2h\to\infty}) \phi (s,u,t) \simeq \exp (- ks/2) . \qquad (2.40)$$

L'Hamiltonien asymptotique s'écrit :

$$H_{as} (\sigma) \simeq - [(1 + \sigma) (\partial^2_s + \partial^2_t) + \partial^2_u + \partial^2_{su} - \partial^2_{tu}] . \qquad (2.41)$$

L'énergie totale du système asymptotique s'obtient par résolution de l'équation :

$$H_{as} (\sigma) \mid \Phi_{as} > = E \mid \Phi_{as} > , \qquad (2.42)$$

où

$$E = - k^2 \phi_{as} (\sigma), \qquad (2.43)$$

avec

$$\phi_{as} (\sigma) = \frac{1 + \sigma}{4} . \qquad (2.44)$$

Compte tenu de la relation (2.37), la fonction ϕ_{as} (σ) constitue la limite asymptotique de l'expression :

$$\phi (\sigma) = \frac{M}{N} . \qquad (2.45)$$

Dans tous les cas (asymptotique et non asymptotique), le système (2.39) pourra s'écrire sous la forme :

$$[\, k\,(\, T + \phi\,(\,\sigma\,)\, S\,)\, + V\,]\, c = 0. \qquad (\,2.46\,)$$

La détermination de l'énergie minimale est maintenant ramenée à celle de la plus grande valeur propre positive k. Partant de l'approximation asymptotique (2.44), nous déterminons les premières valeurs de k ainsi que des coefficients c_{lmn}. Ces derniers nous permettent de déterminer les valeurs des formes quadratiques M, L et N et d'obtenir une expression améliorée de la fonction $\phi\,(\,\sigma\,)$ en utilisant la relation (2.45). Cette fonction servira de point de départ à une nouvelle itération. Lorsque la précision souhaitée est atteinte, l'énergie minimale est obtenue à partir de la relation (2.37).

Dans la présente étude, nous avons utilisé une fonction d'onde à 22 termes, définis par la condition :

$$l + m + n \leq 4\,, \qquad (\,2.47\,)$$

où les entiers l, m et n sont positifs ou nuls. Ce développement est suffisant pour assurer une précision de quatre chiffres significatifs pour les valeurs propres. Finalement l'énergie de liaison du trion X^- s'écrit :

$$W_{X^-} = E_{X^-} - E_X\,, \qquad (\,2.48\,)$$

où E_X est l'énergie de l'exciton dans un milieu bidimensionnel. Nous en déduisons l'expression de l'énergie de liaison du trion chargé positivement en utilisant les relations (2.6) et (2.48). Elle s'écrit :

$$W_{X_2^+}\,(\,\sigma\,) = \sigma^{-1}\, W_{X^-}\,(\,\sigma^{-1}\,)\,. \qquad (\,2.49\,)$$

II.4.2 Résultats numériques et conclusion

Nous avons calculé les énergies des trions négatifs 2D et 3D avec la même fonction d'onde variationnelle à 22 termes, qui nous assure une précision de quatre chiffres significatifs. Les calculs du trion 3D ont été effectués en utilisant la procédure mise au point par MUNSCHY et STEBE (1974). Un nombre d'itérations compris entre 10 et 50 s'est révélé suffisant pour obtenir la précision souhaitée. Les énergies des trions positifs ont été obtenues à partir de celles des trions négatifs en utilisant les relations (2.6) et (2.49).

Dans les figures 2.1 et 2.2 nous comparons les variations des énergies totales des trions négatifs et positifs en fonction des rapports de masses effectives σ variant entre 0 et 1 dans les cas 2D et 3D. Les valeurs correspondant à d'autres valeurs de σ peuvent être obtenues en utilisant la relation (2.6). Toutes les énergies sont exprimées dans nos unités "atomiques", égales à deux fois l'énergie de l'état fondamental d'un donneur hydrogénoïde à trois dimensions.

Nous remarquons que dans tous les cas les énergies totales restent négatives prouvant ainsi l'existence d'au moins un état lié quelle que soit la valeur de σ. De plus, les fonctions E (σ) sont toujours croissantes en accord avec nos conclusions du paragraphe II.2.

Il apparaît également que les valeurs absolues des énergies 2D sont toujours plus grandes que les énergies 3D par suite des effets de confinement qui augmentent l'interaction coulombienne. Cet effet devient d'autant plus marqué que le rapport des masses tend vers zéro.

Dans les figures 2.3 et 2.4 nous avons comparé les variations des énergies des trions négatifs et positifs dans les mêmes conditions que ci-dessus. Nous en déduisons que dans tous les cas, les valeurs absolues des énergies totales du trion X^- 2D sont inférieures à celles du trion X_2^+.

Nous rappelons que dans les cas particuliers où $\sigma = 0$, les trions négatifs et positifs deviennent analogues respectivement à l'ion hydrogène H^- et à la molécule

d'hydrogène ionisée H_2^+ . Lorsque $\sigma = 1$, ils deviennent analogues aux complexes polyéléctroniques (e^+, e^-, e^-) et (e^+, e^+, e^-).

Pour le cas 3D nous obtenons, avec notre fonction d'onde à 22 termes, des énergies $E_{X^-} = -0{,}5277$ pour $\sigma = 0$ et $E_{X^-} = E_{X_2^+} = -0{,}2619$ pour $\sigma = 1$, comparables à celles (-0,5277 et -0,2620) obtenues par STEBE et MUNSCHY (1975) avec la même fonction d'onde à 34 termes mais en utilisant seulement quatre itérations (au lieu de 50) dans le processus variationnel. Ces valeurs sont en excellent accord avec celles obtenues par PEKERIS (1962) et FROST (1964) : -0,5277510 et -0,2620011 pour H^- et (e^+, e^-, e^-) respectivement. Lorsque σ tend vers zéro, nos valeurs pour X_2^+ deviennent moins précises. En effet, dans ce cas limite, notre fonction d'onde de type atomique devient moins bien adaptée. Des résultats plus précis peuvent être obtenus avec une fonction d'onde de type moléculaire (MUNSCHY et STEBE, 1975).

Dans le cas 2D, nous obtenons pour le trion négatif les énergies - 2,2400 et - 1,1214 pour les rapports de masses $\sigma = 0$ et $\sigma = 1$ respectivement. Ces valeurs correspondent comme ci-dessus aux énergies de H^- et (e^+, e^-, e^-). Nous ne disposons pas, pour cette limite bidimensionnelle, de valeurs de références en provenance de la physique atomique ou moléculaire.

Dans la figure 2.5 nous avons reporté les variations en fonction de σ du facteur d'échelle k. Nous constatons qu'il est toujours plus important à 2D qu'à 3D. Ceci traduit le fait que les effets de confinement ont tendance à réduire les orbitales. Dans la figure 2.6, nous avons reporté dans les mêmes conditions les variations des énergies de liaison obtenues à partir des énergies totales en utilisant les relations (2.48) et (2.49). Nous constatons qu'elles sont négatives pour toute valeur de σ, prouvant ainsi la stabilité des trions excitoniques 2D et 3D. Par contre, il apparaît que les trions 2D sont plus stables que les trions 3D. En effet, d'après la figure 2.6 :

$$W^{2D}_{X^- \text{ ou } X_2^+} \simeq 10\, W^{3D}_{X^- \text{ ou } X_2^+} \qquad (2.50)$$

Ce résultat est lié au confinement "géométrique" résultant du passage de la situation 3D au cas strictement 2D. Par ailleurs, à 2D comme à 3D, le trion positif est toujours plus stable que le trion négatif. Ces conclusions sont en accord avec celles résultant des premiers calculs de BOBRYSHEVA et al. (1981 , 1983), effectués avec une fonction à trois termes. Nos résultats, plus précis, nous permetterons au chapitre IV, l'étude des propriétés optiques des trions avec ou sans champ magnétique.

Ces résultats peuvent être très importants en pratique. En effet, à 3D, les trions excitoniques, bien que stables, sont caractérisés par des énergies de liaison relativement faibles. Dans ce cas, leur observation expérimentale n'est possible qu'à très basse température, ce qui limite quelque peu leur intérêt pratique. L'augmentation de l'énergie de liaison des trions en surface, nous laisse prévoir des conditions d'observations expérimentales plus favorables à température ambiante dans les semiconducteurs bidimensionnels. Cette conclusion reste valable dans les super-réseaux semiconducteurs pour lesquels les énergies de liaison sont en général comprises entre les valeurs limites relatives aux cas strictement tri-et bidimensionnels.

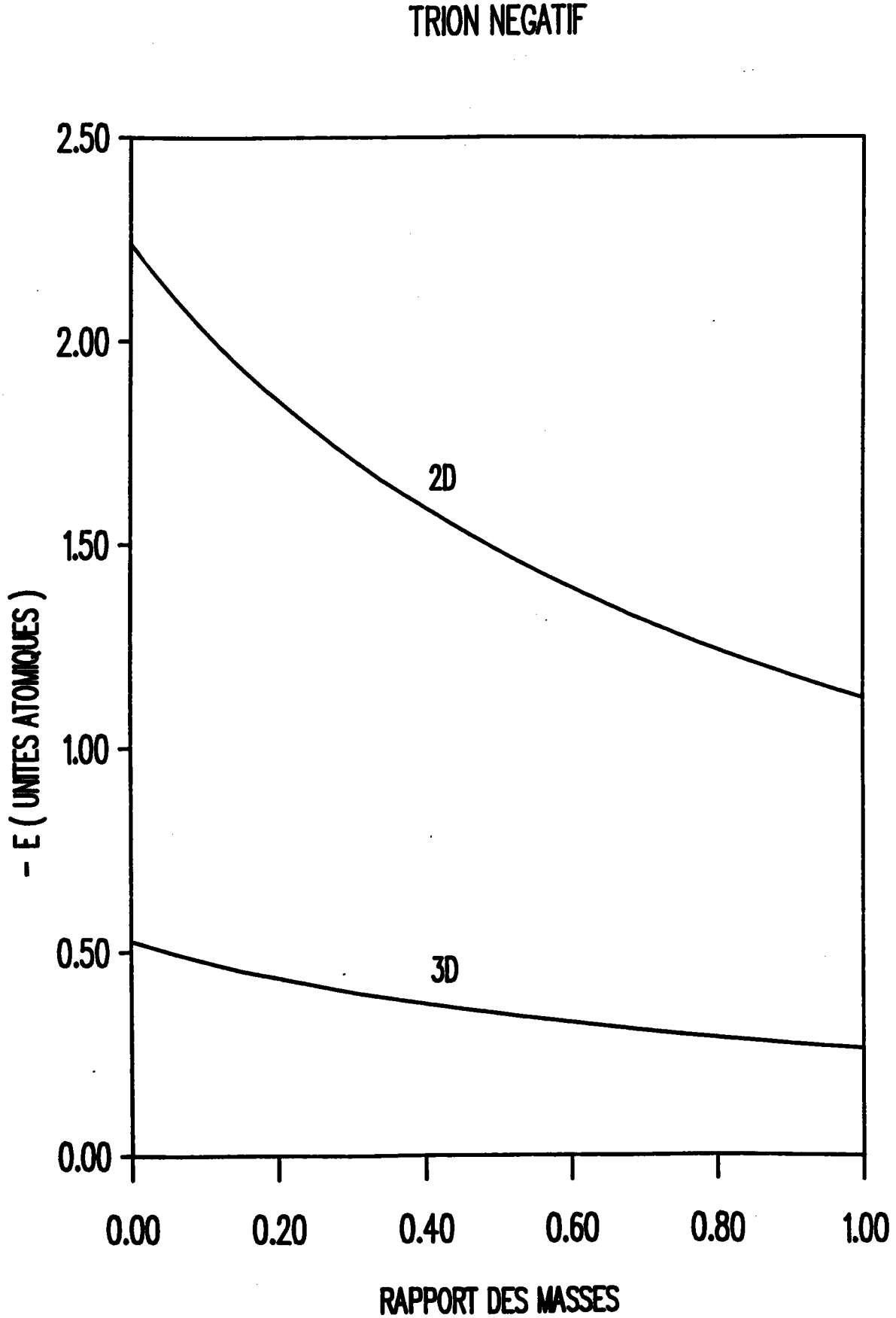


Fig. 2.1 : Comparaison des variations des énergies totales du trion négatif X^- en fonction des rapports de masses effectives σ dans les milieux 2D et 3D.

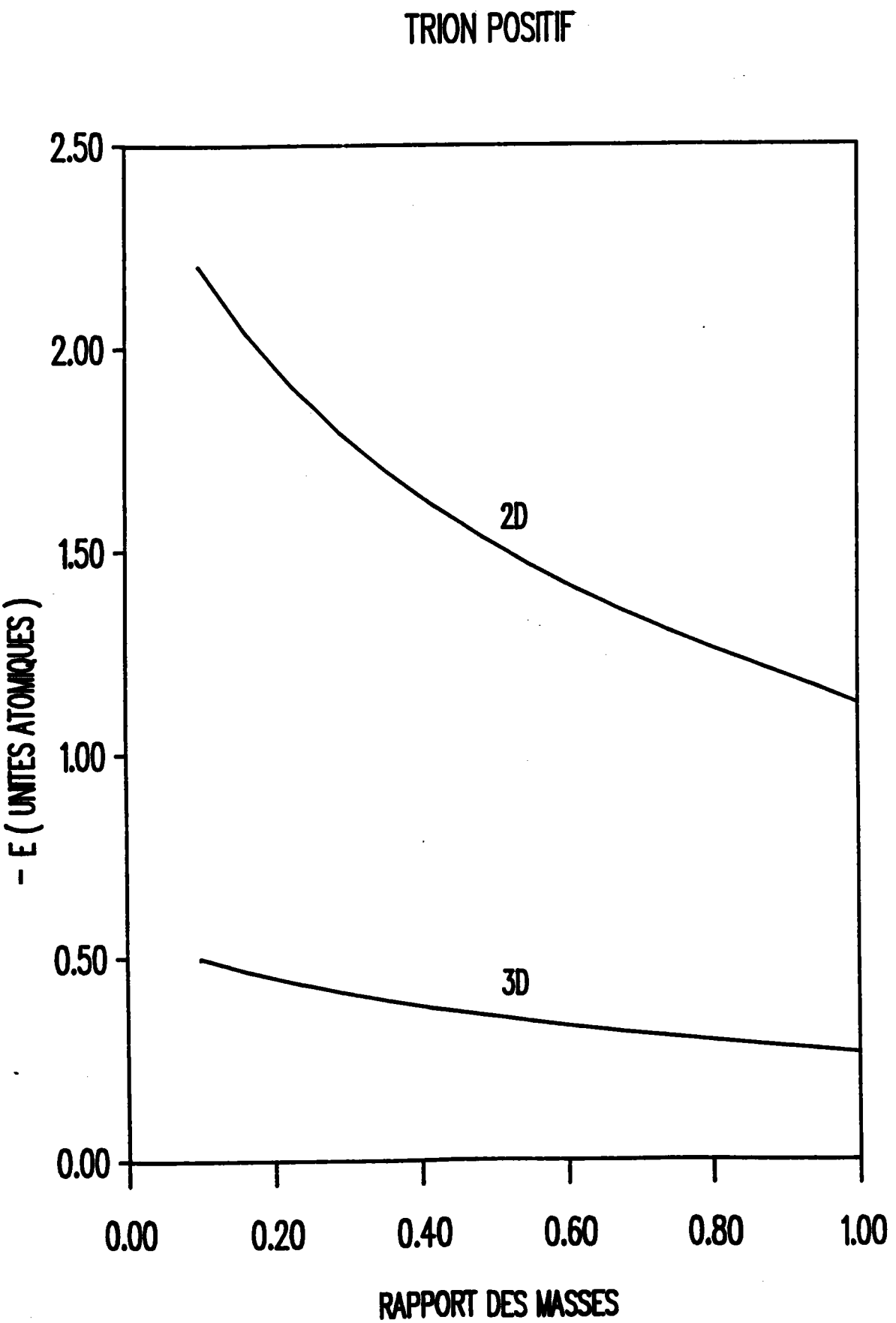


Fig. 2.2 : Comparaison des variations des énergies totales du trion positif X_2^+ en fonction des rapports de masses effectives σ dans les semiconducteurs 2D et 3D.

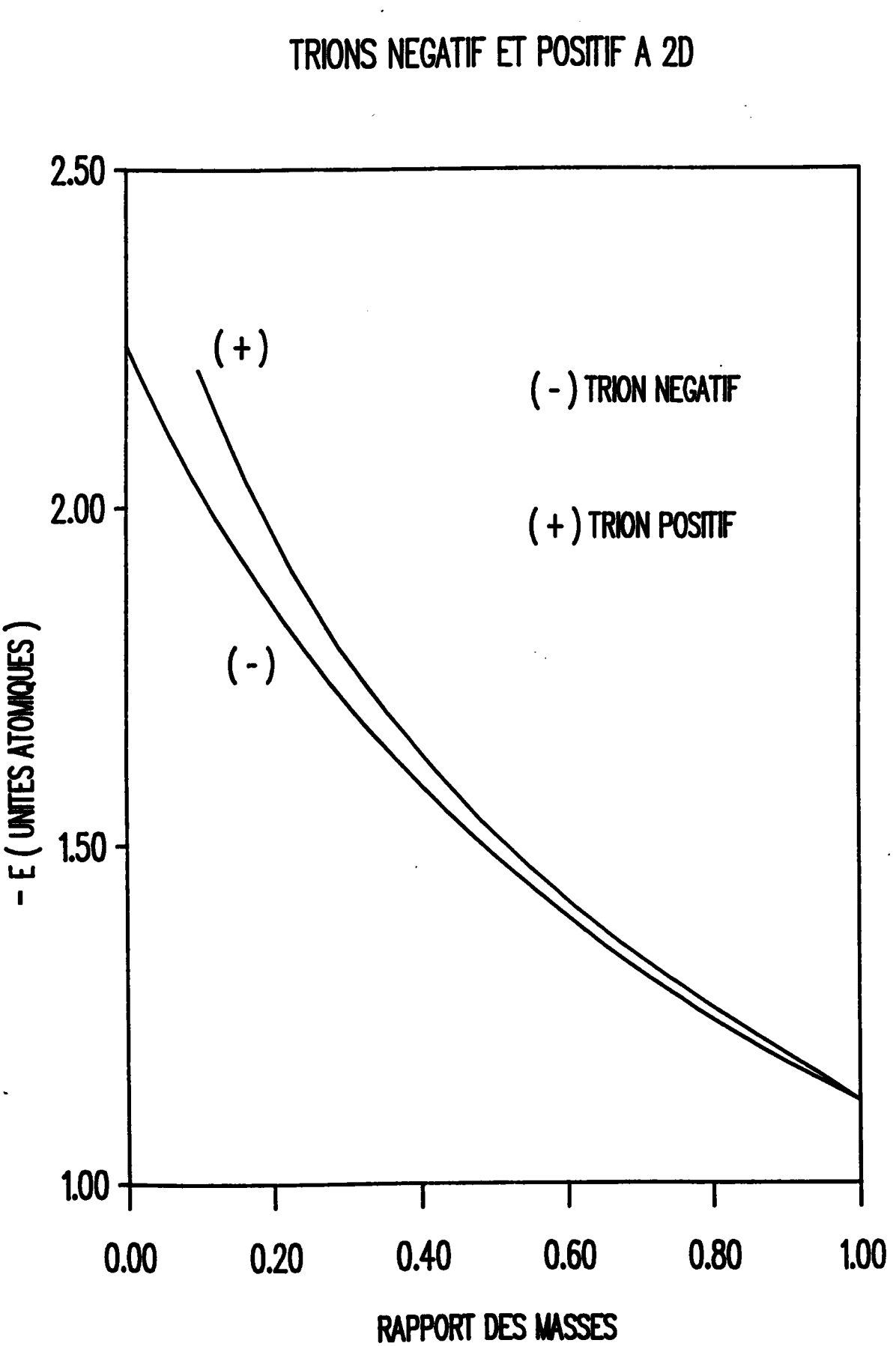


Fig. 2.3 : Comparaison des variations des énergies totales des trions négatifs et positifs (X^- , X_2^+) en fonction des rapports de masses effectives σ à 2D.

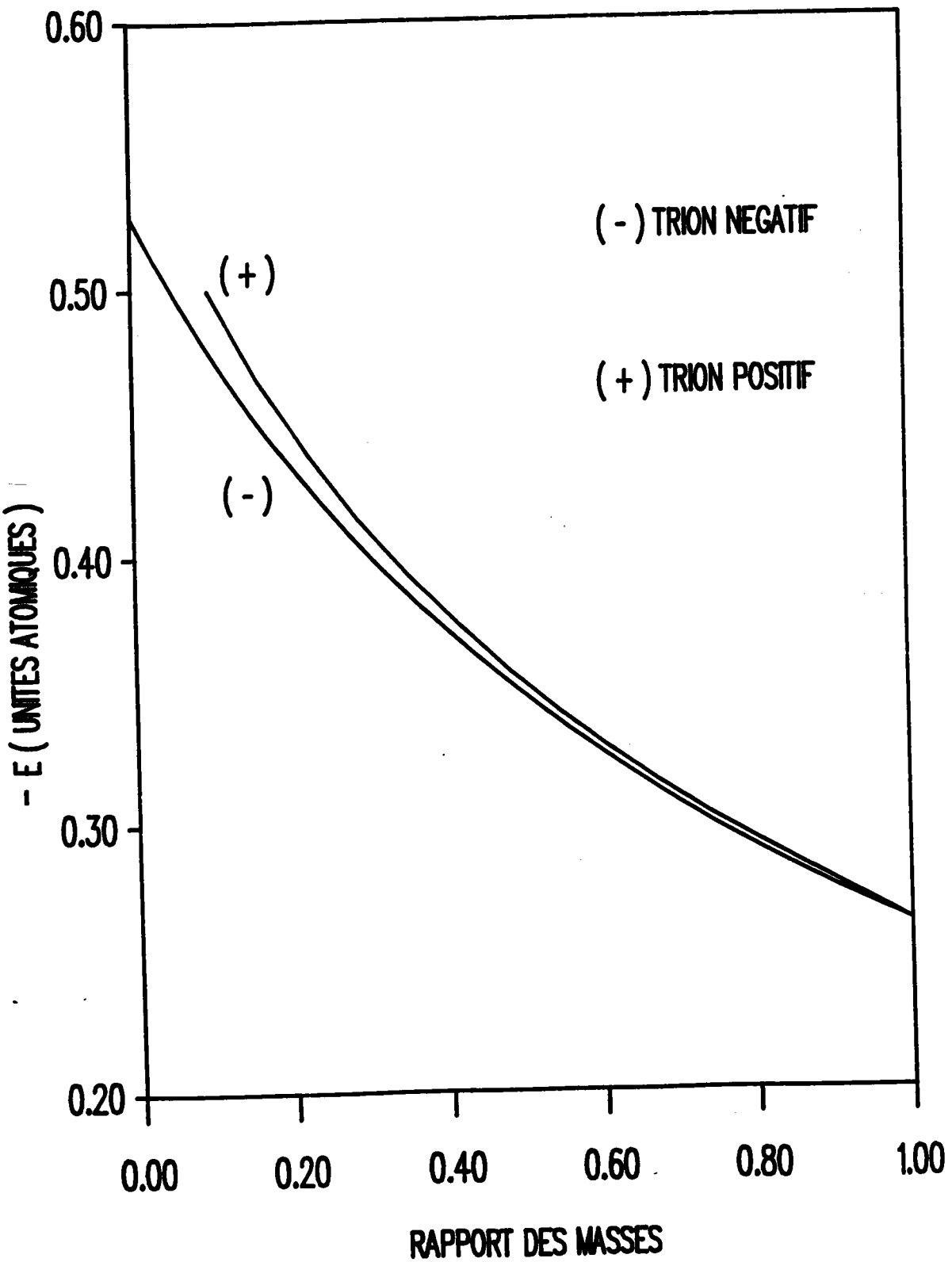


Fig. 2.4 : Comparaison des variations des énergies totales des trions négatifs et positifs (X^- , X_2^+) en fonction des rapports de masses effectives σ à 3D.

