



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>

THESE

présentée

à l'université de METZ

pour obtenir le titre de

DOCTEUR de l'UNIVERSITE de METZ

en PHYSIQUE

(Physique du Solide)

par

Serge LE GOFF

Professeur agrégé

Labo atome d'Optoélectronique et de Microélectronique

Etude des états excitoniques dans les nanostructures de semi-conducteur de forme cylindrique.

soutenue le 18 décembre 1992 devant le Jury composé de Messieurs :

M. GERL Université Nancy I
G. BASTARD ENS Paris
C. JOUANNI Université de Montpellier
J.Y. M...
C. TAV...
R. VGL...
B. STEI...

(Président du Jury)
(Rapporteur)
(Rapporteur)

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE DE METZ



022 420411 4

burg

(Directeur de thèse)

VB 77764

A la mémoire de Jean LE GOFF
(1921 - 1992)

BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - METZ	
N° inv	1992 0705
Cote	SM3 92/29
Loc	Magasin

TABLE DES MATIERES

Table des matières	1
Remerciements	7
INTRODUCTION GENERALE	9
Chapitre 1 ETATS ELECTRONIQUES DANS UN CRISTAL SEMI-CONDUCTEUR	17
1.1. INTRODUCTION	19
1.2. ETAT ELECTRONIQUE FONDAMENTAL D'UN CRISTAL SEMI-CONDUCTEUR	21
1.2.1. Approximation de Born-Oppenheimer	21
1.2.2. Approximation de Hartree-Fock	21
1.3. METHODE DE LA MASSE EFFECTIVE	26
1.3.1. Approximation de la masse effective dans le cas d'une bande non dégénérée	26

1.3.2. Généralisation aux bandes multiples ou dégénérées	29
1.4. CONSTRUCTION D'ETATS EXCITES	
DANS UN MODELE A DEUX BANDES	33
1.4.1. Définition du modèle.	33
1.4.2. Lacunes dans la bande de valence	34
1.4.3. Electrons dans la bande de conduction	38
1.4.4. Interaction électron-trou.	39
1.4.5. Etats excitoniques	40
1.4.6. Excitons de Mott-Wannier ; fonction enveloppe excitonique	43
1.4.7. Equation effective pour la fonction enveloppe excitonique	44
1.4.8. Résolution de l'équation effective	46
Chapitre 2 ETATS ELECTRONIQUES DANS	
 LES NANOSTRUCTURES DE SEMI-CONDUCTEURS . . .	51
2.1. INTRODUCTION	53
2.1.1. Généralités sur la physique des hétérostructures	53
2.1.2. Méthodes théoriques d'étude des hétérostructures	55
2.2. ETATS A UN ELECTRON DANS L'APPROXIMATION	
DE LA FONCTION ENVELOPPE	56
2.2.1. Approximation de la fonction enveloppe dans un milieu faiblement hétérogène ; Hamiltonien de Ben Daniel-Duke	56
2.2.2. Hétérojonction : potentiel de confinement et conditions aux limites.	58
2.2.3. Confinement dans une direction : exemple du puits quantique simple	58
2.2.4. Confinement dans les trois directions : exemple de la boîte parallélépipédique	61
2.2.5. Confinement dans les trois directions : exemple de la microcristallite shérique	63

2.3. ETATS EXCITONIQUES DANS L'APPROXIMATION DE LA FONCTION ENVELOPPE	66
2.3.1. Séparation du mouvement du centre de masse et du mouvement relatif . .	66
2.3.2. Puits quantique	69
2.3.3. Points quantiques	69
2.3.4. Limite du confinement faible	71
2.3.5. Un cas de séparation rigoureuse des mouvements du centre de masse et du mouvement relatif de l'exciton dans un point quantique	74
2.4. CONCLUSION	76
Chapitre 3 EXCITON DANS UNE BOITE QUANTIQUE CYLINDRIQUE CAS DU CONFINEMENT FAIBLE	77
3.1. INTRODUCTION	79
3.2. CALCUL VARIATIONNEL DE L'ENERGIE DE LIAISON DE L'EXCITON	81
3.2.1. Hamiltonien	81
3.2.2. Etats à une particule	82
3.2.3. Etats excitoniques ; cas limites connus	83
3.2.3. Choix de la fonction d'essai	85
3.2.4. Calcul variationnel de l'énergie de liaison	87
3.3. CAS PARTICULIER DU DISQUE QUANTIQUE	91
3.3.1. Fonction d'onde et énergie variationnelle	91
3.3.2. Résultats du calcul variationnel	91
3.4. CAS GENERAL DU CYLINDRE QUANTIQUE	95
3.4.1. Approximation dans le calcul de l'énergie potentielle	

Table des matières

coulombienne	95
3.4.2. Résultats du calcul variationnel	97
3.5. CONCLUSION	106
Chapitre 4 EXCITON DANS UNE BOITE QUANTIQUE CYLINDRIQUE CAS DU CONFINEMENT FORT	105
4.1. INTRODUCTION	107
4.2. DISQUE QUANTIQUE	109.
4.2.1. Fonction d'onde et énergie variationnelle	109
4.2.2. Etats à une particule	110
4.2.3. Particularisation à GaAs/Ga _{1-x} Al _x As	113
4.2.4. Hamiltonien effectif de l'exciton	114
4.2.5. Fonction d'essai	115
4.2.6. Calcul variationnel de l'énergie de l'exciton	115
4.2.7. Résultats du calcul variationnel	116
4.3. CAS GENERAL DU CYLINDRE QUANTIQUE	123
4.3.1. Etats à une particule	123
4.3.2. Hamiltonien effectif de l'exciton	128
4.3.3. Fonction d'essai	129
4.3.4. Calcul variationnel de l'énergie de l'exciton	130
4.4. CONCLUSION	139
CONCLUSION GENERALE.	141

Annexe A	PARAMETRAGE GEOMETRIQUE D'UN EXCITON DANS UNE BOITE QUANTIQUE CYLINDRIQUE.	143
A.1.	Paramétrage géométrique d'une particule	143
A.2.	Paramétrage géométrique d'un système de deux particules	144
A.3.	Expression de l'opérateur Hamiltonien en coordonnées de Hylleraas dans le cas particulier d'une fonction d'onde indépendante de ϕ	147
A.4.	Intégration d'une fonction $F(\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho)$ sur l'espace de configuration . . .	150
Annexe B	DETAIL DES CALCULS ANALYTIQUES DANS LE CAS DU Puits INFINI	154
B.1.	Dérivées de la fonction d'essai	155
B.2.	Recensement des intégrales à calculer	163
B.3.	Réduction des intégrales quintuples à des intégrales quadruples	169
Annexe C	EXCITON DANS UN DISQUE QUANTIQUE DE RAYON QUASI-NUL EN POTENTIEL INFINI	175
C.1.	Rappel des résultats de l'étude générale.	175
C.2.	Approximation des particules non corrélées	176
C.3.	Evaluation des intégrales triples pour R petit	177
C.4.	Recherche du paramètre variationnel optimal	179
C.5.	Expression analytique de l'énergie en fonction du rayon ; domaine de validité	182
Annexe D	DISTANCE ELECTRON-TROU EN L'ABSENCE DE CONFINEMENT QUANTIQUE	185
D.1.	Définition des grandeurs à calculer	185

Table des matières

D.2. Cas du cristal massif 3D	187
D.3. Cas strictement 2D	189
Annexe E UTILISATION D'UNE FONCTION D'ESSAI	
A CORRELATION LATÉRALE GAUSSIENNE	191
E.1. Dérivées de la fonction d'essai	191
E.2. Recensement des intégrales à calculer	194
E.3. Résultats du calcul variationnel	199
Références	201

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé au sein du groupe de Photoélectronique Théorique du Laboratoire d'Optoélectronique et de Microélectronique, structure commune à l'Université de METZ et à l'Ecole Supérieure d'Electricité, sous la direction du Professeur B. STEBE, auquel j'exprime tous mes remerciements pour m'avoir confié un sujet d'actualité, pour m'avoir initié aux méthodes de travail du groupe, et pour avoir assuré un suivi attentif et critique de la progression des résultats.

Dans la phase initiale des calculs numériques, je dois beaucoup à l'aide que m'a apportée mon collègue V. GOMBERT, professeur agrégé de Mathématiques, qui a, indépendamment de moi, calculé les intégrales triples P_i du chapitre 3, ce qui a conféré aux résultats une fiabilité qui n'aurait pu être atteinte sinon. Bien des difficultés mathématiques apparues dans la suite ont également été résolues grâce à l'apport précieux de nos discussions hebdomadaires. J'associe à ces remerciements mon collègue R. JOLY, professeur agrégé d'anglais, qui, à plusieurs occasions, a fort aimablement corrigé mon anglais passablement déficient.

Dans la phase finale, l'environnement amical du groupe de Photoélectronique Théorique a été un constant encouragement. En particulier, je remercie le Professeur J. HUGEL de son soutien, ainsi que Monsieur F. DUJARDIN pour sa disponibilité, tant pour les problèmes scientifiques que bureautiques, alors qu'il était lui-même fort occupé par la préparation de sa Thèse d'Etat, antérieure à la mienne d'une semaine.

Les discussions que j'ai eues avec le Professeur C. TAVARD, de l'Université de METZ, qui a également accepté de participer au jury de cette thèse ont été une

Remerciements

importante stimulation et je l'en remercie vivement.

Monsieur M. GERL, Professeur à l'Université NANCY I, m'a fait le grand honneur d'assumer la présidence du jury de cette thèse. Je le prie de bien vouloir accepter l'expression de ma profonde gratitude.

Monsieur G. BASTARD, Directeur de Recherche au C.N.R.S., de l'Ecole Normale Supérieure de PARIS, a joué un rôle important dans ce travail, non seulement par sa participation au jury et la tâche de rapporteur qu'il a acceptée, mais aussi par l'intermédiaire de son remarquable ouvrage de 1990, sur lequel j'ai passé un certain nombre d'heures. Qu'il en soit ici sincèrement remercié.

Je remercie Monsieur C. JOUANIN, Professeur à l'Université de MONTPELLIER, pour l'intérêt qu'il a bien voulu porter à mon travail, et pour avoir accepté les tâches de rapporteur et de membre du jury.

Je remercie également Monsieur J.Y. MARZIN, du C.N.E.T. de BAGNEUX, pour ses remarques qui ont permis d'améliorer la présentation des résultats, Monsieur R. VOLTZ, Professeur à l'Université de STRASBOURG, pour ses questions qui ouvrent de nouvelles voies d'investigation, et pour leur participation au jury.

INTRODUCTION GENERALE

Les points quantiques dans les semi-conducteurs : un problème actuel.

Un ouvrage récent consacré aux semi-conducteurs (Fishman, 1988) se terminait par la question suivante :

" *A quoi seront utilisées les (futures) études sur les SC à zéro dimension, si jamais un échantillon voit le jour ?* "

A cette question, il est encore prématuré de répondre quant à l'utilisation, mais il est permis de penser que les progrès technologiques dans la fabrication de structures submicroscopiques, ou *nanstructures* permettront de fabriquer de tels objets. En effet, les dimensions caractéristiques des échantillons conduisant à des propriétés quantiques de type 0D sont de l'ordre de quelques nanomètres pour un confinement dans GaAs noyé dans $Ga_{1-x}Al_xAs$. Ces dimensions sont en passe d'être obtenues dans certains laboratoires comme le montrent les figures (0.1) à (0.6). Ce qui pouvait presque passer pour de la science fiction en 1988 devient du domaine de la prouesse technologique en 1992, et pourrait devenir de la technologie courante dans quelques années s'il s'avérait que ces structures peuvent avoir un intérêt industriel.

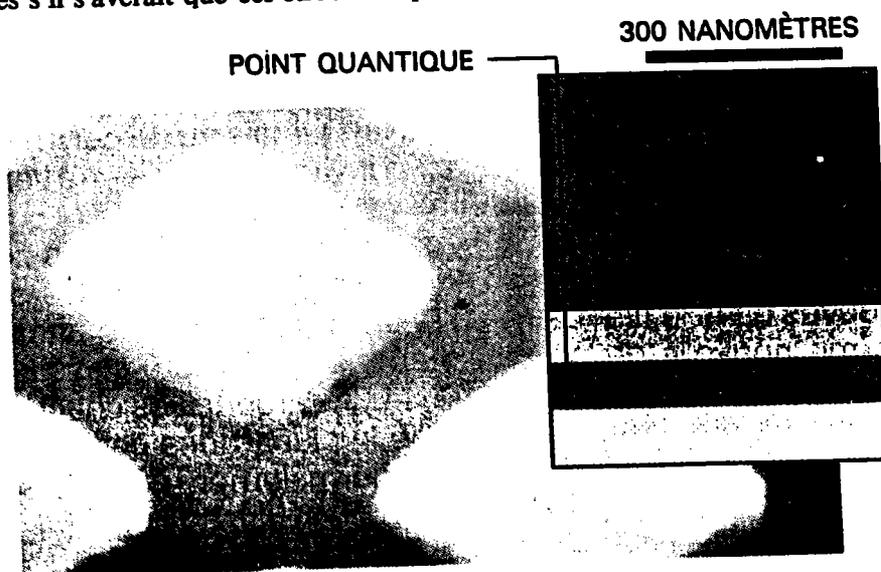


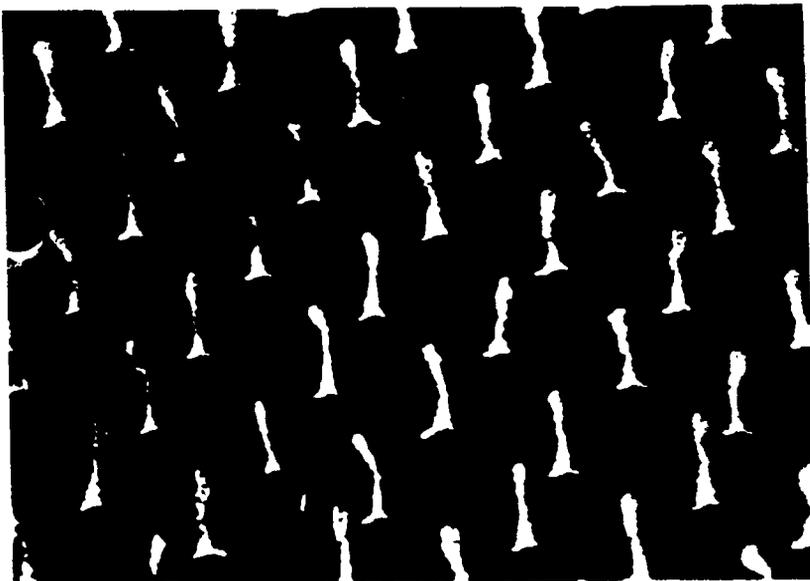
FIG. 0.1.
(*empruntée à Corcoran 1991*)

Points quantiques quasiparallélépipédiques ; on note l'érosion des angles des parallélépipèdes.



0.2 μm

FIG. 0.2.
(empruntée à
Kubena et al 1987)



0.2 μm

FIG. 0.3.
(empruntée à
Kubena et al 1987)

Réseau de points quantiques obtenus par lithographie puis bombardement par un faisceau d'ions Ga^+ . (durée du bombardement : 16 μs dans la figure 0.2. et 8 μs dans la figure 0.3.)

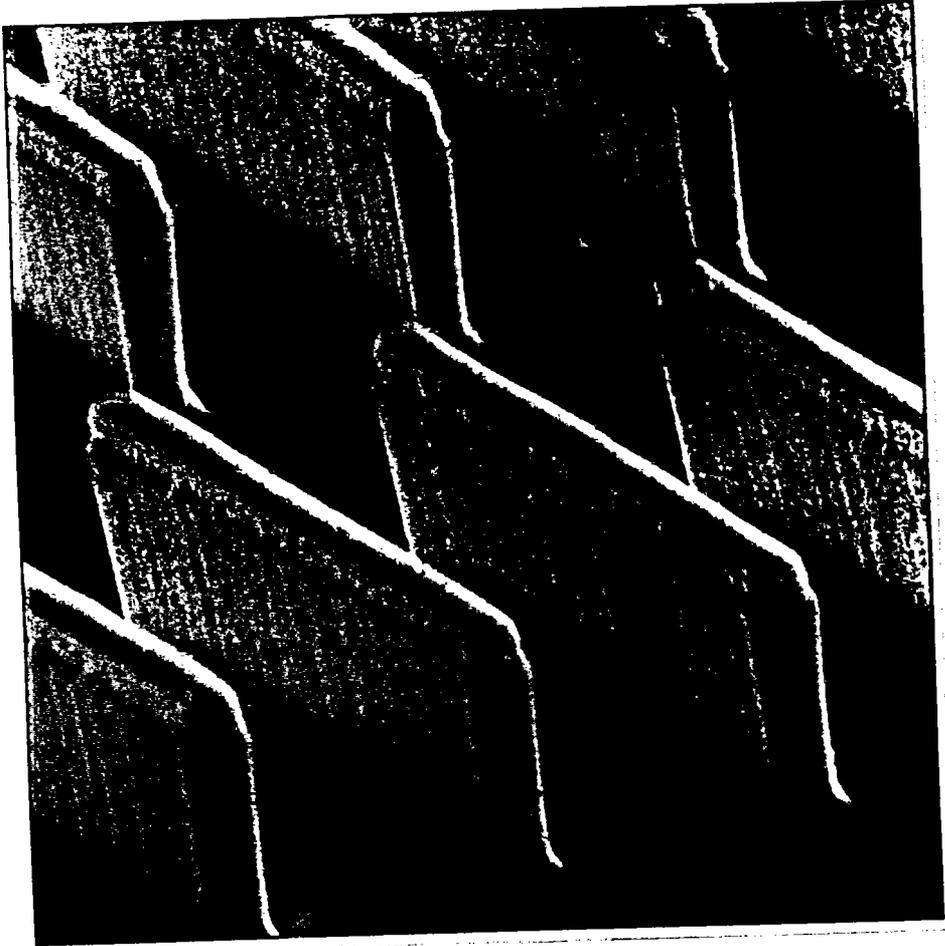


FIG. 0.4. (empruntée à Weisbuch et al 1991)
"Murs" de 110 nm de large constitués d'un empilement de GaAlAs et GaAs sur un substrat de GaAs.

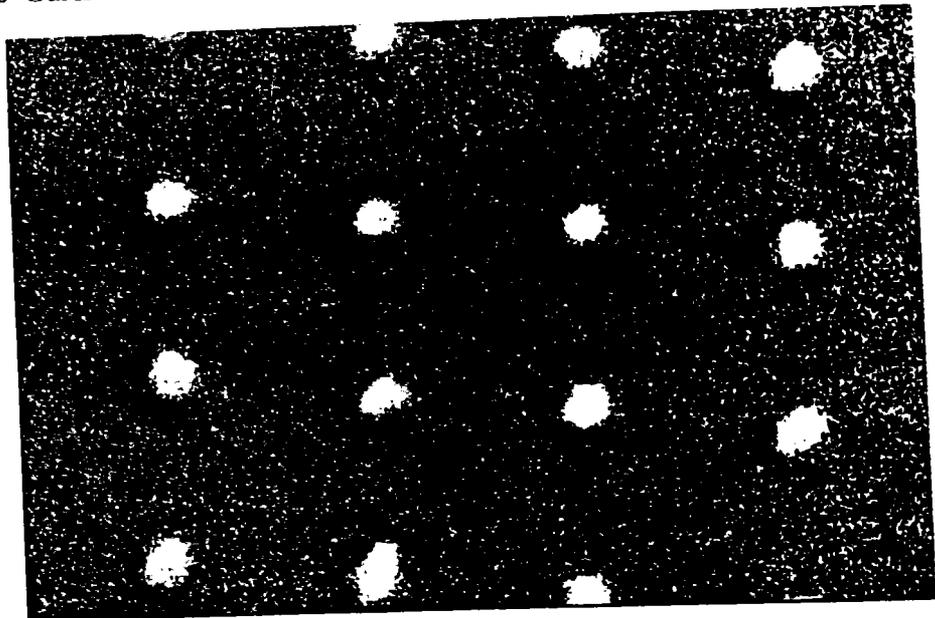


FIG. 0.5. (empruntée à Weisbuch et al 1991)
Motifs dessinés par le pinceau d'électrons d'un microscope électronique puis découpés par une attaque chimique locale.

Depuis les premiers travaux sur les superréseaux (Esaki et Tsu 1969, 1970), les études théoriques sur les semi-conducteurs de basse dimensionnalité ont évolué des problèmes bidimensionnels (superréseaux, puits quantiques) aux problèmes unidimensionnels (fils quantiques) pour aboutir à la dimension zéro (microcristallites, boîtes quantiques).

Les structures bidimensionnelles.

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

Ces structures sont devenues en quelques années des sujets d'étude classiques, présentées dans les revues de vulgarisation scientifique (Döhler 1984), les revues destinées aux enseignants de Physique (Voisin 1990) et désormais étudiés non seulement dans les cours sur les semi-conducteurs (Mathieu 1990) mais aussi dans les cours généraux de Physique de l'état Solide (Burns 1990). Une étude approfondie peut être trouvée sous une forme très achevée dans des ouvrages de cours destinés aux ingénieurs (Jaros 1989) ou aux physiciens (Bastard 1990).

On peut classer les structures bidimensionnelles en trois catégories :

- les puits quantiques simples :

Un puits quantique simple est constitué d'une couche de semi-conducteur dont l'épaisseur est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de de Broglie des électrons, et dont les autres dimensions sont très grandes devant cette longueur d'onde.

- les puits quantiques multiples :

Un puits quantique multiple est constitué d'une juxtaposition de puits simples, suffisamment proches pour qu'il y ait couplage entre les mouvements des électrons dans les différents puits.

- les superréseaux :

Un superréseau est un puits quantique multiple comportant un grand nombre de puits simples équidistants, de telle sorte que la structure peut être considérée comme

quasi-périodique dans la direction normale aux puits.

Les structures unidimensionnelles : fils quantiques.

La technologie MBE permet de fabriquer avec une très grande précision des couches parallèles (Cibert et al. 1986, 1987).

Imaginons que sur une couche, on effectue une gravure dans la direction Ox ; on obtiendra des domaines de confinement qui seront limités en z et en y , et illimités en x . Ces domaines sont appelés fils quantiques (QWW). La technique de gravure tend à donner des tiges à section rectangulaire, mais l'érosion des angles et peut-être aussi la plus grande commodité de modélisation fait que les théoriciens ont porté un grand intérêt aux fils à section circulaire, en particulier à l'influence de ce mode de confinement sur l'énergie de liaison de l'exciton (Brown et Spector, 1986).

Les deux types de filières amenant au confinement total

Une extrapolation de la technique de fabrication des fils quantiques conduit naturellement à un confinement dans les trois directions. Il suffit d'effectuer une seconde gravure dans la direction Oy . Les fils quantiques sont alors coupés en tronçons appelés boîtes quantiques (QB). La réalisation de telles boîtes est contemporaine de la réalisation des fils (Cibert et al. 1986, 1987). Les progrès de la microscopie à balayage ont permis d'obtenir des images spectaculaires de ces structures. Nous reproduisons quelques images représentatives publiées dans des revues d'information scientifique (Weisbuch 1991 ; Corcoran 1991). Une quantification des états électroniques a été observée dans de telles structures (Reed et al. 1986, 1988). Les images des échantillons ayant conduit à ces observations suggèrent une modélisation par une géométrie cylindrique (figure 0.6.).

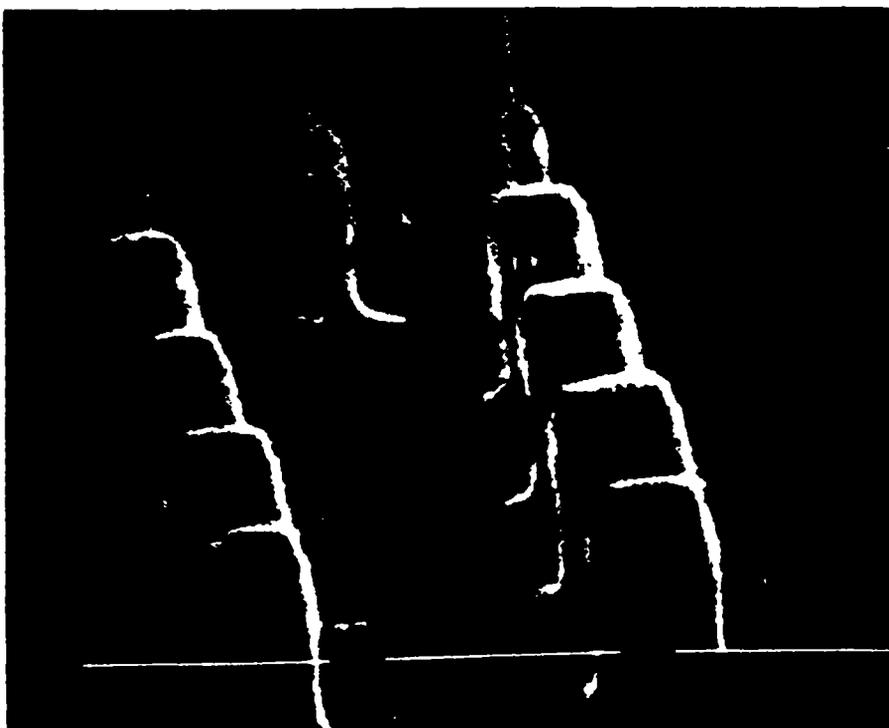


FIG. 0.6.
(*empruntée à Reed et al 1991*)

Micrographie à balayage électronique de nanostructures de GaAs. Les traits blancs horizontaux ont une longueur de $0.5 \mu\text{m}$.

Une autre approche totalement indépendante est la réalisation de microcristaux dans une matrice de verre, par exemple de chlorure de cuivre ou de sulfure de cadmium, obtenus par précipitation du semi-conducteur initialement en solution dans le verre. Ceci conduit à des microstructures de semi-conducteur raisonnablement décrites par une géométrie sphérique, ce qui est un avantage déterminant dans la perspective d'une étude théorique. En revanche, la dispersion des tailles de ces sphères, beaucoup plus importante que par les techniques précédentes, est un obstacle à la confrontation des modèles théoriques aux résultats expérimentaux.

Objectif de l'étude entreprise

Dans les semi-conducteurs massifs, lors de l'absorption d'un photon, il peut se former une paire électron-trou liés par interaction coulombienne (exciton) dont l'énergie totale est inférieure à celle de la paire électron-trou libre. Ceci se traduit par un spectre de raies de type hydrogénoïde dans la bande interdite. Toutefois, la durée de vie des excitons est très faible (quelques nanosecondes) et l'énergie de liaison (quelques meV dans GaAs) petite devant l'énergie $k_B T \simeq 26$ meV caractéristique des processus thermiques à température ambiante. Il en résulte que la transition excitonique (absorption ou émission d'un photon en dessous de l'énergie de gap) est peu probable à température ambiante, et l'observation des raies excitoniques dans les semi-conducteurs massifs nécessite de travailler à très basse température (température de l'Helium liquide). L'étude des puits quantiques a montré que le confinement dans la direction Oz permet d'augmenter considérablement l'énergie de liaison de l'exciton. On peut donc s'attendre à augmenter encore cette énergie de liaison s'il existe un confinement dans les trois directions, ce qui pourrait rendre possible l'observation de raies excitoniques aux températures usuelles.

Nous nous proposons d'étudier l'état fondamental d'un exciton dans une boîte quantique de géométrie cylindrique. Comme on peut le constater sur les diverses photographies présentées précédemment, la technologie de fabrication tend à produire des boîtes parallélépipédiques mais l'érosion des arêtes leur donne en fait plutôt une forme cylindrique lorsque les gravures deviennent très serrées.

Lorsque cette étude a été entreprise, les excitons avaient été étudiés dans le cas du confinement total pour deux géométries : la géométrie sphérique (Efros et Efros 1982 ; Brus 1984 ; Brus 1986 ; Kayanuma 1986) et la géométrie parallélépipédique (Bryant 1987, 1988) en utilisant des potentiels de confinement infinis. Depuis, de nouveaux résultats sont apparus, en particulier l'utilisation d'un potentiel de confinement fini s'est imposée pour des domaines de confinement sphériques de très petites dimensions (Kayanuma 1990). Les domaines de confinement cylindriques ont été étudiés dans une approche voisine de la nôtre (Kayanuma 1991), mais seulement avec un potentiel modélisé par un puits carré infini. Notre contribution essentielle est

d'avoir donné le premier modèle utilisant un puits fini dans cette géométrie.

Plan du mémoire

Dans le premier chapitre, nous rappelons les méthodes utilisées dans les semi-conducteurs massifs : les approximations de Born-Oppenheimer, Hartree-Fock et de la fonction enveloppe qui seront reprises ou éventuellement remaniées lors du passage aux milieux confinés. La théorie excitonique est rappelée dans le formalisme de la seconde quantification pour un modèle à deux bandes simples.

Dans le second chapitre, nous montrons que l'approximation de la fonction enveloppe a été appliquée avec succès à l'étude de diverses géométries de confinement.

Le troisième chapitre décrit notre premier modèle pour l'état fondamental d'un exciton soumis à un confinement par une boîte de géométrie cylindrique. Dans cette première approche, le confinement est modélisé par un puits de potentiel infini. Nous décrivons le choix de la fonction d'essai servant de support à notre approche variationnelle de la détermination de l'état fondamental puis nous commentons les résultats obtenus en examinant en particulier les cas limites $R \rightarrow 0$, $R \rightarrow \infty$, $H \rightarrow 0$, $H \rightarrow \infty$.

La limite $R \rightarrow 0$ dans le modèle du puits infini étant particulièrement peu réaliste, nous sommes amenés à envisager dans le chapitre 4 un modèle de puits carré fini. Après avoir discuté du choix de la fonction d'essai, nous donnons les principales étapes du calcul variationnel, puis les résultats de ce calcul en les comparant aux résultats du modèle précédent.

**RAPPEL DE LA THEORIE DES EXCITONS
DANS UN SEMI-CONDUCTEUR MASSIF**

1.1. INTRODUCTION

**1.2. ETAT ELECTRONIQUE FONDAMENTAL
D'UN CRISTAL SEMI-CONDUCTEUR**

1.2.1. Approximation de Born-Oppenheimer

1.2.2. Approximation de Hartree-Fock

1.3. METHODE DE LA MASSE EFFECTIVE

1.3.1. Approximation de la masse effective dans le cas d'une bande non dégénérée

1.3.2. Généralisation aux bandes multiples ou dégénérées

**1.4. CONSTRUCTION D'ETATS EXCITES
DANS UN MODELE A DEUX BANDES**

1.4.1. Définition du modèle

1.4.2. Lacunes dans la bande de valence

1.4.3. Electrons dans la bande de conduction

1.4.4. Interaction électron-trou

1.4.5. Etats excitoniques

1.4.6. Excitons de Mott-Wannier : fonction enveloppe excitonique

1.4.7. Equation effective pour la fonction enveloppe excitonique

1.4.8. Résolution de l'équation effective

1.1. INTRODUCTION

Ce chapitre est un rapide survol de la théorie des excitons dans un semi-conducteur massif. Toutefois, il ne s'agit pas ici de rendre compte de l'état des connaissances dans ce domaine, mais plus modestement de rappeler dans un contexte bien connu les techniques de résolution et d'approximation qui seront utilisées par la suite dans les milieux confinés.

Des exposés détaillés de la théorie excitonique peuvent être trouvés dans divers ouvrages ; on peut citer par exemple : Knox (1963), Dimmock (1967), Reynolds et Collins (1981), Singh (1984).

Nous rappelons dans un premier temps les grandes lignes de l'approximation de Hartree-Fock conduisant aux fonctions d'onde monoélectroniques du cristal non excité, équations qui sont à la base des calculs de bande.

Nous introduisons ensuite l'approximation de la fonction enveloppe, qui sera adaptée dans le prochain chapitre au cas des électrons soumis à des conditions de confinement.

Dans le cadre d'un modèle à deux bandes simples, une bande de valence pleine et une bande de conduction vide dans l'état fondamental, nous construisons les excitations élémentaires de type fermion (trou dans la bande de valence et électron dans la bande de conduction). Enfin, nous construisons les états excitoniques par combinaison d'états de paires électron-trou non liés. Nous établissons l'équation régissant la fonction enveloppe excitonique dans l'approximation des excitons de Mott-Wannier. Nous résolvons cette équation dans le cas de bandes isotropes, paraboliques et non dégénérées.

Les excitons ne peuvent pas être introduits de manière satisfaisante dans l'approximation à un électron. Ce sont essentiellement des phénomènes collectifs qui doivent être abordés dans un formalisme adapté au problème à N corps. Deux formalismes sont en concurrence pour décrire un système de N fermions : les déterminants de Slater et la seconde quantification. La démarche suivie dans la présentation ci-dessous est due à Haken (1976) ; elle utilise le langage de la seconde quantification qui est d'un usage plus souple.

1.2. ETAT ELECTRONIQUE FONDAMENTAL D'UN CRISTAL SEMI-CONDUCTEUR

Dans ce paragraphe, nous rappelons les approximations fondamentales permettant de passer des lois générales de la Mécanique Quantique aux équations monoélectroniques servant de point de départ aux calculs de bandes.

1.2.1. Approximation de Born-Oppenheimer

Dans un cristal semi-conducteur, on peut distinguer d'une part les ions du réseau cristallin, comprenant les noyaux et les électrons des couches profondes, qui sont localisés sur un site du cristal, et d'autre part les électrons des couches superficielles, qui sont susceptibles de participer à la conduction dans le cristal.

L'approximation adiabatique ou de Born-Oppenheimer, (Born et Oppenheimer, 1927) consiste à négliger le couplage entre le mouvement des électrons et le mouvement des ions du réseau cristallin. Il en résulte que ces deux mouvements peuvent être étudiés séparément. Si l'on ne s'intéresse qu'au mouvement des électrons, on peut donc considérer les ions comme fixes. Ces derniers exercent alors sur chaque électron des actions mécaniques qui peuvent être décrites par un potentiel périodique $V_{\text{ions}}(\mathbf{r})$ ayant la périodicité du réseau cristallin.

1.2.2. Approximation de Hartree-Fock

Dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer, en travaillant dans le formalisme de la seconde quantification, l'Hamiltonien électronique du cristal peut

alors s'écrire :

$$\begin{aligned}
 H_{\text{crist}}^{\text{el}} = & \int \Psi^\dagger(\xi) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ions}}(\mathbf{r}) \right] \Psi(\xi) d\xi \\
 & + \frac{1}{2} \iint \Psi^\dagger(\xi) \Psi^\dagger(\xi') V_{\text{ee}}(\xi, \xi') \Psi(\xi') \Psi(\xi) d\xi d\xi', \quad (1.1)
 \end{aligned}$$

où $\Psi^\dagger(\xi)$ est l'opérateur champ de fermions créant un électron au point $\xi \equiv (\mathbf{r}, \zeta)$, \mathbf{r} et $\zeta = \pm \frac{1}{2}$ désignant respectivement les coordonnées d'espace et de spin ; l'intégration sur ξ symbolise à la fois l'intégration sur les trois coordonnées et la sommation sur les deux états de spin ; V_{ions} est le potentiel périodique créé par les ions du cristal ; $V_{\text{ee}}(\xi, \xi')$ est le potentiel d'interaction à deux corps électron-électron, qui se réduit au potentiel coulombien $V_{\text{ee}}(\xi, \xi') = \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$ dans l'approximation non relativiste.

Les opérateurs champ peuvent être développés sur une base orthonormée de fonctions monoélectroniques $\{ \phi_\lambda \}$:

$$\begin{aligned}
 \Psi^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_\lambda a_\lambda^\dagger \phi_\lambda^*(\mathbf{r}) \\
 \Psi(\mathbf{r}) &= \sum_\lambda a_\lambda \phi_\lambda(\mathbf{r}), \quad (1.2)
 \end{aligned}$$

a_λ^\dagger et a_λ étant respectivement les opérateurs de création et d'annihilation d'un électron dans l'état λ . Les états électroniques du cristal sont construits par application successive de N opérateurs de création a_λ^\dagger sur l'état vide $|0\rangle$.

$$|\Phi_{\text{crist}}\rangle = \prod_{i=1}^N a_{\lambda_i}^\dagger |0\rangle, \quad (1.3)$$

où N est le nombre d'électrons dans le cristal. De tels états électroniques ne prennent pas en compte les interactions électron-électron. En revanche, ils satisfont aux propriétés de symétrie par permutation d'une assemblée de fermions à condition que les opérateurs a_λ et a_λ^\dagger obéissent aux relations de commutation suivantes :

$$\{ a_i^\dagger, a_j^\dagger \} = 0 ; \{ a_i^\dagger, a_j \} = \delta_{ij} ; \{ a_i, a_j \} = 0 , \quad (1.4)$$

où les symboles $\{ \}$ et δ désignent respectivement l'anticommutateur et le symbole de Kronecker :

$$\{ A, B \} = AB + BA \quad ; \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} . \quad (1.5)$$

A ces conditions, $|\Phi_{\text{crist}}\rangle$ est le déterminant de Slater construit à partir des fonctions monoélectroniques $\phi_{\lambda_1}, \dots, \phi_{\lambda_N}$. Il reste à choisir une base de fonctions monoélectroniques. L'approximation de Hartree-Fock consiste à les déterminer par une méthode variationnelle : elles sont choisies de façon à minimiser l'énergie électronique du cristal, tout en restant soumises aux contraintes de normalisation :

$$\frac{\delta \langle \Phi_{\text{crist}} | H | \Phi_{\text{crist}} \rangle}{\delta \phi_{\lambda_i}} = 0 \quad ; \quad \int \phi_{\lambda_i}^*(\xi) \phi_{\lambda_i}(\xi) d\xi = 1 . \quad (1.6)$$

On montre qu'alors les fonctions ϕ_{λ_i} sont solutions du système d'équations à une particule, dites équations de Hartree-Fock :

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{ions}}(\mathbf{r}) \right) \phi_{\lambda_i}(\xi) + \left[\sum_j \int \phi_{\lambda_j}^*(\xi') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_{\lambda_j}(\xi') d\xi' \right] \phi_{\lambda_i}(\xi) \\ & - \sum_j \left[\int \phi_{\lambda_j}^*(\xi') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_{\lambda_i}(\xi') d\xi' \right] \phi_{\lambda_j}(\xi) = \epsilon_i \phi_{\lambda_i}(\xi) . \end{aligned} \quad (1.7)$$

Examinons le premier membre de ces équations de Hartree-Fock. L'interprétation du

premier terme est immédiate : il s'agit de l'Hamiltonien d'un électron soumis au potentiel périodique du réseau cristallin. Le second terme est le terme coulombien prévisible d'interaction électron-électron car le produit $-e|\phi_{\lambda_j}|^2$ représente la densité volumique de charge électrique correspondant à l'électron dans l'état λ_j , la somme sur tous les électrons donnant la densité volumique de charge électronique dans le cristal. En revanche, le troisième terme est purement quantique. Il est appelé terme d'échange car il apparaît comme une conséquence de l'utilisation d'une fonction d'onde antisymétrisée (1.3). En effet, l'utilisation d'un simple produit $\phi_{\lambda_1} \phi_{\lambda_2} \dots \phi_{\lambda_N}$ (approximation de Hartree) conduirait à des équations analogues, où ne subsisteraient que les deux premiers termes. Ce terme d'échange traduit le fait que deux électrons de même spin ne peuvent pas se rapprocher indéfiniment, ce qui se traduit par des effets répulsifs à courte distance.

Notons que les niveaux d'énergie ϵ_i ainsi déterminés ont une signification physique concrète donnée par le théorème de Koopmans (Kittel 1963, p 90) : l'énergie $-\epsilon_i$ est l'énergie qu'il faut fournir à un électron dans l'état λ_i pour l'extraire du solide. Nous démontrerons ce théorème à l'occasion de l'étude des excitations du cristal de type lacune dans la bande de valence.

Techniquement, la résolution de ces équations, qui constituent un système d'équations intégral-différentielles couplées, demeure un problème difficile, qui relève de la compétence des spécialistes des calculs de bandes. La technique standard de résolution est une méthode autocohérente, qui revient à déterminer les ϕ_{λ_i} par approximations successives.

En posant

$$\begin{aligned}
 V_{\text{coul}}(\mathbf{r}) &= \sum_j \int |\phi_{\lambda_j}(\xi')|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\xi' \\
 A_{\lambda_j, \lambda}(\mathbf{r}) &= \int \phi_{\lambda_j}^*(\xi') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_{\lambda}(\xi') d\xi' , \quad (1.8)
 \end{aligned}$$

on peut écrire l'équation (1.7) sous la forme :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{ions}}(\mathbf{r}) + V_{\text{coul}}(\mathbf{r}) \right] \phi_{\lambda_1}(\xi) - \sum_j A_{\lambda_j, \lambda}(\mathbf{r}) \phi_{\lambda_j}(\xi) = \epsilon_i \phi_{\lambda_1}(\xi) . \quad (1.9)$$

soit, en introduisant un potentiel effectif contenant l'interaction coulombienne ions-électron, l'interaction coulombienne directe électron-électron et l'interaction d'échange électron-électron :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right] \phi_{\lambda_1}(\xi) = \epsilon_i \phi_{\lambda_1}(\xi) \quad (1.10)$$

où le potentiel effectif V_{eff} possède la périodicité du réseau, de sorte que les fonctions ϕ_{λ_1} satisfont au théorème de Bloch, et sont donc de la forme (Kittel 1963, p 193) :

$$\begin{aligned} \phi_{\mathbf{n}, \mathbf{k}}(\xi) &= e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{n}, \mathbf{k}}(\mathbf{r}, \zeta) , \\ \text{avec } u_{\mathbf{n}, \mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_L, \zeta) &= u_{\mathbf{n}, \mathbf{k}}(\mathbf{r}, \zeta) , \end{aligned} \quad (1.11)$$

où \mathbf{R}_L est un vecteur du réseau direct.

Les équations (1.10), qui sont à la base des calculs de bande, ne tiennent pas compte de l'interaction spin-orbite ; elles se généralisent par la transformation suivante de l'opérateur hamiltonien (Kittel 1963, p 196) :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) + \frac{1}{4m^2c^2} \sigma \wedge \text{grad } V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p} \quad (1.12)$$

1.3. METHODE DE LA MASSE EFFECTIVE

L'approximation de la masse effective (Kohn et Luttinger) est une méthode permettant de tenir compte d'une perturbation $U(\mathbf{r})$ s'ajoutant au potentiel effectif de Hartree-Fock, quelle que soit l'origine de cette perturbation (champ électrique ou magnétique extérieur, ou hétérogénéité du matériau). Un des principaux atouts de cette théorie est de pouvoir s'adapter à des situations physiques diverses, tout en offrant la possibilité d'effectuer des calculs analytiques susceptibles d'interprétation physique. En revanche, elle n'est adaptée qu'à l'étude du voisinage de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$.

1.3.1. Approximation de la masse effective dans le cas d'une bande non dégénérée

En suivant la démarche d'Altarelli (Altarelli 1986), nous établissons l'équation de la masse effective pour la fonction enveloppe et nous donnons la relation entre la fonction d'onde et la fonction enveloppe à un ordre d'approximation suffisant pour permettre dans le chapitre 2 d'aborder le problème des conditions aux limites pour les dérivées de la fonction d'onde. Dans l'équation effective de Hartree-Fock (1.10) l'adjonction d'un terme de perturbation $U(\mathbf{r})$, conduit à l'équation :

$$(H_{\text{eff}} + U(\mathbf{r})) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$$

avec $H_{\text{eff}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) .$ (1.13)

Les fonctions propres de H_{eff} (1.11), se réduisent, en omettant les variables de spin, à :

$$\phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) ,$$
 (1.14)

correspondant à l'énergie $\epsilon_n(\mathbf{k})$. Ces fonctions propres constituent une base sur laquelle on peut développer la fonction propre ψ de l'Hamiltonien perturbé :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{n,\mathbf{k}} \chi_n(\mathbf{k}) \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.15)$$

En remplaçant ψ par ce développement dans (1.13), on obtient :

$$[\epsilon_n(\mathbf{k}) - E] \chi_n(\mathbf{k}) + \sum_{n',\mathbf{k}'} \langle \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) | U(\mathbf{r}) | \phi_{n',\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \rangle \chi_{n'}(\mathbf{k}') = 0. \quad (1.16)$$

où l'élément de matrice du potentiel de perturbation peut s'écrire, en explicitant les fonctions $\phi_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})$ et $\phi_{n',\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$:

$$\langle \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) | U(\mathbf{r}) | \phi_{n',\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \rangle = \int e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n',\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (1.17)$$

Le produit $u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n',\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$ ayant la périodicité du réseau, on peut le développer en série de Fourier et écrire :

$$u_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{n',\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\mathbf{K}} c(n,\mathbf{k}, n',\mathbf{k}'; \mathbf{K}) e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.18)$$

où \mathbf{K} est un vecteur du réseau réciproque. On obtient ainsi :

$$\langle \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) | U(\mathbf{r}) | \phi_{n',\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \rangle = \sum_{\mathbf{K}} \bar{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}' + \mathbf{K}) c(n,\mathbf{k}, n',\mathbf{k}'; \mathbf{K}). \quad (1.19)$$

Si la fonction $U(\mathbf{r})$ est lentement variable, sa transformée de Fourier $\bar{U}(\mathbf{k})$ ne contient que des termes de faibles fréquences spatiales. On se limite donc à des états au

voisinage du sommet de la bande de valence ou du bas de la bande de conduction, que l'on suppose situés à $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ (semi-conducteur à gap direct) ; on peut alors retenir comme expression approchée de l'élément de matrice du potentiel :

$$\langle \phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) | U(\mathbf{r}) | \phi_{n',\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \rangle = \overline{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') c(n \mathbf{k}, n' \mathbf{k}'; \mathbf{0}) . \quad (1.20)$$

La théorie du \mathbf{k}, \mathbf{p} permet d'obtenir les expressions approchées de $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ et de $\epsilon_n(\mathbf{k})$ au voisinage de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ (Kittel 1963, p 200) :

$$u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{0}}(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m} \sum_{p \neq n} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{pn}}{\epsilon_n(0) - \epsilon_p(0)} u_{p,\mathbf{0}}(\mathbf{r}) \quad (1.21)$$

$$\epsilon_n(\mathbf{k}) = \epsilon_n(0) + \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mu\nu} \left[\frac{m^*}{m_{\mu\nu}} \right] k_\mu k_\nu , \quad (1.22)$$

où $\mu, \nu \in \{x, y, z\}$, $m_{\mu\nu}^*$ désigne le tenseur de masse effective qui s'exprime par :

$$\frac{m^*}{m_{\mu\nu}} = \delta_{\mu\nu} + \frac{2}{m} \sum_{p \neq n} \frac{p_{np}^\mu p_{pn}^\nu}{\epsilon_n(0) - \epsilon_p(0)} \quad (1.23)$$

et p_{np}^μ est l'élément de matrice de la composante p_μ ($\mu \in \{x, y, z\}$) de l'impulsion :

$$p_{pn}^\mu = \langle \phi_{n,\mathbf{0}}(\mathbf{r}) | p_\mu | \phi_{p,\mathbf{0}}(\mathbf{r}) \rangle \quad (1.24)$$

Dans le cas d'une bande simple isotrope non dégénérée, seuls les termes diagonaux ont une contribution non nulle et la relation de dispersion (1.22) se réduit à :

$$\epsilon_n(\mathbf{k}) = \epsilon_n(0) + \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 . \quad (1.25)$$

La transformée de Fourier $F(\mathbf{r})$ de $\chi_n(\mathbf{k})$ est alors solution de l'équation suivante, obtenue par transformation de Fourier de (1.16) puis en tenant compte de (1.20)

et de (1.25) :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(\mathbf{r}) \right] F(\mathbf{r}) = [E - \epsilon_n(\mathbf{0})] F(\mathbf{r}) . \quad (1.26)$$

On retrouve l'équation habituelle de la masse effective dans la théorie des impuretés peu profondes. Toutefois, dans l'expression de la relation entre la fonction d'onde ψ et la fonction enveloppe F :

$$\psi(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) u_{n,0}(\mathbf{r}) + \frac{1}{m} \sum_{p \neq n} \frac{-i \nabla F(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}_{pn}}{\epsilon_n(\mathbf{0}) - \epsilon_p(\mathbf{0})} u_{p,0}(\mathbf{r}) , \quad (1.27)$$

obtenue en substituant (1.21) dans (1.15), nous laissons subsister le terme en gradient de la fonction enveloppe, qui est important dans la discussion à propos des conditions aux limites concernant les dérivées de la fonction d'onde à la séparation de deux semi-conducteurs de natures différentes. Cette discussion, qui reste un sujet ouvert sera abordée dans le chapitre 2.

1.3.2. Généralisation aux bandes multiples ou dégénérées

Le modèle précédent est satisfaisant pour la bande de conduction des semi-conducteurs comme GaAs, mais l'est beaucoup moins pour la bande de valence, qui, comme le montre la figure 1.2., est dégénérée en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$.

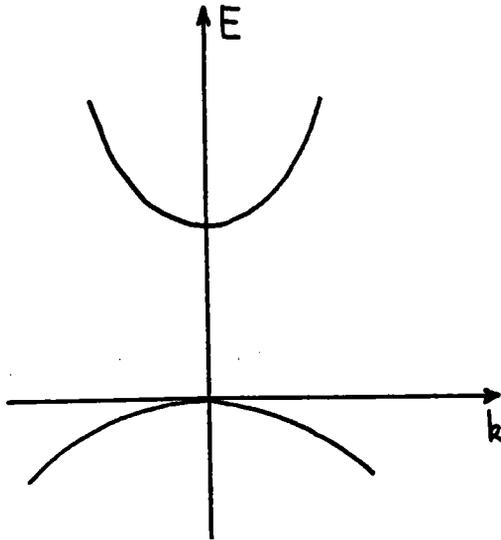


FIG. 1.1.

Modèle à deux bandes.

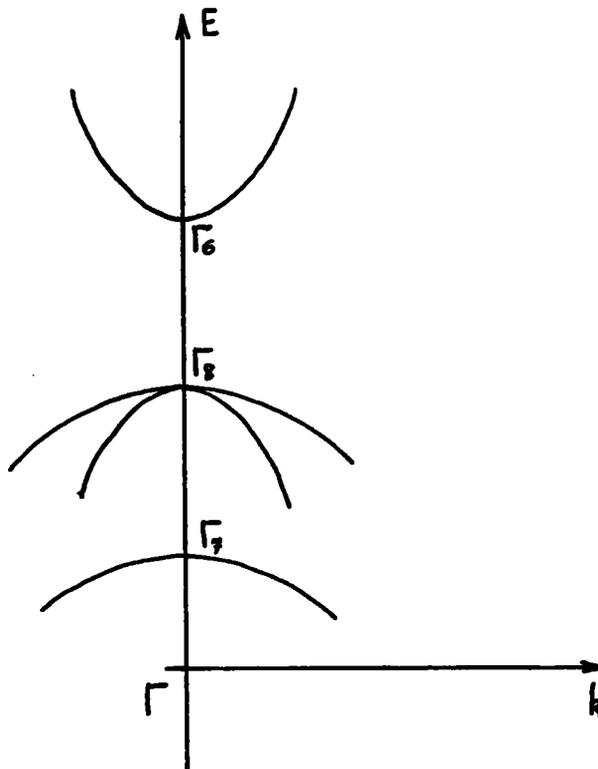


FIG. 12.

Structure de bandes des composés III-V à gap direct au voisinage du centre de zone.

Lorsque n bandes doivent être prises en compte, pour décrire le comportement au voisinage de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, l'équation de dispersion (1.22) se généralise par une équation de la forme :

$$H_{lm}(\mathbf{k}) = \epsilon_l(0) \delta_{lm} + \sum_{\alpha=1}^3 p_{lm}^{\alpha} k_{\alpha} + \sum_{\alpha,\beta=1}^3 D_{lm}^{\alpha\beta} k_{\alpha} k_{\beta} \quad (1.28)$$

où l, m décrivent le numéro de la bande concernée, tandis que les indices α, β sont relatifs aux directions x, y, z . $\epsilon_l(\mathbf{k})$ est la valeur propre de la matrice $n \times n$ de terme général $H_{lm}(\mathbf{k})$ pour une valeur donnée de \mathbf{k} . Les termes linéaires en \mathbf{k} décrivent le couplage $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ direct entre les n bandes prises en compte. La matrice p_{lm}^{α} est donnée par :

$$p_{lm}^{\alpha} = \frac{\hbar}{m} \langle u_l | p^{\alpha} | u_m \rangle \quad (1.29)$$

Les termes quadratiques en \mathbf{k} décrivent le couplage $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ indirect entre deux de ces n bandes et une troisième ne faisant pas partie des n bandes sélectionnées.