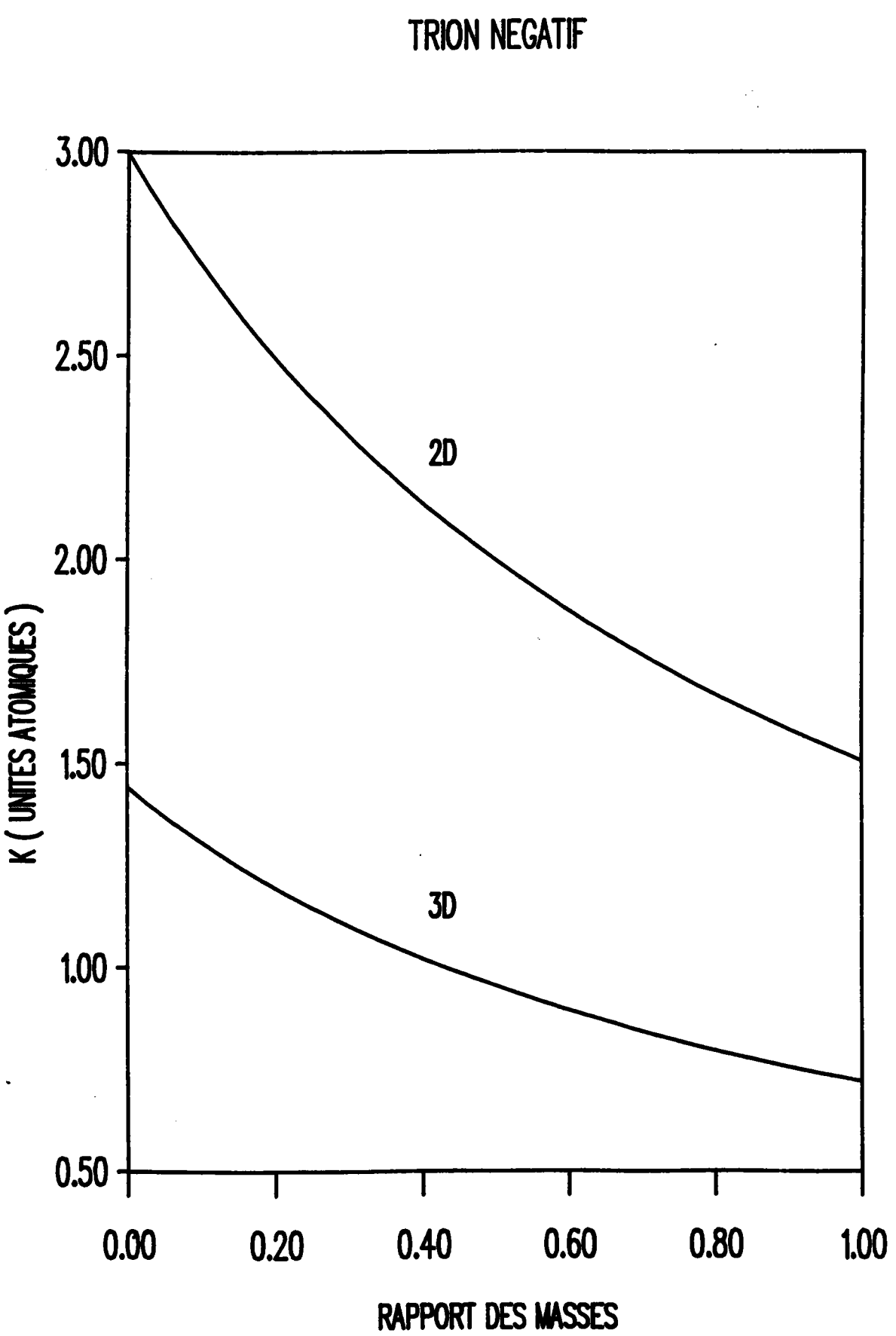


Fig. 2.5 : Variation du facteur d'échelle k en fonction des rapports de masses effectives σ à 2D et à 3D.

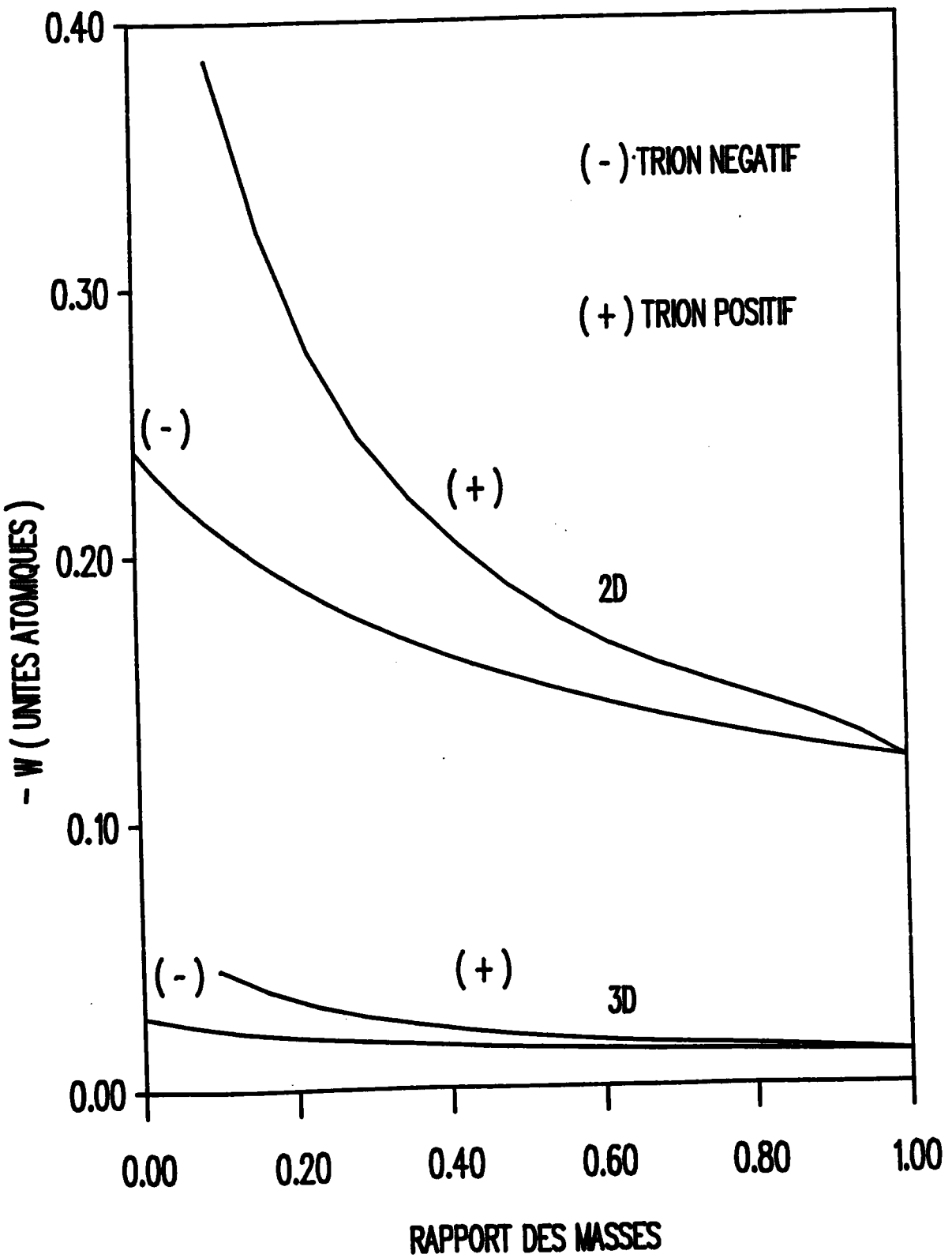


Fig. 2.6 : Comparaison des variations des énergies de liaison des trions négatifs et positifs (X^- , X_2^+) en fonction des rapports de masses effectives σ à 2D et à 3D.

CHAPITRE III

ENERGIE DES EXCITONS CHARGES DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE

III.1 INTRODUCTION

III.2 PROPRIETES DE L'HAMILTONIEN EFFECTIF

III.2.1 Hamiltonien effectif dans l'approximation de la masse effective

III.2.2 Transformation canonique de l'Hamiltonien effectif

III.3 ENERGIE DE L'ETAT FONDAMENTAL DANS L'APPROXIMATION ADIABATIQUE

III.3.1 Approximation adiabatique

III.3.2 Fonction d'onde variationnelle pour le mouvement relatif

III.3.3 Energie relative de l'état fondamental

III.4 RESULTATS NUMERIQUES ET DISCUSSION

CHAPITRE III

ENERGIE DES EXCITONS CHARGES DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS EN PRESENCE D'UN CHAMP MAGNETIQUE

III.1 INTRODUCTION

Dans ce qui précède, nous n'avons pas encore exploité le fait que les trions peuvent être assimilés à des quasi-particules chargées et mobiles. Dans ce chapitre nous allons montrer comment, sous l'action d'un champ magnétique uniforme pas trop élevé, les trions peuvent se comporter comme de simples particules libres et chargées dont les énergies sont décomposées en niveaux de Landau. Cet effet peut être mis à profit pour distinguer les trions des autres complexes excitoniques, qui, sous l'action du champ magnétique, ne présentent qu'un effet diamagnétique (ou Zeeman si les effets de spin sont pris en compte). Ces derniers effets apparaissent également dans le cas des trions. Ils sont dûs à l'action du champ magnétique sur le mouvement relatif. Ils conduisent à une augmentation de l'interaction coulombienne avec l'intensité du champ.

En principe, le mouvement du centre de masse chargé des trions ne peut être découplé du mouvement relatif que dans la limite d'un champ tendant vers zéro. Nous allons montrer que dans le cas de champs effectifs pas trop élevés, ces deux mouvements peuvent encore être séparés dans le cadre d'une approximation de type adiabatique. Dans ces conditions les trions se comportent comme des particules chargées dotées d'une structure interne.

Dans le cas des milieux bidimensionnels, l'action d'un champ magnétique présente quelques particularités qui n'apparaissent pas dans les milieux tridimensionnels. En particulier, il est nécessaire de tenir compte de l'orientation du champ par rapport à la surface. Dans le cas d'un champ perpendiculaire à cette dernière, les effets de quantification dans le plan sont analogues à ceux observés à trois dimensions. Par contre, du fait de l'absence de mouvement dans la direction du champ, il y a confinement total dans les milieux 2D. Dans le cas d'un champ parallèle au plan, le mouvement du centre de masse reste libre dans la direction du champ, et devient quantifié dans la direction perpendiculaire. Pour des orientations quelconques, la situation est intermédiaire entre ces deux limites.

Au paragraphe suivant, nous étudions tout d'abord quelques propriétés générales de l'Hamiltonien du système écrit dans le cadre de l'approximation de la masse effective, et mettons en évidence ses constantes du mouvement. Ces dernières nous permettrons d'établir une transformation canonique dont l'action sur l'Hamiltonien initial conduira à un nouvel Hamiltonien effectif. Dans ce dernier interviendront en particulier les contributions du mouvement du centre de masse et du mouvement relatif ainsi qu'un terme de couplage entre ces derniers.

Au paragraphe III.3, nous déterminons l'énergie de l'état fondamental dans l'approximation adiabatique. L'énergie du mouvement relatif est calculée de façon variationnelle en fonction du champ effectif ainsi que du rapport des masses effectives en utilisant les mêmes procédure et fonction d'onde que celles utilisées au chapitre précédent. La fonction d'onde de type HYLLERAAS (1929), bien que de symétrie sphérique, constitue une bonne approximation dans le domaine de validité de l'approximation adiabatique, c'est-à-dire pour des champs suffisamment faibles.

Enfin, nous présentons et discutons nos résultats et les comparons avec ceux obtenus dans le cas 3D (STEBE et FEDDI 1987).

III.2 PROPRIETES DE L'HAMILTONIEN EFFECTIF

III.2.1 Hamiltonien effectif dans l'approximation de la masse effective

En suivant la procédure développée au chapitre I pour caractériser les états propres du trion chargé négativement, nous allons résoudre l'équation de Schrödinger effective donnée par la relation (1.54). Dans ce qui suit, nous nous plaçons dans l'approximation de la masse effective et nous négligeons les interactions dues au spin. De plus, nous supposons que le milieu est non magnétique.

En choisissant une jauge de coulomb symétrique, l'Hamiltonien effectif s'écrit :

$$H = 1/2m_e^* (p_1 + e/c\, A_1)^2 + 1/2m_e^* (p_2 + e/c\, A_2)^2 + 1/2m_h^* (p_h - e/c\, A_h)^2 + V_c \qquad (3.1)$$

où les potentiels vecteurs A_i des électrons et du trou s'expriment en fonction du champ magnétique $\mathcal{H}$, supposé uniforme :

$$A (r_i) = \frac{1}{2} \mathcal{H} \times r_i \, . \qquad (3.2)$$

Dans le cas des semiconducteurs quasi-bidimensionnels, l'expression de l'Hamiltonien dépend de l'orientation du champ magnétique par rapport au plan du semiconducteur. Cette situation ne se présente pas dans les semiconducteurs tridimensionnels isotropes. Dans ce qui suit, nous étudierons plus particulièrement les deux cas limites correspondant soit à une orientation suivant la direction perpendiculaire au plan : $\mathcal{H} \equiv (0,0,\mathcal{H})$, soit à une orientation parallèle à ce dernier : $\mathcal{H} \equiv (\mathcal{H},0,0)$.

Dans ces deux cas, le potentiel vecteur (3.2) s'écrit explicitement :

$$A(r_i) = \frac{\mathcal{H}}{2}(-y_i, x_i, 0) \quad (\mathcal{H} \text{ perpendiculaire au plan})$$

$$= \frac{\mathcal{H}}{2}(0, 0, y_i). \quad (\mathcal{H} \text{ parallèle au plan}) \qquad (3.3)$$

L'interaction entre les trois particules est toujours modélisée par un potentiel coulombien écranté par une constante diélectrique ϵ introduite de manière quelque peu phénoménologique :

$$V_c = \frac{e^2}{\epsilon}\left[\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1h}} - \frac{1}{r_{2h}}\right]. \qquad (3.4)$$

Nous transformons l'Hamiltonien (3.1), en utilisant les coordonnées relatives et du centre de masse définies par :

$$r = r_1 - r_2$$

$$R = \frac{r_1 + r_2}{2} - r_h$$

$$R_0 = \frac{m_e^* r_1 + m_e^* r_2 + m_h^* r_h}{2m_e^* + m_h^*}. \qquad (3.5)$$

Dans ces conditions, l'Hamiltonien se décompose en trois termes :

$$H = H_0 + \zeta H_1 + H_2, \qquad (3.6)$$

avec

$\zeta = 1$ ($\mathcal{H}$ per. au plan)

$= 0$ ($\mathcal{H}$ para. au plan)

où

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2M_0}\Delta_{R_0} + V_c\ , \qquad (3.7)$$

$$H_1 = -ie\hbar/cm_e^*\,[\,A(r).\nabla_r + \frac{1-2\sigma^2}{1+2\sigma}A(R).\nabla_R + \frac{2\sigma(1+\sigma)}{(1+2\sigma)^2}A(R).\nabla_{R_0}$$
$$+ (1+\sigma)\,A(R_0).\nabla_R + \frac{\sigma}{1+2\sigma}A(R_0).\nabla_{R_0}\,] \qquad (3.8)$$

et

$$H_2 = e^2/2c^2m_e^*\,[\,\frac{1}{2}A^2(r) + 2\,\frac{1+2\sigma^3}{(1+2\sigma)^2}A^2(R)$$
$$+ (2+\sigma)\,A^2(R_0) + 4\,\frac{1-\sigma^2}{1+2\sigma}A(R).A(R_0)\,]\ , \qquad (3.9)$$

avec

$$\mu = \frac{m_e^*}{2}\ , \qquad M = \frac{2m_e^*\,m_h^*}{2m_e^* + m_h^*}\ ,$$

$$M_0 = 2m_e^* + m_h^*\ , \qquad \sigma = \frac{m_e^*}{m_h^*}\ . \qquad (3.10)$$

Il est facile de vérifier que l'opérateur quantité de mouvement du centre de masse $P_0 = -i\hbar\,\nabla_{R_0}$ ne commute pas avec l'Hamiltonien, par suite de la présence des termes faisant intervenir $A(R_0)$. Les mouvements relatif et du centre de masse ne peuvent donc être séparés que dans la limite d'un champ magnétique nul. Dans le cas particulier où le champ magnétique est parallèle au plan, le mouvement du centre de masse dans la direction du champ reste libre et peut être séparé du mouvement relatif. Aucune séparation n'est possible dans le cas général.

Par contre, il apparaît que l'opérateur:

$$\pi = p_1 + p_2 + p_h - \frac{e}{c}\,[\,A(r_1) + A(r_2) - A_h(r_h)\,]\ , \qquad (3.11)$$

que nous pouvons encore réécrire en fonction des coordonnées r, R et R_0 définies

par la relation (3.5) :

$$\pi = -i\hbar\,\nabla_{R_0} - \frac{e}{c}\left[2\,\frac{1+\sigma}{1+2\sigma}\,A(R) + A(R_0)\right], \qquad (3.12)$$

commute avec l'Hamiltonien, c'est à dire que $[\,\pi_x\,,\,H\,] = [\,\pi_y\,,\,H\,] = 0$, bien que ses composantes π_x et π_y ne commutent pas entre elles.

De plus, lorsque le champ magnétique est parallèle au plan et orienté selon l'axe des x, la composante π_x est confondue avec la composante P_{0x} de l'opérateur quantité de mouvement du centre de masse. Dans ce cas particulier, les deux composantes π_x et π_y commutent.

Dans le cas général, il existe donc toujours une base commune de fonctions propres à π_x et H ou à π_y et H. Dans ce qui suit, nous déterminerons la base commune à H et à π_x , où π_x s'écrit :

$$\pi_x = -i\hbar\,\partial_{X_0} + \frac{e\mathcal{H}}{2c}\left[2\,\frac{1+\sigma}{1+2\sigma}\,Y + Y_0\right]. \qquad (3.13)$$

III.2.2 Transformation canonique de l'Hamiltonien effectif

Compte tenu de ce qui précède, il nous est possible de transformer l'Hamiltonien effectif en une expression qui ne contient plus la coordonnée X_0 du centre de masse. En effet, comme les opérateurs π_x et H commutent, la fonction d'onde enveloppe $\phi_{X^-}(r, R, R_0)$ est solution de l'équation différentielle du premier ordre :

$$\pi_x\,\phi_{X^-}(r, R, R_0) = \hbar K_x\,\phi_{X^-}(r, R, R_0), \qquad (3.14)$$

dont la résolution conduit à :

$$\phi_{X^-}(r,R,R_0) = U\,\Phi_{X^-}(r,R,Y_0), \qquad (3.15)$$

où l'opérateur unitaire U a pour expression :

$$U = \exp i[\{K + \frac{2e}{c\hbar}\frac{1+\sigma}{1+2\sigma}A(R)\}.R_0 - e\mathcal{H}/2c\hbar\, X_0 Y_0], \qquad (3.16)$$

dans laquelle nous avons introduit le vecteur $K \equiv (K_x, 0)$, (à ne pas confondre avec le vecteur d'onde K_0 du centre de masse en l'absence de champ magnétique).

L'opérateur U peut être assimilé à une transformation canonique conservant la norme et le produit scalaire. Nous l'utiliserons par la suite pour obtenir une nouvelle expression plus simple de l'Hamiltonien effectif.

En effet, l'énergie du trion X^- plan en présence du champ magnétique :

$$E = \frac{<\phi_{X^-}(r,R,R_0)\,|\,H\,|\,\phi_{X^-}(r,R,R_0)>}{<\phi_{X^-}(r,R,R_0)\,|\,\phi_{X^-}(r,R,R_0)>}, \qquad (3.17)$$

s'écrit, compte tenu de la transformation unitaire U :

$$E = \frac{<\Phi_{X^-}(r,R,Y_0)\,|\,H'\,|\,\Phi_{X^-}(r,R,Y_0)>}{<\Phi_{X^-}(r,R,Y_0)\,|\,\Phi_{X^-}(r,R,Y_0)>}, \qquad (3.18)$$

où H' désigne l'Hamiltonien transformé, qui s'écrit :

$$H' = U^{-1} H U$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2M_0}\Delta_{R_0} + \frac{\hbar^2}{2M_0}K^2{}_x + V_c$$

$$+ \zeta\{-ie\hbar/cm_e^*[A(r).\nabla_r + \frac{1-2\sigma^2}{1+2\sigma}A(R).\nabla_R +$$

$$+ \frac{4\sigma(1+\sigma)}{(1+2\sigma)^2}A(R).\nabla_{R_0} + \frac{\sigma}{1+2\sigma}(A(R_0) - B(R_0)).\nabla_{R_0}]$$

$$- \frac{i\hbar^2}{m_e^*} \frac{\sigma}{1+2\sigma} K.\nabla_{R_0}$$

$$+ e\hbar/cm_e^* [\frac{4\sigma(1+\sigma)}{(1+2\sigma)^2} K.A(R) + \frac{\sigma}{1+2\sigma} K.(A(R_0) - B(R_0))] \}$$

$$+ e^2/c^2m_e^* [\frac{1}{4} A^2(r) + \frac{4\sigma(1+\sigma)}{(1+2\sigma)^2} A(R).[A(R_0) - B(R_0)]$$

$$+ \frac{\sigma}{1+2\sigma} A(R_0) . [A(R_0) - B(R)] + \lambda(\sigma) A^2(R)] , \qquad (3.19)$$

où

$$B(R_0) = \frac{\mathcal{H}}{2} (Y_0, X_0, 0) \qquad (\mathcal{H} \text{ per. au plan})$$
$$= \frac{\mathcal{H}}{2} (0, 0, -Y_0) \qquad (\mathcal{H} \text{ para. au plan}) , \qquad (3.20)$$

tandis que :

$$\lambda(\sigma) = \frac{1 + 4\sigma(1+\sigma)(2+\sigma+\sigma^2)}{(1+2\sigma)^3} . \qquad (3.21)$$

Nous remarquons que la fonction d'onde transformée $\Phi_{X^-} = U^{-1} \phi_{X^-}$ est indépendante de la coordonnée X_0 du centre de masse. Dans ces conditions, l'application des opérateurs $K.\nabla_R$ et $[A(R_0) - B(R_0)].\nabla_{R_0}$ sur Φ_{X^-} ne donne lieu à aucune contribution. En effet :

$$K.\nabla_{R_0} \Phi_{X^-}(r, R, Y_0) = K_x \partial_{X_0} \Phi_{X^-}(r, R, Y_0) = 0, \qquad (3.22)$$

et

$$[A(R_0) - B(R_0)].\nabla_{R_0} \Phi_{X^-}(r, R, Y_0)$$
$$= -\mathcal{H} Y_0 \partial_{X_0} \Phi_{X^-}(r, R, Y_0) = 0. \qquad (3.23)$$

Finalement, l'Hamiltonien transformé peut s'écrire sous la forme d'une somme de cinq termes :

$$H' = H'_1 + \zeta H'_2 + H'_3 + H'_4 + H'_5 .$$

(3.24)

Le premier correspond au mouvement relatif en l'absence du champ magnétique :

$$H'_1 = H_0^{rel} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R + V_c \,. \qquad (3.25)$$

Le deuxième désigne la contribution due à l'effet Zeeman linéaire en champ, qui s'annule si ce dernier est orienté parallèlement au plan ($\zeta = 0$) :

$$H'_2 = -\frac{i\hbar e}{cm_e^*}\left[A(r).\nabla_r + \frac{1-2\sigma^2}{1+2\sigma} A(R).\nabla_R \right]. \qquad (3.26)$$

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

$$H'_3 = \frac{e^2}{c^2 m_e^*}\left[\frac{1}{4} A^2(r) + \lambda(\sigma) A^2(R) \right]. \qquad (3.27)$$

Le quatrième terme H'_4 traduit l'action du champ magnétique sur le mouvement du centre de masse chargé :

$$H'_4 = -\frac{\hbar^2}{2M_0}\partial^2{Y_0}^2 + \frac{M_0\omega_c^2}{2}\left(Y_0 - \frac{\hbar c}{e\mathcal{H}} K_x \right)^2 \quad (\mathcal{H} \text{ per. au plan})$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2M_0}\partial^2{Y_0}^2 + \frac{M_0\omega_c^2}{2} Y_0^2 + \frac{\hbar^2 K_x^2}{2M_0}. \quad (\mathcal{H} \text{ para. au plan}) \qquad (3.28)$$

Il est analogue à l'Hamiltonien d'un oscillateur harmonique de masse M_0 et de pulsation $\omega_c = e\mathcal{H}/M_0c$ dont les oscillations s'effectuent autour du point $Y_0^0 = \hbar c/e\mathcal{H}\, K_x$ si le champ est orienté perpendiculairement par rapport au plan et autour de l'origine ($Y_0^0 = 0$) si $\mathcal{H}$ est parallèle à la surface semiconductrice. Sa contribution conduit dans les deux cas à décomposer les niveaux d'énergies en niveaux de Landau.