L'équation (1.26) se généralise en donnant un système de n équations différentielles couplées régissant les composantes $F_l(\mathbf{r})$ d'une fonction enveloppe à n composantes. Ce système est analogue à l'équation de la masse effective à n bandes écrit par Luttinger et Kohn (Luttinger et Kohn 1955) pour une impureté de type accepteur et s'écrit :

$$\sum_{l=1}^n [H_{lm}(-i\nabla) + U(\mathbf{r})\delta_{lm}] F_m(\mathbf{r}) = E F_l(\mathbf{r}) \quad (1.30)$$

La fonction d'onde ψ s'exprime en fonction des n composantes de la fonction enveloppe par l'expression suivante :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^n \left[F_l(\mathbf{r}) u_{l,0}(\mathbf{r}) + \frac{1}{m} \sum_{q>n} \frac{-i\nabla F_l(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}_{lq}}{\epsilon_1(0) - \epsilon_q(0)} u_{q,0}(\mathbf{r}) \right]. \quad (1.31)$$

1.4. CONSTRUCTION D'ETATS EXCITES DANS UN MODELE A DEUX BANDES

Nous établissons dans ce paragraphe l'équation de Wannier à l'aide du formalisme de Haken (1976).

1.4.1. Définition du modèle

Nous effectuons les approximations suivantes :

- approximation de Born-Oppenheimer : ceci revient à effectuer l'étude des électrons en considérant comme fixes les ions du réseau cristallin ; l'effet de ces ions peut donc être décrit par un potentiel ayant la périodicité du réseau ;

- la structure de bandes du semi-conducteur peut être modélisée par un modèle à deux bandes : une bande de conduction vide et une bande de valence pleine dans l'état fondamental ; cette approximation est justifiée dans la mesure où la largeur de la bande interdite est grande devant les énergies de liaison des excitations considérées par la suite ;

- les semiconducteurs sont supposés à bandes interdites directes au point $k = 0$ et nous nous limiterons aux états excités de vecteurs d'onde k voisins de 0 ;

- les effets d'échange et les degrés de liberté de spin sont négligés ; le paramètre de configuration ξ se réduit donc à la variable d'espace r ;

- les relations de dispersion :

$$\lambda \rightarrow \epsilon_v(\lambda) \quad \text{pour la bande de valence ;} \quad (1.32)$$

$$\lambda \rightarrow \epsilon_c(\lambda) \quad \text{pour la bande de conduction} \quad (1.33)$$

sont supposées connues ; λ se réduit au vecteur d'onde k dans le cas de bandes non dégénérées.

1.4.2. Lacunes dans la bande de valence

Dans ce paragraphe, nous nous proposons d'examiner les excitations du cristal correspondant à l'extraction d'un ou plusieurs électrons de la bande de valence, la bande de conduction restant vide. Le formalisme de la seconde quantification est particulièrement bien adapté à l'étude de ce problème.

Soit Φ_V l'état fondamental du cristal (bande de valence pleine et bande de conduction vide). L'annihilation d'un électron de la bande de valence conduit à l'état

$$\Phi_\lambda = a_{V\lambda} \Phi_V \quad (1.34)$$

Ce processus crée un déficit d'un électron dans la bande de valence, qui peut être considéré comme une particule, qu'il est convenu d'appeler *trou*. L'annihilation d'un électron peut ainsi être réinterprétée comme une création de trou et on peut définir les opérateurs d_λ^\dagger de création et d_λ d'annihilation de trou par :

$$d_\lambda^\dagger = a_{V\lambda} \quad \text{et} \quad d_\lambda = a^\dagger_{V\lambda} \quad (1.35)$$

La bande de valence étant pleine, on a :

$$d_\lambda \Phi_V = a_{V\lambda}^\dagger \Phi_V = 0 \quad (1.36)$$

Les relations d'anticommuation (1.4) deviennent :

$$\{ d_i^\dagger, d_j^\dagger \} = 0 ; \{ d_i^\dagger, d_j \} = \delta_{ij} ; \{ d_i, d_j \} = 0 . \quad (1.37)$$

Par hypothèse, on ne s'intéresse dans ce paragraphe qu'à des états pour lesquels la bande de conduction est vide ; les opérateurs champ (1.2) peuvent alors être développés sur des fonctions propres ϕ_λ correspondant à des états de la seule bande de valence. L'opérateur champ créant un trou au point r peut s'écrire :

$$\Psi_h (r) = \sum_{\lambda} d_{\lambda}^{\dagger} \phi_{h\lambda}^* (r) , \quad (1.38)$$

tandis que l'opérateur champ annihilant un électron en ce même point a pour expression :

$$\Psi (r) = \sum_{\lambda} a_{\lambda} \phi_{\lambda} (r) , \quad (1.39)$$

Or ces deux opérateurs ont le même effet, ce qui nous amène à identifier les fonctions d'onde de trou $\phi_{h\lambda}$ aux conjuguées complexes ϕ_{λ}^* des fonctions d'onde électroniques de la bande de valence. Les fonctions d'onde des trous, lorsque les effets liés au spin sont négligés, peuvent donc être définies comme les conjuguées des fonctions de Bloch électroniques de la bande de valence. Lorsqu'il est tenu compte du couplage spin-orbite, l'Hamiltonien de Hartree-Fock ne commute plus avec l'opérateur K_0 de conjugaison complexe, mais avec l'opérateur K de renversement du temps. Ces deux opérateurs coïncident en l'absence de couplage spin-orbite ; il est donc plus général de définir les fonctions d'onde de trou par :

$$\phi_{h\lambda} = K\phi_{v\lambda} . \quad (1.40)$$

L'hamiltonien (1.1) du cristal peut se réécrire, en développant les opérateurs champ selon (1.2) puis en utilisant les opérateurs d et d^\dagger en lieu et place des a^\dagger et a :

$$\begin{aligned}
 H_{\text{crist}}^{\text{el}} &= \sum_{\lambda_1 \lambda_2} d_{\lambda_1} d_{\lambda_2}^\dagger \int \phi_{\lambda_1}^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ions}}(\mathbf{r}) \right] \phi_{\nu\lambda_2}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} d_{\lambda_1} d_{\lambda_2} d_{\lambda_3}^\dagger d_{\lambda_4}^\dagger \iint \phi_{\nu\lambda_1}^*(\mathbf{r}) \phi_{\nu\lambda_2}^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_{\nu\lambda_3}(\mathbf{r}') \phi_{\nu\lambda_4}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' .
 \end{aligned}
 \tag{1.41}$$

A l'aide des deux identités ci-dessous qui se déduisent des relations d'anticommuation (1.26) :

$$d_i d_j^\dagger = \delta_{ij} - d_j^\dagger d_i , \tag{1.42}$$

$$\begin{aligned}
 d_i d_j d_k^\dagger d_l^\dagger &= \delta_{jk} \delta_{il} - \delta_{jk} d_l^\dagger d_i - \delta_{ki} \delta_{jl} \\
 &+ \delta_{jl} d_k^\dagger d_i + \delta_{ki} d_l^\dagger d_j - d_k^\dagger d_j \delta_{il} + d_j^\dagger d_l^\dagger d_i d_j ,
 \end{aligned}
 \tag{1.43}$$

on obtient :

$$H_{\text{crist}}^{\text{el}} = \mathcal{E}_V + H_d + H_{dd} , \tag{1.44}$$

où le premier terme :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{E}_V &= \sum_{\lambda} \int \phi_{\nu\lambda}^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{ions}}(\mathbf{r}) \right] \phi_{\nu\lambda}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \iint \phi_{\nu\lambda_1}^*(\mathbf{r}) \phi_{\nu\lambda_2}^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_{\nu\lambda_2}(\mathbf{r}') \phi_{\nu\lambda_1}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \\
 &- \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \iint \phi_{\nu\lambda_1}^*(\mathbf{r}) \phi_{\nu\lambda_2}^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_{\nu\lambda_1}(\mathbf{r}') \phi_{\nu\lambda_2}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}'
 \end{aligned}
 \tag{1.45}$$

est l'énergie de la bande de valence pleine dans l'approximation de Hartree-Fock ; le second terme :

$$H_d = - \sum_{\lambda} d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda} \epsilon_v(\lambda) \quad (1.46)$$

est la somme des énergies des défauts en l'absence d'interaction défaut-défaut et le troisième terme :

$$H_{dd} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} d_{\lambda_4}^{\dagger} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda_1} d_{\lambda_2} W(\nu \lambda_1 \nu \lambda_2 | \nu \lambda_4 \nu \lambda_3) \quad (1.47)$$

est le terme d'interaction coulombienne défaut-défaut, avec

$$W(i_1 \lambda_1 i_2 \lambda_2 | i_4 \lambda_4 i_3 \lambda_3) = \iint \phi_{i_1 \lambda_1}^*(\mathbf{r}) \phi_{i_2 \lambda_2}^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \phi_{i_4 \lambda_4}(\mathbf{r}') \phi_{i_3 \lambda_3}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' , \quad (1.48)$$

l'étiquette i_j pouvant prendre les valeurs v et c (respectivement pour la bande de valence et pour la bande de conduction).

Notons que dans le cas où une lacune et une seule est créée dans l'état λ de la bande de valence, l'énergie du cristal est :

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_v - \epsilon_v(\lambda) . \quad (1.49)$$

L'écart d'énergie par rapport au cristal non excité est donc $\epsilon_c(\lambda)$; ceci constitue une démonstration du théorème de Koopmans énoncé au paragraphe 1.3.1.

1.4.3. Electrons dans la bande de conduction

Dans la bande de conduction, on conserve bien sûr la description en terme d'électrons et on définit les fonctions d'onde électroniques

$$\phi_{e\lambda}(\mathbf{r}) = \phi_{c\lambda}(\mathbf{r}) . \tag{ 1.50 }$$

Pour un cristal dont la bande de valence est pleine et dont la bande de conduction contient des électrons, on procède de la même façon qu'au paragraphe précédent. On doit cette fois tenir compte des fonctions d'onde de la bande de valence et de la bande de conduction. On montre que l'Hamiltonien électronique du cristal peut alors se mettre sous la forme :

$$H_{\text{crist}}^{\text{el}} = \mathcal{E}_v + H_e + H_{ee} + H_{ve} , \tag{ 1.51 }$$

où le premier terme \mathcal{E}_v est l'énergie (1.45) de la bande de valence pleine dans l'approximation de Hartree-Fock ; le second terme :

$$H_e = + \sum_{\lambda} a_{c\lambda}^{\dagger} a_{c\lambda} \epsilon_c(\lambda) \tag{ 1.52 }$$

est la somme des énergies des électrons de conduction en l'absence d'interaction entre électrons de conduction ; le troisième terme est :

$$H_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} a_{\lambda_4}^{\dagger} a_{\lambda_3}^{\dagger} a_{\lambda_1} a_{\lambda_2} W(c_{\lambda_1} c_{\lambda_2} | c_{\lambda_4} c_{\lambda_3}) \tag{ 1.53 }$$

où $W(c_{\lambda_1} c_{\lambda_2} | c_{\lambda_4} c_{\lambda_3})$ conserve la même forme que dans le terme d'interaction défaut-défaut (1.47) ; c'est le terme d'interaction coulombienne entre les électrons de conduction ; enfin le quatrième terme est le terme d'interaction entre les électrons de

conduction et les électrons de la bande de valence pleine.

Seul ce dernier terme est de nature nouvelle. C'est le terme le plus important. Du fait qu'il fait intervenir la totalité des fonctions d'onde, il contient 4 types d'éléments de matrice :

$$\begin{aligned}
 &W(v\lambda_1 c\lambda_2 | c\lambda_4 v\lambda_3) \\
 &W(c\lambda_1 v\lambda_2 | v\lambda_4 c\lambda_3) \\
 &W(c\lambda_1 v\lambda_2 | c\lambda_4 v\lambda_3) \\
 &W(v\lambda_1 c\lambda_2 | v\lambda_4 c\lambda_3)
 \end{aligned}
 \tag{ 1.54 }$$

Compte tenu du fait que la bande de valence est pleine, son expression se réduit à :

$$\begin{aligned}
 H_{V_e} = &\sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} a^\dagger_{\lambda_1} a_{\lambda_4} \delta_{\lambda_2 \lambda_3} W(c\lambda_1 v\lambda_2 | v\lambda_3 c\lambda_4) \\
 &- \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} a^\dagger_{\lambda_2} a_{\lambda_4} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} W(v\lambda_1 c\lambda_2 | v\lambda_3 c\lambda_4) .
 \end{aligned}
 \tag{ 1.55 }$$

L'interaction coulombienne entre les électrons de conduction et la bande de valence pleine est donc composée d'un terme direct et d'un terme d'échange.

1.4.4. Interactions Electrons-Trous

Nous envisageons cette fois un cristal où coexistent les deux types d'excitations précédentes : des lacunes dans la bande de valence et des électrons dans la bande de conduction. Nous devons utiliser à la fois les fonctions d'onde monoélectroniques de la bande de valence et de la bande de conduction. L'Hamiltonien électronique du cristal peut alors se mettre sous la forme :

$$H_{\text{crist}}^{\text{el}} = \mathcal{E}_v + H_e + H_d + H_{ee} + H_{dd} + H_{Ve} + H_{ed} ,
 \tag{ 1.56 }$$

où les six premiers termes ont déjà été rencontrés précédemment, tandis que le dernier terme décrit les interactions électron-défaut. Physiquement, il est intéressant de regrouper les trois premiers termes en un Hamiltonien H_0 qui ne tient pas compte des interactions entre les excitations du cristal :

$$H_0 = \mathcal{E}_v + \sum_{\lambda} (a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \epsilon_c(\lambda) - d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda} \epsilon_v(\lambda)) . \quad (1.57)$$

Les quatre derniers termes sont regroupés en un Hamiltonien d'interaction H_I :

$$H_I = H_{ee} + H_{dd} + H_{ve} + H_{ed} \quad (1.58)$$

avec

$$H_{ed} = \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_4} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda_2} W(c_{\lambda_1} v_{\lambda_2} | v_{\lambda_3} c_{\lambda_4}) - \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} a_{\lambda_2}^{\dagger} a_{\lambda_4} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda_1} W(v_{\lambda_1} c_{\lambda_2} | v_{\lambda_3} c_{\lambda_4}) . \quad (1.59)$$

Cet Hamiltonien électron-défaut comprend donc un terme direct et un terme d'échange.

1.4.5. Etats excitoniques

Une excitation électronique d'un cristal semi-conducteur contenant N électrons correspond au transfert d'un électron d'un niveau occupé de la bande de valence à un niveau inoccupé de la bande de conduction. Etant donné l'ordre de grandeur courant de l'écart d'énergie (gap) entre ces niveaux, un tel processus d'excitation est généralement provoqué par l'absorption d'un photon dans le domaine optique. On appelle *exciton* l'état électronique du cristal après une telle excitation.

Pour des atomes en faible interaction, l'excitation reste localisée à un atome et ses voisins immédiats. Cette première approche de la théorie excitonique (Frenkel 1931) est inadaptée aux cristaux semi-conducteurs, où les excitations ne restent pas localisées au voisinage d'un site en raison d'un couplage important entre les atomes du cristal. Une modélisation plus adaptée à l'exciton dans un cristal semi-conducteur consiste à considérer l'électron de la bande de conduction comme une particule en interaction avec les $N-1$ électrons restant dans la bande de valence, ces $N-1$ électrons étant considérés comme une quasi-particule de charge positive appelée *trou*. Un exciton est alors lui-même une quasi-particule qui peut, dans l'approximation de la fonction enveloppe, être considéré comme un système de deux particules, un électron et un trou, en interaction coulombienne (Wannier, 1937 ; Slater, 1949).

L'approximation d'ordre zéro pour un état excitonique est un état de paire électron-trou non liés qui peut se construire à partir de l'état Φ_V (bande de valence pleine) par application successive d'un opérateur de création de trou et d'un opérateur de création d'électron :

$$| \lambda_1 \lambda_2 \rangle = a_{\lambda_1}^\dagger d_{\lambda_2}^\dagger \Phi_V . \quad (1.60)$$

Un tel état est un état propre de l'Hamiltonien H_0 (1.57) correspondant à l'énergie :

$$E = \mathcal{E}_V + \epsilon_c(\lambda_1) - \epsilon_v(\lambda_2) . \quad (1.61)$$

Une meilleure approximation consiste à former une combinaison linéaire d'états de paire :

$$| \Phi_X \rangle = \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} | \lambda_1 \lambda_2 \rangle = \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} a_{\lambda_1}^\dagger d_{\lambda_2}^\dagger \Phi_V . \quad (1.62)$$

Les coefficients $C_{\lambda_1 \lambda_2}$ donnent une description de l'exciton en représentation du nombre d'occupation. Les coefficients $C_{\lambda_1 \lambda_2}$ sont déterminés en écrivant que l'état excitonique $| \Phi_X \rangle$ est un état propre de l'Hamiltonien électronique du cristal (1.56) ;

on peut mettre cet Hamiltonien sous la forme :

$$H_{\text{crist}}^{\text{el}} = \mathcal{E}_V + \sum_{\lambda} (a_{\lambda}^{\dagger} a_{\lambda} \epsilon_c(\lambda) - d_{\lambda}^{\dagger} d_{\lambda} \epsilon_v(\lambda)) + H_I, \quad (1.63)$$

avec $H_I = H_{ee} + H_{dd} + H_{Ve} + H_{ed}$. (1.64)

L'excitation envisagée ne faisant intervenir qu'un électron dans la bande de conduction et un trou dans la bande de valence, les termes H_{ee} et H_{dd} sont nuls.

Il reste :

avec
$$H_I = \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_4} \delta_{\lambda_2 \lambda_3} W(c_{\lambda_1} v_{\lambda_2} | v_{\lambda_3} c_{\lambda_4})$$

$$- \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} a_{\lambda_2}^{\dagger} a_{\lambda_4} \delta_{\lambda_1 \lambda_3} W(v_{\lambda_1} c_{\lambda_2} | v_{\lambda_3} c_{\lambda_4})$$

$$+ \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} a_{\lambda_1}^{\dagger} a_{\lambda_4} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda_2} W(c_{\lambda_1} v_{\lambda_2} | v_{\lambda_3} c_{\lambda_4})$$

$$- \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} a_{\lambda_2}^{\dagger} a_{\lambda_4} d_{\lambda_3}^{\dagger} d_{\lambda_1} W(v_{\lambda_1} c_{\lambda_2} | v_{\lambda_3} c_{\lambda_4}). \quad (1.65)$$

L'équation de Schrödinger s'écrit, pour l'état exciton $|\Phi_X\rangle$

$$H_{\text{crist}}^{\text{el}} |\Phi_X\rangle = \mathcal{E} |\Phi_X\rangle, \quad (1.66)$$

soit \mathcal{E}_X l'énergie d'excitation du cristal définie par

$$\mathcal{E}_X = \mathcal{E} - \mathcal{E}_V. \quad (1.67)$$

En multipliant à gauche par $\langle \Phi_V | d_{\lambda_1} d_{\lambda_2}$, on obtient

$$\langle \Phi_V | d_{\lambda_1} d_{\lambda_2} (H_{\text{crist}}^{\text{el}} - \mathcal{E}_V) | \Phi_X \rangle = \langle \Phi_V | d_{\lambda_1} d_{\lambda_2} \mathcal{E}_X | \Phi_X \rangle, \quad (1.68)$$

d'où l'on déduit l'équation déterminant les coefficients $C_{\lambda_1 \lambda_2}$

$$\begin{aligned} & [\epsilon_c(\lambda_1) - \epsilon_v(\lambda_2) - \mathcal{E}_X] C_{\lambda_1 \lambda_2} \\ & = \sum_{\lambda_3 \lambda_4} C_{\lambda_3 \lambda_4} [W(v\lambda_1 c\lambda_4 | v\lambda_2 c\lambda_3) - W(v\lambda_4 c\lambda_1 | v\lambda_2 c\lambda_3)] \end{aligned} \quad (1.69)$$

En représentation des coordonnées, la fonction d'onde excitonique s'écrit :

$$F_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\lambda_1 \lambda_2} C_{\lambda_1 \lambda_2} \phi_{e\lambda_1}(\mathbf{r}_1) \phi_{h\lambda_2}(\mathbf{r}_2). \quad (1.70)$$

1.4.6. Excitons de Mott-Wannier ; fonction enveloppe excitonique

Dans le cas d'excitons faiblement liés, l'extension spatiale est importante dans l'espace direct. Il en résulte que, dans l'espace réciproque, les vecteurs d'onde sont assez bien déterminés. Dans le cas d'une transition optique dans un semi-conducteur à Gap direct, les vecteurs d'onde \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 seront peu différents l'un de l'autre et voisins de 0. Les fonctions d'onde $\phi_{e\lambda}$ et $\phi_{h\lambda}$ peuvent être approchées par leur développement au voisinage de $\mathbf{k} = 0$; d'autre part, dans l'hypothèse de bandes non dégénérées, l'indice λ se réduit au vecteur d'onde \mathbf{k} . Il reste donc simplement :

$$\begin{aligned} \phi_{e\lambda}(\mathbf{r}) & \simeq c(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ \phi_{h\lambda}(\mathbf{r}) & \simeq (v(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}})^* = v^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (1.71)$$

La fonction d'onde excitonique s'écrit alors :

$$\begin{aligned}
 F_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} C_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} c(\mathbf{r}_1) e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} v^*(\mathbf{r}_2) e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} \\
 &= \psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) c(\mathbf{r}_1) v^*(\mathbf{r}_2) .
 \end{aligned} \tag{1.72}$$

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

$$\psi_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} C_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} \tag{1.73}$$

et $f_{\text{crist}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = c(\mathbf{r}_1) v^*(\mathbf{r}_2) , \tag{1.74}$

1.4.7. Equation effective pour la fonction enveloppe excitonique

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

$$\begin{aligned}
 \epsilon_v(\mathbf{k}) &= \epsilon_{v0} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} \quad \text{pour la bande de valence ;} \\
 \epsilon_c(\mathbf{k}) &= \epsilon_{c0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad \text{pour la bande de conduction.}
 \end{aligned} \tag{1.75}$$

Le coefficient m_h^* , caractérisant la courbure de la bande de valence, sera interprété dans la suite comme la masse effective du trou (h pour *hole*). La largeur de la bande interdite, ou énergie de gap, sera notée :

$$\epsilon_g = \epsilon_{c0} - \epsilon_{v0} . \tag{1.76}$$

L'équation (1.69) devient alors, en utilisant la forme (1.71) des fonctions d'onde :

$$\left[\epsilon_g + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_h} - \mathcal{E}_X \right] C_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} = \sum_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} C_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} [W(\nu \mathbf{k}_1 \mathbf{c} \mathbf{k}_4 | \nu \mathbf{k}_2 \mathbf{c} \mathbf{k}_3) - W(\nu \mathbf{k}_4 \mathbf{c} \mathbf{k}_1 | \nu \mathbf{k}_2 \mathbf{c} \mathbf{k}_3)] \quad (1.77)$$

Le second terme du second membre est le terme d'interaction coulombienne d'échange électron-trou ; ce terme d'échange est généralement petit et à courte portée (Dimmock 1963, p 269 ; Kane 1958, 1959 ; Elliott 1963). Il reste à calculer le premier terme :

$$W(\nu \mathbf{k}_1 \mathbf{c} \mathbf{k}_4 | \nu \mathbf{k}_2 \mathbf{c} \mathbf{k}_3) = \iint |\nu(\mathbf{r})|^2 |c(\mathbf{r}')|^2 e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{r}'} e^{i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' \quad (1.78)$$

Les fonctions $|\nu(\mathbf{r})|^2$ et $|c(\mathbf{r})|^2$ ont la périodicité du réseau mais peuvent osciller rapidement à l'intérieur d'une cellule du réseau.