Enfin le cinquième terme :

$$H'_5 = 2\hbar\omega_c \frac{1+\sigma}{1+2\sigma}\left[-iX\partial_{Y_0} + \frac{M_0\omega_c}{\hbar} Y \left(Y_0 - \frac{\hbar c}{e\mathcal{H}} K_x \right) \right] \quad \mathcal{H} \text{ per. au plan}$$

$$= 2M_0\omega_c^2 \frac{1+\sigma}{1+2\sigma} YY_0 \qquad \mathcal{H} \text{ para. au plan .} \qquad (3.29)$$

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

III.3 ENERGIE DE L'ETAT FONDAMENTAL DANS L'APPROXIMATION ADIABATIQUE

III.3.1 Approximation adiabatique

Au paragraphe précédent, nous avons vu, que par suite de la présense du terme de couplage H'_5 (3.29), les mouvements relatif et du centre de masse restaient couplés. Dans ce qui suit, nous allons montrer comment ces mouvements peuvent encore être séparés moyennant certaines approximations.

En effet, nous remarquons que H'_5 dépend du champ magnétique $\mathcal{H}$ et de la masse M_0 du centre de masse de la façon suivante :

$$H'_5 = \frac{\mathcal{H}}{M_0}(a + b\mathcal{H}) \qquad \mathcal{H} \text{ per. au plan}$$

$$H'_5 = c\,\frac{\mathcal{H}^2}{M_0} \qquad \mathcal{H} \text{ para. au plan.} \qquad (3.30)$$

Il en découle que, pour les deux orientations du champ, H'_5 devient négligeable si $\mathcal{H}$ tend vers zéro. Dans ce cas, les mouvements sont totalement séparés.

Pour des valeurs non nulles, mais suffisamment faibles du champ, H'_5 reste malgré tout très faible. En effet H'_5 est inversement proportionnel à la masse du centre de masse M_0 qui est toujours nettement supérieure à celle des particules constituantes.

Dans ce cas, nous pouvons encore séparer les deux mouvements dans l'esprit d'une approximation de type adiabatique basée sur le fait que le mouvement du centre de masse est beaucoup plus lent que celui du mouvement relatif. Dans ces conditions, nous écrivons la fonction d'onde enveloppe $\Phi_{X^-}(r, R, Y_0)$ sous la forme suivante :

$$\Phi_{X^-}(r, R, Y_0) \simeq \phi_{rel}\,\Phi_{CM}\ , \qquad (3.31)$$

ϕ_{rel} désigne la fonction propre, due au mouvement relatif des excitons chargés dans le plan. Elle vérifie l'équation aux valeurs propres suivante :

$$H^{rel}\,\phi_{rel} = E_{rel}\,\phi_{rel}\ , \qquad (3.32.a)$$

où H^{rel} est l'Hamiltonien relatif décrivant l'interaction coulombienne des trions excitoniques, ainsi que les effets linéaires et quadratiques en champ magnétique :

$$H^{rel} = H_0^{rel} + \zeta H'_2 + H'_3\ . \qquad (3.32.b)$$

Par ailleurs, Φ_{CM} représente la fonction d'onde traduisant le mouvement oscillatoire de la charge du centre de masse sous l'action du champ magnétique. Elle satisfait à une équation identique à celle d'un oscillateur harmonique :

$$H'_4\,\Phi_{CM} = E_{CM}\,\Phi_{CM}\ . \qquad (3.33)$$

La résolution de cette équation différentielle du second ordre donne lieu aux énergies des niveaux de Landau, conduisant ainsi à une séparation des niveaux d'énergies des excitons chargés. Nous verrons plus loin que ces énergies augmentent considérablement avec l'intensité du champ magnétique ainsi qu'avec le rapport des masses effectives. Pour les deux orientations du champ, les états propres de l'équation précédente s'écrivent respectivement :

Pour $\mathcal{H}$ perpendiculaire au plan :

$$E_{CM} = E_L^N = \hbar\omega_{CM}\,(N + 1/2)$$

$$\Phi^0_{CM} = \mathcal{A}\,\exp -\frac{e\mathcal{H}}{2\hbar c}\,(Y_0 - \frac{\hbar c}{e\mathcal{H}}\,K_x)^2, \qquad (3.34)$$

où Φ^0_{CM} représente la fonction propre du niveau fondamental.

Pour $\mathscr{K}$ parallèle au plan :

$$E_{CM} = E_L^N + \frac{\hbar^2 K^2_x}{2M_0}$$

$$\Phi^0_{CM} = \mathscr{A} \exp(iK_x X_0) \exp - \frac{e\mathscr{K}}{2\hbar c} Y_0^2. \qquad (3.35)$$

Finalement, l'énergie totale du trion X^- en présence du champ magnétique s'écrit :

$$E = \frac{< \phi_{rel} \mid H_0^{rel} + \zeta H'_2 + H'_3 + E_{CM} \mid \phi_{rel} >}{< \phi_{rel} \mid \phi_{rel} >}, \qquad (3.36)$$

que nous déterminerons par un calcul variationnel.

III.3.2 Fonction d'onde variationnelle pour le mouvement relatif

Pour comparer nos résultats avec ceux obtenus à champ nul, présentés au chapitre précédent, nous utilisons la même fonction d'onde variationnelle de type HYLLERAAS à 22 termes. Mais ici les coefficients et les paramètres variationnels dépendent de l'intensité du champ. Nous rappelons que cette fonction dépend seulement des distances r_{2h} , r_{2h} et r_{12} . Dans ces conditions nous pouvons écrire :

$$\phi_{rel} (r, R) = \Phi (r_{1h} , r_{2h} , r_{12}), \qquad (3.37)$$

soit aussi en utilisant le système de coordonnées elliptiques (s, u, t) défini en (2.20) :

$$\phi (s, u, t) = \Phi (ks, ku, kt) = \sum_{lmn} c_{lmn} \mid lmn >, \qquad (3.38)$$

où

$$\mid lmn > = \exp(- s/2) s^l u^m t^n . \qquad (3.39)$$

l, m et n sont des entiers positifs ou nuls, les paramètres c_{lmn} et le facteur d'échelle k sont déterminés par la méthode variationnelle et sont fonction de l'intensité du champ magnétique.

Le terme Zeeman H'_2 qui intervient pour l'orientation perpendiculaire du champ magnétique, ne donne lieu à aucune contribution à l'énergie totale (3.36), du fait que la fonction d'onde choisie est indépendante des angles qui orientent le trion (eeh) dans le plan.

III.3.3 Energie relative de l'état fondamental

Dans ce qui suit, nous utilisons les unités atomiques pour la longueur $\frac{\epsilon\hbar^2}{m_e^* e^2}$ et l'énergie $\frac{m_e^* e^4}{\epsilon^2\hbar^2} = 2Ry$ définies au chapitre II. Compte tenu des approximations décrites ci-dessus, l'énergie totale moyenne du trion X^- s'écrit :

$$E = E_{rel} + E_{CM} , \qquad (3.40)$$

avec

$$E_{rel} = \frac{< \phi_{rel} \mid H_0^{rel} + H'_3 \mid \phi_{rel} >}{< \phi_{rel} \mid \phi_{rel} >} . \qquad (3.41)$$

tandis que E_{CM} est l'énergie du centre de masse :

$$E_{CM} = E_L^N \qquad \mathscr{H} \text{ per. au plan}$$

$$= E_L^N + \frac{\hbar^2 K_x^2}{2M_0} \qquad \mathscr{H} \text{ para. au plan} , \qquad (3.42)$$

H_0^{rel} est l'Hamiltonien du mouvement relatif sans champ magnétique, transformé en coordonnées elliptiques au chapitre II par la relation (2.21). Le terme diamagnétique H'_3 a pour expression :

$$H'_3 = H_{dia} = \frac{\gamma^2}{4} [\ \frac{1}{4} \rho^2_r + \lambda(\sigma)\, \rho^2_R\ ]\ , \qquad (3.43)$$

où

$$\rho_r = x^2 + y^2 \qquad \mathcal{H} \text{ per. au plan}$$
$$= y^2 \qquad \mathcal{H} \text{ para. au plan}$$

et

$$\rho_R = X^2 + Y^2 \qquad \mathcal{H} \text{ per. au plan}$$
$$= Y^2 \qquad \mathcal{H} \text{ para. au plan} \qquad (3.44)$$

avec :

$$\gamma = \frac{\hbar\omega_c}{2Ry} \quad , \quad \omega_c = \frac{e\mathcal{H}}{m^*_e\, c}\ . \qquad (3.45)$$

Des relations (3.44), il découle que la contributions H_{dia} dépend de l'orientation du champ magnétique. Désignons respectivement par H^{para}_{dia} et H^{per}_{dia} ses expressions pour les directions parallèle et perpendiculaire du champ. Il est facile de vérifier que $H^{para}_{dia} = \frac{1}{2} H^{per}_{dia}$. En particulier :

$$H^{per}_{dia}(s,u,t) = \frac{\gamma^2}{16} [\ u^2 + \lambda(\sigma)\ \{\ s^2 + t^2 - u^2\ \}\ ] = \frac{1}{k^2} H^{per}_{dia}(ks,ku,kt)\ . \qquad (3.46)$$

La valeur moyenne de l'énergie relative (3.41) peut être exprimée en fonction des éléments de matrice de $H'_3 = H_{dia}$, H^{rel}_0 , ainsi que de la norme dans la base de vecteurs $|\ lmn >$. Nous avons déjà déterminé les expressions analytiques des deux derniers au chapitre II. Nous définissons ceux relatifs à H_{dia} par :

$$D^{l'm'n'}_{lmn} = < l'm'n' \mid H^{per}_{dia} \mid lmn >. \qquad (3.47)$$

Ces éléments s'expriment en fonction des intégrales définies en (2.29) et (2.30) . Nous obtenons en particulier dans le cas d'un champ perpendiculaire :

$$D_{lmn}^{l'm'n'} = \frac{\gamma^2}{16} [\, J_i^j(2,3,0) - J_i^j(0,3,2)$$
$$+ \lambda(\sigma) \{ J_i^j(4,1,0) - J_i^j(0,1,4)$$
$$+ J_i^j(0,3,2) - J_i^j(2,3,0) \}]\,. \qquad (3.48)$$

Finalement, la valeur moyenne de l'énergie relative s'écrit :

$$E_{rel} = \frac{k^2M - kL + P/k^2}{N}\,, \qquad (3.49)$$

où nous avons introduit la notation :

$$P = c^{\dagger}\, D\, c, \qquad (3.50)$$

où c désigne la matrice colonne des coefficients c_{lmn} tandis que **D** représente la matrice des éléments $D_{lmn}^{l'm'n'}$.

Le principe variationnel nous conduit à chercher le minimum de l'énergie moyenne (3.49) relatif aux variations des paramètres k et c_{lmn} . Ces derniers doivent par conséquent vérifier les deux relations :

$$\frac{\partial E_{rel}}{\partial k} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial E_{rel}}{\partial c_{lmn}} = 0. \qquad (3.51)$$

La première condition nous conduit à :

$$k^4 - \frac{L}{2M} k^3 - \frac{P}{M} = 0\,, \qquad (3.52.a)$$

d'où :

$$E_{rel} = -\frac{k^2M}{N} + \frac{3P}{k^2N}\,. \qquad (3.52.b)$$

La deuxième condition conduit à un système d'équations linéaires pour les coefficients c_{lmn} :

$$[\, k^2T + kV + D/k^2 - E_{rel}\, S \,]\, c = 0. \qquad (3.53)$$

III.4 RESULTATS NUMERIQUES ET DISCUSSION

La résolution du système (3.53) ci-dessus nous permet de déterminer les énergies E_{rel} ainsi que les paramètres variationnels c_{lmn} et k. Nous utilisons comme point de départ des itérations les valeurs du facteur d'échelle k obtenues à champ nul au chapitre précédent.

Pour k, γ et σ fixés, nous diagonalisons le système (3.53). A partir des coefficients c_{lmn} nous déterminons les formes quadratiques L, M, N et P relatives à la valeur propre fondamentale de (3.53). Ensuite nous déterminons numériquement les racines réelles de l'équation du quatrième degré en k (3.52.a) que nous reportons dans l'équation (3.52.b). Nous conservons la valeur de k qui nous donne la plus petite énergie E_{rel} . Cette valeur de k servira de point de départ à une nouvelle itération, et ainsi de suite jusqu'à l'obtention de la précision souhaitée sur l'énergie.

Dans la figure (3.1), nous représentons les variations en fonction de γ de l'énergie relative (3.41) de l'état fondamental du trion négatif X^- obtenue à l'aide d'une fonction d'onde à 22 termes, pour quelques valeurs du rapport des masses effectives σ. Un nombre maximum de 50 itérations a été nécessaire pour obtenir une précision de quatre chiffres significatifs. Nous comparons nos valeurs 2D aux valeurs 3D que nous avons recalculées à l'aide de la même fonction d'onde à 22 termes en utilisant la procédure mise au point par STEBE, FEDDI et MUNCHY (1986).

Nous remarquons que les valeurs absolues des énergies relatives 2D sont plus grandes que les énergies 3D par suite du confinement dimensionnel. Dans tous les cas l'énergie relative augmente avec le champ magnétique.

$$E_{rel} \text{ (2D)} > E_{rel} \text{ (3D)}$$

et

$$E_{rel} \text{ (} \mathscr{H} \text{ per. au plan)} > E_{rel} \text{ (} \mathscr{H} \text{ para. au plan)}$$

En vue de mettre en evidence l'influence des deux confinements dimensionnel et magnétique sur l'énergie d'interaction coulombienne, il nous faut retrancher de l'énergie relative (3.41) celle des trois particules non interagissantes subissant l'action du champ magnétique.

A cet effet, nous avons représenté dans la figure (3.2), les variations en fonction de γ, pour deux valeurs de σ, de la différence de l'énergie relative E_{rel} et de l'énergie fondamentale E^0_L (eeh) de Landau des trois particules non interagissantes subissant l'influence du champ magnétique.

Nous constatons que les deux confinements dimensionnel et magnétique augmentent l'effet de l'interaction coulombienne. En effet pour γ fixé, $E_{2D} < E_{3D}$. Par ailleurs, dans tous les cas, l'interaction coulombienne augmente avec le champ.

Les résultats que nous venons d'obtenir peuvent aussi trouver leur prolongement en physique atomique. En effet, dans le cas limite où σ tend vers zéro, le trion X^- devient analogue à l'ion hydrogène H^-. Tandis que le trion X_2^+ se réduit à la molecule d'hydrogène ionisée H_2^+. Ainsi le comportement de l'ion H^- en champ magnétique est représenté dans la figure (3.1).

En vue de mettre en evidence l'influence du champ magnétique et du confinement sur le mouvement du centre de masse chargé, nous avons représenté dans les figures (3.3) et (3.4) les variations de l'énergie totale (3.40) du trion X^- en fonction du champ γ, pour deux valeurs de σ. Ces figures nous montrent comment la séparation des niveaux d'énergies du trion négatif à champ nul est obtenue par suite de l'apparition des niveaux de Landau. Nous verrons au chapitre suivant comment cet effet spécifique aux complexes excitoniques chargés est susceptible de donner lieu à une magnéto-absorption oscillatoire permettant de distinguer ces derniers des complexes neutres.

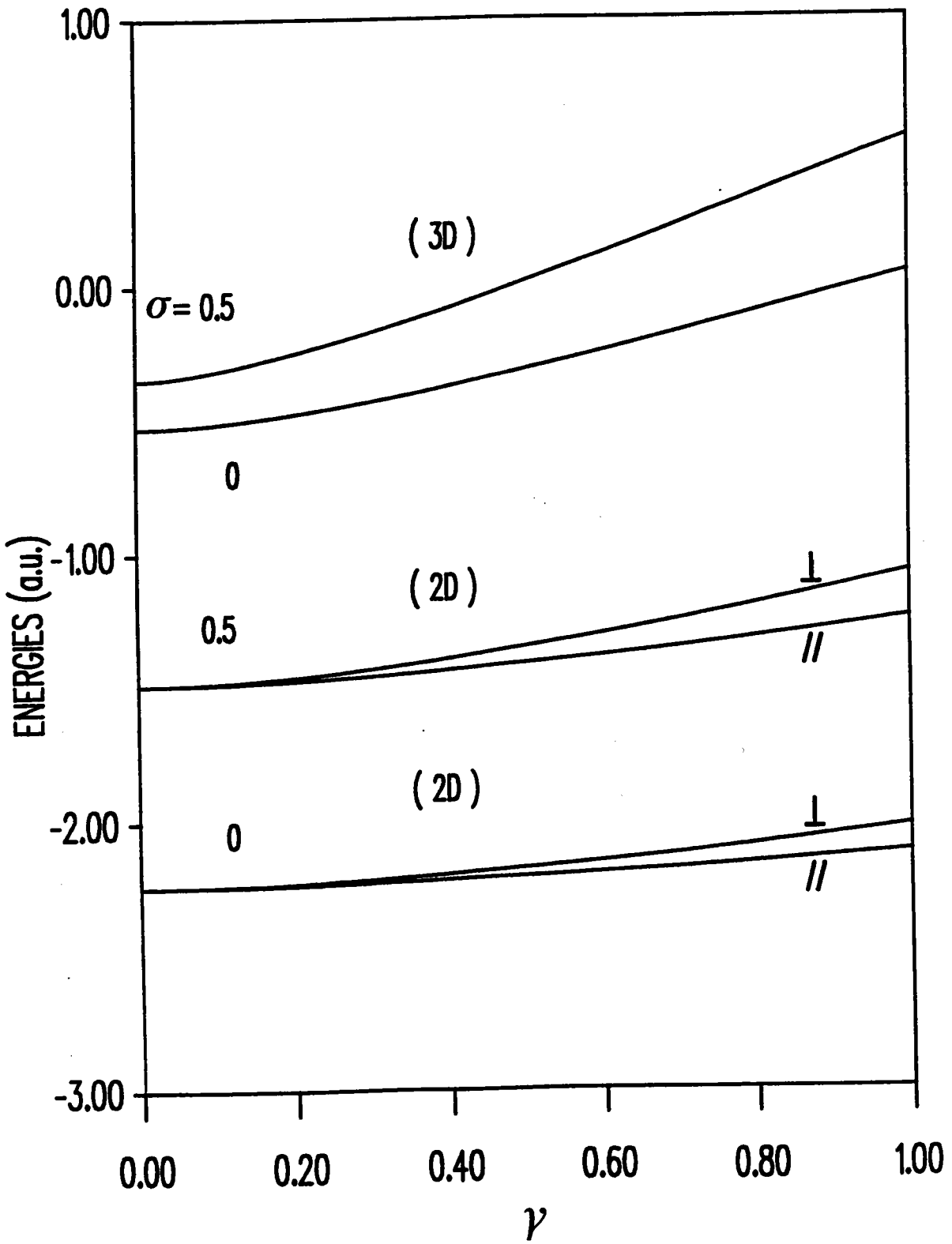


Fig. 3.1 : Comparaison des variations en fonction du champ effectif γ de l'énergie relative de l'état fondamental du trion X^- pour deux valeurs du rapport des masses effectives σ à 2D et à 3D. Influence de l'orientation du champ magnétique.

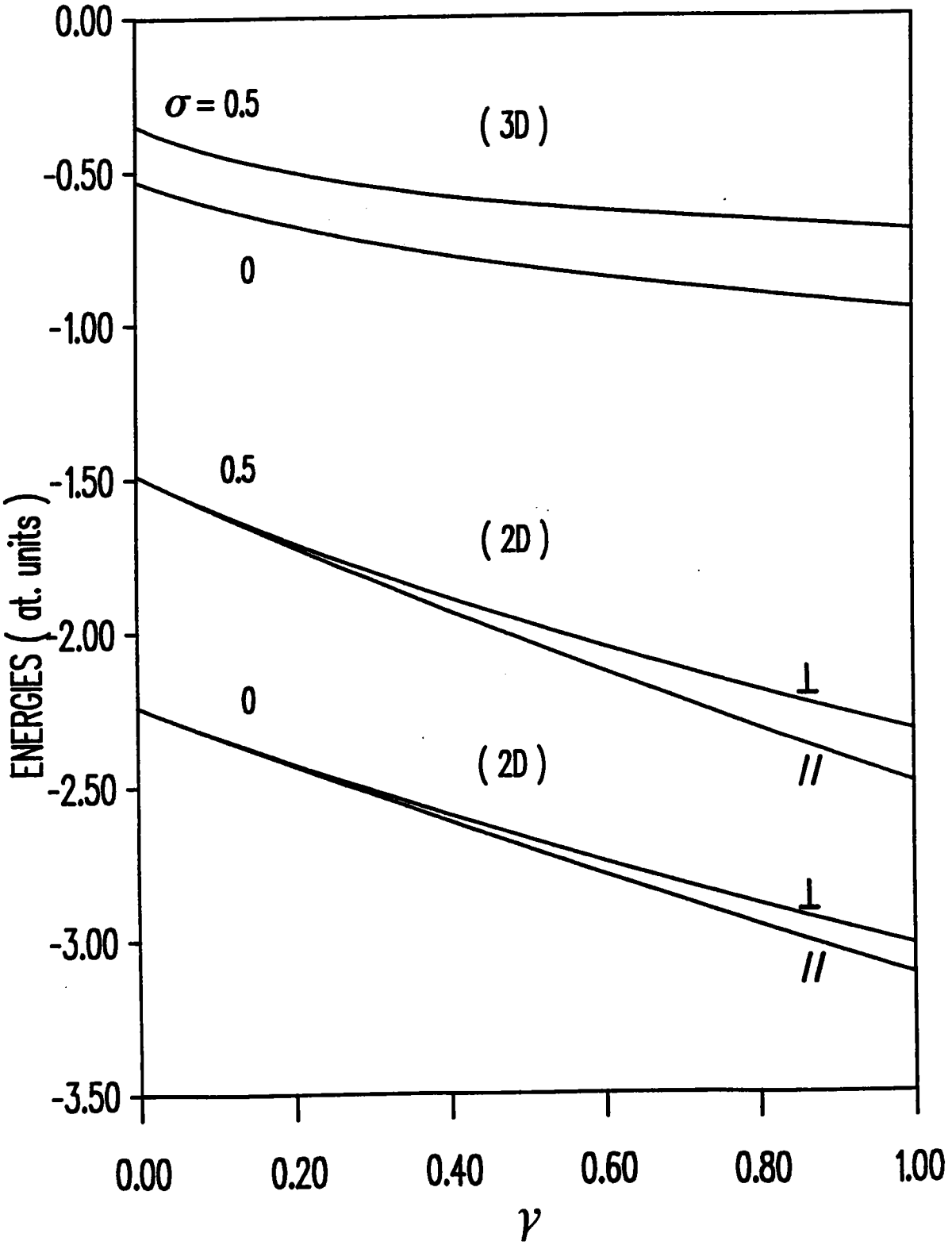


Fig. 3.2 : Variation de la différence de l'énergie relative et de l'énergie fondamentale de Landau des trois particules non interagissantes ($E_{rel} - E_L^0$), en fonction de γ pour deux valeurs de σ.