Pour évaluer (1.78), on effectue une moyenne sur des cellules différentes du réseau. Comme les fonctions de Bloch sont normées dans un volume V , et comme il y a deux fonctions de Bloch dans l'intégrale, le processus de prise de moyenne fait apparaître un facteur $\frac{1}{V^2}$:

$$W(\nu \mathbf{k}_1 \mathbf{c} \mathbf{k}_4 | \nu \mathbf{k}_2 \mathbf{c} \mathbf{k}_3) \simeq \frac{1}{V^2} \iint e^{i(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{r}'} e^{i(\mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1) \cdot \mathbf{r}} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{r}' . \quad (1.79)$$

Au même degré d'approximation, la fonction d'onde excitonique s'écrit :

$$F_X(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} C_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2)}. \quad (1.80)$$

En sommant sur \mathbf{k}_1 et \mathbf{k}_2 les deux membres de (1.77), on obtient une équation de Schrödinger à deux particules :

$$\left[\epsilon_g - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right] \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \mathcal{E}_X \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2). \quad (1.81)$$

On montre (Haken 1959) que, si l'on tient compte des phénomènes de polarisation induits par les transitions virtuelles entre les bandes, le terme d'interaction coulombienne est modifié. Cette modification peut être comprise de façon plus élémentaire en envisageant la polarisation macroscopique du matériau dont on peut rendre compte par l'introduction d'une constante diélectrique κ . En effectuant cette modification, on obtient l'équation de Wannier :

$$\left[- \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \right] \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E_X \psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h). \quad (1.82)$$

où l'on a défini l'énergie de liaison de l'exciton par :

$$E_X = \mathcal{E}_X - \epsilon_g. \quad (1.83)$$

1.4.8. Résolution de l'équation effective

Dans un cristal infini, il y a invariance par translation. La quantité de mouvement \mathbf{P} du système électron-trou commute alors avec l'Hamiltonien. On peut alors séparer le mouvement du centre de masse décrit par la variable

$$\mathbf{R} = \frac{m_e^* \mathbf{r}_e + m_h^* \mathbf{r}_h}{m_e^* + m_h^*} \quad (1.84)$$

du mouvement relatif décrit par la variable :

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h \quad (1.85)$$

La fonction d'onde $\psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$ peut se mettre sous la forme d'un produit :

$$\psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \Phi(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{r}) . \quad (1.86)$$

En notant M la masse totale du système électron-trou :

$$M = m_e^* + m_h^* , \quad (1.87)$$

et μ sa masse réduite :

$$\mu = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*} , \quad (1.88)$$

l'équation (1.82) peut se réécrire :

$$\left[- \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{r}}^2 - \frac{e^2}{\kappa r} \right] \Phi(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{r}) = E_X \Phi(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{r}) . \quad (1.89)$$

On peut séparer l'équation régissant le mouvement du centre de masse :

$$- \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\mathbf{R}}^2 \Phi(\mathbf{R}) = E_X^0 \Phi(\mathbf{R}) \quad (1.90)$$

de celle qui régit le mouvement relatif :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - \frac{e^2}{\kappa r} \right] \phi(r) = E_X^{\text{rel}} \phi(r). \quad (1.91)$$

La première a pour solutions les ondes planes :

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \quad (1.92)$$

correspondant à l'énergie :

$$E_X^0 = \frac{\hbar^2 K^2}{2M} \quad (1.93)$$

L'étude des états stationnaires du mouvement relatif est formellement identique au problème de l'atome d'hydrogène et sa solution analytique conduit, dans l'état fondamental, à une énergie totale dans le référentiel barycentrique :

$$E_X^{\text{rel}} = -\frac{\mu e^4}{2\kappa^2 \hbar^2} = E_X^{3D}. \quad (1.94)$$

La fonction d'onde correspondant à cet état fondamental est

$$\psi_X^{3D} = e^{-\alpha r} \quad (1.95)$$

où r désigne la distance électron-trou, et α est tel que

$$\frac{1}{\alpha} = \frac{\kappa \hbar^2}{\mu e^2} = a_X^{3D}. \quad (1.96)$$

a_X^{3D} est, par définition, le rayon de Bohr excitonique. Les valeurs numériques de E_X^{3D} et a_X^{3D} peuvent s'écarter des valeurs $E_0 = -13,6$ eV et $a_0 = 0,054$ nm relatives à l'atome d'hydrogène. En effet, les valeurs des masses effectives de l'électron et du trou peuvent être très supérieures à la masse de l'électron libre, tandis que la constante diélectrique κ peut être de l'ordre de 10. Il en résulte des énergies de liaison beaucoup plus faibles que l'énergie de liaison de l'atome d'hydrogène et des rayons de Bohr excitoniques beaucoup plus grands que le rayon de l'atome d'hydrogène, et par

conséquent beaucoup plus grands que la maille cristalline. Pour l'arséniure de gallium, qui sera l'objet de nos investigations ultérieures, on a ainsi :

$$E_X^{3D} = - 4,84 \text{ meV} ; a_X^{3D} = 11,90 \text{ nm} \quad (\text{pour le trou lourd})$$

$$E_X^{3D} = - 3,39 \text{ meV} ; a_X^{3D} = 16,99 \text{ nm} \quad (\text{pour le trou léger})$$

L'énergie totale de l'exciton est ainsi la somme d'une énergie cinétique de translation du centre de masse et d'une énergie totale dans le référentiel barycentrique :

$$E_X = \frac{\hbar^2 K^2}{2M} - \frac{\mu e^4}{2\kappa^2 \hbar^2} \quad (1.97)$$

Contrairement au cas du cristal illimité, le mouvement du centre de masse de l'exciton n'est plus libre dans le cas des hétérostructures. La séparation du mouvement du centre de masse et du mouvement relatif de l'exciton n'est plus valable qu'approximativement, l'approximation devenant d'autant plus médiocre que les dimensions des hétérostructures sont plus petites.

**ETATS EXCITONIQUES DANS
LES MILIEUX CONFINES**

2.1. INTRODUCTION

2.1.1. Généralités sur la physique des hétérostructures

2.1.2. Méthodes théoriques d'étude des hétérostructures

**2.2. ETATS A UN ELECTRON DANS
L'APPROXIMATION DE LA FONCTION ENVELOPPE**

2.2.1. Approximation de la fonction enveloppe dans un milieu faiblement hétérogène ; Hamiltonien de Ben Daniel-Duke

2.2.2. Hétérojonction : potentiel de confinement et conditions aux limites

2.2.3. Confinement dans une direction : exemple du puits quantique simple

2.2.4. Confinement dans les trois directions : exemple de la boîte parallélépipédique

2.2.5. Confinement dans les trois directions : exemple de la microcristallite sphérique

**2.3. ETATS EXCITONIQUES DANS
L'APPROXIMATION DE LA FONCTION ENVELOPPE**

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

2.3.2. Puits quantique

2.3.3. Points quantiques

2.3.4. Limite du confinement faible

2.3.5. Un cas de séparation rigoureuse des mouvements du centre de masse et du mouvement relatif de l'exciton dans un point quantique

2.4. CONCLUSION

2.1. INTRODUCTION

Dans le premier chapitre, nous avons rappelé le cadre théorique de la théorie des excitons dans un cristal massif, en précisant les hypothèses restrictives que nous ferons dans la suite. Dans ce chapitre, nous proposons une revue des domaines de confinement plus ou moins restreints réalisables dans les semi-conducteurs, en partant du cristal massif (3D) jusqu'au point quantique (0D).

2.1.1. Généralités sur la physique des hétérostructures

Si l'on met à part les microcristallites, les hétérostructures sont obtenues par réalisation de couches parallèles. Les structures de basse dimensionnalité sont obtenues par gravure ultérieure sur ces couches. L'obtention de couches extrêmement fines d'un semi-conducteur B sur un semi-conducteur A nécessite que la croissance cristalline de B sur A (épitaxie) soit réalisable, ce qui impose des restrictions importantes dans le choix des semi-conducteurs possibles : il faut en effet que A et B aient le même type de réseau cristallin et la même dimension de cellule élémentaire. Comme on peut le voir sur la figure 2.1., le couple GaAs/AlAs présente un accord de maille satisfaisant. Le désaccord de maille relatif peut s'exprimer quantitativement par :

$$\frac{\delta a}{a} = \frac{a_B - a_A}{a_A}, \quad (2.1)$$

où a_A et a_B sont les constantes de réseau respectives de A et de B . Il est inférieur à 0,1 pour le couple GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs lorsque $x < 0,4$. En revanche, il existe des couples comme GaSb/AlSb pour lesquels le désaccord de maille est plus important et conduit à des effets de tension (Osborn 1983 ; Voisin 1984 ; Marzin 1986)

résultant de l'adaptation du matériau en couche mince sur le matériau en couche épaisse. Dans la suite, on se limitera au cas où les effets de tension peuvent être négligés ; la constante de réseau a est alors la même dans les deux matériaux.

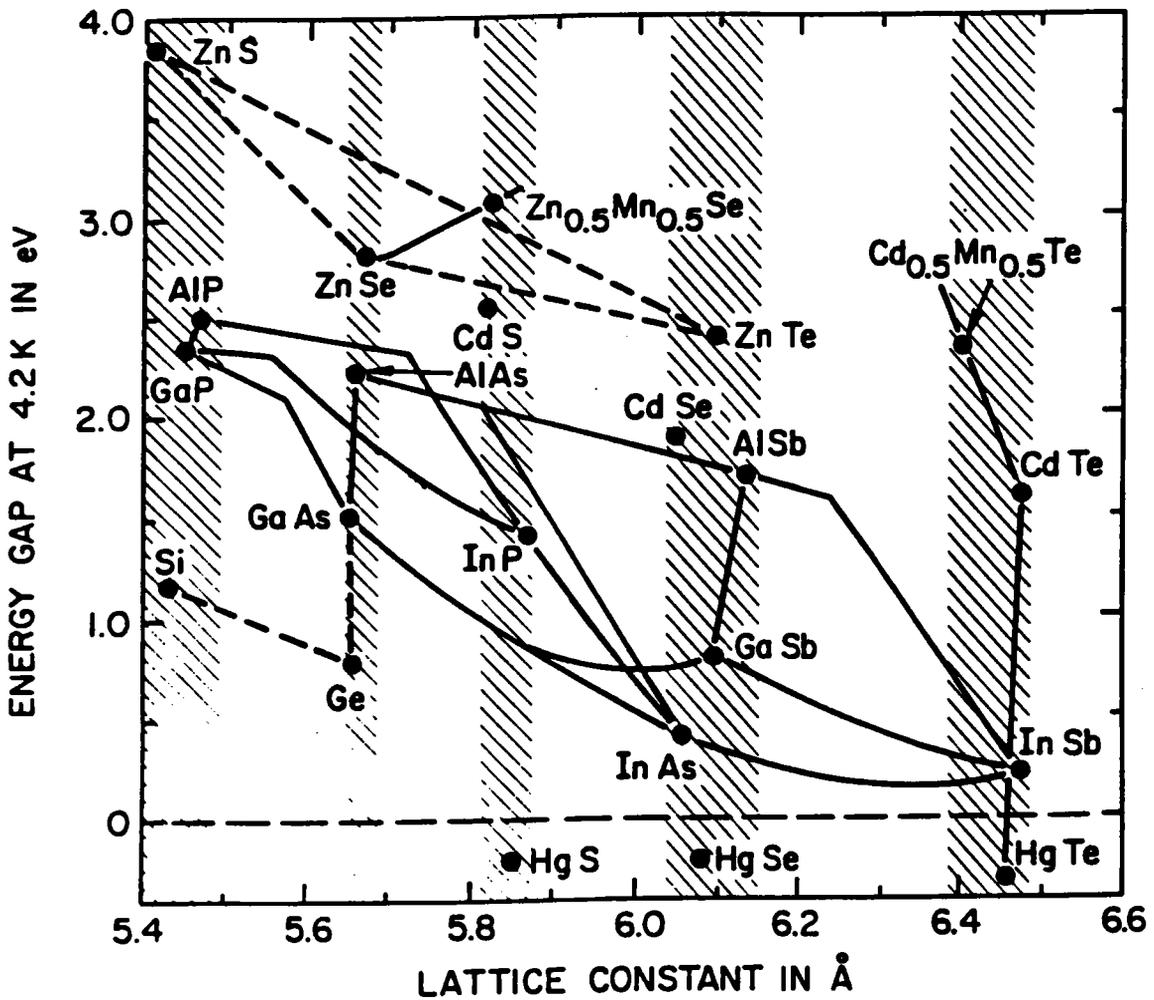


FIG. 2.1.

(empruntée à Esaki 1986)

Gap énergétique et constante de réseau des semi-conducteurs courants. L'accord de maille est particulièrement satisfaisant pour GaAs/AlAs.

2.1.2. Méthodes théoriques d'étude des hétérostructures

Parmi les méthodes en compétition pour aborder l'étude de la structure électronique d'une hétérostructure, on peut citer :

- la méthode des liaisons fortes paramétrisée (Schulman et Chang 1981 ; Chang et Schulman 1982).

Cette méthode, simple dans son principe, ne se prête pas à l'étude de l'action de champs extérieurs. Elle consiste, en partant des niveaux d'énergie caractéristiques des liaisons sp^3 entre atomes voisins, à construire la fonction d'onde atome après atome. Cela revient à considérer l'hétérostructure comme un matériau massif dont la cellule élémentaire est très grande à l'échelle atomique (dans un superréseau, c'est la période du superréseau).

- la méthode des pseudo-potentiels (Jaros et Wong 1984 ; Jaros et al. 1985).

L'avantage de ces deux méthodes est de permettre de traiter des états même éloignés du point $k = 0$, contrairement à l'approximation de la fonction enveloppe.

- l'approximation de la fonction enveloppe (Bastard 1981, 1982 ; Altarelli, 1983 ; Bastard et Brum 1986)

Le modèle théorique utilisé dans la description des hétérostructures est une adaptation de la théorie 3D en rajoutant au potentiel effectif de l'approximation de Hartree-Fock un potentiel de confinement. En effet, dans un milieu hétérogène, les grandeurs intervenant dans l'équation effective pour la fonction enveloppe (masse effective et énergie de gap), au lieu d'être uniformes, deviennent des fonctions de la position de la particule.

2.2. ETATS A UN ELECTRON DANS L'APPROXIMATION DE LA FONCTION ENVELOPPE

2.2.1. Approximation de la fonction enveloppe dans un milieu faiblement hétérogène ; Hamiltonien de BenDaniel-Duke

Pour simplifier l'exposé, on supposera dans ce paragraphe que le cristal est homogène dans les directions x et y ; les grandeurs caractéristiques du matériau sont donc des fonctions de la variable z seule. On effectue l'approximation de la fonction enveloppe (Bastard 1981, 1982 ; Altarelli, 1983 ; Bastard et Brum 1986) dans un modèle à deux bandes isotropes non dégénérées.

Un premier type d'hétérogénéité est une succession de couches de deux semi-conducteurs A et B, chaque couche étant homogène. Dans chacune des couches de semi-conducteur, il est alors naturel de supposer que la fonction d'onde ψ est reliée à une fonction enveloppe F par l'expression suivante, issue de l'approximation de la fonction enveloppe dans un cristal massif, en présence d'un potentiel extérieur $U(r)$:

$$\psi(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) u_{n,0}(\mathbf{r}) + \frac{1}{m} \sum_{p \neq n} \frac{-i \nabla F(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{p}_{pn}}{\epsilon_n(0) - \epsilon_p(0)} u_{p,0}(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

où la fonction enveloppe F est régie par l'équation :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + U(\mathbf{r}) \right] F(\mathbf{r}) = [E - \epsilon_n(0)] F(\mathbf{r}). \quad (2.3)$$

Dans cette équation, la masse effective et l'énergie $\epsilon_n(0)$ sont des grandeurs dépendant de z , ayant 2 valeurs distinctes selon que z correspond au matériau A ou au matériau B. Mais, en toute rigueur, il en est aussi de même pour la partie périodique des

fonctions de Bloch. On supposera toutefois dans la suite que, dans le cas d'un bon accord de maille, les parties périodiques des fonctions de Bloch sont identiques dans les deux matériaux, soit :

$$u_{n,0}^A(\mathbf{r}) = u_{n,0}^B(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

La question naturelle qui se pose alors est la généralisation de l'équation (2.3) à l'ensemble du cristal. Selon les positions respectives de la masse effective et de l'opérateur de dérivation, l'opérateur énergie cinétique peut prendre des expressions de différentes formes (Einervoll et Hemmer 1988) :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m^*}\right)^\alpha \nabla \left[\left(\frac{1}{m^*}\right)^\beta \cdot \left[\nabla \left(\frac{1}{m^*}\right)^\gamma \right] \right]; \alpha + \beta + \gamma = 1, \quad (2.5)$$

qui coïncident avec l'opérateur énergie cinétique usuel dans le cas où m^* est uniforme. La solution naïve ($\alpha = 1$; $\beta = \gamma = 0$) qui consiste à prendre l'équation (2.3) en remplaçant simplement m^* et $\epsilon_n(0)$ par des fonctions de z ne convient pas, car elle conduit à un Hamiltonien non hermitique. L'hermiticité de L'Hamiltonien peut être rétablie en choisissant $\beta = 1$ et $\alpha = \gamma = 0$, ce qui conduit à l'équation de BenDaniel-Duke (Harrison 1961 ; BenDaniel et Duke 1966) :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{1}{m^*(z)} \nabla \right) + U(\mathbf{r}) \right] F(\mathbf{r}) = [E - \epsilon_{n0}(z)] F(\mathbf{r}). \quad (2.6)$$

Cette équation coïncide avec l'équation (2.3) dans le cas d'une masse effective indépendante de z et assure la conservation du courant de probabilité associé à la fonction enveloppe ; le vecteur densité de courant a pour expression :

$$\mathbf{J}_F = \frac{\hbar}{m^*} (F^* \nabla F - F \nabla F^*) \quad (2.7.)$$

l'équation de conservation correspondante est :

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_F = 0 \quad (2.8)$$

pour des états stationnaires. Cette équation est satisfaite si $\frac{1}{m^*} \nabla F$ est continu à la surface de séparation des deux matériaux.

Sous certaines hypothèses, on peut montrer que c'est la seule solution acceptable. Ceci a été démontré par Enders (Enders 1989) dans le cadre de l'approximation de la masse effective, ce qui suppose que le potentiel U et la masse effective m^* ne varient pas de façon sensible sur des distances de l'ordre des dimensions de la cellule élémentaire. Ces hypothèses sont toutefois mises en défaut sur une hétérojonction où l'on passe des caractéristiques du semi-conducteur A à celles du semi-conducteur B en quelques couches atomiques.

2.2.2. Hétérojonction : potentiel de confinement et conditions aux limites

En admettant l'équation de BenDaniel et Duke, on obtient les conditions aux limites suivantes pour la fonction enveloppe :

$$\begin{aligned} &F \text{ est continue à l'interface} \\ &\frac{1}{m^*} \frac{dF}{dz} \text{ est continu à l'interface} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Il est à remarquer que l'on peut aussi adopter la démarche inverse, qui consiste à admettre les conditions aux limites (2.9) ; l'équation de BenDaniel et Duke s'en déduit alors aisément.

2.2.3. Confinement dans une direction : exemple du puits quantique simple

Considérons une couche mince d'épaisseur H d'un semi-conducteur A prise entre deux couches épaisses d'un semi-conducteur B . Supposons que les structures de bandes de A et B sont suffisamment proches pour que les parties périodiques des fonctions de Bloch dans les deux matériaux soient identiques. On supposera également, par souci de simplification, que les masses effectives sont identiques et isotropes dans les deux matériaux. Si l'énergie de gap de A est supérieure à celle de B , la fonction enveloppe obéit à une équation :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + V_w(\mathbf{r}) \right] F(\mathbf{r}) = [E - \epsilon_{n0}] F(\mathbf{r}) . \quad (2.10)$$

où V_w est le potentiel de confinement. Ce potentiel est représenté par :

$$V_w(z) = \begin{cases} 0 & \text{pour } |z| < H/2 \\ V_0 & \text{pour } |z| > H/2 \end{cases} \quad (2.11)$$

Le potentiel étant indépendant de x et y , on cherche une fonction propre de la forme :

$$F(\mathbf{r}) = f(z) g(x) h(y) . \quad (2.12)$$

On obtient alors :

$$F(\mathbf{r}) = \exp(i(k_x x + k_y y)) f(z) , \quad (2.13)$$

qui est solution de l'équation (2.10) si f est solution de :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] f(z) = E_w f(z) \quad (2.14)$$

avec des conditions aux limites qui traduisent la continuité de f et de sa dérivée f' pour $|z| = \frac{H}{2}$. La valeur propre associée à cette fonction est l'énergie :

$$E - \epsilon_n(0) = E_w + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) \quad (2.15)$$

La fonction enveloppe a donc partiellement perdu le caractère d'onde progressive qu'elle présentait dans le cas du semi-conducteur massif. L'énergie E_w associée au confinement par le puits s'obtient très facilement dans le cas limite du puits infini (limite $V_0 \rightarrow \infty$). Dans ce cas limite, l'équation (2.14) et ses conditions aux limites deviennent :

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 f(z)}{\partial z^2} &= E_w f(z) && \text{pour } |z| < \frac{H}{2} \\ f(z) &= 0 && \text{pour } |z| > \frac{H}{2} \end{aligned} \quad (2.16)$$

L'énergie E_w est quantifiée ; le niveau n est caractérisé par :

$$\begin{aligned} f_{2n+1}(z) &= \cos\left[(2n+1) \frac{\pi z}{H}\right] ; E_{w2n+1} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\pi^2(2n+1)^2}{H^2} \text{ pour les états pairs ;} \\ f_{2n+2}(z) &= \sin\left[(2n+2) \frac{\pi z}{H}\right] ; E_{w2n+2} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\pi^2(2n+2)^2}{H^2} \text{ pour les états impairs.} \end{aligned} \quad (2.17)$$

La condition de quantification de l'énergie est ici imposée par la condition d'annulation de f sur la frontière du matériau A . Le cas du puits fini conduit qualitativement à une solution similaire ; dans le cas des états liés pairs, les fonctions d'onde ont pour expression :

$$f_n(z) = \begin{cases} \cos(kz) & \text{pour } |z| < \frac{H}{2} \\ B \exp(-\kappa|z|) & \text{pour } |z| > \frac{H}{2} \end{cases} \quad (2.18)$$

$$\text{avec } k = \sqrt{\frac{2m^* E_w}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E_w)} . \quad (2.19)$$

La continuité de f en $\pm \frac{H}{2}$ détermine la constante B , tandis que la continuité de la dérivée première conduit à l'équation transcendante :

$$k \tan\left(k \frac{H}{2}\right) = \kappa \quad (2.21)$$

qui détermine une suite k_n donnant à nouveau des niveaux d'énergie discrets :

$$E_{wn} = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_n^2 \quad (2.22)$$

Que le potentiel de confinement soit fini ou non, la présence du potentiel de puits a pour effet de remplacer le spectre continu par un spectre discret. Ceci a pour conséquence importante le comportement quasi-bidimensionnel des porteurs dans les hétérostructures III-V. Si l'écart entre les niveaux discrets est grand devant l'énergie d'agitation thermique et l'énergie transférée lors des collisions, le mouvement des porteurs de charge est pratiquement localisé dans le plan (x, y) , le degré de liberté en z étant gelé dans un état lié $f_n(z)$. Dans le cas particulier d'un puits fini, il s'y rajoute un effet purement quantique (effet tunnel) : la probabilité de présence hors du puits a une valeur finie non nulle.

2.2.4. Confinement dans les trois directions : exemple de la boîte parallélépipédique

On considère un semi-conducteur A localisé dans un domaine parallélépipédique de côtés L_1, L_2, L_3 , enchâssé dans un semi-conducteur B . Reprenons les hypothèses et la démarche effectuées dans le cas du puits quantique.

Si la barrière de potentiel imposée par les parois du système modélisée par un potentiel de puits infini, ce potentiel de confinement peut s'écrire sous la forme d'une somme de trois potentiels à une dimension :

$$V(x_1, x_2, x_3) = \sum_{i=1}^3 V_i(x_i) \text{ avec } V(x_i) = \begin{cases} 0 & \text{pour } |x_i| < \frac{L_i}{2} \\ \infty & \text{pour } |x_i| > \frac{L_i}{2} \end{cases} \quad (2.23)$$

L'Hamiltonien de la particule est alors la somme de trois Hamiltoniens à une dimension ; les fonctions d'onde sont donc des produits de trois fonctions d'onde du type (2.17) :

$$f_{n_1 n_2 n_3}(x_1, x_2, x_3) = f_{n_1}^1(x_1) f_{n_2}^2(x_2) f_{n_3}^3(x_3) \quad (2.24)$$

avec

$$f_{2n+1}^i(x_i) = \cos\left((2n+1) \frac{\pi x_i}{L_i}\right) \text{ et } f_{2n+2}^i(x_i) = \sin\left((2n+2) \frac{\pi x_i}{L_i}\right), \quad (2.25)$$

tandis que l'énergie de la particule est la somme des énergies correspondant aux trois degrés de liberté de translation :

$$E_{w n_1 n_2 n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2} \right) \quad (2.26)$$

En revanche, si la barrière de potentiel est finie et de hauteur V_0 , le potentiel de confinement ne peut plus s'écrire sous la forme d'une somme de trois potentiels à une dimension. La fonction d'onde tridimensionnelle ne peut plus s'écrire sous la forme d'un produit de trois fonctions d'une seule variable. Nous reviendrons sur ce problème dans le chapitre IV car il se pose en des termes voisins dans le cas du confinement dans une boîte cylindrique.

2.2.5. Confinement dans les trois directions : exemple de la microcristallite sphérique

Imaginons un semi-conducteur A localisé dans un domaine sphérique de rayon R , enchâssé dans un semi-conducteur B . Reprenons à nouveau les hypothèses et la démarche effectuées dans le cas du puits quantique. L'équation de Schrödinger effective s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + V(r) \right] F = E_w F \quad (2.27)$$

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{pour } r < R \\ \infty & \text{pour } r > R \end{cases} \quad (2.28)$$

La résolution est techniquement moins immédiate, en raison de l'expression de l'opérateur laplacien en coordonnées sphériques. On obtient (Flügge 1974, p 156) :

$$F_{nlm}(r, \theta, \phi) = j_l(\alpha_{nl} r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2.29)$$

où les fonctions j_l sont les fonctions de Bessel sphériques, Y_{lm} les harmoniques sphériques et où les constantes α_{nl} sont déterminées par la condition de nullité de la fonction d'onde sur la sphère de confinement. L'énergie dans l'état propre $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ est :

$$E_{nlm} = \frac{\hbar^2}{2m^* R^2} \alpha_{nl}^2 \quad (2.30)$$

Dans le cas d'un potentiel de confinement fini :

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{pour } r < R \\ V_0 & \text{pour } r > R \end{cases} \quad (2.31)$$

les fonctions d'onde sont, pour les états liés ($E < V_0$), de la forme (cf Flügge 1974 , p 160) :

$$F_{nlm}(r, \theta, \phi) = \begin{cases} j_l(\alpha_{nl} r) Y_{lm}(\theta, \phi) & \text{pour } r < R \\ B h_l^{(1)}(i\beta_{nl} r) Y_{lm}(\theta, \phi) & \text{pour } r > R \end{cases} \quad (2.32)$$

avec

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m^* E_w}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad \beta = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} (V_0 - E_w)} \quad (2.33)$$

où $h_l^{(1)}$ est une fonction de Hankel sphérique ou fonction de Bessel sphérique de troisième espèce (Abramowitz 1970, p 437). La constante B est déterminée par la continuité de F à la surface de la sphère. La constante α est déterminée par l'équation transcendante ci-dessous traduisant la continuité de la dérivée première de F à la surface de la sphère.

$$i\beta R \frac{h_l^{(1)'}(i\beta R)}{h_l^{(1)}(i\beta R)} = \alpha R \frac{j_l'(\alpha R)}{j_l(\alpha R)} \quad (2.34)$$

qui conduit à un ensemble discret de solutions α_{nl} et par conséquent à des niveaux d'énergie quantifiés :

$$E_{nlm} = \frac{\hbar^2}{2m^* R^2} \alpha_{nl}^2 \quad (2.35)$$

L'expression des niveaux est la même que dans le cas du puits infini, mais la suite des α_n n'est plus la même.