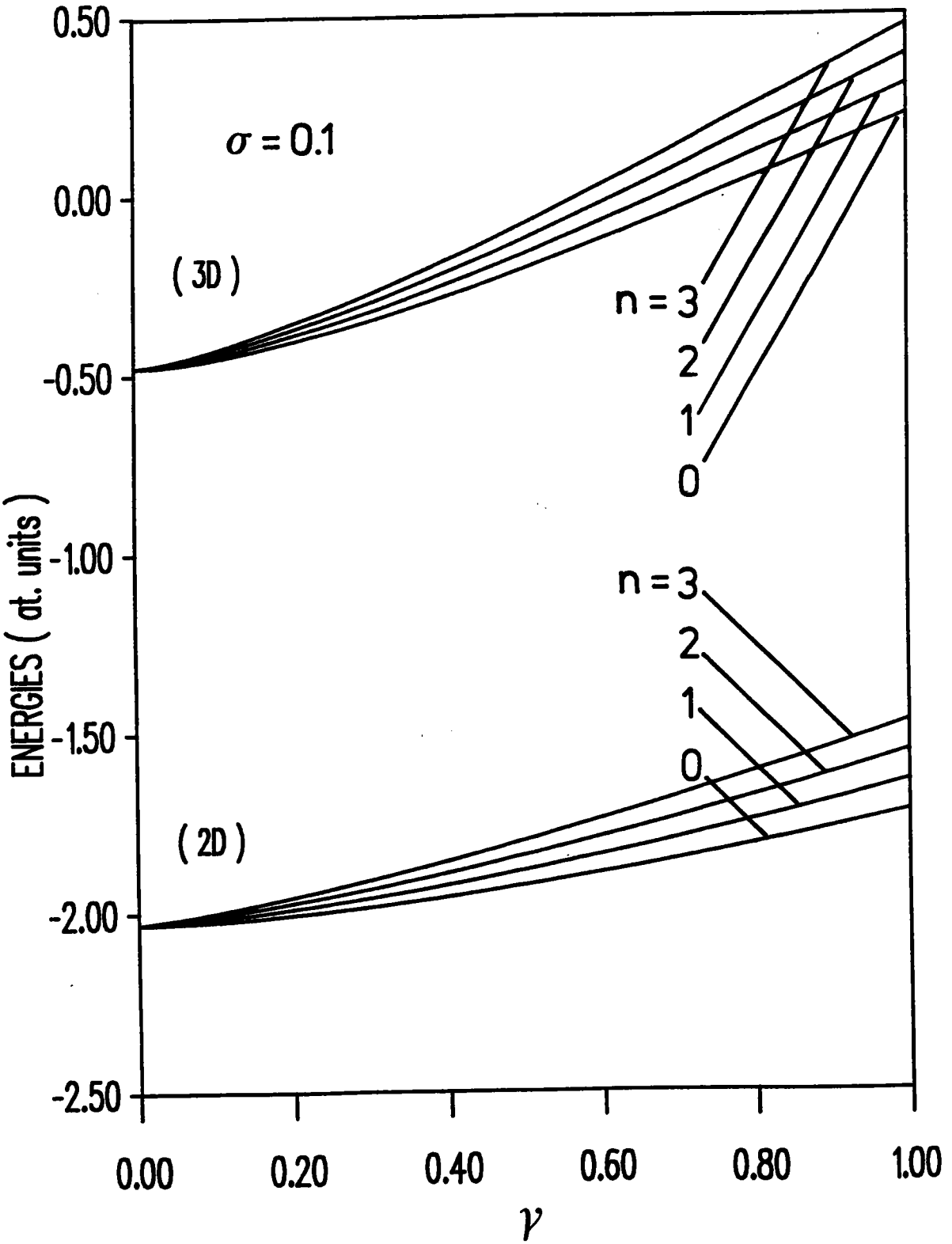


Fig. 3.3 : Variation de l'énergie totale ($E_{rel} + E_L^N$) du trion X^- en fonction du champ effectif γ, pour $\sigma = 0.1$, dans les milieux 2D et 3D. Effet du champ magnétique.

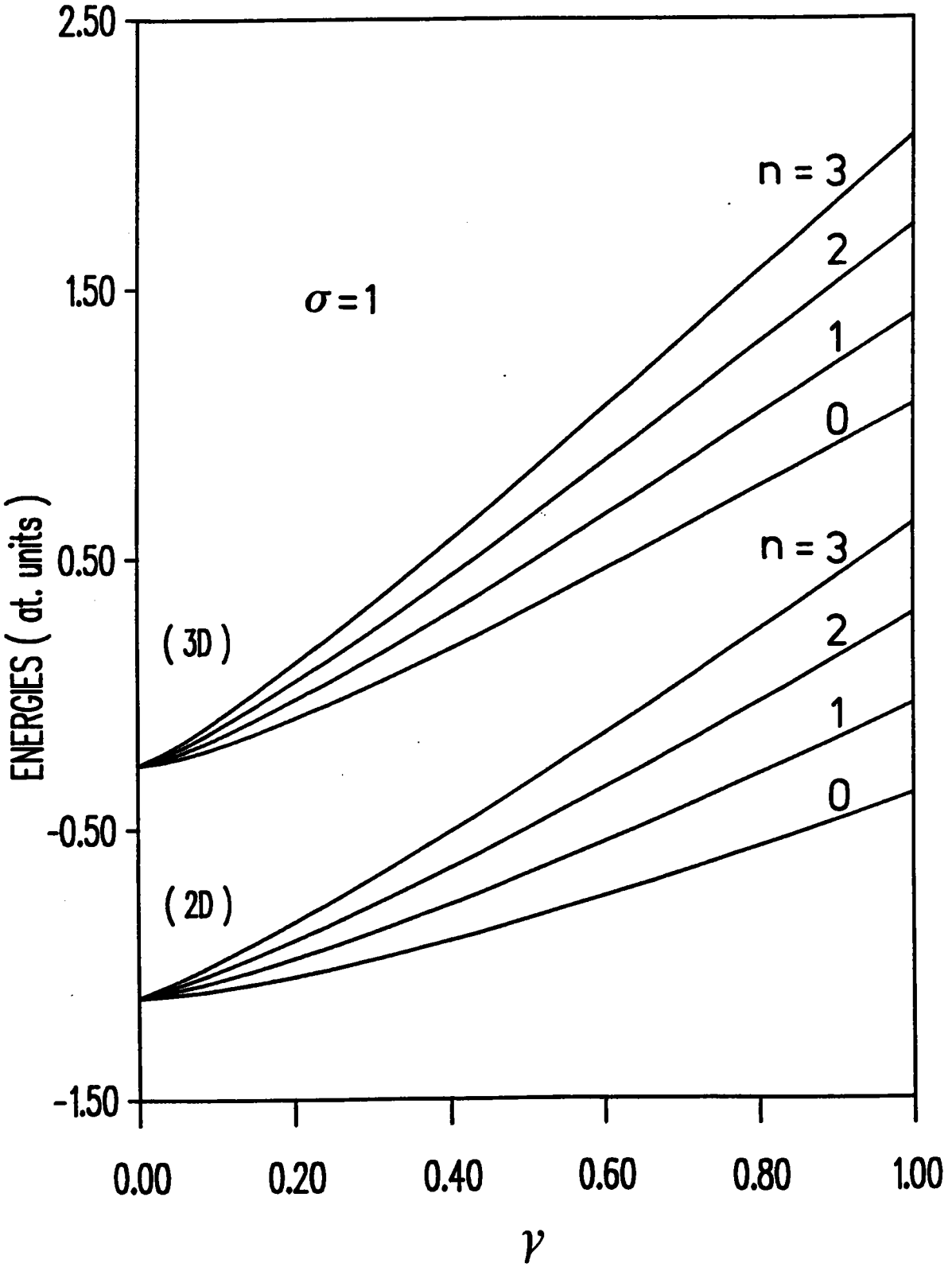


Fig. 3.4 : Comparaison des variations de l'énergie totale du trion X^- en fonction du champ effectif γ, pour $\sigma = 1$, dans les semiconducteurs 2D et 3D.

CHAPITRE IV

MAGNETO-ABSORPTION DES TRIONS EXCITONIQUES DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS

IV.1 INTRODUCTION

IV.2 FORMALISME GENERAL

IV.2.1 Interaction rayonnement-matière avec un système électron-trou à deux dimensions dans le modèle à deux bandes

IV.2.2 Approximation dipolaire électrique

IV.2.3 Transition à un photon

IV.3 ABSORPTION PAR LES TRIONS EXCITONIQUES A CHAMP NUL

IV.3.1 Eléments de matrice des transitions dipolaires électriques

IV.3.2 Expression de $I_{X^-}(K_0)$

IV.3.3 Détermination de la probabilité de transition à champ nul

IV.3.4 Coefficient d'absorption

IV.4 ABSORPTION OPTIQUE DU TRION NEGATIF EN CHAMP

IV.4.1 Coefficient d'absorption pour un champ perpendiculaire au plan

- Expression des coefficients C_{λ_i}
- Probabilité de transition et coefficient d'absorption

IV.4.2 Coefficient d'absorption pour un champ parallèle au plan

- Expression des coefficients C_{λ_i}
- Probabilité de transition et coefficient d'absorption

IV.5 RESULTATS NUMERIQUES ET DISCUSSION

CHAPITRE IV

MAGNETO-ABSORPTION DES TRIONS EXCITONIQUES DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS

IV.1 INTRODUCTION

Dans ce chapitre, nous étudions les propriétés optiques des trions excitoniques dans les semiconducteurs strictement bidimensionnels en présence ou non de champ magnétique. Comme dans les chapitres précédents, nous particularisons notre étude au cas du trion négatif X^-. Dans ces conditions, nous déterminons plus précisément le coefficient d'absorption monophotonique associé à une transition entre un état initial correspondant à un électron libre de la bande de conduction et un état final d'exciton chargé. Nous nous plaçons dans le cadre de l'approximation dipolaire électrique et limitons notre étude aux phénomènes d'optiques linéaires aux très basses températures.

A champ nul, on s'attend dans le cas 2D, (comme d'ailleur dans le cas 3D), à des raies d'absorptions analogues à celles observées pour le biexciton X_2 dans les cristaux massifs : raies assez larges présentant un bord d'absorption accompagné d'une queue décroissante vers les basses énergies. Ceci est dû au fait que, dans le cas d'une transition entre un état initial d'électron libre et un état final de trion, la quantité de mouvement de l'électron est conservée et peut prendre toutes les valeurs possibles. Le bord d'absorption correspond à des états à vecteur d'onde nul. Au contraire, dans le cas de transitions excitoniques, seules sont possibles les transitions vers des états d'excitons à vecteur d'onde quasi-nul, puisque dans ce cas, l'état initial correspond à des bandes de valences pleines caractérisées par une quantité de mouvement nulle et que le vecteur d'onde d'un photon reste très petit par rapport à celui d'un électron.

Ceci explique les raies fines observées dans ce cas. On s'attend à ce que la différence entre les cas 2D et 3D se traduise simplement par une modification de la forme des raies des trions. En effet, il apparaît que le coefficient d'absorption est proportionnel, entre autre, à la densité d'états des trions, qui peuvent dans une certaine mesure être assimilés à des quasi-particules libres et chargées. Dans ces conditions, cette densité d'états sera, dans le cas 3D, proportionnelle à la racine carrée de l'énergie des trions, comme dans le cas d'un gaz d'électrons libres 3D, mais se réduira à une constante dans le cas 2D. Toutefois, le coefficient d'absorption ne sera pas forcément égal à une constante dans le cas 2D, puisque, comme nous allons le montrer, il dépend aussi, dans tous les cas, de la correlation coulombienne entre les trois particules constitutives du trion.

En présence d'un champ magnétique, nous avons montré au chapitre III, que le centre de masse du trion se comportait, pour des champs pas trop élevés, comme une particule libre chargée. Dans ces conditions on s'attend à ce que le spectre d'absorption des trions présente, comme pour les électrons libres (ROTH, 1959), une magnéto-absorption oscillatoire dont les pics sont dûs à des transitions entre les niveaux de Landau de l'électron libre et ceux relatifs au mouvement du centre de masse du trion. Cet effet est spécifique aux trions et ne peut être observé dans le cas des excitons et des autres complexes excitoniques localisés ou neutres. Toutefois, nous allons voir que le spectre optique des trions sera inversé par rapport à celui des porteurs libres en champ magnétique par suite du mouvement interne des particules constitutives du trion. En effet, nous allons montrer que les pics de magnéto-absorption se situeront du coté des basses énergies par rapport au pic à champ nul, alors que dans le cas des électrons libres, ces pics apparaissent du côté des grandes énergies.

Une particularité très importante dans le cas 2D réside dans le fait que la forme des raies de magnéto-absorption des trions dépend aussi de l'orientation du champ magnétique, contrairement aux cas des trions 3D et des particules libres. En effet, lorsque $\mathcal{H}$ est perpendiculaire au plan, la quantification des états initiaux et finaux est totale. Dans ce cas, le coefficient d'absorption se présente sous forme d'une série de fonctions δ de Dirac séparées par l'énergie de résonance cyclotronique $\hbar\omega$ associée au centre de masse du trion. Par contre, lorsque le champ est dirigé

parallèlement au plan, le mouvement du centre de masse du trion reste libre dans cette direction et devient quantifié dans la direction perpendiculaire. Dans ce cas, les raies de magnéto-absorption oscillatoire sont élargies : à chaque valeur du champ correspond un pic d'absorption accompagné d'une "queue" décroissante vers les basses énergies. Nous suggérons que tous ces effets spécifiques devraient pouvoir être utilisés afin d'identifier les trions excitoniques et les distinguer des excitons et des autres complexes excitoniques localisés ou neutres. De plus, la comparaison des résultats à 2D et 3D permet une estimation des observations prévisibles dans les super-réseaux et puits quantiques de semiconducteurs.

Dans le paragraphe IV.2, nous établissons tout d'abord l'Hamiltonien effectif d'interaction rayonnement-matière dans un modèle à deux bandes, justifié dans le cas de l'optique linéaire. Nous nous limitons au cas de l'absorption monophotonique et nous ne tenons pas compte du terme quadratique en champ.

Dans le paragraphe IV.3, nous déterminons les éléments de matrice des transitions dipolaires électriques à champ nul puis nous déterminons la probabilité de transition afin d'obtenir le coefficient d'absorption.

Au paragraphe IV.4, nous présentons la méthode de calcul du coefficient d'absorption en présence du champ magnétique et en tenant compte de l'orientation de ce dernier.

Enfin, au paragraphe IV.5, nous présentons et discutons les résultats de nos calculs numériques.

IV.2 FORMALISME GENERAL

IV.2.1 Interaction rayonnement-matière avec un système électron-trou à deux dimensions dans le modèle à deux bandes

L'Hamiltonien des électrons d'un milieu absorbant, en interaction avec une radiation électromagnétique et en présence d'un champ magnétique extérieur s'écrit en seconde quantification :

$$H = \int d^2r\, \Psi^\dagger (r) [1/2m (p + \frac{e}{c} A_{ext} + \frac{e}{c} A_R)^2 + V (r)] \Psi (r)$$
$$+ \frac{1}{2} \int d^2r\, d^2r'\, \Psi^\dagger (r) \Psi^\dagger (r') \frac{e^2}{| r - r' |} \Psi (r') \Psi (r) , \qquad (4.1)$$

où m est la masse de l'électron au repos, p le vecteur quantité de mouvement, c la vitesse de la lumière, A_{ext} le potentiel vecteur du champ magnétique appliqué, A_R le potentiel vecteur de l'onde électromagnétique et V (r) le potentiel périodique de la surface semiconductrice.

En représentation de Schrödinger indépendante du temps, le potentiel vecteur décrivant l'onde électromagnétique s'écrit sous la forme suivante :

$$A_R = \sum_{q_\lambda} \frac{c}{n} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{q_\lambda} S}} \{ \epsilon_{q_\lambda} b_{q_\lambda} e^{iq.r} + c.c \} , \qquad (4.2)$$

où n est l'indice de réfraction du milieu absorbant de surface S, ϵ_{q_λ} représente le vecteur polarisation de l'onde lumineuse, b_{q_λ} est l'opérateur annihilation d'un photon caracterisé par le vecteur d'onde q, une polarisation λ et une pulsation ω_{q_λ}. Nous supposons par la suite que la condition $\epsilon_{q_\lambda} . q = 0$, soit réalisée. Cette dernière est compatible avec la condition de jauge de coulomb, $\nabla . A = 0$.

Dans ces conditions, et dans le cadre de l'approximation non relativiste, l'Hamiltonien du système électronique interagissant avec l'onde lumineuse s'écrit :

$$H = \int d^2r\, \Psi^\dagger(r)\,[\,1/2m\,(p + \frac{e}{c} A_{ext})^2 + V(r)\,]\,\Psi(r)$$
$$+ \frac{1}{2} \int d^2r\, d^2r'\, \Psi^\dagger(r)\, \Psi^\dagger(r')\, \frac{e^2}{|r - r'|}\, \Psi(r')\, \Psi(r)$$
$$+ \int d^2r\, \Psi^\dagger(r)\, \frac{e}{mc}\,(p + \frac{e}{c} A_{ext}).A_R\, \Psi(r)$$
$$+ \int d^2r\, \Psi^\dagger(r)\, \frac{e^2}{2mc^2} A^2_R\, \Psi(r), \qquad (4.3)$$

où le premier terme désigne la contribution des électrons placés dans un champ magnétique extérieur, le deuxième terme représente l'interaction électrostatique des électrons de la bande de conduction et des trous de la bande de valence. Le troisième terme, H^{e-r} , représente l'interaction rayonnement-matière lineaire en champ, que nous étudions par la suite. Le quatrième terme, quadratique en A, caractérise les phénomènes d'optique non linéaire, dont nous ne tenons pas compte dans notre étude. Dans ces conditions, seul le troixième terme contribuera à l'interaction rayonnement-matière.

Dans notre modèle à deux bandes, ce terme d'interaction rayonnement-matière peut être réécrit en utilisant les expressions (1.10) et (1.11) des opérateurs champ. Nous faisons l'approximation de négliger les termes correspondant à la création suivie de l'annihilation d'une même particule dans une même bande, ce qui revient à négliger les transitions intrabandes. Cette approximation est justifiée dans la mesure où nous ne nous intéressons qu'aux excitations optiques d'énergies comparables à celle de la bande interdite. Nous obtenons :

$$H^{e-r} = \frac{e}{cm} \int d^2r\, \Psi^\dagger_e(r)\,[\,p + \frac{e}{c} A_{ext}\,].A_R\, \Psi^\dagger_h(r)$$
$$+ \frac{e}{cm} \int d^2r\, \Psi_h(r)\,[\,p + \frac{e}{c} A_{ext}\,].A_R\, \Psi_e(r). \qquad (4.4)$$

En utilisant le développement des opérateurs champ dans la base des fonctions d'électrons et de trous en présence d'un champ magnétique, nous obtenons encore :

$$H^{e-r} = \frac{e}{cm} \sum_{kk'} \sum_{NN'} a^\dagger_{kN}\, d^\dagger_{k'N'} \int_S d^2r\, \phi^*_{ekN}(r)\,[\,p + \frac{e}{c} A_{ext}\,].A_R\, \phi^*_{hk'N'}(r)$$

$$+\frac{e}{cm}\sum_{kk'}\sum_{NN'} d_{kN}\, a_{k'N'} \int_S d^2r\, \phi_{hkN}(r)\,[\,p + \frac{e}{c} A_{ext}\,].A_R\, \phi_{ek'N'}(r)\,, \qquad (4.5)$$

où les $\phi(r)$ sont des fonctions d'onde des électrons, relatives aux bandes de conduction et de valence. Rappelons qu'en présence du champ magnétique extérieur et dans l'approximation de la masse effective, ces fonctions s'écrivent sous la forme d'un produit de la partie périodique d'une fonction de Bloch au centre de zone par une fonction d'onde de l'oscillateur harmonique associée au mouvement des électrons (ou des trous) dans une direction perpendiculaire au champ magnétique :

$$\phi_{ekN}(r) = c(r)\, f^{e}_{kN}(r)$$

$$\phi_{hkN}(r) = v^*(r)\, f^{h}_{kN}(r)\,. \qquad (4.6)$$

où k est le module du vecteur d'onde dans le plan, qui est dirigé selon la projection sur le plan du champ $\mathcal{H}$. Ce vecteur n'est défini que lorsque $\mathcal{H}$ n'est pas perpendiculaire au plan. Dans ce dernier cas les mouvements sont totalement quantifiés. En reportant le développement des fonctions d'ondes $\phi(r)$ dans l'expression de l'Hamiltonien d'interaction rayonnement-matière, nous obtenons :

$$H^{e\text{-}r} = \frac{e}{cm}\sum_{kk'}\sum_{NN'} a^{\dagger}_{kN}\, d^{\dagger}_{k'N'} \int_S d^2r\, c^*(r)\, f^{*e}_{kN}(r)\,[\,p + \frac{e}{c} A_{ext}\,].A_R\, v(r)\, f^{*h}_{k'N'}(r)$$

$$+\frac{e}{cm}\sum_{kk'}\sum_{NN'} d_{kN}\, a_{k'N'} \int_S d^2r\, v^*(r)\, f^{h}_{kN}(r)\,[\,p + \frac{e}{c} A_{ext}\,].A_R\, c(r)\, f^{e}_{kN}(r). \qquad (4.7)$$

Par ailleurs, l'application de l'opérateur $[\,p + \frac{e}{c} A_{ext}\,].A_R$ sur les fonctions d'onde $\phi(r)$ donne lieu à la somme suivante :

$$\left[\frac{\hbar}{i}\nabla_r + \frac{e}{c} A_{ext}\right].A_R\, c(r)\, f^{e}_{kN}(r)$$

$$= f^{e}_{kN}(r)\, A_R \cdot p\, c(r) + c(r)\left[p + \frac{e}{c} A_{ext}\right] A_R\, f^{e}_{kN}(r) . \qquad (4.8)$$

Dans ces conditions l'Hamiltonien d'interaction rayonnement-matière s'écrit :

$$H^{e-r} = \frac{e}{cm} \sum_{kk'} \sum_{NN'} a^{\dagger}_{kN}\, d^{\dagger}_{k'N'} \int d^2r \Big\{ f^{*e}_{kN}(r)\, f^{*}_{k'N'}\, c^{*}(r)\, A_R \cdot p\, v(r) + c^{*}(r)\, v(r)\, f^{*}_{kN}(r)\left[p + \frac{e}{c} A_{ext}\right] A_R\, f^{*h}_{k'N'}(r) \Big\}$$

$$+ \frac{e}{cm} \sum_{kk'} \sum_{NN'} d_{kN}\, a_{k'N'} \int d^2r \Big\{ f^{h}_{kN}(r)\, f^{e}_{k'N'}(r)\, v^{*}(r)\, A_R \cdot p\, c(r) + v^{*}(r)\, c(r)\, f^{h}_{kN}(r)\left[p + \frac{e}{c} A_{ext}\right] A_R\, f^{e}_{k'N'}(r) \Big\}. \qquad (4.9)$$

Les intégrales peuvent être séparées dans la mesure où les variations, sur une maille primitive, des fonctions d'onde d'oscillateur d'électrons et de trous ainsi que celles du potentiel vecteur extérieur (cas d'une perturbation faible) sont lentes par rapport aux parties périodiques des fonctions de Bloch c (r) et v (r). Il est alors possible de supposer que f^{e} , f^{h} et A_{ext} sont constants dans une cellule élémentaire de surface S_0 (ROTH et al. 1959). Dans ces conditions nous pouvons écrire chacune des intégrales de la relation (4.9) sous la forme d'un produit de deux termes, l'un portant sur la cellule élémentaire l'autre sur toute la surface semiconductrice.