La comparaison des différents domaines de confinement rencontrés précédemment est riche d'enseignements car un certain nombre de traits généraux peuvent être dégagés :

- le potentiel de confinement brise l'invariance par translation de l'Hamiltonien ;
- les niveaux d'énergie sont quantifiés pour les états liés ;
- dans le modèle du puits fini, les particules ont une probabilité de présence non nulle hors du domaine de confinement.

2.3. ETATS EXCITONIQUES DANS L'APPROXIMATION DE LA FONCTION ENVELOPPE

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

La présence du potentiel de confinement brise l'invariance par translation de l'Hamiltonien effectif. Au lieu de séparer le mouvement relatif et le mouvement du centre de masse de l'exciton, on privilégie un paramétrage séparé pour le mouvement de l'électron et celui du trou. La fonction enveloppe excitonique F_X est alors, dans le cadre d'un modèle à 2 bandes simples isotropes, solution d'une équation du type :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + V_{we}(\mathbf{r}_e) + V_{wh}(\mathbf{r}_h) \right] F(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E_X F(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) . \quad (2.36)$$

Il s'agit de l'équation (1.82) dans laquelle ont été rajoutés les potentiels de puits V_{we} et V_{wh} . Dans le paragraphe 2.3.4., nous reviendrons sur la possibilité de traiter l'exciton comme une particule unique soumise globalement à des conditions de confinement. Un tel point de vue revient en fait à admettre une invariance par translation approchée ; on peut donc prévoir qu'il sera d'autant mieux justifié que les dimensions du domaine de confinement sont plus grandes.

2.3.2. Puits quantique

L'exciton dans un puits quantique de GaAs-Ga_xAl_{1-x}As a été l'objet de nombreuses études tant expérimentales que théoriques. En effet, les excitons jouent un rôle essentiel dans la forme des spectres d'absorption et de luminescence des

hétérostructures à puits quantiques (Vojak et al. 1980 ; Weisbuch et al. 1981).

Parmi les premières études expérimentales, on peut citer l'étude du spectre d'absorption optique (Dingle 1974 et 1975), l'observation d'oscillations laser par pompage optique à basse température (van der Ziel et al. 1975) puis à température ambiante (Dupuis et Dapkus 1978 ; Holonyak et al. 1978).

Parmi les premières études théoriques, citons les premiers calculs variationnels de l'énergie de liaison dans le modèle du puits infini (Miller et al. 1981 ; Bastard et al. 1982) puis dans un modèle de puits fini (Greene et Bajaj 1983 ; Greene, Bajaj et Phelps 1984 ; Matsuura et Shinozuka 1984). La fonction d'essai est prise de la forme :

$$F_X(z_e, z_h, \rho) = F_e(z_e) F_h(z_h) F_{eh}(\rho, |z_e - z_h|) \quad (2.37)$$

avec

$$\rho = \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2} \quad (2.38)$$

Dans le modèle du puits infini, le calcul variationnel conduit, lorsque l'épaisseur H du puits varie de zéro à l'infini, à une énergie de liaison variant de façon monotone de la valeur strictement bidimensionnelle à la valeur 3D. En revanche, pour un puits fini, l'énergie de liaison présente un extremum pour une épaisseur de puits de l'ordre du rayon de Bohr excitonique.

Utilisant une méthode de variation-perturbation suggérée par Lee (Lee et al. 1982), Tsin-Fu Jiang (Jiang 1984) étend les résultats de Greene et al. en tenant compte de la différence des masses effectives dans le puits et dans la barrière. Dans ces premières études, la structure de bande est décrite de façon succincte (modèle à deux bandes). Les travaux plus récents prennent mieux en compte la structure de bandes des matériaux (Sanders et Chang 1985, 1987 ; Zhu et Huang 1987 ; Zhu 1988 ; Andreani et Pasquarello 1988, 1989).

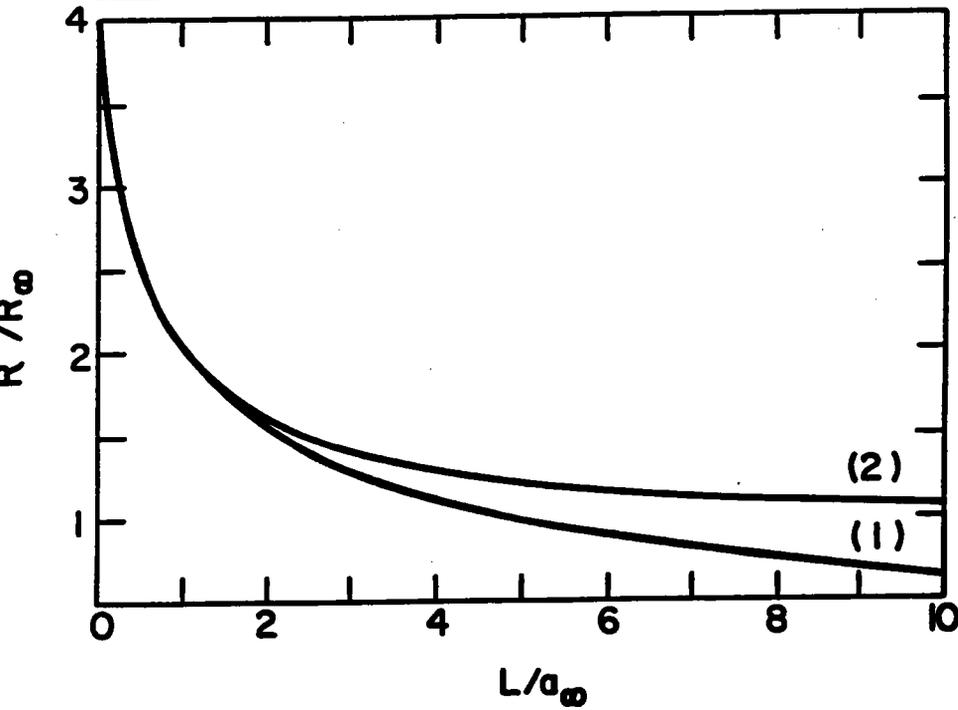


FIG. 22.

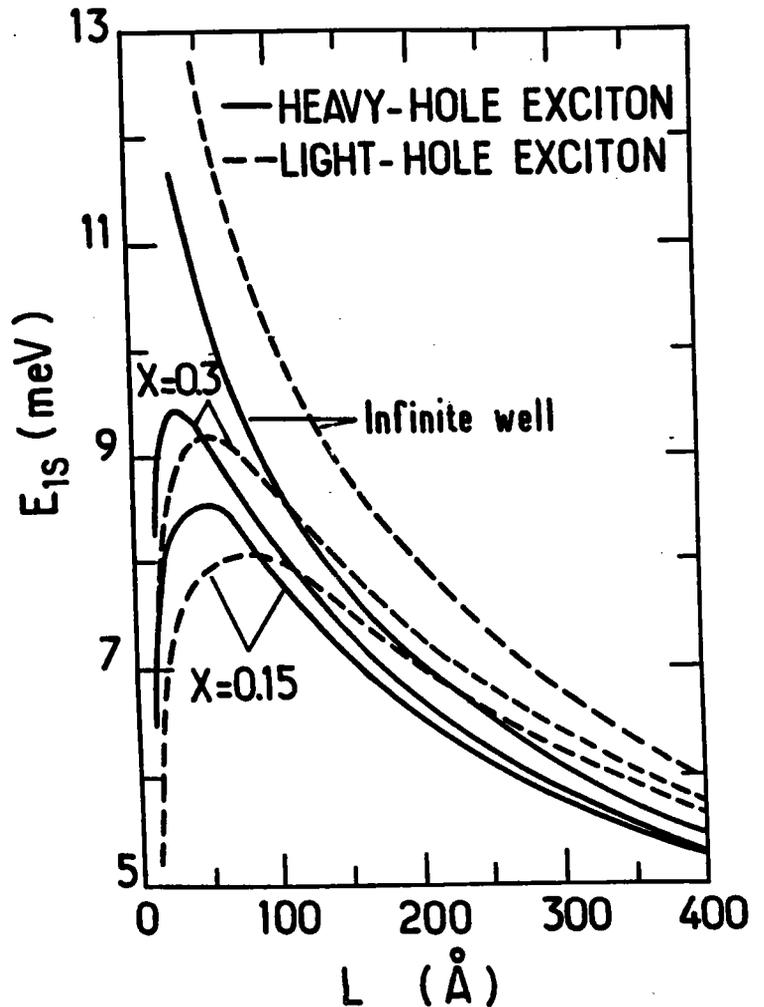
(d'après Bastard et al 1982)

Energie de liaison d'un exciton dans un puits quantique dans le modèle du puits de potentiel infini obtenue à l'aide d'une fonction d'onde séparable (1) ou non séparable (2).

FIG. 23.

(D'après Greene et al 1984)

Energie de liaison d'un exciton dans un puits quantique de largeur L dans le modèle du puits de potentiel infini et dans le cas du potentiel fini correspondant à un puits d'arséniure de Gallium pour des concentrations en aluminium $x = 0.15$ et $x = 0.30$.



2.3.3. Points quantiques

Pour un confinement total, nous présentons ici quelques résultats dans deux géométries : la géométrie parallélépipédique qui est, par sa technologie de fabrication et par les problèmes théoriques posés, la plus proche de la géométrie cylindrique qui fera l'objet des chapitres suivants, et la géométrie sphérique, qui, grâce à ses plus grandes propriétés de symétrie, a permis une étude plus achevée, en particulier en puits fini.

Boîtes parallélépipédiques

Les principaux travaux consacrés à l'étude des excitons dans les boîtes parallélépipédiques sont dûs à Bryant (Bryant 1987, 1988). Dans l'hypothèse d'un potentiel de confinement infini, il a utilisé une méthode variationnelle pour déterminer l'état fondamental des excitons confinés en utilisant une fonction d'onde de la forme :

$$F_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = F_e(\mathbf{r}_e) F_h(\mathbf{r}_h) F_{eh}((x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2) \quad (2.39)$$

où F_e et F_h sont les fonctions d'onde correspondant respectivement à l'état fondamental de l'électron et du trou seuls dans le domaine de confinement, et F_{eh} une somme de 5 à 10 fonctions gaussiennes :

$$F_{eh}(\rho) = \sum_n c_n \exp[-\alpha_n \rho^2] \quad (2.40)$$

où c_n et α_n sont des coefficients variationnels. Le point faible du choix de cette fonction d'onde est de ne pas tenir compte de l'écart $z_e - z_h$ entre les composantes sur z de l'électron et du trou. Ceci limite la validité de son étude à des boîtes dont les dimensions sur L_x et L_y sont grandes devant L_z .

Microcristallites

Les premiers travaux sur les excitons dans les microsphères utilisent une modélisation du potentiel de confinement par un puits carré infini. Ils font apparaître plusieurs régimes de confinement. Le régime de confinement fort, caractérisé par un rayon de la microsphère petit devant le rayon de Bohr de l'exciton, pour lequel l'attraction coulombienne est secondaire et peut être traitée en perturbation et le régime de confinement faible pour lequel l'exciton se comporte comme une particule unique de masse $M = m_e^* + m_h^*$ (Efros et Efros 1982). La limite du confinement fort a été en particulier étudiée par Brus (Brus 1984 ; 1986) qui a obtenu une expression de l'énergie de l'état fondamental dans cette limite. Nous reviendrons dans le prochain paragraphe sur la limite du confinement faible pour en donner quelques propriétés indépendantes de la forme du domaine de confinement. Kayanuma a proposé un calcul variationnel avec une fonction à un paramètre (Kayanuma 1986) :

$$F_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = F_e(\mathbf{r}_e) F_h(\mathbf{r}_h) F_{eh}(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|) \quad (2.41)$$

où F_e et F_h sont les fonctions d'onde correspondant respectivement à l'état fondamental de l'électron et du trou seuls dans le domaine de confinement :

$$F_e(\mathbf{r}) = F_h(\mathbf{r}) = j_0(\alpha_{10}r) , \quad (2.42)$$

et F_{eh} est la fonction d'onde correspondant à la limite du semi-conducteur massif :

$$F_{eh}(r) = \exp(-\alpha r) \quad (2.43)$$

où α est pris comme paramètre variationnel.

Pour des cristallites de dimensions petites devant le rayon de Bohr de l'exciton, l'effet tunnel devient important et l'extension spatiale de l'électron et du trou vont au-delà du domaine de confinement. Il convient alors de modéliser le potentiel de confinement par un puits fini (Kayanuma et Momiji 1990).

2.3.4. Limite du confinement faible

Lorsque les dimensions du domaine de confinement sont grandes devant les dimensions propres de l'exciton, il est raisonnable d'admettre que l'exciton est une particule confinée, avec des degrés de liberté internes. On procède donc à une séparation du mouvement relatif et du mouvement du centre de masse.

Cette séparation n'est rigoureuse que si la quantité de mouvement totale commute avec l'Hamiltonien du système électron-trou, c'est-à-dire s'il y a invariance par translation. Il est manifeste que l'invariance par translation est violée par la présence du potentiel de confinement, mais qu'elle subsiste de façon approchée pour des translations de l'ordre de a_X^{3D} si les dimensions du domaine de confinement sont grandes devant a_X^{3D} . Le mouvement du centre de masse excitonique est alors régi par les lois du mouvement à une particule, tandis que le mouvement relatif est celui d'un exciton 3D.

Cette approximation a été utilisée par divers auteurs sans justification supplémentaire ; un fondement théorique plus solide est proposé dans le cas d'un domaine de confinement sphérique par Stoltz (*Asymptotik des Grundzustands von quantenmechanischen N-Teilchen-Systemen in Kugeln* 1989). Il y est montré que l'énergie $E_N(R)$ de l'état fondamental d'un système de N particules en interaction deux à deux, confiné à l'intérieur d'une sphère de rayon R , est la somme de trois termes :

- l'énergie $E_N(\infty)$ de l'état fondamental du même système en l'absence de la contrainte de confinement ;
- l'énergie du centre de masse du système (particule ponctuelle affectée de la masse totale M du système, et soumise au potentiel de confinement) ;
- un terme correctif s'annulant quand $R \rightarrow \infty$ comme $\frac{\ln(R)}{R^3}$.

En appliquant ce formalisme au système excitonique confiné dans une sphère, on a :

$$E_X (R) = E^{3D} + \frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\pi}{R} \right)^2 + O \left(\frac{\ln(R)}{R^3} \right) \quad (2.44)$$

où $M = m_e^* + m_h^*$ est la masse totale de la paire électron-trou.

La présence du terme correctif met bien en évidence le caractère approximatif de la séparation des mouvements du centre de masse et du mouvement relatif. On peut, sans gros investissement théorique, mieux comprendre la nature de cette approximation, et même y apporter une certaine amélioration. Ce que l'on fait dans cette approximation, c'est appliquer les mêmes conditions aux limites aux fonctions d'onde de l'électron et du trou, que l'on annule sur la frontière du domaine de confinement. Or l'électron et le trou ne sont pas localisés en un même point ; ils sont plutôt séparés par une distance de l'ordre de a^{3D} . Si l'on se représente l'exciton comme une sphère dure de rayon $\frac{3}{2} a^{3D}$ (Nair et al. 1987), le domaine accessible au centre de masse de l'exciton est réduit à une sphère de rayon $R - \frac{3}{2} a^{3D}$: on doit donc retrancher au volume de la sphère une zone interdite, comprise entre les sphères de rayons $R - \frac{3}{2} a^{3D}$ et R . On peut ainsi espérer de meilleurs résultats en prenant comme condition aux limites l'annulation de la fonction d'onde sur la sphère de rayon $R - \frac{3}{2} a^{3D}$. D'autre part, on peut estimer que le mouvement relatif des deux particules n'est perturbé notablement que lorsque le centre de masse est proche de la frontière, c'est-à-dire dans un domaine dont le volume est de l'ordre de $6\pi R^2 a^{3D}$; ce volume étant petit devant celui $\left(\frac{4\pi R^3}{3} \right)$ du domaine de confinement, et la fonction d'onde s'annulant sur les parois, la présence de l'exciton a une probabilité très faible dans ce domaine critique, ce qui justifie d'envisager un mouvement relatif non perturbé.

La fonction d'essai (2.41) conduit à une énergie de liaison ne dépendant que de la masse réduite de l'exciton et pas de la masse totale. Bien qu'elle conduise à la limite correcte lorsque R tend vers l'infini, elle ne peut donc donner une expression asymptotique de la forme prévue par Efros et Efros, puisque cette expression fait intervenir la masse totale de l'exciton. C'est la symétrie de la fonction d'onde par échange de l'électron du trou qui a pour conséquence le fait que l'énergie de liaison

ne dépend pas de la masse totale de l'exciton. Le calcul variationnel de Nair (Nair et al. 1987) utilise précisément une fonction d'onde pour laquelle la symétrie de la fonction d'onde a été brisée artificiellement :

$$F_X(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = F_0(\mathbf{r}_e)^{\alpha_1} F_0(\mathbf{r}_h)^{\alpha_2} F_{eh}(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|) \quad (2.45)$$

où α_1 et α_2 sont deux paramètres variationnels supplémentaires. Dans le cas d'un confinement faible, on s'attend à ce que $|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h| \ll R$, et que le mouvement du centre de masse soit quantifié ; le facteur de confinement serait alors

$$F_0(\mathbf{r}_e)^{\alpha_1} F_0(\mathbf{r}_h)^{\alpha_2} \simeq F_0(\mathbf{R}), \quad (2.46)$$

où \mathbf{R} est le vecteur position du centre de masse du système, ce qui correspondrait à $\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{1}{2}$. Malgré cette modification, l'expression asymptotique attendue n'est toujours pas obtenue pour les grandes valeurs de R . Les auteurs expliquent ceci par le fait que les paramètres variationnels α_1 et α_2 n'ont toujours pas atteint leur limite commune $\frac{1}{2}$ pour les plus grandes valeurs de R envisagées dans leur calcul. Il faut attendre le calcul variationnel de Kayanuma (Kayanuma 1988) prenant une expression polynomiale pour le produit $F_e F_h$ et $F_{eh} = r^L \exp(-\alpha r)$, pour obtenir un comportement asymptotique en accord avec les prévisions, c'est-à-dire des résultats numériques bien représentés par l'expression :

$$E = E^{3D} + \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2M} \right) \frac{1}{(R - \eta(\sigma) a_X^{3D})^2} \quad (2.47)$$

où $\eta(\sigma)$ est un paramètre de l'ordre de l'unité dépendant du rapport $\sigma = m_e^*/m_h^*$ des masses effectives de l'électron et du trou. Cette expression est physiquement intéressante car elle est en accord à la fois avec les idées de quantification du mouvement du centre de masse et de zone interdite à la frontière du domaine. Toutefois, ce résultat n'est pas étayé par une démonstration analytique et reste à l'état de conjecture.

Toutes ces considérations sont en fait indépendantes de la forme du domaine de confinement. D'Andrea et Del Sole (D'Andrea et Del Sole 1990) ont ainsi obtenu une énergie de la forme :

$$E = E^{3D} + n^2 \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{2M} \right) \frac{1}{(L - 2/P)^2} \quad (2.48)$$

pour un exciton dans une boîte cubique de côté L , où $\frac{1}{P}$ est un paramètre variationnel donnant une idée de l'encombrement propre de l'exciton.

2.3.5. Un cas de séparation rigoureuse des mouvements du centre de masse et du mouvement relatif de l'exciton dans un point quantique

Dans le paragraphe précédent, nous avons vu que la séparation des mouvements relatif et du centre de masse de l'exciton est une approximation d'autant plus justifiée que le domaine de confinement est grand devant le rayon excitonique. Il est toutefois un cas où cette séparation est valable indépendamment de toute approximation (Que 1992). Il se trouve en effet que, si l'on modélise le potentiel de confinement non pas par un puits carré comme on le fait habituellement, mais par un puits parabolique, l'Hamiltonien effectif est de la forme suivante :

$$H = \frac{P_e^2}{2m_e} + \frac{1}{2} m_e^* \omega_e^2 r_e^2 + \frac{P_h^2}{2m_h} + \frac{1}{2} m_h^* \omega_h^2 r_h^2 + V_{\text{coul}} (| r_e - r_h |) \quad (2.49)$$

où P_e et P_h sont les opérateurs quantité de mouvement respectifs de l'électron et du trou, $\frac{1}{2} m_e^* \omega_e^2 r_e^2$ et $\frac{1}{2} m_h^* \omega_h^2 r_h^2$ les potentiels de confinement paraboliques respectifs et $V_{\text{coul}} (| r_e - r_h |)$ le potentiel d'interaction coulombienne. Il s'agit de la somme de deux Hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques et d'un terme de couplage coulombien. Dans le cas très particulier où les pulsations ω_e et ω_h des deux oscillateurs sont identiques, l'Hamiltonien peut être réécrit sous la forme :

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 \mathbf{R}^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 \mathbf{r}^2 + V_{\text{coul}}(\mathbf{r}) \quad (2.50)$$

où M et μ sont respectivement la masse totale de l'exciton et la masse réduite du système électron-trou, \mathbf{P} est la quantité de mouvement totale, \mathbf{p} est la quantité de mouvement dans le référentiel barycentrique, $\mathbf{R} = \frac{m_e^* \mathbf{r}_e + m_h^* \mathbf{r}_h}{M}$ et $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h$. On obtient donc la somme d'un Hamiltonien dépendant des coordonnées du centre de masse et d'un Hamiltonien relatif. La fonction d'onde peut donc se mettre sous la forme du produit d'une fonction d'onde $\Phi(\mathbf{R})$ par une fonction d'onde $\Psi(\mathbf{r})$. La première correspond à un potentiel harmonique et peut donc se déterminer analytiquement, tandis que la seconde correspond à un potentiel effectif

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 \mathbf{r}^2 + V_{\text{coul}}(\mathbf{r}) . \quad (2.51)$$

Le potentiel coulombien ne dépendant que de $|\mathbf{r}|$, la résolution par rapport aux variables angulaires est triviale et seule subsiste la résolution de la partie radiale de l'équation qui peut facilement être menée à bien par des méthodes numériques. On peut même pousser la résolution analytique à son terme en prenant un potentiel élastique pour l'interaction électron-trou ! Pour séduisantes que puissent paraître ces simplifications successives, il ne faut pas perdre de vue le caractère arbitraire de l'hypothèse consistant à prendre deux pulsations propres égales pour l'électron et le trou.

2.4. CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons passé en revue différentes géométries de confinement. Nous retiendrons que la méthode de la fonction enveloppe s'avère une méthode efficace d'investigation, dans l'étude des états à un électron, comme dans l'étude des états excitoniques. Les excitons jouent un rôle important dans la forme des spectres d'absorption et de luminescence des hétérostructures. Ceci résulte du fait que le confinement augmente l'énergie de liaison des excitons. Lorsque les dimensions du domaine de confinement deviennent très faibles, les modèles utilisant un potentiel de confinement infini prédisent une énergie de liaison non bornée, et il faut recourir à un modèle utilisant un potentiel de confinement fini pour obtenir des résultats plus satisfaisants. Il apparaît alors que, du fait de l'effet tunnel, l'énergie de liaison est bornée et présente un minimum pour des dimensions optimales du domaine de confinement. Nous nous proposons dans la suite de tenter d'évaluer les dimensions optimales d'un cylindre de GaAs noyé dans un substrat de $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. Nous procéderons en deux étapes : tout d'abord, nous nous contenterons d'un modèle utilisant un potentiel de confinement infini. Ceci nous permettra de tester la validité du choix de notre fonction d'onde d'essai en confrontant les résultats obtenus aux cas limites analytiquement solubles. Enfin, dans le dernier chapitre, nous adapterons notre étude au cas d'un potentiel de confinement fini.

**EXCITON DANS UNE BOITE QUANTIQUE CYLINDRIQUE
CAS DU CONFINEMENT FAIBLE**

3.1. INTRODUCTION

**3.2. CALCUL VARIATIONNEL DE L'ENERGIE
DE LIAISON DE L'EXCITON¹**

3.2.1. Hamiltonien

3.2.2. Cas limites

3.2.3. Choix de la fonction d'essai

3.2.4. Calcul variationnel de l'énergie de liaison

3.3. CAS PARTICULIER DU DISQUE QUANTIQUE^{1,2}

3.3.1. Fonction d'onde et énergie variationnelle

3.3.2. Résultats du calcul variationnel

3.4. CAS GENERAL DU CYLINDRE QUANTIQUE¹

3.4.1. Approximation dans le calcul de l'énergie potentielle coulombienne

3.4.2. Résultats du calcul variationnel

3.5. CONCLUSION

¹ S. Le Goff et B. Stébé, Phys. Rev. B15, soumis à publication en mai 1992.

² S. Le Goff et B. Stébé, J. Phys. B., soumis à publication en mai 1992, accepté en octobre 1992.

3.1. INTRODUCTION

Ce chapitre présente notre calcul variationnel de l'énergie de l'état fondamental d'un exciton confiné dans une boîte quantique de semi-conducteur de forme cylindrique (figure 3.1 au verso) de hauteur H et de rayon R , dans l'hypothèse restrictive d'un potentiel de confinement infini. La technologie de fabrication des boîtes donne à penser que celles-ci sont plutôt de forme parallélépipédique, mais nous allons voir dans la suite que la recherche d'un effet de confinement important amène à tenter de fabriquer des boîtes de très petites dimensions. Ceci ne pose pas de problèmes majeurs en ce qui concerne les dimensions axiales (hauteur H), puisque les technologies actuelles permettent de réaliser des monocouches, mais la recherche de très petites dimensions latérales pousse les techniques de microgravure dans leurs derniers retranchements. Quand on diminue le pas de la gravure, on constate d'abord une érosion des angles des parallélépipèdes, pour aboutir finalement à des boîtes de forme cylindriques.

Les propriétés de l'exciton dans une telle microstructure sont à la fois d'un grand intérêt théorique (compétition entre un potentiel coulombien à 2 corps et un potentiel de confinement à un corps) et pratique, car la perspective ouverte par l'augmentation en valeur absolue de l'énergie de liaison des excitons est leur stabilisation à température ambiante.