Par la suite, nous supposerons que les fonctions c (r) et v (r) sont normalisées sur une cellule élémentaire tandis que les fonctions f^{e} (r) , f^{h} (r) le sont sur tout le cristal. Dans ces conditions, H^{e-r} peut alors s'écrire sous la forme suivante :

$$H^{e-r} = \frac{e}{cmS_0} \sum_{kk'} \sum_{NN'} a^{\dagger}_{kN}\, d^{\dagger}_{k'N'} \cdot \left[\int_S d^2r\, f^{*e}_{kN}(r)\, f^{*h}_{k'N'}(r) \int_{S_0} d^2r\, c^{*}(r)\, A_R \cdot p\, v(r) \right.$$

$$+ \int_{S_0} d^2r\, c^*(r)\, v(r) \int_S d^2r\, f^*_{kN}(r)\,(p + \frac{e}{c} A_{ext}).A_R\, f^*_{k'N'}(r)\Big]$$

$$+ \frac{e}{cmS_0} \sum_{kk'} \sum_{NN'} d_{kN}\, a_{k'N'} \cdot$$

$$\cdot \Big[\int_S d^2r\, f^h_{kN}(r)\, f^e_{k'N'}(r) \int_{S_0} d^2r\, v^*(r)\, A_R .p\, c(r)$$

$$+ \int_{S_0} d^2r\, v^*(r)\, c(r) \int_S d^2r\, f^h_{kN}(r)\,(p + \frac{e}{c} A_{ext}).A_R\, f^e_{k'N'}(r)\Big] .$$

(4.10)

$S = NS_0$ désigne la surface de normation du milieu bidimensionnel constitué de N mailles primitives de surface S_0. Dans la mesure où nous pouvons supposer que toutes les fonctions d'onde sont orthonormées, nous pouvons écrire :

$$\frac{1}{S} \int_S d^2r\, f^{*h}_{kN}(r)\, f^e_{k'N'}(r) = \delta_{NN'}\, \delta_{kk'}$$

et

$$\frac{1}{S_0} \int_{S_0} d^2r\, c^*(r)\, v(r) = 0 . \qquad (4.11)$$

Dans ces conditions, l'expression de l'Hamiltonien rayonnement-matière devient :

$$H^{e\text{-}r} = \frac{e}{cm} \sum_{kN} a^\dagger_{kN}\, d^\dagger_{kN} \int_S d^2r\, c^*(r)\, A_R .p\, v(r)$$

$$+ \frac{e}{cm} \sum_{kN} d_{kN}\, a_{kN} \int_S d^2r\, v^*(r)\, A_R .p\, c(r) . \qquad (4.12)$$

IV.2.2 Approximation dipolaire électrique

Dans la relation (4.12) le premier terme correspond à l'absorption d'un photon avec création d'une paire électron-trou, tandis que le deuxième correspond à l'émission. Dans ce qui suit, nous nous limiterons au cas de l'absorption monophotonique. Dans la plupart des situations expérimentales, le vecteur d'onde q du photon peut être négligé. En effet l'amplitude de l'onde électromagnétique varie sur des distances de l'ordre de sa longueur d'onde $\lambda = \frac{2\pi}{q} \simeq 1\ \mu m$ qui sont beaucoup plus grandes que toute dimension caractéristique d'origine électronique. Dans ces conditions, nous pouvons développer en série le facteur exp (iq.r) intervenant dans l'expression du potentiel vecteur A_R :

$$\exp (iq.r) \simeq 1 + iq.r + ... \qquad (4.13)$$

L'approximation dipolaire électrique consiste à négliger le terme iq.r et les termes d'ordre supérieur en ne gardant que le premier terme. L'Hamiltonien correspondant à l'absorption optique s'écrit alors, en ne retenant que le terme correspondant à la création d'une paire électron-trou consécutive à la destruction d'un photon :

$$H_{abs}^{e-r} = \frac{1}{mn} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{q_\lambda} S}} \sum_{q_\lambda} \sum_{kN} a_{kN}^{\dagger} d_{kN}^{\dagger} b_{q_\lambda} \epsilon . \int_S d^2r\, c^* (r) ep\, v (r) . \qquad (4.14)$$

Nous pouvons simplifier cette écriture en introduisant le vecteur dipolaire électrique D relatif à une paire électron-trou non liée de la surface :

$$H_{abs}^{e-r} = \frac{1}{mn} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{q_\lambda} S}} \sum_{q_\lambda} \sum_{kN} a_{kN}^{\dagger} d_{kN}^{\dagger} \epsilon .D , \qquad (4.15)$$

où

$$D = \int_S d^2r\, c^* (r) ep\, v (r) . \qquad (4.16)$$

IV.2.3 Transition à un photon

La probabilité de transition par unité de temps pour l'absorption d'un photon d'énergie $\hbar\omega$ entre deux états $|\, i >$ et $|\, f >$ est définie par :

$$W^{if}_{abs} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,f} | H'_{abs} |^2 \, \delta (E_f - E_i - \hbar\omega) , \qquad (4.17)$$

où H'_{abs} désignent les éléments de matrice des transitions entre les états initiaux $|\, i >$ et finaux $|\, f >$ du système électron-photon non interagissant considéré. Ces derniers s'écrivent comme produit tensoriel d'états électroniques et photoniques :

$$| i > = | \Phi_i ; 0 ; 1 ;.....; N_{q_\lambda} ;.....>$$

$$| f > = | \Phi_f ; 0 ; 1 ;.....; N_{q_\lambda} - 1 ;...> . \qquad (4.18)$$

N_{q_λ} désigne le nombre de photons de vecteur d'onde q et de polarisation λ existant à l'état initial. A l'état final le nombre de photons du système photonique est diminué d'une unité par suite de l'absorption d'un photon. Dans ces conditions, H'_{abs} s'écrit :

$$H'_{abs} = < \Phi_f ; 0 ; 1 ;...; N_{q_\lambda} - 1... | H^{e-r}_{abs} | 0 ; 1 ; ....; N_{q_\lambda} ;...; \Phi_i > . \qquad (4.19)$$

Nous pouvons obtenir une expression indépendante des états de photons en utilisant les propriétés des opérateurs de photons (assimilés à des bosons). Nous remarquons en particulier que :

$$b_{q_\lambda} | 0 ; 1 ;.....; N_{q_\lambda} ...> = \sqrt{N_{q_\lambda}} | 0 ; 1 ;.....; N_{q_\lambda} - 1 ;.... > , \qquad (4.20)$$

Compte tenu de l'orthogonalité des états photoniques, nous obtenons finalement :

$$H'_{abs} = \sqrt{N_{q_\lambda}}\ \frac{1}{mn}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{q_\lambda} S}} < \Phi_f \mid \sum_{kN} a^\dagger_{kN}\, d^\dagger_{kN} \mid \Phi_i > \epsilon.D\ , \qquad (4.21)$$

Compte tenu des expressions des états électroniques $\mid \Phi_i >$ (état d'électrons) et $\mid \Phi_f >$ (états de trions) déjà définis au chapitre I :

$$\mid \Phi_i > = a^\dagger_{kN} \mid \Phi_0 >$$

et

$$\mid \Phi_f > = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}\, a^\dagger_{\lambda_1}\, a^\dagger_{\lambda_2}\, d^\dagger_{\lambda_3} \mid \Phi_0 >\ , \qquad (4.22)$$

où $\lambda_i \equiv (k_i , N_i)$ désignent les états d'électrons et de trous, et en utilisant les relations de commutations de fermions ainsi que l'antisymétrie des fonctions d'onde quant à l'échange de deux particules identiques, l'expression (4.21) devient :

$$H'_{abs} = \frac{2}{mn}\sqrt{\frac{\pi\hbar N_p}{\omega_{q_\lambda}}}\ \epsilon.D \sum_{k'N'} C^*_{k'N'kNk'N'}\ . \qquad (4.23)$$

où N_p désigne le nombre de photons incidents par unité de surface.

IV.3 ABSORPTION PAR LES TRIONS EXCITONIQUES A CHAMP NUL

Dans ce paragraphe nous particularisons, le formalisme développé au paragraphe précédent au cas particulier d'un champ magnétique nul. Dans ce cas, les états d'électrons et de trous sont simplement définis par leur vecteur d'onde k. Nous nous proposons d'établir l'expression du coefficient d'absorption monophotonique de photons d'énergie $\hbar\omega$ comparable à la largeur de bande interdite entre des états d'électrons libres et de trions négatifs. Le cas des transitions entre états de trous libres et de trions positifs peut être traité de façon tout à fait analogue.

IV.3.1 Eléments de matrice des transitions dipolaires électriques

Nous caractérisons l'état initial par la présence d'électrons libres excédentaires :

$$| \Phi_i > \equiv | \Phi_e > = a_k^+ | \Phi_0 > , \qquad (4.24)$$

où $| \Phi_0 >$ correspond à l'état de la bande de valence pleine à température nulle. L'état final du trion X^- a déjà été défini en (1.41) comme combinaison linéaires des états à trois particules non liées :

$$| \Phi_f > \equiv | \Phi_{X^-} > = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k_1 k_2 k_3} C_{k_1 k_2 k_3} \, a^+_{k_1} \, a^+_{k_2} \, d^+_{k_3} | \Phi_0 > , \qquad (4.25)$$

où les coefficients C_λ sont les transformées de Fourier des fonctions d'onde enveloppe des trions. Dans ces conditions, les éléments de matrice des transitions monophotoniques s'écrivent :

$$H'_{abs} = \frac{1}{mn} \sqrt{\frac{\pi\hbar N_{q_\lambda}}{\omega_{q_\lambda} S}} \sum_{k'} \sum_{k_1 k_2 k_3} C^*_{k_1 k_2 k_3} < \Phi_0 | d_{k_3} \, a_{k_2} \, a_{k_1} \, a^+_{k'} \, d^+_{k'} \, a^+_k | \Phi_0 > \epsilon.D \qquad (4.26)$$

En procédant de même qu'en présence d'un champ magnétique, nous obtenons une relation analogue à la relation (4.23) :

$$H'_{abs} = \frac{2}{mn}\sqrt{\frac{\pi\hbar N_p}{\omega_{q_\lambda}}}\,\epsilon.D\sum_{k'} C^*_{k'kk'}\,, \qquad (4.27)$$

où $N_p = \frac{N_{q_\lambda}}{S}$ représente le nombre de photons incidents par unité de surface.

Les coefficients intervenant dans la relation (4.27) peuvent être obtenus à partir de l'expression de la fonction d'onde enveloppe :

$$\phi_{X^-}(r_1,r_2,r_3) = S^{-3/2}\sum_{k_1k_2k_3} C_{k_1k_2k_3}\exp i(k_1.r_1 + k_2.r_2 - k_3.r_3)\,, \qquad (4.28)$$

en effectuant une transformée de Fourier :

$$C_{k_1k_2k_3} = S^{-3/2}\int d^2r_1d^2r_2d^2r_3\,\phi_{X^-}(r_1,r_2,r_3)\exp -i(k_1.r_1 + k_2.r_2 - k_3.r_3)\,, \qquad (4.29)$$

et

$$\sum_{k'} C_{k'kk'} = S^{-3/2}\sum_{k'}\int d^2r_1d^2r_2d^2r_3\,\phi_{X^-}(r_1,r_2,r_3)\exp -ik'(r_1 - r_3)\exp(-ikr_2)$$
$$= S^{-1/2}\int d^2r_1d^2r_2d^2r_3\,\phi_{X^-}(r_1,r_2,r_3)\exp(-ik.r_2)\,\delta(r_1 - r_3)\,. \qquad (4.30)$$

Nous avons déjà remarqué au chapitre II qu'en l'absence de champ magnétique la quantité de mouvement du centre de masse était une constante du mouvement. Aussi la fonction d'onde enveloppe peut être exprimée sous forme du produit des fonctions d'onde du centre de masse (libre) et du mouvement relatif (2.16) :

$$\phi_{X^-}(r,R,R_0) = S^{-1/2}\exp(iK_0.R_0)\,\phi_{rel}(r,R)\,, \qquad (4.31)$$

où $\mathbf{K_0}$ désigne le vecteur d'onde du centre de masse. Les coordonnées ($\mathbf{r, R, R_0}$) ont déjà été définies ci-dessus (2.13) :

$$\mathbf{r} = \mathbf{r_2} - \mathbf{r_1} \quad ; \quad \mathbf{R} = \frac{\mathbf{r_1} + \mathbf{r_2}}{2} - \mathbf{r_3}$$

$$\mathbf{M_0 R_0} = m_e^* (\mathbf{r_1} + \mathbf{r_2}) + m_h^* \mathbf{r_3} \quad , \quad M_0 = 2m_e^* + m_h^* . \qquad (4.32)$$

Dans ces conditions la relation (4.30) s'exprime par :

$$\sum_{k'} C_{k'kk'} = \frac{1}{S} \int d^2r d^2R_0 \exp -i(\frac{m_e^* + m_h^*}{M_0})\mathbf{k}.\mathbf{r} \exp i\mathbf{R_0}(\mathbf{K_0} - \mathbf{k}) \phi_{X^-} (\mathbf{r}, \mathbf{r}/2)$$

$$= \int d^2r \exp -i(\frac{m_e^* + m_h^*}{M_0})\mathbf{k}.\mathbf{r} \phi_{X^-} (\mathbf{r}, \mathbf{r}/2) \delta_{\mathbf{K_0 k}} , \qquad (4.33)$$

où $\phi_{X^-} (\mathbf{r}, \mathbf{r}/2)$ est l'amplitude de probabilité pour que les positions d'un électron et d'un trou soient confondues. Les éléments de matrice des transitions dipolaires électriques s'écrivent alors pour $\mathbf{K_0} = \mathbf{k}$:

$$| H'_{abs} |^2 = \frac{4\pi\hbar N_p}{m^2 n^2 \omega_{q_\lambda}} | \epsilon.\mathbf{D} |^2 I_{X^-} (\mathbf{K_0}) , \qquad (4.34)$$

où

$$I_{X^-} (\mathbf{K_0}) = | \sum_{k'} C_{k'kk'} |^2$$

$$= | \int d^2r \exp -i(\frac{1 + \sigma}{1 + 2\sigma})\mathbf{K_0}.\mathbf{r} \phi_{X^-} (\mathbf{r}, \mathbf{r}/2) |^2 , \qquad (4.35)$$

où σ désigne le rapport des masses effectives de l'électron et du trou.

Nous remarquons que les éléments de matrice s'annulent lorque le vecteur d'onde de l'électron (état initial) est différent du vecteur d'onde du centre de masse du trion (état final). Celà traduit la conservation de la quantité de mouvement lors de transitions optiques dipolaires directes : $\mathbf{k} + \mathbf{q} \simeq \mathbf{K_0}$.

IV.3.2 Expression de I_{X^-} (K_0)

L'intégrale I (K_0) est définie par :

$$I(K_0) = \left| \int d^2r \exp -i\left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} K_0.r \right) \phi_{X^-}(r, r/2) \right|^2 , \qquad (4.36)$$

où K_0 et r sont des vecteurs dans le plan. Leur produit scalaire est fonction de l'angle que fait le vecteur position avec le vecteur d'onde K_0 :

$$K_0.r = K_0 r \cos(\theta) . \qquad (4.37)$$

En utilisant la fonction d'onde enveloppe définie au chapitre II par la relation (2.22) , ϕ_{X^-} (r, r/2) s'exprime par :

$$\phi_{X^-}(r, r/2) = \mathcal{N} \exp\left(-\frac{kr}{2}\right) \sum_{lmn} c_{lmn} (kr)^{l+m+n} , \qquad (4.38)$$

k étant le facteur d'échelle, tandis que l, m et n sont des entiers positifs ou nuls. Comme ϕ_{X^-} (r, r/2) dépend uniquement de la distance r, nous la notons simplement f (r) afin de simplifier les écritures. En introduisant les coordonnées polaires (r, θ) l'intégrale I_{X^-} (K_0) devient :

$$I_{X^-}(K_0) = \left| \iint r\, f(r) \exp -i(\alpha K_0 r\cos\theta)\, d\theta\, dr \right|^2 . \qquad (4.39)$$

L'intégration sur θ donne lieu à une contribution que nous pouvons noter :

$$I_1 = \int_{-\pi}^{\pi} \exp -i(\alpha K_0 r\cos\theta)\, d\theta , \qquad (4.40)$$

qui peut être évaluée moyennant des changements de variables adéquats. Nous obtenons :

$$I_1 = 2 \int_{-1}^{1} \frac{\exp (i\alpha K_0 r x)}{\sqrt{1 - x^2}} dx , \qquad (4.40a)$$

$$I_1 = 2 \sqrt{\pi}\, \Gamma (1/2)\, J_0 (\alpha K_0 r) , \qquad (4.40b)$$

où $\Gamma (1/2) = \sqrt{\pi}$. Finalement :

$$I_1 = 2\pi\, J_0 (\alpha K_0 r) = 2\pi \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \frac{(\alpha K_0 r)^{2p}}{2^{2p} (p!)^2} , \qquad (4.41)$$

où $J_0 (\alpha K_0 r)$ est une fonction de Bessel d'ordre zéro, p est un entier positif ou nul. Par conséquent $I_{X^-} (K_0)$ s'écrit :

$$I_{X^-} (K_0) = \left| \int_0^{\infty} 2\pi \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \frac{(\alpha K_0 r)^{2p}}{2^{2p} (p!)^2} r\, f (r)\, dr \right|^2 . \qquad (4.42)$$

En remplaçant f (r) par sa valeur et après intégration sur r, nous obtenons :

$$I_{X^-} (K_0) =$$

$$\frac{64\, \pi^2 \mathcal{N}^2}{k^4} \left| \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^p (\alpha K_0 r)^{2p}}{k^{2p} (p!)^2} \sum_{lmn} c_{lmn}\, 2^{l+m+n} (l + m + n + 2p + 1)! \right|^2 , \qquad (4.43)$$

$\mathcal{N}$ étant le facteur de normation. $I_{X^-} (K_0)$ dépend à la fois de $\alpha = (1 + \sigma)/(1 + 2\sigma)$ et du module K_0 du vecteur d'onde K_0 du centre de masse du trion excitonique X^-. Il est à remarquer que le fait que I ne dépend que du module de K_0 est lié au choix d'une fonction d'onde enveloppe de symétrie sphérique.

IV.3.3 Détermination de la probabilité de transition à champ nul

L'expression de la probabilité de transition entre les deux états $| i >$ et $| f >$ a déjà été définie ci-dessus (4.17) :

$$W^{if}_{abs} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k, K_0} \delta_{K_0 k} \, | H'_{abs} (K_0) |^2 \, \delta (E_f (K_0) - E_i (k) - \hbar\omega) , \qquad (4.44)$$

où E_f et E_i désignent respectivement les énergies correspondant aux états final et initial du système électronique en l'absence du champ magnétique.

Nous pouvons remplacer la sommation discrète restante par une sommation continue dans l'espace des k en tenant compte du fait que le vecteur d'onde n'intervient que par son module. Nous obtenons :

$$W^{if}_{abs} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{2S}{(2\pi)^2} \int | H'_{abs} |^2 \, \delta (E_f - E_i - \hbar\omega) \, d^2K_0 , \qquad (4.45)$$

où le facteur 2 est une conséquence du principe de Pauli. En reportant l'expression des éléments de matrice H'_{abs} dans l'expression précédente nous obtenons :

$$\begin{aligned} W^{if}_{abs} &= \frac{4SN_p}{m^2 n^2 \omega q_\lambda} | \epsilon.D |^2 \int I_{X^-} (K_0) \, \delta (E_f - E_i - \hbar\omega) \, 2\pi K_0 \, dK_0 \\ &= \beta \int 2\pi K_0 \, I_{X^-} (K_0) \, \delta (E_f - E_i - \hbar\omega) \, dK_0 , \end{aligned} \qquad (4.46)$$

où β est une constante caractérisant le matériau semiconducteur.

$$\beta = \frac{4SN_p \, | \epsilon.D |^2}{m^2 n^2 \omega q_\lambda} . \qquad (4.47)$$

Les énergies des états initiaux et finaux sont données par :

$$E_f = \mathcal{E}_0 + 2E_g + E_{rel} + \frac{\hbar^2 K_0^2}{2M_0}$$

$$E_i = \mathcal{E}_0 + E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}, \qquad (4.48)$$

où $\mathcal{E}_0$ est l'énergie de la bande de valence pleine tandis que E_g est l'énergie de la bande interdite. La conservation des quantités de mouvement impose que $K_0 = k$. Dans ces conditions la différence d'énergie $E_f - E_i - \hbar\omega$ s'écrit :

$$E_f - E_i - \hbar\omega = E_g + E_{rel} - \alpha \frac{\hbar^2 K_0^2}{2m_e^*} - \hbar\omega , \qquad (4.49)$$

où $\alpha = \frac{1+\sigma}{1+2\sigma}$. (4.50)

Afin d'exprimer analytiquement l'intégrale intervenant dans la relation (4.46), nous utilisons les propriétés de la fonction δ de Dirac (CALLAWAY, 1964).

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

où x_0 représente la racine de f (x), comprise dans l'intervalle [a, b]. Dans notre cas f (x) et g (x) sont définies par :

$$f(K_0) = E_f - E_i - \hbar\omega$$

et

$$g(K_0) = 2\pi K_0 I_{X^-}(K_0) . \qquad (4.52)$$

Par conséquent, la racine positive κ de f (K_0) et la quantité $\left| \frac{dK_0}{df} \right|_{K_0=\kappa}$ s'écrivent :

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m_e^*}{\alpha\hbar^2}} \left[E_g + E_{rel} - \hbar\omega \right]^{1/2} = \kappa (\omega)$$

et

$$\left| \frac{dK_0}{df} \right|_{K_0=\kappa} = \sqrt{\frac{m_e^*}{2\alpha\hbar^2}} \left[E_g - E_{rel} - \hbar\omega \right]^{-1/2} . \qquad (4.53)$$

Finalement, la probabilité de transition W_{abs}^{if} s'écrit :

$$W_{abs}^{if} = 2\pi \frac{\beta m_e^*}{\alpha\hbar^2} I_{X^-} [\kappa (\omega)] . \qquad (4.54)$$

IV.3.4 Coefficient d'absorption

Le coefficient d'absorption traduit l'affaiblissement du flux lumineux lors de son passage à travers le matériau considéré. Dans le cas d'un milieu quasi-bidimensionnel, nous pouvons définir le coefficient d'absorption, comme étant la fraction d'énergie perdue par l'onde incidente, par unité de temps, de surface et d'énergie (KNOX, 1963) :

$$\mu = \frac{\text{Energie dissipée par unité de surface}}{\text{Densité d'énergie x vitesse de propagation}}$$

que nous écrivons sous la forme analytique :

$$\mu = \frac{W_{abs}^{if} \hbar\omega}{S} \frac{1}{N_p \hbar\omega \, c/n} = \frac{n \, W_{abs}^{if}}{c N_p S} , \qquad (4.55)$$

où n est l'indice de réfraction du milieu absorbant, c la vitesse de la lumière, tandis que N_p est le nombre de photons incidents. Nous reportons l'expression de W_{abs}^{if} dans celle du coefficient d'absorption. Nous obtenons :

$$\mu(\omega) = \frac{8\pi m_e^* \,|\, \epsilon.D \,|^2}{cn^2 m^2 \alpha \hbar} \frac{I_{X^-}[\kappa(\omega)]}{\hbar\omega_{q_\lambda}} . \qquad (4.56)$$

Dans le système d'unités atomiques que nous avons défini au chapitre II, κ s'écrit :

$$\kappa^{u.a}(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\alpha}} (\omega_0 - \omega)^{1/2} . \qquad (4.57)$$

IV.4 ABSORPTION OPTIQUE DU TRION NEGATIF EN CHAMP

En présence du champ magnétique, les états d'électrons et de trous sont définis par les états $\lambda_i \equiv (k_i , N_i)$. Dans ce qui suit, nous allons étudier le comportement du coefficient d'absorption monophotonique, en tenant compte de l'effet très important de l'orientation du champ. En effet, nous verrons que lorsque $\mathcal{H}$ est perpendiculaire au plan, la quantification des états propres correspondant aux états $| i >$ et $| f >$ est totale. Dans ce cas, le coefficient d'absorption se présente sous forme d'une série de fonctions δ de Dirac séparées par l'énergie $\hbar\omega$. Par contre, nous nous attendons à une magnéto-absorption oscillatoire, lorsque le champ est parallèle au plan, résultant du mouvement libre du centre de masse du trion X^-, selon la direction parallèle du champ.

IV.4.1 Coefficient d'absorption pour un champ perpendiculaire au plan

Dans ce paragraphe nous déterminons d'abord l'expression des coefficients C_{λ_i} (4.23) puis nous en déduisons celle du coefficient d'absorption.

- **Expression des coefficients C_{λ_i}**

Pour ce cas particulier, les énergies des états $| i >$ et $| f >$ dans le plan sont totalement quantifiées et ne peuvent prendre que des valeurs discrètes correspondant aux niveaux de Landau. Pour des bandes de conduction et de valence supposées paraboliques, ces énergies s'écrivent :

$$E_i = \mathcal{E}_0 + E_g + \hbar\omega_e \left(N' + \frac{1}{2} \right)$$

$$E_f = \mathcal{E}_0 + 2E_g + E_{rel} + \hbar\omega_{cm} \left(N + \frac{1}{2} \right) , \qquad (4.58)$$

avec :

$$\omega_e = \frac{e\mathcal{H}}{m^*_e c} \quad , \quad \omega_{cm} = \frac{e\mathcal{H}}{M_0 c} \text{ et } N = N' = (0,1,2,...), \qquad (4.59)$$

$\mathcal{E}_0$ représente l'énergie de la bande de valence pleine, E_g désigne l'énergie de la bande interdite, ω_e et ω_{cm} sont les pulsations cyclotroniques de l'électron et du trion X^-.