De façon apparemment paradoxale, nous avons qualifié de confinement faible le confinement envisagé dans ce chapitre, alors que le potentiel de confinement est infini. Ceci a pour objectif de privilégier la physique du phénomène plutôt que l'aspect mathématique du modèle. En effet, nous verrons que ce modèle n'est valable que pour des dimensions de boîtes suffisamment grandes (confinement faible), tandis que pour des boîtes plus petites (confinement fort), nous serons conduits à prendre l'hypothèse physiquement plus satisfaisante d'un potentiel de confinement fini. Ceci fera l'objet du chapitre suivant. Nous verrons alors que la hauteur de la barrière de potentiel n'est pas le seul élément déterminant la validité du modèle en puits infini,

et que, même pour un potentiel de confinement très faible, les résultats du calcul présenté ici peuvent servir de cas limite pour des boîtes de dimensions suffisantes.

Dans le paragraphe 3.2., nous présentons les principales étapes de notre calcul variationnel de l'énergie de liaison de l'exciton dans le modèle du potentiel de confinement infini. Dans les deux paragraphes suivants, nous mènerons ce calcul à son terme, successivement dans le cas particulier du disque puis dans le cas général du cylindre.

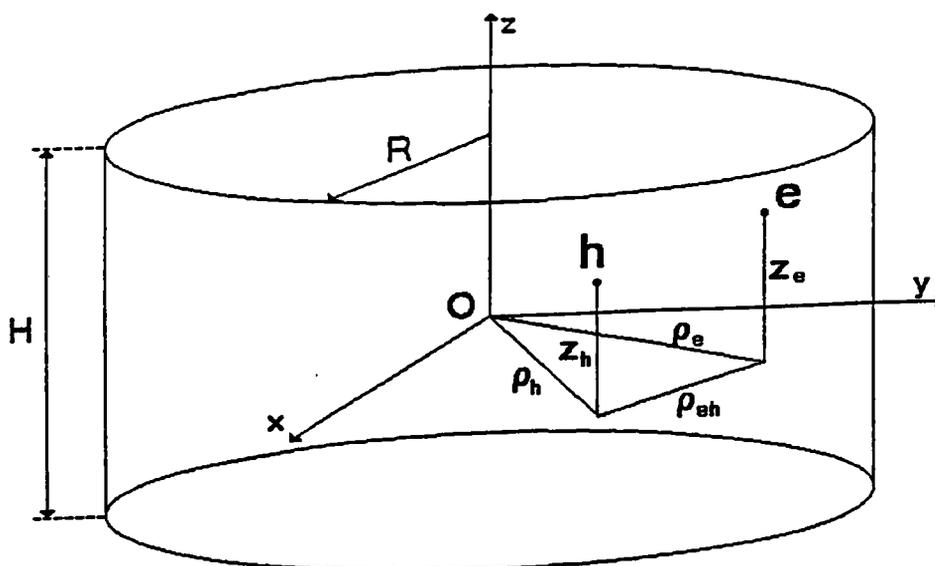


FIG. 3.1.

Paire électron-trou dans un cylindre quantique : définition des coordonnées.

3.2. CALCUL VARIATIONNEL DE L'ENERGIE DE LIAISON DE L'EXCITON

3.2.1. Hamiltonien

Considérons un exciton dans une boîte cylindrique d'un semi-conducteur noyé dans un autre semi-conducteur d'énergie de gap plus élevée. On désignera par R le rayon de la boîte et par H sa hauteur. Nous supposons que les décalages des bandes des deux matériaux sont suffisamment faibles pour que l'on puisse utiliser l'approximation de la fonction enveloppe dans un modèle à deux bandes. Nous négligerons le couplage électron-phonon, ainsi que l'interaction d'échange électron-trou. Dans le cas de bandes paraboliques non dégénérées, l'Hamiltonien effectif a pour expression :

$$H = - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + V_w^e(\mathbf{r}_e) + V_w^h(\mathbf{r}_h) \quad (3.1)$$

où m_e^* et m_h^* désignent respectivement les masses effectives de l'électron et du trou. κ est la constante diélectrique du matériau de la boîte. V_w^e et V_w^h sont respectivement le potentiel de confinement de l'électron et du trou :

$$V_w^i = \begin{cases} 0 & \text{à l'intérieur de la boîte} \\ \infty & \text{à l'extérieur de la boîte} \end{cases} \quad (i = e, h) \quad (3.2)$$

z_e et z_h sont les coordonnées de l'électron et du trou le long de l'axe z , choisi selon l'axe de symétrie du révolution du cylindre (FIG. 3.1.), tandis que ρ_e et ρ_h sont les distances respectives de l'électron et du trou à l'axe du cylindre.

3.2.2. Etats à une particule

Pour un électron dans la bande de conduction, l'Hamiltonien se réduit à :

$$H = - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 + V_w^e(\mathbf{r}_e) \quad (3.3)$$

Compte tenu de la géométrie du domaine de confinement, il est naturel de travailler en coordonnées cylindriques (ρ_e, ϕ_e, z_e) pour repérer la position de l'électron. Le potentiel de confinement peut se mettre sous la forme d'une somme de trois potentiels dépendant respectivement de ρ_e, ϕ_e, z_e :

$$V_w^e(\mathbf{r}_e) = V_\rho^e(\rho_e) + V_\phi^e(\phi_e) + V_z^e(z_e) \quad (3.4a)$$

$$\text{avec } V_\rho^e(\rho) = \begin{cases} 0 & \text{pour } \rho < R \\ \infty & \text{pour } \rho > R \end{cases} ; V_\phi^e(\phi) = 0 ; V_z^e(z) = \begin{cases} 0 & \text{pour } |z| < \frac{H}{2} \\ \infty & \text{pour } |z| > \frac{H}{2} \end{cases} \quad (3.4b)$$

L'opérateur Hamiltonien est la somme de trois opérateurs H_ρ, H_ϕ, H_z opérant respectivement sur les variables ρ_e, ϕ_e, z_e . On peut donc chercher les solutions de l'équation de Schrödinger sous la forme $\psi_e(\rho_e, \phi_e, z_e) = f_e(\rho_e) h_e(\phi_e) g_e(z_e)$. Les équations relatives aux trois fonctions f_e, h_e et g_e se séparent. L'équation relative à f_e se ramène à une équation de Bessel (Zepp 1975), tandis que l'équation relative à g_e est formellement identique à l'équation (2.14) rencontrée à l'occasion de l'étude du puits quantique simple. Dans le cas particulier de l'état fondamental, la fonction d'onde est indépendante de ϕ_e ; on obtient ainsi, compte tenu des conditions aux limites, qui exigent l'annulation de la fonction d'onde sur la frontière du cylindre :

$$f_e(\rho_e) = J_0(\theta_0 \rho_e/R) ; h_e(\phi_e) = 1 ; g_e(z_e) = \cos(\pi z_e/H) ; \quad (3.5)$$

J_0 est la fonction de Bessel d'ordre zéro ; $\theta_0 = 2.4048255577$ est le premier zéro de J_0

(Abramovitz-Stegun 1970). L'énergie de l'état fondamental a pour expression :

$$E_e = \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{\theta_0^2}{R^2} + \frac{\pi^2}{H^2} \right) \quad (3.6)$$

3.2.3. Etats excitoniques : cas limites connus

L'énergie E et la fonction d'onde enveloppe Ψ_X sont obtenues par résolution de l'équation de Schrödinger effective :

$$H \Psi_X = (\epsilon - \epsilon_g) \Psi_X = E \Psi_X \quad (3.7)$$

où ϵ_g correspond au gap entre les bandes de conduction et de valence pour le matériau de la boîte. La solution analytique de (3.7) n'est pas connue. On devra donc se contenter d'une méthode approchée. Il a été choisi de déterminer l'état fondamental par la méthode variationnelle de Ritz (Messiah 1969, page 652).

Avant de choisir une fonction d'onde d'essai, examinons quelques cas limites. La limite du semi-conducteur massif (limite 3D) est obtenue pour des dimensions R et H simultanément très grandes de la boîte. L'énergie E_X^{3D} et la fonction d'onde Ψ_X^{3D} de l'état fondamental sont alors bien connues :

$$E_X^{3D} = - \frac{\mu e^4}{2\kappa^2 \hbar^2}, \quad \Psi_X^{3D} = \exp(-r/a_X^{3D}) \quad (3.8)$$

où $1/\mu = 1/m_e^* + 1/m_h^*$ est la masse réduite et r désigne la distance électron-trou, tandis que $a_X^{3D} = \kappa \hbar^2 / \mu e^2$ représente le rayon de Bohr de l'exciton 3D.

Une autre situation analytiquement soluble est obtenue si $R \rightarrow \infty$ et $H \rightarrow 0$. C'est ce que nous appellerons l'exciton 2D, dont l'étude est formellement identique à celle de l'atome d'hydrogène 2D (Zaslow, Zandler 1967).

Dans l'état fondamental, l'énergie correspondante est 4 fois celle de l'exciton 3D, soit $E_X^{2D} = 4 E_X^{3D}$ tandis que la fonction d'onde est $\Psi^{2D} = \exp(-r/a_X^{2D})$, avec

$a_X^{2D} = a_X^{3D} / 2$. L'interaction coulombienne est donc plus importante dans l'exciton de surface que dans l'exciton tridimensionnel, ce qui se traduit par un exciton plus compact et plus fortement lié. Notons qu'une étude approfondie des électrons de surface pose un certain nombre de problèmes, en particulier l'expression du potentiel d'interaction coulombienne lorsque la surface sépare deux milieux de constantes diélectriques différentes (Ginzburg, Kelle 1973).

Si $R \rightarrow \infty$ pour une valeur finie de H , la boîte tend vers un puits quantique 1D, situation qui n'admet pas de solution analytique, mais qui a déjà été très largement étudiée (Bastard 1982,1990 ; Greene et Bajaj 1983,1984), en particulier par des approches variationnelles.

Si $H \rightarrow \infty$ pour une valeur finie de R , la boîte tend vers un fil quantique, dont l'étude a été effectuée par une approche variationnelle (Brown et Spector 1987).

Nous nous intéresserons également à un autre cas limite, le cas du disque quantique ($H = 0$ et R fini), que nous aborderons par la méthode variationnelle.

Lorsque les boîtes deviennent très petites, l'effet du confinement quantique devient largement prépondérant devant l'interaction coulombienne électron-trou. On peut alors, dans une première approche, assimiler l'énergie de l'exciton à la somme des énergies de l'électron et du trou non corrélés (Haug, Koch 1990). La fonction d'onde correspondante dans l'état fondamental s'écrit alors :

$$\Psi^0 = f_e(\rho_e) g_e(z_e) f_h(\rho_h) g_h(z_h) \quad (3.9)$$

avec $f_i(\rho) = J_0(\theta_0 \rho/R)$; $g_i(z) = \cos(\pi z/H)$ ($i = e, h$) (3.10)

L'énergie de cet état fondamental est la somme des énergies de l'électron et du trou confinés :

$$E_e + E_h = \left(\frac{\hbar^2}{2m_e^*} + \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \right) \left(\frac{\theta_0^2}{R^2} + \frac{\pi^2}{H^2} \right) \quad (3.11)$$

On peut constater que les fonctions d'onde de l'électron et du trou sont identiques. Leur masse effective n'y apparaît pas. Il en résulte que la somme (3.11) des énergies des particules indépendantes (énergie de paire) dépend de la masse réduite μ , mais pas

de la masse totale M .

Dans la suite, nous utiliserons les unités atomiques a_x^{3D} pour la longueur et $|E_x^{3D}|$ pour l'énergie. Dans ces unités, l'énergie de paire devient indépendante des masses effectives :

$$E_e + E_h = \left(\frac{\theta_0}{R}\right)^2 + \left(\frac{\pi}{H}\right)^2 \quad (3.12)$$

On peut voir dans (3.12) que le confinement quantique introduit une forte singularité pour les petites dimensions des boîtes. En particulier, l'énergie de paire tend vers l'infini lorsque $H \rightarrow 0$. Pour éviter que cette singularité ne masque l'influence du confinement sur la corrélation électron-trou, on retranchera l'énergie de paire à l'énergie du système électron-trou, la différence étant ce que nous appellerons dans la suite énergie de corrélation de l'exciton :

$$W = E_X - (E_e + E_h). \quad (3.13)$$

Cette énergie de corrélation présente aussi l'avantage de permettre une comparaison des cas bidimensionnels et tridimensionnels. En effet, si on ne retranche pas l'énergie de paire, le passage à la limite $H \rightarrow 0$ dans les expressions de l'énergie 3D conduit à un terme prépondérant en $(\pi/H)^2$, donc non borné.

3.2.4. Choix de la fonction d'essai

De façon générale, on peut exprimer la fonction enveloppe excitonique en utilisant les six coordonnées indépendantes (ρ_i, ϕ_i, z_i) , où ϕ_i est la coordonnée angulaire de la particule i ($i = e, h$). Mais, dans l'état fondamental, le système est invariant par rotation quelconque autour de l'axe z de sorte que la dépendance angulaire peut se

réduire à un seul paramètre : la différence $\chi = \phi_e - \phi_h$ comprise entre $-\pi$ et π (Annexe A). Cette dépendance angulaire peut aussi être décrite par la distance ρ_{eh} des projections des positions de l'électron et du trou dans un plan perpendiculaire à l'axe z . Toutefois, la correspondance n'est pas bijective car deux valeurs opposées de Φ donnent une même valeur de ρ_{eh} . Il convient donc de prendre des précautions lors du changement de variables pour établir l'expression de la fonction de poids qui intervient dans le calcul des intégrales. L'annexe A montre que le paramétrage par ρ_{eh} convient néanmoins, en raison de la parité par rapport à χ des fonctions à intégrer ; nous choisirons donc une fonction d'onde de la forme suivante :

$$\Psi_X = F_e(\rho_e, z_e) F_h(\rho_h, z_h) F_{eh}(\rho_{eh}, |z_e - z_h|) \quad (3.14)$$

où le produit $F_e F_h$ décrit le confinement de l'électron et du trou non corrélés. $F_e F_h$ se réduit donc à l'expression (3.9) dans le cas présent du puits infini. Dans le chapitre 4, nous envisagerons le cas d'un puits de potentiel fini pour lequel F_e et F_h ne sont plus les solutions exactes du problème à une particule. F_{eh} décrit le mouvement interne de l'exciton. Pour R et H simultanément grands, il se réduit à la limite 3D (3.8). Dans les autres cas, on peut en rendre compte par une fonction variationnelle écrantée. La fonction suivante a été utilisée récemment (Kayanuma 1991) :

$$F_{eh}(\rho_{eh}, |z_e - z_h|) = \exp \left[-\alpha \sqrt{\rho_{eh}^2 + (z_e - z_h)^2} \right] \quad (3.15)$$

Elle ne dépend que de la distance électron-trou et ne prend pas en compte l'anisotropie du domaine de confinement, qui peut devenir importante pour certaines valeurs de R et H , mais on peut en attendre des résultats satisfaisants dans la limite du confinement faible ($R \rightarrow \infty, H \rightarrow \infty$). Cependant, cette fonction n'étant pas séparable en ρ_{eh} et z_e, z_h , elle conduit à des calculs lourds, en particulier à une évaluation numérique d'intégrales quadruples. C'est pourquoi nous avons choisi une fonction d'onde séparable plus simple :

$$F_{eh}(\rho_{eh}, |z_e - z_h|) = \exp(-\alpha \rho_{eh}) \exp(-\gamma(z_e - z_h)^2) \quad (3.16)$$

Deux paramètres variationnels α et γ sont introduits afin de tenir compte d'une éventuelle anisotropie de la boîte. Dans cette forme, la fonction d'onde conduit à des calculs numériques plus simples et l'on peut se limiter à l'évaluation numérique d'intégrales triples. Dans l'annexe E nous reportons également les résultats d'un premier essai avec un facteur de corrélation purement gaussien qui permettait une intégration analytique supplémentaire mais qui apportait des problèmes d'instabilité numérique dès que R dépassait quelques unités.

3.2.5. Calcul variationnel de l'énergie de liaison

La fonction d'onde et l'énergie dans l'état fondamental sont déterminées par la minimisation de l'énergie moyenne :

$$\langle E(\alpha, \gamma) \rangle = \frac{\langle \Psi_X | H | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} \quad (3.17)$$

par rapport aux paramètres α et γ . En tenant compte du fait que la fonction d'onde dans l'état fondamental est indépendante de l'angle ϕ , l'hamiltonien effectif, dans les unités atomiques (a_X^{3D} pour la longueur et $|E_X^{3D}|$ pour l'énergie) que nous avons choisies, peut s'écrire sous la forme suivante (cf Annexe B pour le détail des calculs) :

$$\begin{aligned} H = & - \frac{1}{1+\sigma} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho_e^2} + \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial}{\partial \rho_e} + \frac{\rho_{eh}^2 + \rho_e^2 - \rho_h^2}{\rho_e \rho_{eh}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_e \partial \rho_{eh}} + \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \right] \\ & - \frac{\sigma}{1+\sigma} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho_h^2} + \frac{1}{\rho_h} \frac{\partial}{\partial \rho_h} + \frac{\rho_{eh}^2 + \rho_h^2 - \rho_e^2}{\rho_h \rho_{eh}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_h \partial \rho_{eh}} + \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} \right] \\ & - \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho_{eh}^2} + \frac{1}{\rho_{eh}} \frac{\partial}{\partial \rho_{eh}} \right] - \frac{2}{\sqrt{\rho_{eh}^2 + (z_e - z_h)^2}} \\ & + V_w^e(\rho_e, z_e) + V_w^h(\rho_h, z_h) \end{aligned} \quad (3.18)$$

où nous avons noté $\sigma = m_e^*/m_h^*$ le rapport des masses effectives de l'électron et du trou. L'énergie moyenne (3.17) est alors donnée par (Annexe B) :

$$\begin{aligned} \langle E(\alpha, \gamma) \rangle = & \left(\frac{\theta_0}{R} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{H} \right)^2 - \alpha^2 + \alpha \frac{P_3(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} - \frac{\alpha}{1+\sigma} \frac{P_4(\alpha, R) + \sigma P_5(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} \\ & + 2\gamma - 4\gamma^2 \frac{Z_2(\gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} + \frac{4\gamma}{1+\sigma} \frac{Z_3(\gamma, H) + \sigma Z_4(\gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} + \langle V_{\text{coul}} \rangle \end{aligned} \quad (3.19)$$

Dans les deux premiers termes, on reconnaît l'énergie de paire, qui est bien sûr indépendante de α et de γ , ce qui montre qu'il est équivalent de procéder à la minimisation de l'énergie moyenne ou à la minimisation de l'énergie de corrélation.

Les intégrales P_i et Z_i sont définies par :

$$P_i = 8\pi \int_0^R d\rho_e \int_0^R d\rho_h \int_{|\rho_e - \rho_h|}^{\rho_e + \rho_h} \frac{F_i(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) \rho_e \rho_h \rho_{eh} d\rho_{eh}}{\sqrt{[(\rho_e + \rho_h)^2 - \rho_{eh}^2] [\rho_{eh}^2 - (\rho_e - \rho_h)^2]}} \quad (3.20)$$

où :

$$\begin{aligned} F_1(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) &= [f_e(\rho_e) f_h(\rho_h) \exp(-\alpha\rho_{eh})]^2 \\ F_3(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) &= \frac{1}{\rho_{eh}} F_1(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) \\ F_4(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) &= - \frac{\rho_{eh}^2 + \rho_e^2 - \rho_h^2}{\rho_e \rho_{eh}} f_e(\rho_e) f_e'(\rho_e) [f_h(\rho_h) \exp(-\alpha\rho_{eh})]^2 \\ F_5(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) &= - \frac{\rho_{eh}^2 + \rho_h^2 - \rho_e^2}{\rho_h \rho_{eh}} f_h(\rho_h) f_h'(\rho_h) [f_e(\rho_e) \exp(-\alpha\rho_{eh})]^2 \end{aligned} \quad (3.21)$$

et :

$$Z_i = \int_{-H/2}^{H/2} dz_e \int_{-H/2}^{H/2} dz_h G_i(z_e, z_h) \quad (3.22)$$

avec $G_1(z_e, z_h) = [g_e(z_e) g_h(z_h) \exp(-\gamma(z_e - z_h)^2)]^2$

$$\begin{aligned}
 G_2(z_e, z_h) &= (z_e - z_h)^2 G_1(z_e, z_h) \\
 G_3(z_e, z_h) &= (z_e - z_h) g_e(z_e) g_e'(z_e) [g_h(z_h) \exp(-\gamma(z_e - z_h)^2)]^2 \\
 G_4(z_e, z_h) &= (z_h - z_e) g_h(z_h) g_h'(z_h) [g_e(z_e) \exp(-\gamma(z_e - z_h)^2)]^2 \quad (3.23)
 \end{aligned}$$

Les intégrales P_i seront calculées numériquement. Dans les intégrales doubles Z_i , l'intégration sur $z \equiv (z_e + z_h)/2$ peut être effectuée analytiquement (Annexe B), tandis que l'intégration restante sur $\zeta \equiv z_e - z_h$ sera effectuée numériquement.

Notons que les fonctions d'onde individuelles (3.10) de l'électron et du trou sont identiques. Il en résulte que les fonctions à intégrer qui ne diffèrent que par une permutation des indices e et h sont égales. On a donc $F_4(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) = F_5(\rho_h, \rho_e, \rho_{eh})$ et $G_3(z_e, z_h) = G_4(z_h, z_e)$. En outre, comme on peut échanger l'ordre des sommations par rapport aux coordonnées de l'électron et du trou (théorème de Fubini ; Rudin 1966), on obtient :

$$P_4(\alpha, R) = P_5(\alpha, R) \quad \text{et} \quad Z_3(\gamma, H) = Z_4(\gamma, H) \quad (3.24)$$

Donc, bien que le rapport σ des masses effectives apparaisse dans l'hamiltonien, l'énergie ne dépend pas de σ :

$$\begin{aligned}
 \langle E(\alpha, \gamma) \rangle &= \left(\frac{\theta_0}{R} \right)^2 + \left(\frac{\pi}{H} \right)^2 - \alpha^2 + \alpha \frac{P_3(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} - \frac{\alpha P_4(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} \\
 &+ 2\gamma - 4\gamma^2 \frac{Z_2(\gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} + 4\gamma \frac{Z_3(\gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} + \langle V_{\text{coul}} \rangle \quad (3.25)
 \end{aligned}$$

Cette propriété est indépendante de la géométrie du domaine de confinement et reste valable aussi bien pour des microstallites sphériques que des boîtes parallélépipédiques. En revanche, l'hypothèse qui prévaut dans tout le chapitre, à savoir le caractère infini du potentiel de confinement, est une condition nécessaire. Cette propriété sera donc perdue dans le chapitre 4 où nous envisagerons un modèle à barrières de potentiel finies. Dans la suite, nous discuterons tout d'abord le cas particulier de la limite strictement bidimensionnelle, c'est-à-dire du disque quantique, avant d'aborder le cas général du cylindre.

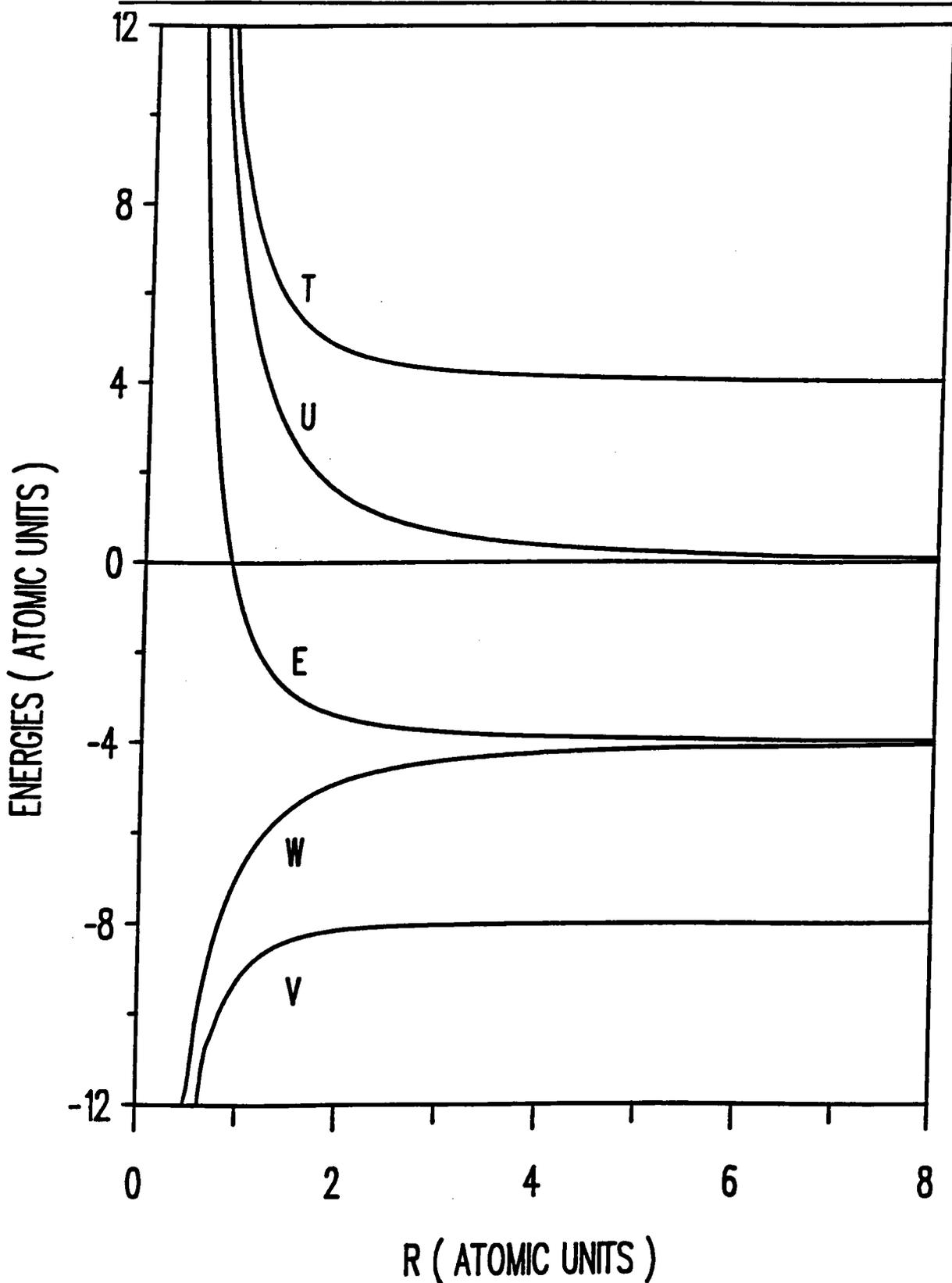


FIG. 3.2.