Les fonctions d'onde correspondant aux états initiaux et finaux en présence du champ s'écrivent :

$$f^e_\lambda (r) = \exp i(k_x x) \exp -i(\frac{e\mathcal{H}}{2\hbar c} xy) \Phi_N \left[\sqrt{\frac{e\mathcal{H}}{\hbar c}} \left(y - \frac{c\hbar}{e\mathcal{H}} k_x \right) \right] , \qquad (4.60)$$

et

$$\phi_{X^-} (r_1, r_2, r_3) = S^{-3/2} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} f^e_{\lambda_1} (r_1) f^e_{\lambda_2} (r_2) f^h_{\lambda_3} (r_3). \qquad (4.61)$$

Nous nous proposons d'établir l'expression des éléments de matrice, donnés en (4.21). A cet effet, nous effectuons une transformée de Fourier afin de déterminer les coefficients C_{λ_i} intervenant dans la relation (4.21) :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = S^{-3/2} \sum_{k'N'} \int d^2r_1 d^2r_2 d^2r_3 \, \phi_{X^-} (r_1, r_2, r_3) f^{*e}_{k'N'} (r_1) f^{*e}_{kN} (r_2) f^{*h}_{k'N'} (r_3) . \qquad (4.62)$$

Comme les fonctions $f_\lambda (r)$ sont supposées orthonormées, nous pouvons écrire :

$$S^{-\frac{1}{2}} \sum_{k'N'} f^{*e}_{k'N'} (r_1) f^{*h}_{k'N'} (r_3) = \delta (r_1 - r_3). \qquad (4.63)$$

Dans ces conditions, l'expression (4.62) s'écrit :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = S^{-1} \int d^2r_1 \, d^2r_2 \, d^2r_3 \, \phi_{X^-} (r_1, r_2, r_3) f^{*e}_{kN} (r_2) \delta (r_1 - r_3)$$

$$= S^{-1} \int d^2r_1 \, d^2r_2 \, \phi_{X^-} (r_1, r_2, r_1) f^{*e}_{kN} (r_2). \qquad (4.64)$$

Nous utilisons les coordonnées relatives et du centre de masse :

$$r = r_2 - r_1 \quad ; \quad R = \frac{r_1 + r_2}{2} - r_3$$

$$M_0 R_0 = m_e^* r_1 + m_e^* r_2 + m_h^* r_3 \quad ; \quad M_0 = 2m_e^* + m_h^* , \qquad (4.65)$$

comme $r_1 = r_3$, nous pouvons écrire :

$$R = \frac{r}{2} \quad ; \quad r_1 = R_0 - \frac{m_e^*}{M_0} r \quad ; \quad r_2 = R_0 + \frac{m_e^* + m_h^*}{M_0} r . \qquad (4.66)$$

En tenant compte du Jacobien de la transformation, la relation (4.64) s'exprime par :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = S^{-1} \int_S \Big\{ d^2R_0 \, d^2r \exp -ik_x \left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} x + X_0 \right) \exp \frac{ie\mathcal{H}}{2\hbar c} \left[\left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} x + X_0 \right) \left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} y + Y_0 \right) \right] \Phi_N \left[\sqrt{\frac{e\mathcal{H}}{\hbar c}} \left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} y + Y_0 - \frac{c\hbar}{e\mathcal{H}} k_x \right) \right] \phi_{X^-} (r, R, R_0) \Big\} \qquad (4.67)$$

avec :

$$\phi_{X^-} (r, R, R_0) = \phi_{X^-} (r, \frac{r}{2} , R_0) . \qquad (4.68)$$

Nous pouvons faire apparaître l'expression de la transformation unitaire déjà définie au chapitre précédent (3.16), en rajoutant et retranchant la quantité $(1 + \sigma)/(1 + 2\sigma)\, xY_0$ dans la deuxième exponentielle de la relation (4.67). Nous obtenons :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = S^{-1} \int_S \Big\{ d^2R_0\, d^2r \exp -i\Big(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} k_x\, x \Big) \exp -i\big(k_x X_0 \big)$$

$$\exp \frac{ie\mathcal{H}}{2\hbar c} \Big[\Big(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} \Big)^2 xy + \frac{1+\sigma}{1+2\sigma} xY_0 + \frac{1+\sigma}{1+2\sigma} yX_0 + X_0Y_0 \pm \frac{1+\sigma}{1+2\sigma} xY_0 \Big]$$

$$\Phi_N \Big[\sqrt{\frac{e\mathcal{H}}{\hbar c}} \Big(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} y + Y_0 - \frac{c\hbar}{e\mathcal{H}} k_x \Big) \Big] \phi_{X^-} \Big(r, \frac{r}{2}, R_0 \Big) \Big\}$$

$$= S^{-1} \int_S \Big\{ d^2R_0\, d^2r \exp -i\Big(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} k_x\, x \Big)$$

$$\exp -i\big(k_x X_0 \big) \exp \frac{ie\mathcal{H}}{2\hbar c} \Big[\Big(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} \Big) (yX_0 - xY_0) + X_0Y_0 \Big]$$

$$\exp \frac{ie\mathcal{H}}{\hbar c} \frac{1+\sigma}{1+2\sigma} \Big[xY_0 + \frac{1}{2} \frac{1+\sigma}{1+2\sigma} xy \Big]$$

$$\Phi_N \Big[\sqrt{\frac{e\mathcal{H}}{\hbar c}} \Big(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} y + Y_0 - \frac{c\hbar}{e\mathcal{H}} k_x \Big) \Big] \phi_{X^-} \Big(r, \frac{r}{2}, R_0 \Big) \Big\}. \qquad (4.69)$$

Nous remarquons que l'expression ($yX_0 - xY_0$) peut être exprimée en fonction du produit scalaire $\mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{R}_0$, en tenant compte des relations (4.66) :

$$yX_0 - xY_0 = -\frac{4}{\mathcal{H}} \mathbf{A}(\mathbf{R}) \cdot \mathbf{R}_0 . \qquad (4.70)$$

En reportant cette expression dans le développement (4.69), ce dernier s'écrit :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = S^{-1} \int_S \Big\{ d^2R_0\, d^2r \exp -i\Big(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} k_x\, x \Big)$$

$$\exp \frac{ie\mathcal{H}}{\hbar c} \Big(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} \Big) \Big[xY_0 + \frac{1}{2} \frac{1+\sigma}{1+2\sigma} xy \Big] \cdot$$

$$\Phi_N \Big[\sqrt{\frac{e\mathcal{H}}{\hbar c}} \Big(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} y + Y_0 - \frac{c\hbar}{e\mathcal{H}} k_x \Big) \Big] \cdot$$

$$\exp -i\left[\left(K + \frac{2e}{\hbar c}\,\frac{1+\sigma}{1+2\sigma}\,A(R)\right).R_0 - \frac{e\mathcal{H}}{2\hbar c}\,X_0Y_0\right]\phi_{X^-}\left(r, \frac{r}{2}, R_0\right)\Big\}. \qquad (4.71)$$

Au chapitre III nous avons introduit la transformation canonique (3.15) :

$$\phi_{X^-}(r,R,R_0) = U\,\Phi_{X^-}(r,R,Y_0)\,, \qquad (4.72)$$

que nous pouvons encore écrire :

$$U^{-1}\,\phi_{X^-}(r,R,R_0) = \Phi_{X^-}(r,R,Y_0)\,, \qquad (4.73)$$

avec :

$$U^{-1} = \exp -i\left[\left(K + \frac{2e}{\hbar c}\,\frac{1+\sigma}{1+2\sigma}\,A(R)\right).R_0 - \frac{e\mathcal{H}}{2\hbar c}\,X_0Y_0\right], \qquad (4.74)$$

où nous avons introduit le vecteur $K \equiv (k_x\,,\,0)$, différent du vecteur d'onde K_0 du centre de masse à champ nul. Dans ces conditions, l'expression des coefficients se simplifie considérablement et nous pouvons écrire :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = S^{-1}\int_S\Big\{d^2R_0\,d^2r\,\exp -i\left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma}\,k_x\,x\right)$$
$$\exp\frac{ie\mathcal{H}}{\hbar c}\left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma}\right)\left[xY_0 + \frac{1}{2}\,\frac{1+\sigma}{1+2\sigma}\,xy\right].$$
$$\Phi_N\left[\sqrt{\frac{e\mathcal{H}}{\hbar c}}\left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma}\,y + Y_0 - \frac{c\hbar}{e\mathcal{H}}\,k_x\right)\right]\Phi_{X^-}\left(r, \frac{r}{2}, Y_0\right)\Big\}. \qquad (4.75)$$

Nous remarquons, que l'intégrale ci-dessus est indépendante de la coordonnée X_0. Par conséquent, l'intégration sur cette dernière se reduit à $\delta_{K_x\,k_x}$. Celà nous permet d'écrire que :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = S^{-1}\,\delta_{K_x\,k_x} \int_S \Big\{ dY_0\, d^2r \exp -i\left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} K_x\, x\right)$$

$$\exp \frac{ie\mathscr{H}}{\hbar c}\left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma}\right)\left[xY_0 + \frac{1}{2}\,\frac{1+\sigma}{1+2\sigma}\,xy\right] .$$

$$\Phi_N\left[\sqrt{\frac{e\mathscr{H}}{\hbar c}}\left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma}\,y + Y_0 - \frac{c\hbar}{e\mathscr{H}} K_x\right)\right] \Phi_{X^-}\left(r, \frac{r}{2}, Y_0\right)\Big\}. \qquad (4.76)$$

Nous avons vu au chapitre III que, pour des valeurs suffisamment faibles du champ magnétique, la fonction d'onde Φ_{X^-} s'écrit sous forme d'un produit de deux fonctions, décrivant respectivement le mouvement relatif et celui du centre de masse chargé. D'autre part, nous savons que le mouvement de ce dernier est beaucoup plus lent comparé à celui du mouvement relatif. En se basant sur ces approximations, nous pouvons nous limiter au premier terme du développement en série de la deuxième exponentielle intervenant dans l'expression (4.76), et pouvons écrire :

$$\Phi_N\left[\sqrt{\frac{e\mathscr{H}}{\hbar c}}\, Y_0\left(1 + \frac{1+\sigma}{1+2\sigma}\,\frac{y}{Y_0} - \frac{Y_0^0}{Y_0}\right)\right] \simeq \Phi_N\,(Y_0)\,, \qquad (4.77)$$

où $Y_0^0 = \frac{c\hbar}{e\mathscr{H}} K_x$, représente la position autour de laquelle s'effectuent les oscillations du centre de masse du trion X^-. Par conséquent :

$$\Phi_{X^-}(r, R, Y_0) \simeq \phi_{rel}\, \Phi_{N'}(Y_0)\,. \qquad (4.78)$$

Compte tenu de ce qui précède, nous pouvons écrire (4.76) sous la forme :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = S^{-1}\,\delta_{K_x\,k_x} \int_S \Big\{ dY_0\, d^2r \exp -i\left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} K_x\, x\right)$$

$$\Phi_N(Y_0)\,\Phi_{N'}(Y_0)\,\phi_{rel}\left(r, \frac{r}{2}\right)\Big\}, \qquad (4.79)$$

où les fonctions Φ_N sont supposées normées. Par conséquent l'intégration sur Y_0 conduit à :

$$S^{-1} \int dY_0 \, \Phi_N (Y_0) \, \Phi_{N'} (Y_0) = \delta_{NN'} . \qquad (4.80)$$

Finalement, nous obtenons :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = \delta_{K_x k_x} \; \delta_{NN'} \int_S d^2r \exp -i \left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} K_x x \right) \phi_{rel} \left(r, \frac{r}{2} \right) . \qquad (4.81)$$

Nous pouvons donc déjà affirmer que les transitions ne sont permises que si $K_x = k_x$ et $N = N'$.

■ Probabilité de transition et coefficient d'absorption

Dans ce paragraphe, nous allons établir l'expression explicite de la probabilité de transition monophotonique, pour la direction perpendiculaire du champ à partir de la relation (4.17) :

$$W^{if}_{abs} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,f} | H'_{abs} |^2 \, \delta (E_f - E_i - \hbar\omega) . \qquad (4.82)$$

Comme les mouvements oscillatoires des quasi-particules chargées e et X^- s'effectuent autour de la position $Y^0_0 = \frac{c\hbar}{e\mathcal{H}} K_x$, les états possibles K_x peuvent prendre des valeurs comprises dans l'intervalle $[0, L_Y]$:

$$0 \leq Y^0_0 \leq L_Y$$

ou :

$$0 \leq K_x \leq \frac{e\mathcal{H}}{c\hbar} L_Y . \qquad (4.83)$$

La probabilité de transition intégrée s'écrit alors :

$$W^{if}_{abs} = \frac{2\pi}{\hbar} 2 \frac{L_X}{2\pi} \int_0^{\frac{e\mathcal{K}}{c\hbar} L_Y} | H'_{abs} |^2 \delta (E_f - E_i - \hbar\omega) dK_x , \qquad (4.84)$$

où nous avons utilisé les mêmes notations que ci-dessus. Nous obtenons :

$$W^{if}_{abs} = \frac{8\pi N_p L_X}{m^2 n^2 \omega q_\lambda} | \epsilon.D |^2 \int_0^{\frac{e\mathcal{K}}{c\hbar} L_Y} I_{X^-} (K_x) \delta (E_f - E_i - \hbar\omega) dK_x , \qquad (4.85)$$

avec :

$$I_{X^-} (K_x) = \left| \sum_{k'N'} C^*_{k'N'kNk'N'} \right|^2$$

$$= \left| \delta_{K_x k_x} \delta_{NN'} \int_S d^2r \exp -i(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} K_x x) \phi_{rel} (r, r/2) \right|^2 . \qquad (4.86)$$

Nous remarquons que la différence d'énergie ($E_f - E_i - \hbar\omega$) est indépendante des états K_x et s'écrit :

$$E_f - E_i - \hbar\omega = E_g + E_{rel} + \hbar\omega_{cm} (N + \frac{1}{2}) - \hbar\omega_e (N' + \frac{1}{2}) - \hbar\omega . \qquad (4.87)$$

Comme les transitions ne sont permises que si $N = N'$, et en tenant compte du lien entre ω_{cm} et ω_e , l'expression ci-dessus s'écrit :

$$E_f - E_i - \hbar\omega = E_g + E_{rel} - (N + \frac{1}{2}) \alpha\hbar\omega_e - \hbar\omega , \qquad (4.88)$$

où :

$$\alpha = \frac{1+\sigma}{1+2\sigma}$$

et :

$$\omega_{cm} = \frac{\sigma}{1 + 2\sigma}\,\omega_e \,. \qquad (4.89)$$

Dans ces conditions, nous pouvons faire sortir l'expression $\delta (E_f - E_i - \hbar\omega)$ du signe intégrale. Nous obtenons ainsi :

$$W_{abs}^{if} = \frac{8\pi N_p L_X}{m^2 n^2 \omega q_\lambda} \mid \epsilon.D \mid^2 \left\{ \int_0^{\frac{e\mathcal{K}}{c\hbar}} L_Y \, I_{X^-} (K_x) \, dK_x \right\} \delta (E_f - E_i - \hbar\omega) \,, \qquad (4.90)$$

que nous pouvons encore écrire :

$$W_{abs}^{if} = A_0 \, \delta [E_g + E_{rel} - (N + \tfrac{1}{2}) \alpha\hbar\omega_e - \hbar\omega] \,, \qquad (4.91)$$

où A_0 désigne la constante :

$$A_0 = \frac{8\pi N_p L_X}{m^2 n^2 \omega q_\lambda} \mid \epsilon.D \mid^2 \left\{ \int_0^{\frac{e\mathcal{K}}{c\hbar}} L_Y \, I_{X^-} (K_x) \, dK_x \right\} . \qquad (4.92)$$

En appliquant la définition (4.55) du coefficient d'absorption, ce dernier s'écrit finalement :

$$\mu = \frac{n \, W_{abs}^{if}}{c \, N_p \, S} = \frac{n \, A_0}{c \, N_p \, S} \, \delta [E_g + E_{rel} - (N + \tfrac{1}{2}) \alpha\hbar\omega_e - \hbar\omega] \,. \qquad (4.93)$$

Nous constatons que le coefficient d'absorption se reduit à une série de pics de Dirac. Ce résultat est en accord avec nos prévisions initiales. Il traduit le fait que l'action du champ perpendiculaire donne lieu à une quantification totale des mouvements de l'électron et du trion qui décrivent des orbites circulaires quantifiées autour de la direction du champ.

IV.4.2 Coefficient d'absorption pour un champ parallèle au plan

Nous avons montré au chapitre III que, lorsque le champ magnétique est parallèle à la surface, le mouvement du centre de masse du trion X^- reste libre dans la direction du champ, et devient quantifié dans la direction perpendiculaire. Contrairement au cas précédent, nous verrons qu'il est possible d'observer ici le phénomène de magnéto-absorption oscillatoire. Ce dernier est lié à l'existence du mouvement libre des états d'électrons et de trous, selon la direction du champ.

- **Expression des coefficients $C_{\lambda i}$**

En utilisant, les mêmes procédures qu'au cas précédent, nous déterminons d'abord les coefficients C_{λ_i} , puis la probabilité de transition monophotonique et enfin le coefficient d'absorption. Nous avons vu aux chapitres précédents, que les états propres correspondant aux états $|\ i >$ et $|\ f >$ s'écrivent pour cette orientation particulière du champ :

$$E_i = \mathcal{E}_0 + E_g + \hbar\omega_e \left(N' + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e^*}$$

$$f^e_{\lambda_i} (r) = \exp (ik_x x) \Phi_{N'} \left[\sqrt{\frac{e\mathcal{H}}{2\hbar c}}\, y \right]$$

$$E_f = \mathcal{E}_0 + 2E_g + E_{rel} + \hbar\omega_{cm} \left(N + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 K_x^2}{2M_0}$$

$$\phi_{X^-} (r_1, r_2, r_3) = S^{-3/2} \sum_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3} C_{\lambda_1\lambda_2\lambda_3}\, f^e_{\lambda_1} (r_1)\, f^e_{\lambda_2} (r_2)\, f^h_{\lambda_3} (r_3). \quad (4.94)$$

Nous rappelons que ω_e et ω_{cm} sont les pulsations de résonance cyclotronique dues aux oscillations des quasi-particules e et X^- dans la direction perpendiculaire à celle du champ. Elles s'écrivent :

$$\omega_e = \frac{e\mathcal{H}}{2m_e^* c} \quad ; \quad \omega_{cm} = \frac{e\mathcal{H}}{2cM_0} . \tag{4.95}$$

Par un raisonnement analogue à celui du paragraphe précédent, la somme des coefficients C_{λ_i} intervenant dans les éléments de matrice correspondant aux transitions monophotoniques :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = S^{-1} \int d^2r_1 \, d^2r_2 \, \phi_{X^-}(r_1, r_2, r_1) \, f^{*e}_{kN}(r_2), \tag{4.96}$$

peut être réécrite sous la forme :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = S^{-1} \int_S \Big\{ d^2R_0 \, d^2r \exp -ik_x \left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} x + X_0 \right) \Phi_{N'} \left[\sqrt{\frac{e\mathcal{H}}{2\hbar c}} \left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} y + Y_0 \right) \right] \phi_{X^-}\left(r, \frac{r}{2}, R_0 \right) \Big\}. \tag{4.97}$$

Nous rappelons que, pour une orientation parallèle du champ, la composante π_x de l'opérateur défini en (3.12), est confondue avec la composante P_{0x} de l'opérateur quantité de mouvement du centre de masse. Par conséquent, la transformation canonique peut s'écrire dans ce cas :

$$U^{-1} \phi_{X^-}\left(r, \frac{r}{2}, R_0 \right) = \Phi_{X^-}\left(r, \frac{r}{2}, Y_0 \right)$$

avec :

$$U^{-1} = \exp -ik_x X_0 , \tag{4.98}$$

où k_x est la composante du vecteur d'onde K_0 du centre de masse, selon la direction du champ. Dans ces conditions, nous pouvons écrire la relation (4.97), sous la forme :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = S^{-1} \int_S \Big\{ d^2R_0\, d^2r \exp -i\Big(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} k_x\, x \Big)$$

$$\Phi_{N'} \left[\sqrt{\frac{e\mathscr{H}}{2\hbar c}} \left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} y + Y_0 \right) \right] \Phi_{X^-} \left(r, \frac{r}{2}, Y_0 \right) \Big\}. \qquad (4.99)$$

Comme l'expression sous le signe intégrale est indépendante de la coordonnée X_0 du centre de masse, l'intégration sur X_0 se ramène à $\delta_{K_x\, k_x}$ et :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = S^{-1}\, \delta_{K_x\, k_x} \int_S \Big\{ d^2Y_0\, d^2r \exp -i\Big(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} k_x\, x \Big)$$

$$\Phi_{N'} \left[\sqrt{\frac{e\mathscr{H}}{2\hbar c}} \left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} y + Y_0 \right) \right] \Phi_{X^-} \left(r, \frac{r}{2}, Y_0 \right) \Big\}. \qquad (4.100)$$

Dans le cadre de l'approximation du champ faible, décrite au paragraphe précédent, nous pouvons écrire :

$$\Phi_{X^-} \left(r, \frac{r}{2}, Y_0 \right) \simeq \phi_{rel} \left(r, \frac{r}{2} \right) \Phi_N \left(Y_0 \right)$$

et

$$\Phi_{N'} \left[\sqrt{\frac{e\mathscr{H}}{2\hbar c}}\, Y_0 \left(1 + \frac{1+\sigma}{1+2\sigma} \frac{y}{Y_0} \right) \right] \simeq \Phi_{N'} \left(Y_0 \right) . \qquad (4.101)$$

Dans ces conditions, nous obtenons :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = S^{-1}\, \delta_{K_x\, k_x} \int_S \Big\{ d^2Y_0\, d^2r \exp -i\Big(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} K_x\, x \Big)$$

$$\Phi_{N'} \left(Y_0 \right) \Phi_N \left(Y_0 \right) \phi_{rel} \left(r, \frac{r}{2} \right) \Big\}, \qquad (4.102)$$

en utilisant l'orthogonalité des fonctions Φ_N . Soit, finalement :

$$\sum_{k'N'} C_{k'N'kNk'N'} = \delta_{K_x\, k_x}\, \delta_{NN'} \int_S \left\{ d^2r \exp -i\left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} K_0.r \right) \phi_{rel}\left(r, \frac{r}{2} \right) \right\}, \qquad (4.103)$$

où K_0 est le vecteur d'onde du centre de masse de composantes $K_0 \equiv (K_x , 0)$.