Energie totale E , énergie de paire $U = E_e + E_h$, énergie cinétique T , énergie potentielle coulombienne V et énergie de corrélation $W = E - U$ tracées en fonction du rayon R pour un exciton confiné dans un disque par un puits de potentiel infini.

3.3. CAS PARTICULIER DU DISQUE QUANTIQUE

3.3.1. Fonction d'onde et énergie variationnelle

Dans la limite du disque quantique ($H \rightarrow 0$), les coordonnées axiales z_e et z_h disparaissent, de telle sorte que la fonction d'onde se réduit à :

$$\Psi_X = J_0(\theta_0 \rho_e/R) J_0(\theta_0 \rho_h/R) \exp(-\alpha \rho_{eh}) \quad (3.26)$$

La valeur moyenne de l'énergie d'interaction coulombienne s'écrit alors :

$$\langle V_{\text{coul}} \rangle = - \frac{2P_3(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} \quad (3.27)$$

L'énergie moyenne (3.25) prend alors la forme plus simple :

$$\langle E(\alpha) \rangle = \left(\frac{\theta_0}{R} \right)^2 - \alpha^2 + (\alpha - 2) \frac{P_3(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} - \alpha \frac{P_4(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} \quad (3.28)$$

3.3.2. Résultats du calcul variationnel

Dans la Fig. (3.2), l'énergie totale E , l'énergie de corrélation W , l'énergie de paire $U = E_e + E_h$, l'énergie potentielle coulombienne V , et l'énergie cinétique T sont représentées en fonction du rayon du disque. Pour les grandes valeurs de R , ces courbes montrent que l'on obtient le comportement attendu. En effet, on obtient les valeurs limites correctes : $E \rightarrow -4$, $W \rightarrow -4$, $E_e + E_h \rightarrow 0$, $V \rightarrow -8$, $T \rightarrow +4$, valeurs exprimées en unités excitoniques ($| E_X^{\text{SD}} |$).

Dans la figure (3.2.bis), on peut voir que les résultats obtenus sont proches des résultats obtenus dans le cas d'un carré extra-plat (Bryant 1988a). Nous avons reporté sur cette figure les énergies de corrélation d'un exciton dans un disque de rayon R (courbe en trait continu), dans un carré de côté $R\sqrt{2}$ (pavés rectangulaires) et dans un carré de côté $2R$ (points).

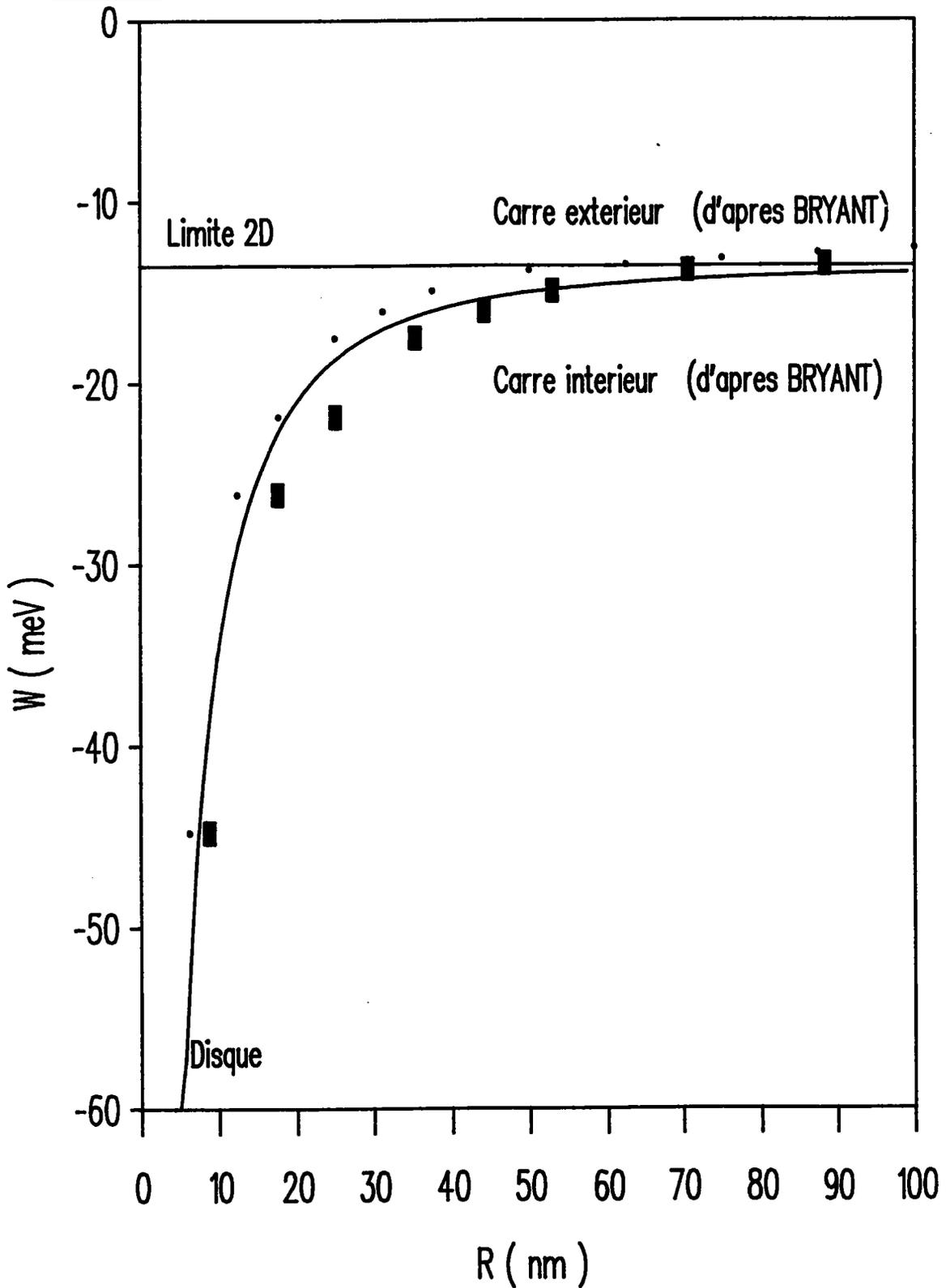


FIG. 3.2bis.

Comparaison entre les énergies de corrélation dans un disque de rayon R , dans un carré de côté $2R$ et dans un carré de côté $R\sqrt{2}$ (Bryant 1988a).

Le paramètre variationnel α tend aussi vers la limite théorique $1/a_X^{2D} = 2$ pour les grandes valeurs de R , comme le montre la Fig. (3.3).

Pour les très petites valeurs de R , la valeur optimale de α tend vers $\alpha_0 = 1.072$ (Annexe C), ce qui est environ le double de la valeur (0.4980) obtenue (Kayanuma 1988) à l'aide d'une fonction d'onde analogue pour une sphère quantique avec des barrières de potentiel infinies. La différence est due à l'influence du confinement géométrique, la corrélation électron-trou étant plus grande dans le cas 2D que dans le cas 3D. Dans cette limite, nous pouvons donner une expression analytique de l'énergie en unités excitoniques :

$$\langle E(\alpha_0, R \rightarrow 0) \rangle \simeq \frac{\theta_0^2}{R^2} - \frac{5.190}{R} - 1.149 \quad (3.29)$$

Nous y vérifions que l'énergie de paire électron-trou $E_e + E_h = \theta_0^2/R^2$ devient bien plus grande en valeur absolue que l'énergie de corrélation, bien que cette dernière tende vers l'infini. Ce n'est que dans ce sens très restreint que l'on peut dire que la limite des petites dimensions est la limite des particules non corrélées. La corrélation subsiste en effet sous deux aspects :

- le paramètre variationnel α ne tend pas vers 0 ;
- l'énergie de corrélation, non seulement ne tend pas vers 0, mais tend vers l'infini.

Ces remarques concernant la corrélation résiduelle pour les très petites dimensions sont qualitativement valables pour une géométrie quelconque du domaine de confinement, dans le cas de barrières de potentiel infinies.

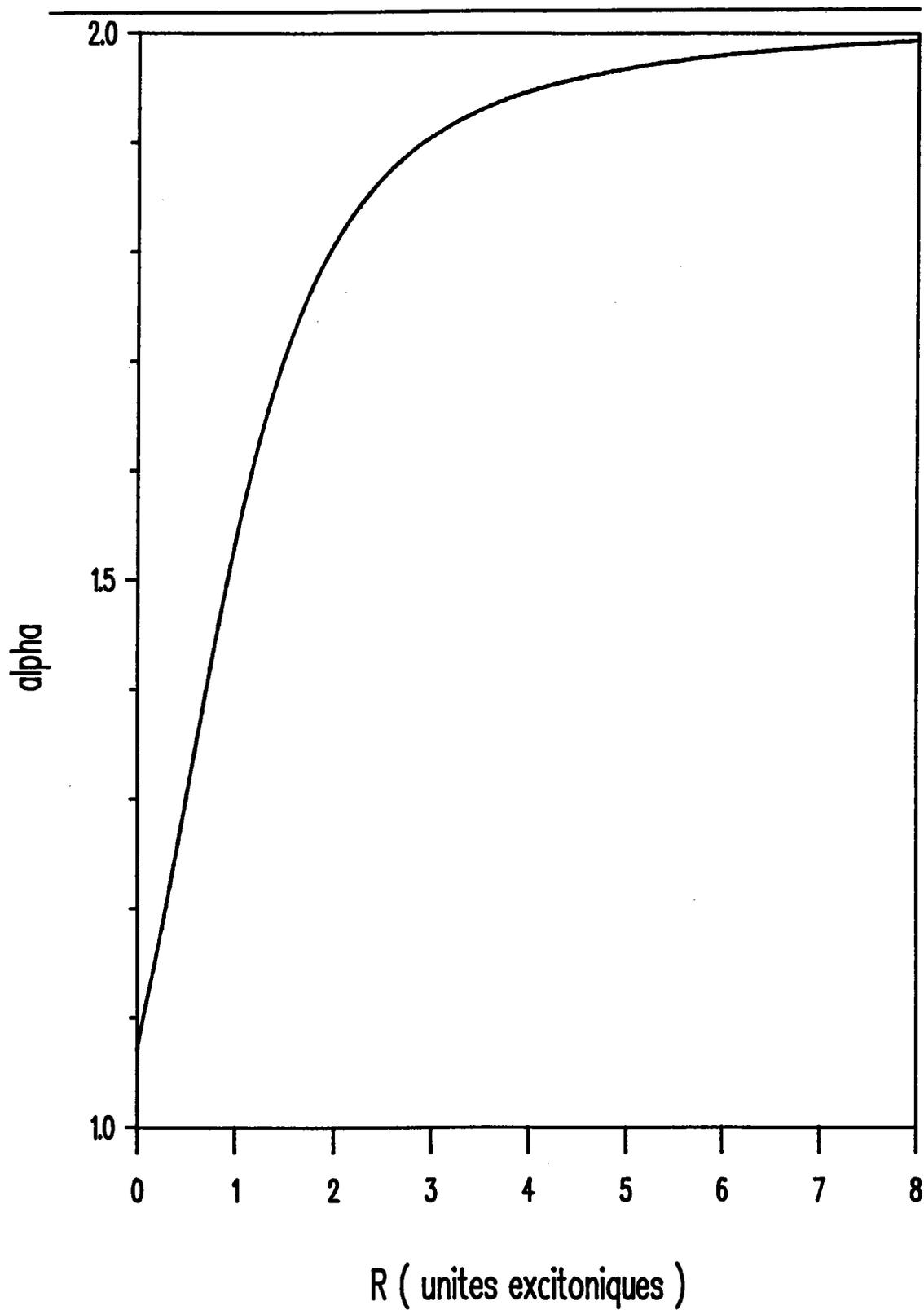


FIG 3.3.

Paramètre variationnel α tracé en fonction du rayon R pour un exciton confiné dans un disque par une barrière de potentiel infinie.

3.4. CAS GENERAL DU CYLINDRE QUANTIQUE

Nous nous replaçons dans le cadre général d'un cylindre de rayon R et de hauteur H non nulles

3.4.1. Approximation dans le calcul de l'énergie potentielle coulombienne

Lorsque R et H sont finis et non nuls, la valeur moyenne de l'énergie potentielle coulombienne s'écrit :

$$\langle V_{\text{coul}} \rangle = \int_{-H/2}^{H/2} dz_e \int_{-H/2}^{H/2} dz_h G_1(z_e, z_h) P_c(\alpha, R, z_e - z_h) \quad (3.30)$$

où P_c est analogue aux intégrales P_i (3.19), avec une fonction F_c à intégrer définie par :

$$F_c(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) = \frac{F_1(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh})}{\sqrt{\rho_{eh}^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad (3.31)$$

Il s'agit donc d'une intégrale quintuple, réductible en intégrale quadruple après intégration sur $z \equiv (z_e + z_h)/2$ (Annexe B). Pour ne pas perdre le bénéfice d'une fonction d'onde séparable dans la simplification des calculs numériques, nous déterminerons $\langle V_{\text{coul}} \rangle$ en utilisant l'expression approchée suivante pour les intégrales P_c :

$$\phi_\alpha(z_e - z_h) = \frac{a}{b + |z_e - z_h|} \quad (3.32)$$

où les constantes a et b sont choisies de telle sorte que les valeurs correctes de $\langle V_{\text{coul}} \rangle$ soient retrouvées dans les limites $|z_e - z_h| \rightarrow 0$ et $|z_e - z_h| \rightarrow \infty$.

Si $|z_e - z_h|$ est grand,

$$\phi_\alpha(z_e - z_h) \simeq \frac{a}{|z_e - z_h|} \quad (3.33)$$

tandis que

$$P_c(\alpha, R, z_e - z_h) \simeq \frac{P_1(\alpha, R)}{|z_e - z_h|}, \quad (3.34)$$

ce qui détermine

$$a = P_1(\alpha, R). \quad (3.35)$$

D'autre part, pour les petites valeurs de $|z_e - z_h|$,

$$\phi_\alpha(z_e - z_h) \simeq \frac{a}{b} \quad (3.36)$$

tandis que

$$P_c(\alpha, R, z_e - z_h) \simeq P_3(\alpha, R), \quad (3.37)$$

ce qui donne

$$\frac{a}{b} = P_3(\alpha, R). \quad (3.38)$$

Ainsi, l'expression approchée de $\langle V_{\text{coul}} \rangle$ est donnée par :

$$\langle V_{\text{coul}} \rangle = -2 \frac{Z_c(\alpha, R, \gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} \quad (3.39)$$

où Z_c est une intégrale de type Z_i (3.22), avec :

$$G_c(H, R, \alpha, \gamma, z_e, z_h) = \frac{G_1(z_e, z_h)}{\frac{P_1(\alpha, R)}{P_3(\alpha, R)} + |z_e - z_h|} \quad (3.40)$$

3.4.2. Résultats du calcul variationnel

Dans la figure (3.4), nous avons représenté les variations de l'énergie de corrélation en fonction de R pour différentes valeurs de H . Il apparaît, comme cela était prévisible, que pour chaque valeur de H , $W \rightarrow -\infty$ quand $R \rightarrow 0$. Pour R fixé (Fig. 3.5), W est une fonction croissante de H , la limite $H = 0$ (limite du disque quantique) correspondant à l'énergie de corrélation la plus basse. Quand $R \rightarrow \infty$, nous obtenons la limite du puits quantique (QW). Dans tous les cas, le confinement quantique accroît l'effet de la corrélation coulombienne.

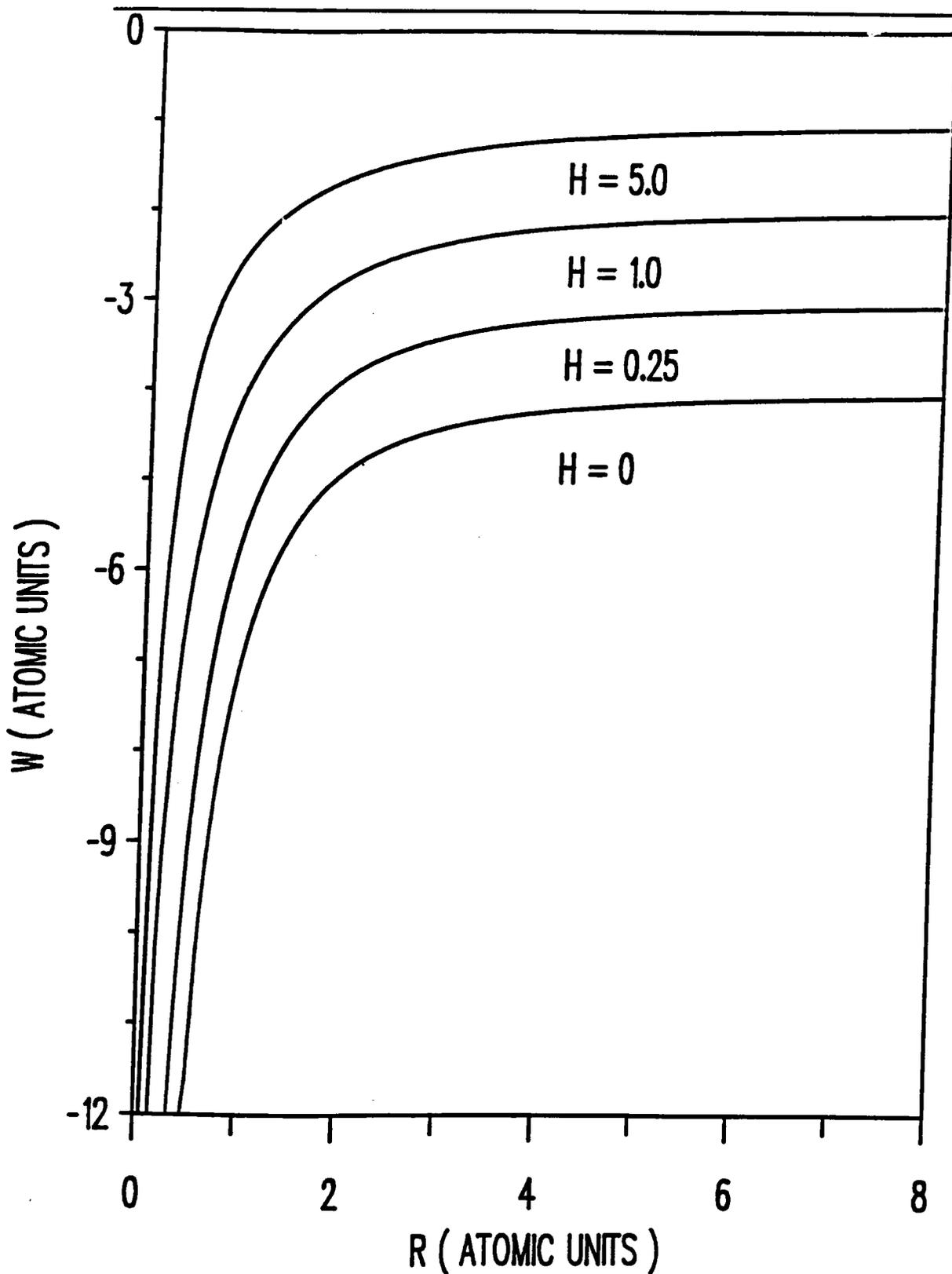


FIG. 3.4.

Energie de corrélation $W = E - (E_e + E_h)$ tracée en fonction du rayon R pour un exciton confiné dans un disque ($H = 0$) ou un cylindre par une barrière de potentiel infinie.

Les hauteurs sont exprimées en unités excitoniques.

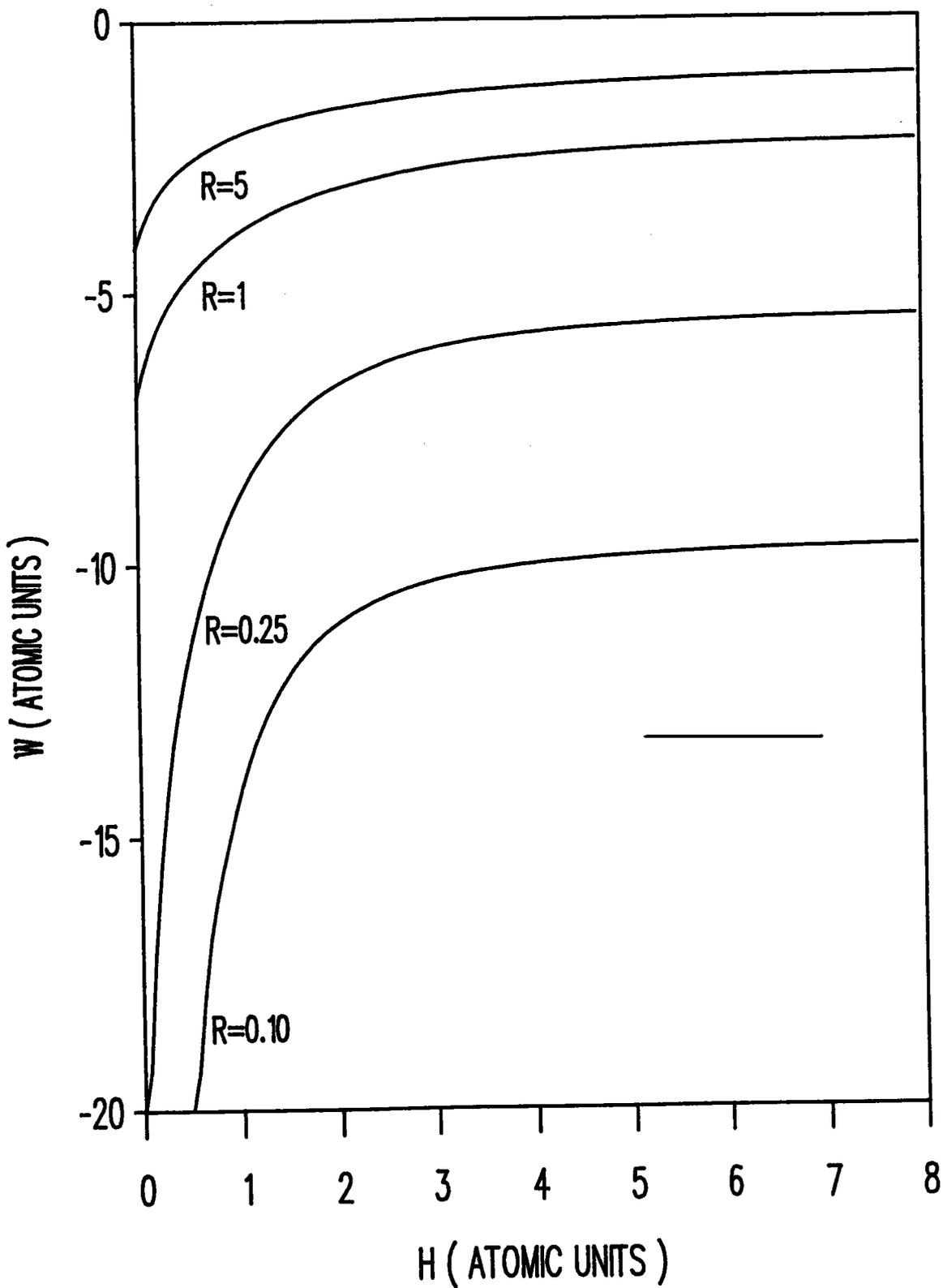


FIG. 3.5.

Energie de corrélation $W = E - (E_e + E_n)$ tracée en fonction de la hauteur H pour un exciton confiné dans un cylindre de rayon R par une barrière de potentiel infinie.

Les rayons sont exprimés en unités excitoniques.

Dans la figure (3.6), nous comparons les variations, en fonction de R , des paramètres variationnels α et γ pour une valeur donnée de H (ici $H = 1$ u.a.). En particulier, on y remarque que, pour les très faibles valeurs de R , α devient très faible tandis que γ devient très grand. Ceci signifie que, dans cette limite, la corrélation en z devient prépondérante sur la corrélation latérale. Cette particularité n'apparaissait pas dans la fonction d'onde précédemment utilisée (Kayanuma 91), car la fonction de corrélation électron-trou (3.15), isotrope, ne possédait qu'un seul paramètre variationnel décrivant simultanément les corrélations axiale et latérale.

Enfin, dans la figure (3.7), nous montrons l'allure du paramètre variationnel α en fonction de R pour différentes valeurs de H . L'extrapolation des courbes à la limite $R \rightarrow 0$ suggère que la corrélation latérale disparaît pour $H \neq 0$; la corrélation électron-trou est alors purement axiale. Nous n'avons pas approfondi ce cas limite car il nous semble que le résultat est étroitement lié à la forme (3.16) du facteur de corrélation F_{eh} , qui a été essentiellement choisie pour des raisons de commodité de calcul.