■ **Probabilité de transition et coefficient d'absorption**

Entre les états $| i >$ et $| f >$, la probabilité de transition est donnée par :

$$W^{if}_{abs} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{i,f} | H'_{abs} |^2 \delta (E_f - E_i - \hbar\omega) . \qquad (4.104)$$

$| H'_{abs} |^2$ désigne les éléments de matrice des transitions monophotoniques qui s'écrivent pour $K_x = k_x$:

$$| H'_{abs} |^2 = \frac{4\pi\hbar N_p}{m^2 n^2 \omega_{q_\lambda}} | \epsilon.D |^2 I_{X^-}(K_x) , \qquad (4.105)$$

avec :

$$I_{X^-}(K_x) = \left| \sum_{k'N'} C^*_{k'N'kNk'N'} \right|^2$$

$$= \left| \delta_{K_x\, k_x}\, \delta_{NN'} \int_S \left\{ d^2r \exp -i\left(\frac{1+\sigma}{1+2\sigma} K_0.r \right) \phi_{rel}\left(r, \frac{r}{2} \right) \right\} \right|^2 . \qquad (4.106)$$

Comme les vecteurs d'onde correspondant aux états $| i >$ et $| f >$ n'interviennent que par leurs composantes selon l'axe x (axe selon lequel est orienté le champ), nous pouvons transformer la sommation discrète de l'expression (4.104), en une sommation continue dans l'espace des k. Compte tenu des développements précédents, nous obtenons :

$$W^{if}_{abs} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{2L_X}{2\pi} \frac{4\pi\hbar N_p}{m^2 n^2 \omega_{q_\lambda}} | \epsilon.D |^2 \int_0^\infty I_{X^-}(K_x) \delta (E_f - E_i - \hbar\omega) dK_x . \qquad (4.107)$$

En tenant compte des règles de selection ci-dessus, les transitions permises sont caractérisées par $K_x = k_x$ et $N = N'$. Dans ces conditions, la différence d'énergie $E_f - E_i - \hbar\omega$ s'écrit :

$$E_f - E_i - \hbar\omega = E_g + E_{rel} - \alpha\hbar\omega_e (N + \frac{1}{2}) - \alpha \frac{\hbar^2 K^2_x}{2m^*_e} - \hbar\omega , \qquad (4.108)$$

où $\alpha = \frac{1 + \sigma}{1 + 2\sigma}$. (4.109)

L'intégrale de la relation (4.107) s'obtient en utilisant une des proprietés des fonctions de Dirac :

$$\int_a^b g (x) \delta [f(x)] dx = \sum_{x_0} g (x_0) \left| \frac{dx}{df} \right|_{x = x_0} , \qquad (4.110)$$

où x_0 désigne la racine de f(x), comprise dans l'intervalle [a, b]. Dans notre cas, f(x) et g(x) sont définies par :

$$f(K_x) = E_f - E_i - \hbar\omega$$

et

$$g(K_x) = I_{X^-}(K_x) . \qquad (4.111)$$

Les expressions de la racine positive κ de f(K_x) et de la quantité $\left| \frac{dK_x}{df} \right|_{K_x = \kappa}$ s'écrivent :

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m^*_e}{\alpha\hbar^2}} [E_g + E_{rel} - \alpha\hbar\omega_e (N + \frac{1}{2}) - \hbar\omega]^{\frac{1}{2}} = \kappa(\omega)$$

et

$$\left| \frac{dK_X}{df} \right|_{K_X = \kappa} = \sqrt{\frac{m^*_e}{2\alpha\hbar^2}} \left[E_g + E_{rel} - \alpha\hbar\omega_e \left(N + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega \right]^{-\frac{1}{2}} . \qquad (4.112)$$

Dans ces conditions, la probabilité de transition s'écrit :

$$W^{if}_{abs} = \frac{8\pi N_p L_X}{m^2 n^2 \omega_{q_\lambda}} | \epsilon.D |^2 \frac{\sqrt{\frac{m^*_e}{2\alpha\hbar^2}} I_{X^-} [\kappa(\omega)]}{\left[E_g + E_{rel} - \alpha\hbar\omega_e \left(N + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega \right]^{1/2}} . \qquad (4.113)$$

Finalement, l'expression du coefficient d'absorption s'écrit :

$$\mu = \frac{n W^{if}_{abs}}{c N_p S}$$

$$= \frac{8\pi | \epsilon.D |^2}{cnm^2 L_Y} \sqrt{\frac{m^*_e}{2\alpha}} \frac{I_{X^-} [\kappa(\omega)]}{\hbar\omega_{q_\lambda} \left[E_g + E_{rel} - \alpha\hbar\omega_e \left(N + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega \right]^{1/2}} . \qquad (4.114)$$

Dans le système d'unités atomiques défini au chapitre III, $\kappa(\omega)$ et μ s'écrivent encore :

$$\kappa^{u.a}(\omega) = \sqrt{\frac{2}{\alpha}} \left[\omega_0 - \alpha\gamma \left(N + \frac{1}{2} \right) - \omega \right]^{\frac{1}{2}}$$

et

$$\mu^{u.a} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \frac{I_{X^-} [\kappa^{u.a}(\omega)]}{\omega \left[\omega_0 - \alpha\gamma \left(N + \frac{1}{2} \right) - \omega \right]^{1/2}} , \qquad (4.115)$$

où $\gamma = \frac{\hbar\omega_e}{2R_Y}$. (4.116)

Le calcul de l'expression de $I_{X^-} [\kappa^{u.a}(\omega)]$ est analogue à celui développé au paragraphe IV.3.2.

Nous constatons que dans le cas d'un champ parallèle au plan, le coefficient d'absorption est une fonction oscillatoire décroissante de la pulsation. Ce résultat est dû au fait que dans cette géométrie l'action du champ magnétique ne donne pas lieu à une quantification totale.

Dans le cas général d'un champ orienté de façon quelconque par rapport au plan, la situation est intermédiaire entre les deux cas limites discutés ci-dessus. En conséquence, nous suggérons que la variation de l'orientation du champ par rapport au plan pourrait constituer un moyen intéressant d'identification des trions excitoniques dans les milieux quasi-bidimensionnels.

IV.5 RESULTATS NUMERIQUES ET DISCUSSION

Nous avons calculé numériquement les coefficients d'absorption avec et sans champ en utilisant les fonctions d'onde variationnelles à vingt deux termes obtenues aux chapitres II et III en fonction du rapport σ des masses effectives de l'électron et du trou ainsi que de l'intensité du champ effectif γ. Nous limitons notre étude au cas de transitions entre un état initial d'électron libre et un état de trion négatif X^-. Le cas du trion positif X^+_2 se traite de façon tout à fait analogue.

Nous avons vu ci-dessus que les énergies $h\nu_{X^-}$ des photons intervenant dans ces transitions sont données par :

$$h\nu_{X^-} = h\nu_X + W_{X^-} + E_L^N(X^-) - E_L^{N'}(e) \qquad \mathscr{H} \text{ per. au plan}$$

$$h\nu_{X^-} = h\nu_X + W_{X^-} + \frac{\hbar^2 K_x^2}{2M_0} + E_L^N(X^-) - E_L^{N'}(e) - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e} \qquad \mathscr{H} \text{ para. au plan} \tag{4.117}$$

où W_{X^-} représente l'énergie de liaison du trion X^- définie à partir de l'énergie relative $E_{rel}(X^-)$ par la relation :

$$E_{rel}(X^-) = E_X + W_{X^-} . \tag{4.118}$$

Dans la figure (4.1), nous représentons schématiquement le diagramme de ces transitions.

Dans la figure (4.2) nous avons représenté les variations du coefficient d'absorption à champ nul en fonction de l'écart de "fréquences" $\Delta\omega$ relatif à la "fréquence" ω_0 correspondant au bord d'absorption pour quelques valeurs significatives du rapport des masses effectives. Nous remarquons que l'allure des raies d'absorption est analogue à celles que l'on observe dans le cas des biexcitons et des trions dans les semiconducteurs massifs : un bord d'absorption accompagné par une "queue" décroissante vers les basses énergies. Seule change la forme de la raie lorsqu'on passe de 3D à 2D. Nous remarquons également que le coefficient d'absorption est d'autant plus important que le trou est plus lourd. Ceci est dû au fait que l'énergie de liaison est la plus importante dans ce cas et que l'intensité d'oscillateur est proportionnelle à la probabilité pour que les positions de l'électron et du trou soient confondues.

Dans les figures (4.3) et (4.4) nous avons représenté les mêmes variations en présence d'un chmap magnétique perpendiculaire ou parallèle au plan du semiconducteur. Dans le premier cas nous avons vu ci-dessus que les raies d'absorption se réduisaient à des pics de Dirac, par suite des effets de confinement. Dans le cas d'un champ parallèle, nous obtenons, comme dans le cas du trion 3D, une série d'oscillations de Landau analogue à celles que l'on observe pour des particules libres chargées. La seule différence réside dans le fait que les bords d'absorption sont accompagnées de "queues" décroissant vers les basses énergies et non vers les grandes énergies comme dans le cas des particules libres. L'écart entre les différents bords d'absorption est proportionnel à l'intensité du champ magnétique ainsi qu'à la valeur du rapport des masses effectives.

Nous pensons que l'originalité de ces spectres devrait être de nature à faciliter l'identification expérimentale des trions excitoniques dans les milieux quasi-bidimensionnels.

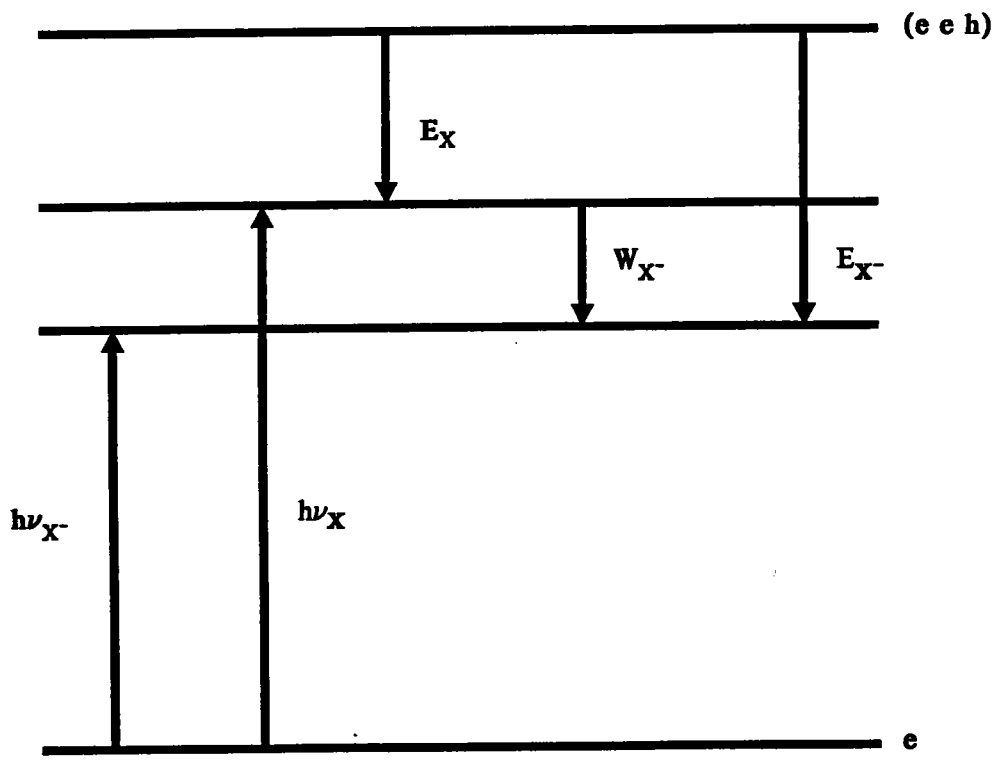


Fig. 4.1 : Diagramme des transitions entre un état initial d'électron libre et un état final de trion négatif X^-.

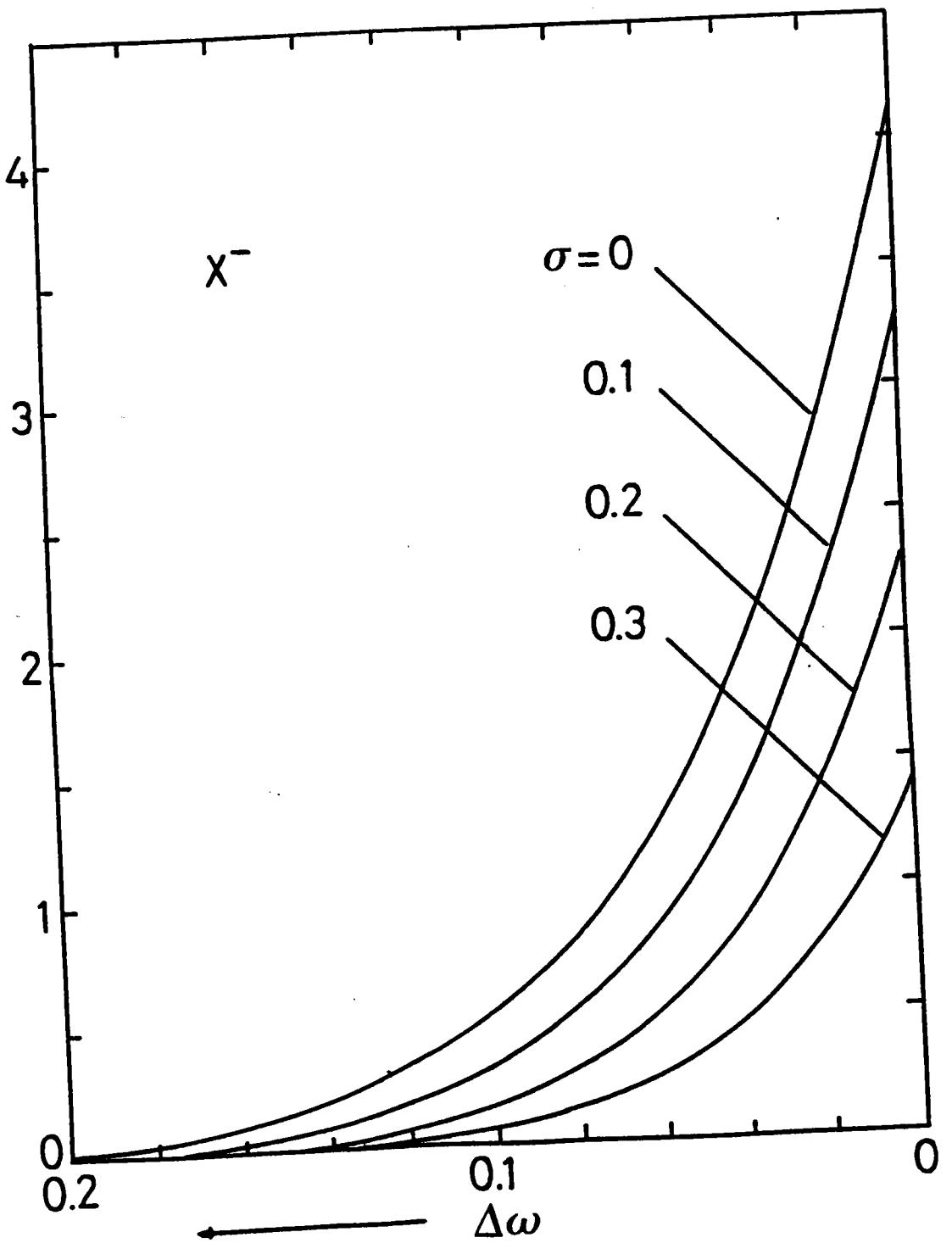


Fig. 4.2 : Variation du coefficient d'absorption à champ nul en fonction de l'écart $\Delta\omega$ relatif à la pulsation ω_0 du bord d'absorption pour quelques valeurs de σ.

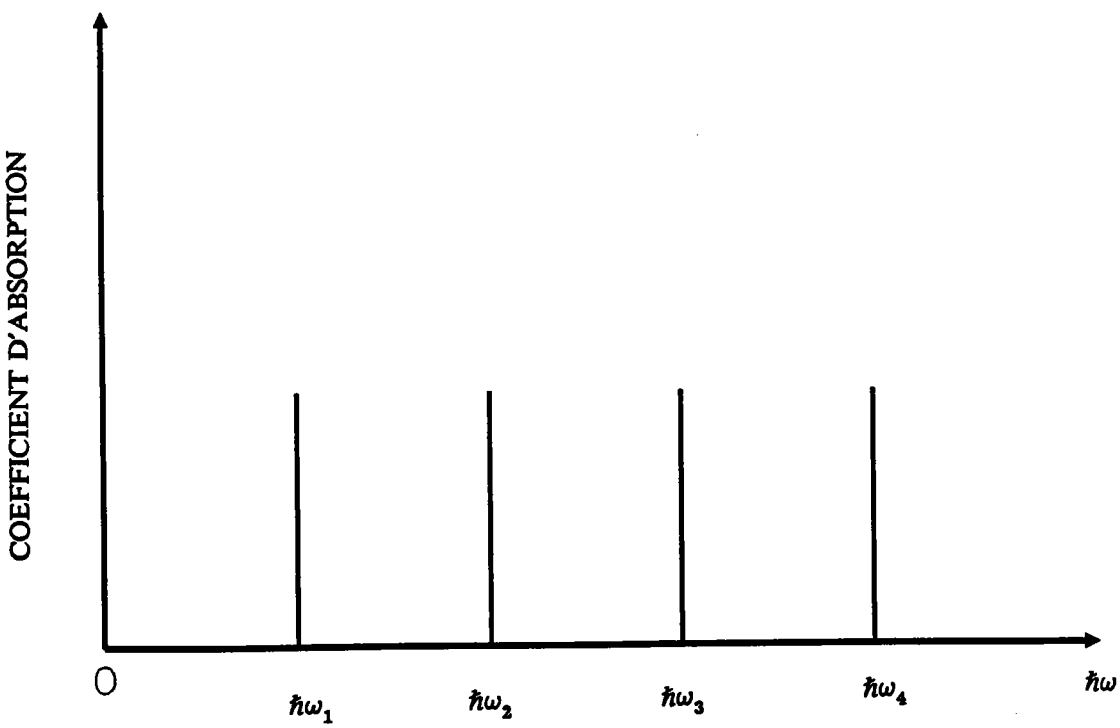


Fig. 4.3 : Magnéto-absorption oscillatoire du trion négatif X^- sous l'action d'un champ magnétique perpendiculaire au plan.

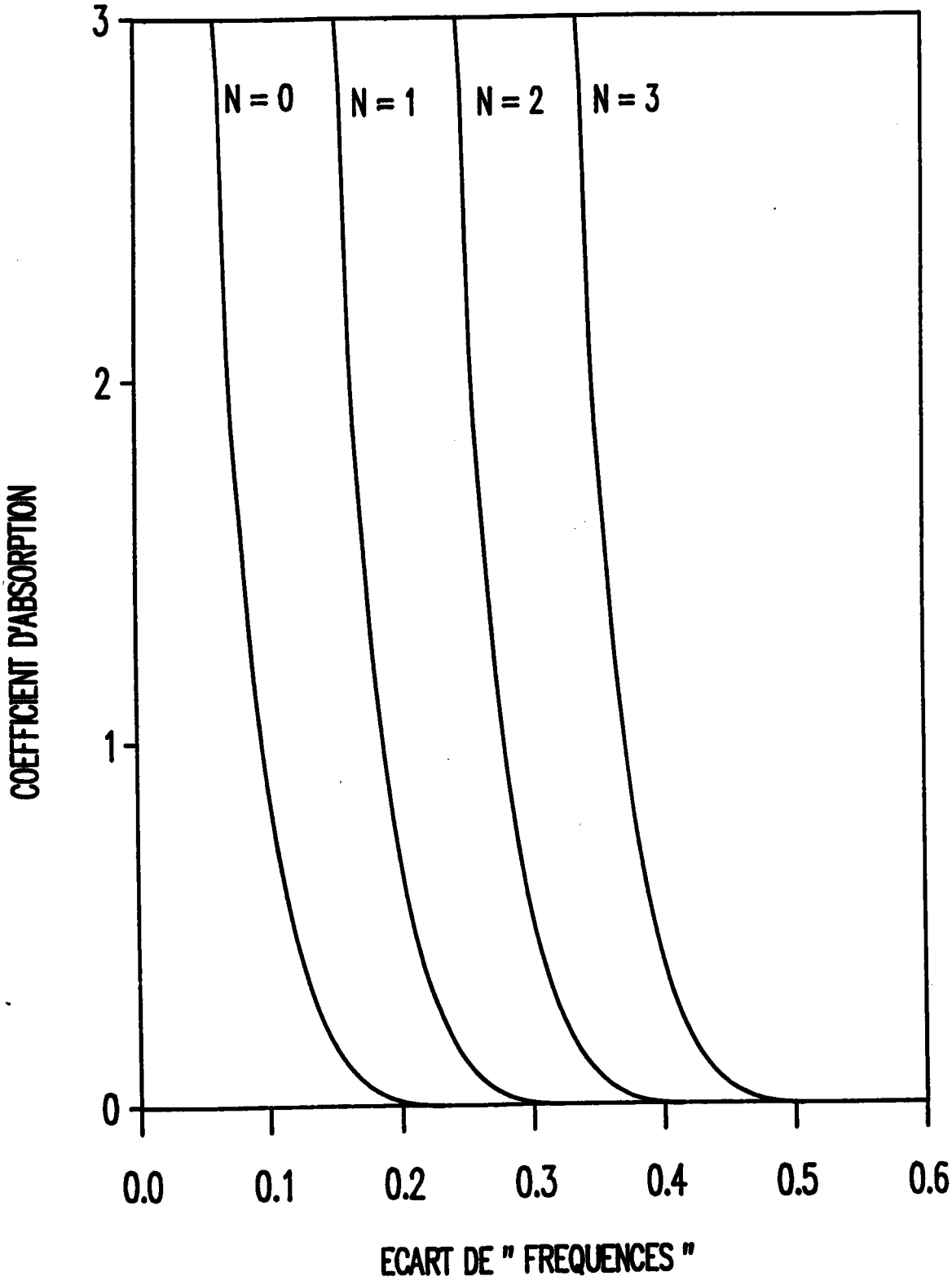


Fig. 4.4 : Magnéto-absorption oscillatoire du trion X^- pour $\mathscr{H}$ parallèle au plan.

CONCLUSION GENERALE

Le présent travail a été consacré à l'étude des trions excitoniques dans les semiconducteurs bidimensionnels en présence ou non d'un champ magnétique extérieur. Il a été motivé par le fait que ces quasi-particules libres et chargées sont susceptibles de donner lieu à des effets originaux liés à leur mobilité et à leur charge, en particulier dans les milieux quasi-bidimensionnels.

A notre connaissance, il n'existe pas encore d'identification certaine de trions excitoniques dans les super-réseaux semiconducteurs ou dans les puits quantiques, bien que certaines observations récentes laissent envisager leur présence.

Notre étude a permis de montrer, qu'en l'absence de champ magnétique, ces quasi-particules étaient beaucoup plus stables dans les semiconducteurs bidimensionnels que dans les semiconducteurs massifs. Par conséquent, leur observation devrait être grandement facilitée dans ce dernier cas. Nous envisageons même une possible observation à température ambiante. Nous avons montré que la forme des raies d'absorption est différente de celle des excitons et autres complexes excitoniques localisés. Ceci devrait faciliter leur identification. Il est à remarquer que les porteurs de charges libres nécessaires aux transitions pourraient être aisément obtenus, dans le cas des super-réseaux semiconducteurs, par un dopage sélectif des semiconducteurs dont la largeur de bande interdite est la plus grande.

Nous avons montré que l'action d'un champ magnétique sur les trions conduit à un renforcement et une quantification supplémentaire des énergies. De plus, nous avons mis en évidence l'influence déterminante de l'orientation du champ magnétique par rapport à la surface du semiconducteur sur le degré de quantification. Cette dernière est totale pour un champ perpendiculaire au plan et minimale pour un champ parallèle au plan. Pour des champs magnétiques pas trop élevés, les trions se

comportent globalement comme des quasi-particules libres et chargées. Dans ces conditions, le champ magnétique donne lieu à des niveaux de Landau comme dans le cas 3D. Pour un champ perpendiculaire, la magnéto-absorption se réduit à une série de pics de Dirac. Par contre, dans le cas limite d'un champ parallèle, elle donne lieu à une série de raies décroissantes vers les basse énergies, à partir d'un bord d'absorption principal. Ces résultats sont originaux et spécifiques aux trions excitoniques.

Nous espérons que ce travail puisse susciter de nouvelles expériences et contribuer à la mise en évidence et à l'identification des trions excitoniques dans les milieux quasi-bidimensionnels.

APPENDICES

APPENDICE IA

- QUANTIFICATION DE L'ENERGIE D'UNE PARTICULE LIBRE SOUMISE A L'ACTION D'UN CHAMP MAGNETIQUE UNIFORME DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS

- Champ perpendiculaire au plan
- Champ parallèle au plan

APPENDICE IB

- RESOLUTION DE L'EQUATION EFFECTIVE DE L'EXCITON EN PRESENCE DU CHAMP MAGNETIQUE DANS LES MILIEUX BIDIMENSIONNELS

APPENDICE IA

QUANTIFICATION DE L'ENERGIE D'UNE PARTICULE LIBRE SOUMISE A L'ACTION D'UN CHAMP MAGNETIQUE UNIFORME DANS LES SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS

Le mouvement d'une particule chargée dans un champ magnétique constant est traité en théorie quantique par plusieurs auteurs, notamment dans les semiconducteurs massifs (JOHNSON et LIPPMANN, 1949).

Dans cet appendice, nous allons étudier l'influence d'un champ magnétique sur une particule libre de charge (- e), mobile dans les semiconducteurs strictement bidimensionnels. Nous nous plaçons dans le cadre de l'approximation de la masse effective. L'Hamiltonien décrivant le mouvement de la particule chargée est donné par :

$$H = \frac{1}{2m_e^*} \left[\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right]^2 , \qquad (IA.1)$$

où m_e^* représente la masse effective de l'électron, $\mathbf{p}$ est le vecteur quantité de mouvement et $\mathbf{A}$ représente le potentiel vecteur et $(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A})$ peut être désignée sous le nom de quantité de mouvement généralisée (KIREEV 1975). Nous choisissons la la jauge de Coulomb par la relation :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mathscr{H} \times \mathbf{r} . \qquad (IA.2)$$

Dans cette jauge, nous pouvons vérifier facilement la commutation des opérateurs **p** et **A**. En effet :

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} = -i\hbar \operatorname{div} \mathbf{A}(\mathbf{r}), \qquad (\text{IA.3})$$

dans ces conditions, l'Hamiltonien du système peut s'écrire :

$$H = \frac{p^2}{2m_e^*} + \frac{e}{m_e^* c} A.p + \frac{e^2}{2m_e^* c^2} A^2 . \qquad (\text{IA.4})$$

■ **Champ perpendiculaire au plan**

Considérons une particule chargée et libre, soumise à l'action d'un champ magnétique uniforme $\mathcal{H}$ dirigé selon oz. Alors $\mathbf{A} \equiv \left(-\frac{\mathcal{H}}{2} y, \frac{\mathcal{H}}{2} x, 0 \right)$. Afin de déterminer les états propres de la particule, nous allons résoudre l'équation de Schrödinger suivante :

$$\frac{1}{2m_e^*}\left[\left(p_x - \frac{e\mathcal{H}}{2c} y \right)^2 + \left(p_y + \frac{e\mathcal{H}}{2c} x \right)^2 \right] \Psi(x,y) = E\,\Psi(x,y), \qquad (\text{IA.5})$$

que nous réécrivons encore :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\partial^2_{x^2} + \partial^2_{y^2} \right) + \frac{1}{2m_e^*} \left(\frac{e\mathcal{H}}{2c} \right)^2 (x^2 + y^2) + \frac{i\hbar}{2m_e^*} \frac{e\mathcal{H}}{c} \left(y\partial_x - x\partial_y \right) \right] \Psi(x,y) = E\,\Psi(x,y). \qquad (\text{IA.6})$$

Nous remarquons que le vecteur quantité de mouvement et la quantité de mouvement généralisée ne commutent pas avec l'Hamiltonien. Par contre, nous vérifions facilement que l'opérateur :

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}, \qquad (\text{IA.7})$$

est une constante du mouvement ($[\pi_x , H] = [\pi_y , H] = 0$), bien que ses composantes ne commutent pas entre elles. Il existe donc une base de fonctions propres commune entre les opérateurs π_x et H ou π_y et H. Par suite, nous nous proposons de déterminer la base commune à π_x et à H, en résolvant l'équation :

$$\left[-i\hbar \partial_x + \frac{e\mathcal{H}}{2c} y \right] \Psi(x,y) = \hbar k_x \Psi (x,y), \qquad (IA.8)$$

où $\hbar k_x$ désigne la valeur propre de l'opérateur π_x , la résolution de l'équation différentielle du premier ordre ci-dessus donne lieu à la fonction d'onde suivante :

$$\Psi (x,y) = \exp (ik_x x) \exp (-\frac{ixy}{2l^2}) \Phi (y), \qquad (IA.9)$$

où $l^2 = \frac{c\hbar}{e\mathcal{H}}$. (IA.10)

En reportant l'expression de la fonction d'onde $\Psi (x,y)$ dans la relation (IA.6) nous obtenons une équation relative à la fonction $\Phi (y)$:

$$\frac{d^2\Phi(y)}{dy^2} + \frac{2m_e^*}{\hbar^2}\left[E - \frac{m_e^*}{2}(\frac{e\mathcal{H}}{m_e^* c})^2 (y - y_0)^2 \right] \Phi (y) . \qquad (IA.10)$$

Cette dernière est analogue à celle d'un oscillateur harmonique de masse m_e^* et de pulsation $\omega_e = \frac{e\mathcal{H}}{m_e^* c}$ et dont les oscillations s'effectuent autour du point $y_0 = \frac{c\hbar}{e\mathcal{H}} k_x$.
L'énergie de l'oscillateur est :

$$E = E_N = \hbar\omega_e (N + \frac{1}{2}) \quad , \quad N = 0,1,2,.... \qquad (IA.11)$$

Nous constatons que lorsque la particule se déplace dans le plan xoy, perpendiculaire au champ magnétique, elle décrit une circonférence à une vitesse angulaire ω_e , que l'on appelle " fréquence " de cyclotron. Par conséquent, l'énergie d'une particule effectuant un tel mouvement est quantifiée.

Les fonctions d'onde correspondantes sont :

$$\Psi (x,y) = \mathcal{A} \exp (ik_x x) \exp (- \frac{ixy}{2l^2}) .$$
$$. \exp [- \frac{(y - y_0)^2}{2l^2}] H_N [\frac{(y - y_0)}{l}], \qquad (IA.12)$$

où $\mathcal{A}$ est une constante de normation, H_N représente un polynôme d'Hermite de degré N.

■ Champ parallèle au plan

Contrairement au cas précédent, nous verrons que lorsque le champ magnétique est orienté parallèlement à la surface $\mathcal{H} \equiv (\mathcal{H}, 0, 0)$ le mouvement de la particule reste libre dans la direction du champ et devient quantifié dans la direction perpendiculaire. En effet l'expression de l'Hamiltonien (IA.4) s'écrit dans ce cas particulier :

$$H = \frac{p^2}{2m_e^*} + \frac{1}{2m_e^*} \frac{e^2}{c^2} A^2 . \qquad (IA.13)$$

Dans ces conditions, l'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$\left[\frac{1}{2m_e^*} (p^2_x + p^2_y) + \frac{1}{2m_e^*} \frac{e^2}{c^2} (\frac{\mathcal{H}}{2})^2 y^2 \right] \Psi (x,y) = E \Psi (x,y). \qquad (IA.14)$$

Nous remarquons que l'opérateur H ne contient pas explicitement la coordonnée x. Par ailleurs, les opérateurs p_x et H commutent donc il existe une base commune à p_x et à H que nous déterminons :

$$-i\hbar \partial_x \Psi (x,y) = \hbar k_x \Psi (x,y) , \qquad (IA.15)$$

$\hbar k_x$ représente la valeur propre de p_x parcourant toutes les valeurs de $-\infty$ à $+\infty$. La résolution de l'équation (IA.15) conduit à :

$$\Psi (x,y) = e^{(ik_x x)} \Phi (y) ,$$

(IA.16)

nous reportons cette dernière dans l'équation de Schrödinger (IA.14), nous obtenons :

$$\frac{d^2 \Phi(y)}{dy^2} + \frac{2m_e^*}{\hbar^2}\left[E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e^*} - \frac{m_e^*}{2}\left(\frac{e\mathcal{H}}{2m_e^* c} \right)^2 y^2 \right] \Phi(y) = 0, \qquad (IA.17)$$

équation d'un oscillateur harmonique de masse m_e^* de pulsation $\omega_e = \frac{e\mathcal{H}}{2m_e^* c}$ égale à la moitié de celle du cas précédent. L'énergie de cet oscillateur est :

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e^*} + \hbar\omega_e \left(N + \frac{1}{2} \right). \qquad (IA.18)$$

Cette dernière relation montre que le champ magnétique n'exerce aucune action sur le mouvement d'une particule se déplaçant suivant la direction du champ (le long de l'axe x) et que l'énergie correspondant à ce mouvement n'est pas quantifiée. Par contre l'énergie devient quantifiée dans la direction perpendiculaire au champ. Les fonctions propres s'écrivent :

$$\Psi(x,y) = \mathcal{A} \exp(ik_x x) \exp\left(- \frac{e\mathcal{H}}{4\hbar c} y^2 \right) H_N\left[\sqrt{\frac{e\mathcal{H}}{2\hbar c}}\, y \right]. \qquad (IA.19)$$

La généralisation de cette étude est possible pour un nombre de particules impair en présence d'un champ magnétique et dont la charge totale est différente de zéro.

APPENDICE IB

RESOLUTION DE L'EQUATION EFFECTIVE DE L'EXCITON EN PRESENCE DU CHAMP MAGNETIQUE DANS LES MILIEUX BIDIMENSIONNELS

Dans cet appendice, nous nous proposons de résoudre l'équation effective de la fonction d'onde enveloppe déjà établie au chapitre I par la relation (1.37). Dans ce qui suit, nous supposons que le milieu est non magnétique et nous nous plaçons dans le cadre de l'approximation de la masse effective.

Nous rappelons que dans les semiconducteurs strictement bidimensionnels, l'expression de l'Hamiltonien du système dépend de l'orientation du champ magnétique par rapport au plan du semiconducteur, contrairement au cas des semiconducteurs massifs. Nous allons résoudre l'équation effective pour les deux cas limites correspondant soit à une orientation suivant la direction perpendiculaire au plan : $\mathcal{H} \equiv (0,0,\mathcal{H})$, soit à une orientation parallèle à ce dernier $\mathcal{H} \equiv (\mathcal{H},0,0)$. Dans la jauge de Coulomb, l'Hamiltonien effectif relatif à l'exciton s'écrit :

$$H = \frac{1}{2m_e^*}\left(p_1 + \frac{e}{c} A_1 \right)^2 + \frac{1}{2m_h^*}\left(p_2 - \frac{e}{c} A_2 \right)^2 + \frac{e^2}{\epsilon \left| r_1 - r_2 \right|}, \qquad (IB.1)$$

où A_1 et A_2 désignent les potentiels vecteurs de l'électron et du trou, qui s'expriment en fonction du champ par :

$$A_i (r) = \frac{1}{2} \mathcal{H} \times r. \qquad (IB.2)$$

Les composantes du potentiel vecteur A_i (r) s'écrivent :

$$A_i(r) = \frac{\mathcal{H}}{2}(-y, x, 0) \quad (\mathcal{H} \text{ perpendiculaire au plan})$$

$$= \frac{\mathcal{H}}{2}(0, 0, y) \quad (\mathcal{H} \text{ parallèle au plan}). \qquad (IB.3)$$

A 3D, et en l'absence du champ magnétique, le mouvement du centre de masse se sépare du mouvement relatif . Dans ce qui suit, nous allons montrer que dans le cas de l'exciton en présence du champ magnétique il y a toujours séparation des deux mouvements quelle que soit l'orientation du champ. A cet effet, nous utilisons les coordonnées relatives à ses derniers définies par :

$$r = r_1 - r_2 \quad , \quad R = \frac{m_e^* r_1 + m_h^* r_2}{M} \quad , \quad M = m_e^* + m_h^* . \qquad (IB.4)$$

Dans ces conditions l'Hamiltonien transformé s'écrit :

$$H = H_0 + \zeta H_1 + H_2$$

avec :

$\zeta = 1$ ($\mathcal{H}$ perpendiculaire au plan)

$= 0$ ($\mathcal{H}$ parallèle au plan), (IB.5)

où

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_R - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_r - \frac{e^2}{\epsilon |r|}$$

$$H_1 = \frac{e\hbar}{ic}\left[\frac{1}{\mu} A(R).\nabla_r + \frac{1}{M} A(r).\nabla_R + \left(\frac{1}{m_e^*} - \frac{1}{m_h^*}\right) A(r).\nabla_r\right]$$

et

$$H_2 = \frac{e^2}{2c^2}\left[\frac{A^2(R)}{\mu} + \frac{1}{M^2}\frac{m_e^{*3} + m_h^{*3}}{m_e^* m_h^*} A^2(r) + 2\left(\frac{1}{m_e^*} - \frac{1}{m_h^*}\right) A(R).A(r)\right]$$

(IB.6)

avec :

$$M = m_e^* + m_h^* \quad , \quad \mu = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*} . \qquad (IB.7)$$

Nous vérifions que l'opérateur :

$$\pi = p_1 + p_2 - \frac{e}{c} [A (r_1) - A (r_2)]$$
$$= - i\hbar \nabla_R - \frac{e}{c} A (r), \qquad (IB.8)$$

est une constante du mouvement puisque le commutateur $[\pi , H] = 0$. Nous pouvons alors déterminer une base commune de fonctions propres à H et à π en résolvant l'équation différentielle ci-dessous :

$$\pi \Phi_X (r, R) = \hbar K \Phi_X (r, R). \qquad (IB.9)$$

Nous obtenons :

$$\Phi_X (r, R) = U \phi_X (r), \qquad (IB.10)$$

où l'opérateur unitaire U s'écrit :

$$U = \exp i [K + \frac{e}{\hbar c} A (r)].R \qquad (IB.11)$$

K représente le vecteur d'onde du centre de masse en présence du champ magnétique. Cette dernière relation servira par la suite pour obtenir une nouvelle expression de l'Hamiltonien effectif relatif à l'exciton. En effet la valeur moyenne de l'énergie de l'exciton dans les milieux bidimensionnels en présence d'un champ magnétique s'écrit :

$$E = \frac{< \Phi_X (r,R) | H | \Phi_X (r,R) >}{< \Phi_X (r,R) | \Phi_X (r,R) >}, \qquad (IB.12)$$

que nous pouvons réécrire sous la forme :

$$E = \frac{\langle \Phi_X(r) \mid H' \mid \Phi_X(r) \rangle}{\langle \Phi_X(r) \mid \Phi_X(r) \rangle}, \qquad (IB.13)$$

où H′ représente l'Hamiltonien transformé, qui s'écrit :

$$\begin{aligned} H' &= U^{-1} H U \\ &= \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon |r|} + \frac{\hbar^2 K^2}{2M} + \frac{e^2}{2\mu c^2} A^2(r) \\ &\quad + \zeta \left[\frac{2e\hbar}{cM} K.A(r) - \frac{e}{c}\left(\frac{1}{m_h^*} - \frac{1}{m_e^*} \right) A(r).p \right], \end{aligned} \qquad (IB.14)$$

avec :

$\zeta = 1$ si $\mathcal{H}$ est perpendiculaire au plan

$= 0$ si $\mathcal{H}$ est parallèle au plan

Finalement, l'Hamiltonien H′ peut s'écrire sous la forme d'une somme de quatre termes :

$$H' = H_1' + H_2' + H_3' + \zeta H_4'. \qquad (IB.15)$$

H_1' correspond au mouvement relatif en l'absence du champ magnétique :

$$H_1' = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon |r|}. \qquad (IB.16)$$

H_2' représente le mouvement du centre de masse non chargé de l'exciton :

$$H_2' = \frac{\hbar^2 K^2}{2M}. \qquad (IB.17)$$

Le troisième terme désigne l'effet diamagnétique quadratique en champ :

$$H_3' = \frac{e^2}{2\mu c^2} A^2(r). \qquad (IB.18)$$

Le quatrième terme représente à la fois l'effet d'un champ électrique induit par le champ magnétique extérieur et l'effet Zeeman linéaire en champ. Ces derniers

s'annulent pour une orientation du champ parallèle au plan :

$$H_4' = \zeta \left[\frac{2e\hbar}{cM} K.A(r) - \frac{e}{c}\left(\frac{1}{m_h^*} - \frac{1}{m_e^*} \right) A(r).p \right]$$

$$= \zeta \left[\frac{e}{c}(V \times \mathcal{H}).r - \frac{e}{2c}\left(\frac{1}{m_h^*} - \frac{1}{m_e^*} \right) \mathcal{H}.(r \times p) \right]$$

$$= \zeta \left[e\,E.r - \frac{e}{2c}\left(\frac{1}{m_h^*} - \frac{1}{m_e^*} \right) \mathcal{H}.L \right], \qquad (IB.19)$$

où E désigne le champ électrique induit, qui est perpendiculaire à la vitesse V du centre de masse et au champ $\mathcal{H}$. Tandis que L est le moment cinétique orbital dû à la rotation de l'électron et du trou autour du centre de masse. Cette étude peut être généralisée à un nombre de particules pair en champ magnétique, caractérisé par une charge totale nulle (exemple : le biexciton)

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

AINANE A., GARCIA L. et STEBE B. (1990) " 3ème Journées Nationales Microélectronique et Optoélectronique III-V " AUSSOIS, 12-14 Mars, sur affiche.

BENOIT A LA GUILLAUME C.B., DEBEVER J. et SALVAN F. (1969). Phys. Rev. **177**, 567.

BOBRYSHEVA A.I., ZYUKOV V.T. et BILINKIS P.G (1981). Sov. Phys. Semicond. **15**, 808.

BOBRYSHEVA A.I., GRODETSKII M.V. et ZYUKOV V.T. (1983). J. Phys. C: Solid State Phys. **16**, 5723.

CALLAWAY J. (1964). " Energy Band Theory ", Academic Press.

DEAN P.J., FLOOD W. et KAMINSKY G. (1967a). Phys. Rev. **163**, 721.

DEAN P.J., CUTHBERT J.D., THOMAS D.G. et LYNCH R.T. (1967b). Phys. Rev. Lett. **18**, 122.

DEAN P.J et HERBERT D.C. (1979). " Bound Excitons in Semiconductors " Springer - Verlag, Berlin, Heidelberg.

FEDDI E. (1987). Thèse de Troisième Cycle.

FROST A.A., INOKUTI M. et LOWE J.P (1964). J. Chem. Phys. **41**, 482.

GRUN J.B., NIKITINE S., BIVAS A. et LEVY R. (1970). J. Lunin. **1,2**, 241.

HAYNES J.R. (1960). Phys. Rev. Lett. 4, 361.

HAYNES J.R. (1966). Phys. Rev. Lett. 17, 860.

HAKEN H. (1976). " Quantum Field of Solids ", North Holland.

HYLLERAAS E.A. (1929). Z. Phys. 54, 347.

INSEPOV Z.A et NORMAN G.E. (1975). Sov. Phys. JETP. 42, 674.

JOHNSON M.H et LIPPMAN B.A. (1949). Phys. Rev. 76, 828.

KAWABATA T., MURO K. et NARITA S. (1977). Solid State Comm. 23, 267.

KIREEV P. (1975). " La Physique des Semiconducteurs " Editions Mir, Moscou.

KNOX R.S. (1963). " Theory of Excitons ", Academic Press.

LAMPERT M.A. (1958). Phys. Rev. Lett. 1, 450.

LUTTINGER J.M. et KOHN W. (1955). Phys.Rev. 97,896.

MAAN J.C., BELLE G., FASOLINO A., ALTARELLI M. et PLOOG K. (1984). Phys. Rev. 30, 2253.

MUNSCHY G. et STEBE B. (1974). Phys. Stat. Sol. (b) 64, 213.

MUNSCHY G. et STEBE B. (1975). Phys. Stat. Sol. (b) 72, 135.

MYSYROWICZ A., GRUN J.B., LEVY R., BIVAS A. et NIKITINE S. (1968). Phys. Rev. Lett. 26 A, 615.

NASSAU K., HENRY C.H. et SHIEVER J.W. (1970). Proc. 10th Int. Conf. oN the Physics of Semiconductors, Cambridge MA, eds. KELLER et al. (USAEC DIV. of

Techn. Inf. Springfiel VA). p. 629.

NIKITINE S. (1969). " Optical Properties of Solids " Nudelman et Mitra eds. Pleunum Press, New York.

PACKARD D.C., LITTON C.W. et COLLINS T.C. (1967). J. Physique. 33, 877.

PEKERIS C.L. (1962). Phys. Rev. 126, 1470.

REYNOLDS D.C., LITTON C.W et COLLINS T.C. (1969). Phys. Rev. 185, 1099.

ROTH L., LAX B. et ZWERDLING S. (1959). Phys. Rev. 114, 90.

STEBE B. et AINANE A. (1988) " 4th International Conference On Superlattices, Microstructures and Microdevices " TRIESTE (Italie), 8-12 Août, sur affiche.

STEBE B. et AINANE A. (1988) " Journées de la Matière Condensée (Semiconducteurs, Surfaces et Interfaces) de la Société Française de Physique " TOULOUSE, 12-14 Septembre, sur affiche.

STEBE B. et AINANE A.(1989). Superlattices and Microstructures 5, 545-548.

STEBE B. et MUNSCHY G. (1975). Solid State Commun. 17, 1051.

STEBE B. et COMTE C. (1977). Phys. Rev. 15, 3967.

STEBE B., SAUDER T., CERTIER M. et COMTE C. (1978). Solid State Commun. 26, 637.

STEBE B., FEDDI E. et MUNSCHY G. (1986). J. Phys. C: Solid State Phys. 19, L699.

STEBE B., FEDDI E. et MUNSCHY G. (1987). Phys. Rev. 35, 4331.

THOMAS D.C. et HOPFIELD J.J. (1962). Phys. Rev. 128, 2135.

WANNIER G. (1937). Phys. Rev. 52, 191.

RESUME

Le travail présenté dans ce mémoire de thèse est consacré à l'étude des trions excitoniques dans les semiconducteurs bidimensionnels. Ces quasi-particules peuvent résulter, dans certaines conditions, de la liaison d'un exciton (paire électron-trou liée) avec un électron ou un trou dans les semiconducteurs. Ils se distinguent des autres complexes excitoniques par leur mobilité et leur charge. Ces deux caractéristiques sont susceptibles de donner lieu à des propriétés originales, notamment dans les semiconducteurs quasi-bidimensionnels (super-réseaux semiconducteurs, puits quantiques). L'étude des trions excitoniques présente un très grand intérêt, tant du point de vue pratique que théorique. Elle permet de comprendre les mécanismes des recombinaisons radiatives contrôlant le fonctionnement de certains dispositifs utilisés en optoélectronique et dans le domaine des télécommunications. Elle fournit également à la physique fondamentale des nouveaux modèles de systèmes formés de quasi-particules en interaction mutuelle, susceptibles d'une analyse expérimentale et théorique très précise. Notre étude a permis de montrer, qu'en l'absence de champ magnétique, ces quasi-particules étaient beaucoup plus stables dans les semiconducteurs bidimensionnels que dans les semiconducteurs massifs. Par conséquent, leur observation devrait être beaucoup plus favorable dans les milieux 2D. Nous envisageons même une possible observation à température ambiante. Nous avons montré que la forme des raies d'absorption est différente de celle des excitons et autres complexes excitoniques localisés. Ceci devrait faciliter leur identification. Nous avons montré que l'action d'un champ magnétique sur les trions conduit à un renforcement et une quantification supplémentaire des énergies. De plus, nous avons mis en évidence l'influence déterminante de l'orientation du champ magnétique par rapport à la surface du semiconducteur sur le degré de quantification. Cette dernière est totale pour un champ perpendiculaire au plan est minimale pour un champ parallèle au plan. Pour des champs magnétiques non nuls, mais suffisamment faibles, les trions se comportent comme des quasi-particules libres et chargées. Dans ces conditions, le champ magnétique donne lieu à des niveaux de Landau comme le cas 3D. Pour un champ magnétique perpendiculaire, la magnéto-absorption se réduit à une série de pics de Dirac. Par contre, dans le cas d'un champ parallèle, elle donne lieu à une série de raies décroissantes vers les basses énergies, à partir d'un bord d'absorption principal. Nos résultats sont originaux et spécifiques aux trions excitoniques. Ils peuvent contribuer à la mise en évidence et à l'identification de ces quasi-particules dans les milieux quasi-bidimensionnels (super-réseaux et puits quantiques semiconducteurs)

ABSTRACT

This thesis is devoted to the study of excitonic trions in bidimensional semiconductors (S.C.). These quasi-particles can be the result, assuming some conditions, of the binding of an exciton and an electron or a hole in semiconductors. They differ from others excitonic "complexes" by their charge and mobility winch allow some original properties, especially in quasi-bidimensional semiconductors (S.C. superlattices, quantum wells). The study of excitonic trions is of great interest for theory as well as for experiment. It allows the understanding of "radiative" recombination mechanisms winch control some devices in optoelectronic or telecommunication. This study also provides to fundamental physics new models for systems containing few particles. This work allows to point out that, in the absence of magnetic field, these quasi-particles are much more stable in bidimensional S.C. that in 3D S.C. Therefore, their observation should be easier in 2D media. Moreover room temperature studies may become possible for such quasi-particles. We have shown that the absorption line shape differs from that of excitons or other localized excitonic complexes. Their identification is therefore easier. We have shown that the influence of a magnetic field on trions leads to an increasing and additional quantification of the energies. Moreover, we have pointed out the influence of the magnetic field orientation relative to the S.C. surface on the quantification degree. This quantification is total with a magnetic field perpendicular to the plane and minimal with the field parallel to the plane. For a weak enough magnetic field, the trions behave as free and charged quasi-particles. In this case, the magnetic field gives rises to Landau levels as in 3D S.C. With a perpendicular magnetic field, the magnetoabsorption reduces to Dirac peaks. However, with a parallel field, there appears a series of lines decreasing in the low energy region below a main absorption edge. Our results are original and specific to excitonic trions. They can help in proving the occurrence and the identification of these quasi-particles in quasi-bidimensional media (super lattices S.C. and quantum wells).

MOTS-CLES : TRIONS; EXCITONS; SEMICONDUCTEURS BIDIMENSIONNELS; CHAMP MAGNETIQUE; ENERGIES DE LIAISON; MAGNETO-ABSORPTION.