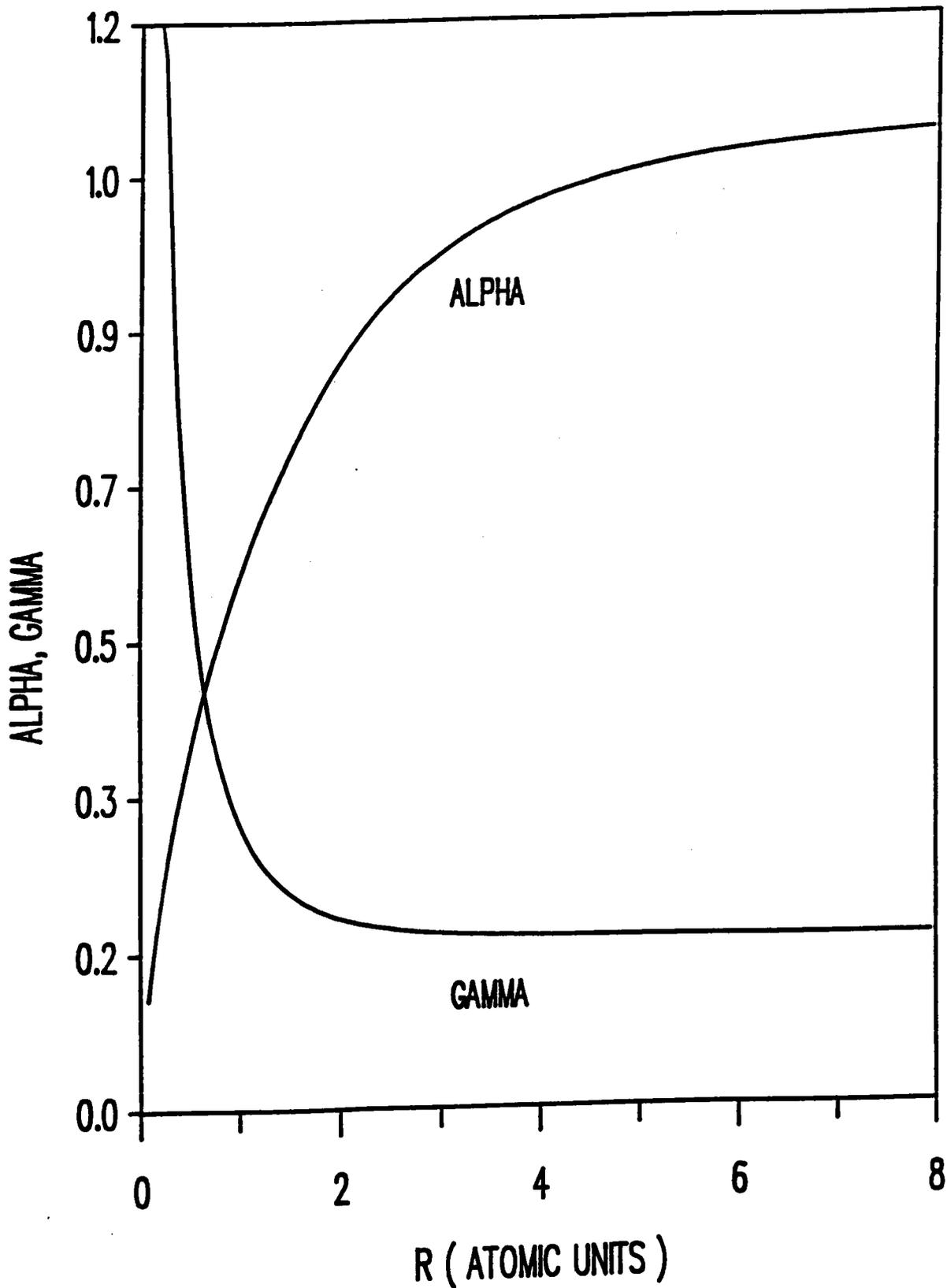


FIG. 3.6.

Paramètres variationnels α et γ représentés en fonction du rayon R pour un exciton confiné dans un cylindre de hauteur $H = 1$ (unités excitoniques) par une barrière de potentiel infinie.

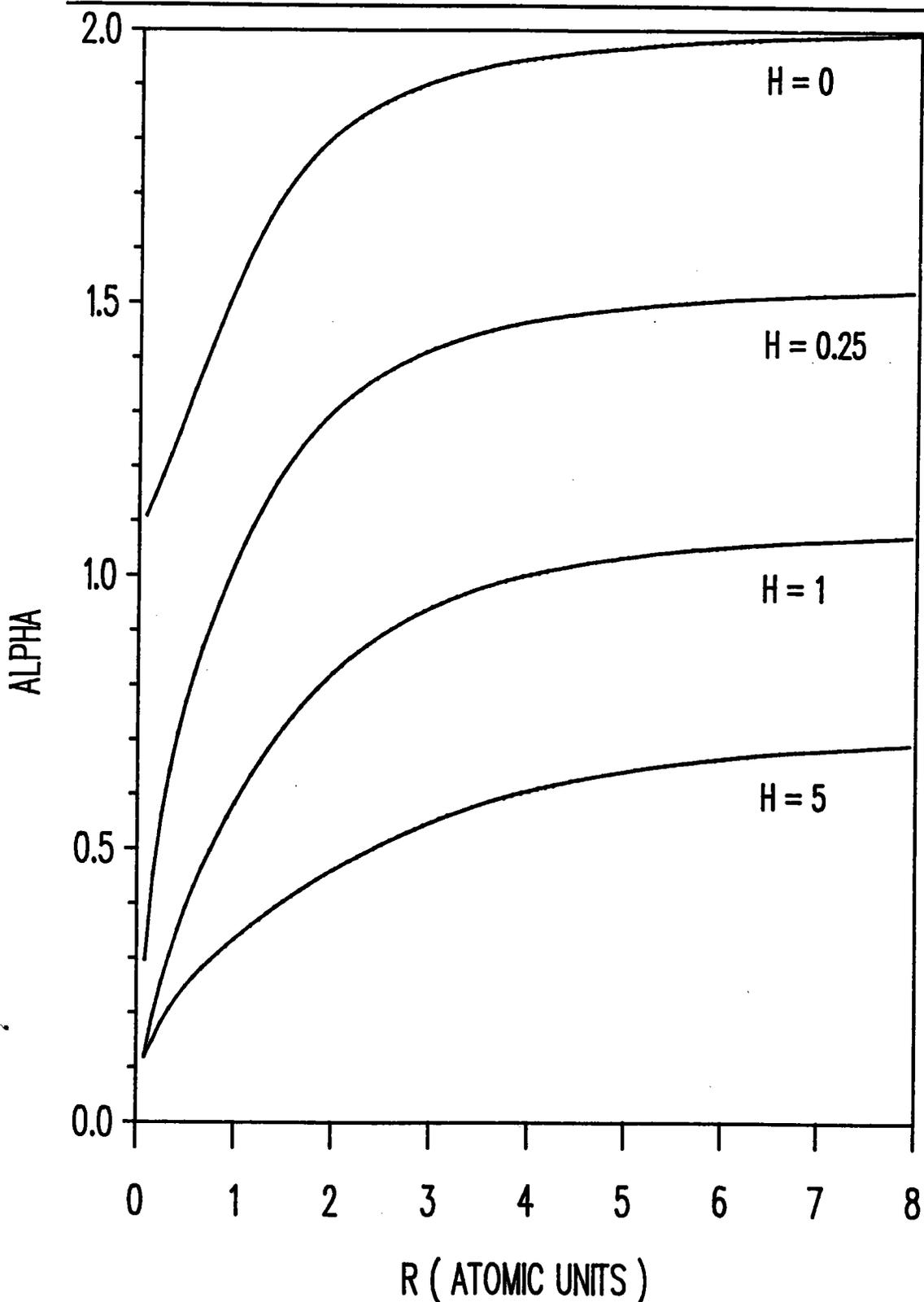


FIG. 3.7.

Paramètre variationnel α représenté en fonction du rayon R pour un exciton confiné dans des cylindres de différentes hauteurs H (en unités excitoniques) par une barrière de potentiel infinie.

3.5. CONCLUSION

Cette première étude nous a permis de tester les possibilités et les limites de notre fonction d'onde variationnelle. Elle a également permis de mettre en évidence l'utilité du concept d'énergie de corrélation $W = E - (E_e - E_h)$, où E , E_e , E_h , sont respectivement l'énergie totale de l'exciton, l'énergie de l'électron seul et l'énergie du trou seul. En effet, l'énergie d'un exciton confiné dans un cylindre tend vers l'infini lorsque $R \rightarrow 0$, ce qui ne conduit pas à la limite du disque comme on pourrait s'y attendre. Ceci correspond à un choix différent de l'origine des énergies dans les deux géométries. L'utilisation de l'énergie de corrélation nous permet de retrouver à partir des résultats du cylindre les cas limites du disque, du puits quantique, du cristal 2D et du cristal 3D. Ceci constitue un complément utile à une étude analogue (Kayanuma 1991) utilisant toutefois une meilleure fonction d'onde variationnelle. En accord avec cette étude, nous constatons que la liaison électron-trou est d'autant plus renforcée que les dimensions du cylindre (R ou H) sont plus petites. Nous ne pouvons pas effectuer de comparaison quantitative directe des résultats concernant l'énergie, car l'auteur n'a pas utilisé comme nous l'énergie de corrélation pour présenter ses résultats, mais la différence $E(R, H) - E(R, \infty)$. Par rapport à cette étude, nous apportons un éclairage différent car nous avons privilégié le confinement latéral par rapport au confinement axial et étudié l'influence de R pour H fixé plutôt que l'influence de H pour R fixé. L'objectif suivant est de reprendre le problème avec un modèle de puits fini pour décrire le confinement. A notre connaissance, c'est la première étude en puits fini dans cette géométrie de confinement.

**EXCITON DANS UNE BOITE QUANTIQUE CYLINDRIQUE
CAS DU CONFINEMENT FORT**

4.1. INTRODUCTION

4.2. DISQUE QUANTIQUE

4.2.1. Position du problème

4.2.2. Etats à une particule

4.2.3. Particularisation à GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs

4.2.4. Hamiltonien effectif de l'exciton

4.2.5. Fonction d'essai

4.2.6. Calcul variationnel de l'énergie de liaison

4.2.7. Résultats du calcul variationnel

4.3. CAS GENERAL DU CYLINDRE QUANTIQUE

4.3.1. Etats à une particule

4.3.2. Hamiltonien effectif de l'exciton

4.3.3. Fonction d'essai

4.3.4. Calcul variationnel de l'énergie de liaison

4.3.5. Résultats du calcul variationnel

4.4. CONCLUSION

4.1. INTRODUCTION

Pour de très petites dimensions de boîte, le modèle du puits infini ne convient plus en raison de l'effet tunnel qui devient très important. La fonction d'onde ne s'annule plus à l'extérieur du cylindre. Cet effet devient de plus en plus important lorsque les dimensions deviennent très petites.

Dans le chapitre précédent, nous avons conclu que, plus les dimensions du domaine de confinement sont petites, plus la corrélation électron-trou est importante. Cela est dû aux conditions de confinement qui rapprochent indéfiniment l'électron et le trou piégés dans la boîte quantique. Cette conclusion risque d'être remise en cause dans le modèle du puits fini. En effet, l'effet tunnel limite la possibilité de contrainte de rapprochement des deux particules. Si l'on raisonne par analogie avec les autres géométries pour lesquelles ces études ont été effectuées (puits quantiques simples, microcristallites et fils quantiques), on peut s'attendre à une prépondérance de l'effet tunnel lorsque les dimensions tendent vers 0.

Ce ne serait pas alors pour les plus petites boîtes que la fonction d'onde excitonique est la plus compacte, mais pour des dimensions intermédiaires, telles que l'effet tunnel ne compense pas complètement l'effet de confinement. Si c'est le cas, l'énergie de corrélation doit présenter un minimum lorsque l'on fait varier R à H constant, et lorsque l'on fait varier H à R constant. L'objectif de ce chapitre est de tester cette hypothèse, puis, si elle est confirmée, de préciser les dimensions optimales des boîtes, c'est-à-dire celles qui rendent minimale (maximale en valeur absolue) l'énergie de corrélation.

4.2. DISQUE QUANTIQUE

4.2.1. Position du problème

Dans le cas du puits infini, le disque représentait le cas limite d'un cylindre de hauteur H tendant vers 0. Ici, nous envisageons sous le nom de *disque quantique* un problème spécifique, correspondant à un confinement dimensionnel dans un plan et un confinement latéral par un puits de potentiel fini :

$$V_{\text{wp}}^i(\rho_i) = V_i \theta(\rho_i - R), \quad \text{avec } i = (e, h) \quad (4.1)$$

V_e et V_h étant respectivement les barrières de potentiel de l'électron et du trou et θ la fonction saut de Heaviside.

L'électron et le trou sont par hypothèse rigoureusement localisés dans le plan d'équation $z = 0$, tandis que la localisation à l'intérieur du disque (confinement latéral) est limitée par l'effet tunnel. Or l'effet tunnel est d'autant plus important que les dimensions sont plus faibles. La limite $H \rightarrow 0$ pour un cylindre de semi-conducteur A noyé dans un semi-conducteur B ne conduit pas à une telle localisation dans le plan $z = 0$, car, du fait de l'effet tunnel, on obtient à cette limite une absence de confinement en z , c'est-à-dire, paradoxalement, un comportement proche d'un fil quantique. Du point de vue théorique, le disque quantique correspond à une localisation de l'électron et du trou dans le disque sous l'effet d'un potentiel de confinement latéral fini et d'un potentiel de confinement axial infini. Une réalisation d'un disque quantique conforme à nos hypothèses consisterait en une pastille d'un semi-conducteur de type A entourée par un film infini de semi-conducteur de type B , avec des structures adéquates pour A et B (accord de maille, structures de bandes voisines...).

4.2.2. Etats à une particule

L'électron et le trou étant astreints à se mouvoir dans le plan du disque, ils peuvent être repérés par leurs coordonnées polaires $\rho_i, \phi_i (i = e, h)$. L'hamiltonien effectif pour la particule i seule dans le disque s'écrit alors :

$$H = - \frac{\hbar^2}{2m_i^*} \nabla^2 + V_{wp}^i(\rho_i) \quad (4.1)$$

Dans les mêmes unités atomiques qu'au chapitre précédent, l'équation de Schrödinger effective s'écrit alors, pour l'électron comme pour le trou :

$$- \tau_i \nabla_i^2 f_i(\rho_i, \phi_i) + V_{wp}^i(\rho_i) f_i(\rho_i, \phi_i) = E_i f_i(\rho_i, \phi_i) \quad (4.2)$$

avec

$$\tau_e = \frac{1}{1+\sigma} ; \quad \tau_h = \frac{\sigma}{1+\sigma} \quad (4.3)$$

où nous avons repris la notation $\sigma = m_e^*/m_h^*$ pour désigner le rapport des masses effectives de l'électron et du trou.

Cette équation est soluble analytiquement. La fonction d'onde (non normée) dans l'état fondamental est indépendante de l'angle polaire ϕ_i et a pour expression :

$$f_i(\rho_i) = \begin{cases} J_0(\theta_i \rho_i/R) & \text{si } \rho_i < R \\ A_i K_0(\beta_i \rho_i) & \text{si } \rho_i > R \end{cases} \quad (4.4)$$

avec

$$\beta_i = \left[\frac{V_i}{\tau_i} - \frac{\theta_i^2}{R^2} \right]^{1/2}$$

J_0 et K_0 sont respectivement la fonction de Bessel et la fonction de Bessel modifiée d'ordre zéro. θ_i et A_i sont deux constantes déterminées par les conditions aux limites pour $\rho_i = R$:

$$A_i = \frac{J_0(\theta_i)}{K_0(\beta_i R)}$$

et

$$\theta_i \frac{J_1(\theta_i)}{J_0(\theta_i)} = \beta_i R \frac{K_1(\beta_i R)}{K_0(\beta_i R)} \quad (4.5)$$

La première condition traduit la continuité en $\rho_i = R$ de la fonction d'onde tandis que la seconde traduit la continuité en ce même point de la dérivée première de la fonction d'onde. Cette seconde condition peut être améliorée sans complication ultérieure des calculs en y substituant une condition de type (2.9). Le point de vue adopté ici revient à confondre les masses effectives dans le disque et dans le semi-conducteur du film environnant.

L'énergie dans cet état fondamental est :

$$E_{ip} = \tau_i \left(\frac{\theta_i}{R} \right)^2 \quad (4.6)$$

Le comportement en $\frac{1}{R^2}$ n'est qu'apparent, car, contrairement au disque en puits infini, la "constante" θ_i dépend de R , et, surtout, tend vers 0 lorsque R tend vers 0. Le modèle du puits fini fait donc disparaître la singularité sévère qu'engendrait le modèle du puits infini dans la limite $R \rightarrow 0$.

A l'opposé, lorsque R tend vers l'infini, θ_i tend vers θ_0 ; cette valeur limite, indépendante de la hauteur de la barrière de potentiel, est le premier zéro de J_0 , valeur que l'on avait rencontré précédemment dans le modèle du potentiel de confinement infini. La fonction d'onde à l'intérieur du disque se rapproche donc de la fonction d'onde obtenue dans le cas du puits infini, tandis que la fonction d'onde à l'extérieur du disque tend vers 0. Ceci est tout à fait en accord avec ce que l'on attend intuitivement, à savoir une disparition progressive de l'effet tunnel lorsque les dimensions du disque s'accroissent. Le modèle du puits infini est donc satisfaisant pour des disques suffisamment grands, indépendamment de la hauteur de la barrière de potentiel et tombe en défaut pour des disques trop petits.

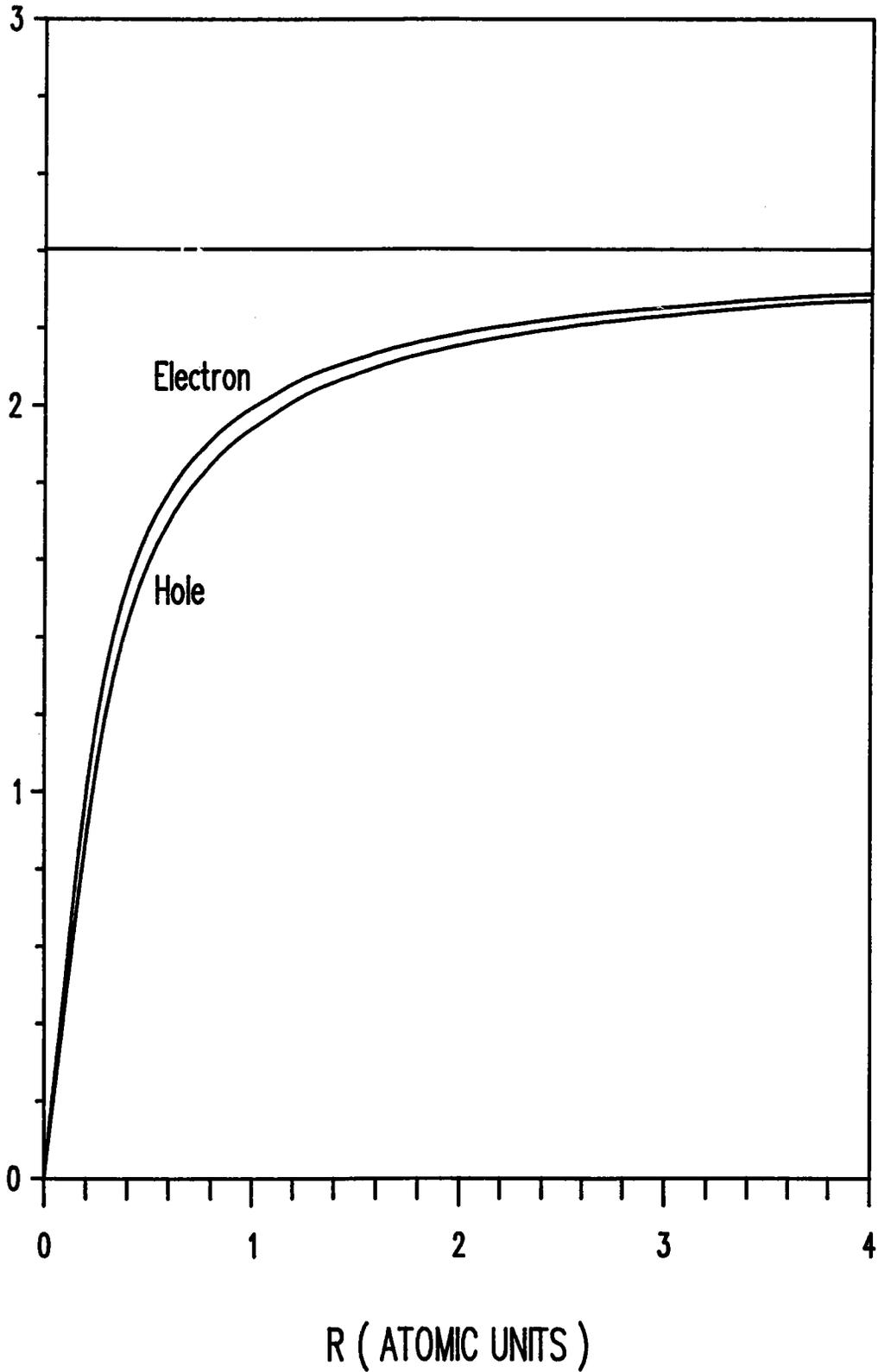


FIG. 4.1

Paramètre θ_i de la fonction d'onde à une particule en fonction du rayon R .

4.2.3. Particularisation à GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs

Une des servitudes engendrées par le modèle du puits fini est l'obligation de recourir à des valeurs numériques pour la hauteur des barrières de potentiel. Il faut donc renoncer à l'universalité du propos en s'intéressant à un couple A/B particulier de semi-conducteurs.

Dans la suite, les résultats seront appliqués à un disque de GaAs dans un film de Ga_{1-x}Al_xAs. Nous travaillerons avec les données suivantes (Miller et al, 1984) : $m_e^*/m_0 = 0.0665$, $m_{hh}^*/m_0 = 0.34$ et $m_{lh}^*/m_0 = 0.094$ pour les masses effectives respectives de l'électron, du trou lourd et du trou léger. Les décalages des bandes sont $V_e = Q_e \Delta\epsilon_g$ et $V_h = Q_h \Delta\epsilon_g$, où $Q_e = 0.57 = 1 - Q_h$.

D'autre part, nous supposerons que la différence de gap $\Delta\epsilon_g$ et le pourcentage x d'aluminium dans le substrat sont reliés par : $\Delta\epsilon_g = 1.155 x + 0.37 x^2 eV$ (Lee et al 1980).

En prenant pour constante diélectrique $\kappa = 12.5$ (Greene et Bajaj 1984), on obtient respectivement pour unités de longueur et d'énergie :

$$\begin{aligned} a_X^{3D} &= 118.96 \text{ Angström} & \text{et} & \quad |E_X^{3D}| = 4.84 \text{ meV} & \text{(cas du trou lourd)} \\ a_X^{3D} &= 169.89 \text{ Angström} & \text{et} & \quad |E_X^{3D}| = 3.39 \text{ meV} & \text{(cas du trou léger)} \end{aligned}$$

La figure (4.1) montre comment les paramètres θ_i varient de 0 à leur limite commune θ_0 pour un électron et un trou lourd ($\sigma = 0.196$) dans le cas d'un pourcentage $x = 0.15$ d'aluminium dans le substrat. On constate que la différence avec le modèle du puits infini devient considérable lorsque le rayon du disque devient inférieur au rayon excitonique. Nous n'avons pas tracé sur le même diagramme la courbe correspondant au trou léger, car l'unité de longueur correspondante n'aurait plus la même valeur, ce qui serait une source de confusion. On se convaincra aisément que l'allure de cette courbe est très voisine de celles des courbes représentées. Lorsque le pourcentage x s'accroît, le passage de la valeur 0 à la valeur asymptotique θ_0 quand R augmente s'effectue plus rapidement, mais avec toujours la même allure de courbe.

4.2.4. Hamiltonien effectif de l'exciton

L'hamiltonien effectif de l'exciton a pour expression

$$H = - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{\kappa |r_e - r_h|} + V_{wp}^e(\rho_e) + V_{wp}^h(\rho_h) \quad (4.7)$$

où m_e^* et m_h^* désignent les masses effectives de l'électron et du trou. Nous les supposons identiques dans le disque et dans le semi-conducteur environnant. La constante diélectrique κ , supposée identique dans les deux matériaux, tient compte de façon phénoménologique des effets de polarisation.

Pour une fonction d'onde indépendante des angles polaires de l'électron et du trou, cet hamiltonien effectif se réduit, en unités atomiques, à :

$$\begin{aligned} H = & - \frac{1}{1+\sigma} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho_e^2} + \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial}{\partial \rho_e} + \frac{\rho_{eh}^2 + \rho_e^2 - \rho_h^2}{\rho_e \rho_{eh}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_e \partial \rho_{eh}} \right) \\ & - \frac{\sigma}{1+\sigma} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho_h^2} + \frac{1}{\rho_h} \frac{\partial}{\partial \rho_h} + \frac{\rho_{eh}^2 + \rho_h^2 - \rho_e^2}{\rho_h \rho_{eh}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_h \partial \rho_{eh}} \right) \\ & - \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho_{eh}^2} + \frac{1}{\rho_{eh}} \frac{\partial}{\partial \rho_{eh}} \right) - \frac{2}{\rho_{eh}} + V_w^e(\rho_e) + V_w^h(\rho_h) \end{aligned} \quad (4.8)$$

L'équation de Schrödinger correspondante n'admettant pas de solution analytique, nous déterminerons l'état fondamental par la méthode variationnelle de Ritz, à l'aide d'une fonction d'onde d'essai Ψ_X à un paramètre variationnel α . La fonction d'onde et l'énergie dans l'état fondamental sont déterminées par la minimisation de l'énergie moyenne :

$$\langle E(\alpha) \rangle = \frac{\langle \Psi_X | H | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} \quad (4.9)$$

par rapport au paramètre α .

4.2.5. Fonction d'essai

Il est ici naturel de reprendre une fonction d'onde de même forme que dans l'approximation du puits de potentiel infini, soit :

$$\Psi_X = f_e(\rho_e) f_h(\rho_h) \exp(-\alpha \rho_{eh}) \quad (4.10)$$

où f_e et f_h sont les fonctions d'onde exactes (4.4) des particules non corrélées dans l'état fondamental.

4.2.6. Calcul variationnel de l'énergie de liaison

La valeur moyenne de l'énergie s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \langle E(\alpha) \rangle = & \frac{1}{1+\sigma} [(\theta_e / R)^2 + \sigma (\theta_h / R)^2] \\ & - \alpha^2 + (\alpha - 2) \frac{P_3(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} - \frac{\alpha}{1+\sigma} \frac{P_4(\alpha, R) + \sigma P_5(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} \end{aligned} \quad (4.11)$$

Les intégrales P_i sont définies par :

$$P_i = 8\pi \int_0^\infty d\rho_e \int_0^\infty d\rho_h \int_{|\rho_e - \rho_h|}^{\rho_e + \rho_h} \frac{F_i(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) \rho_e \rho_h \rho_{eh} d\rho_{eh}}{\sqrt{[(\rho_e + \rho_h)^2 - \rho_{eh}^2] [\rho_{eh}^2 - (\rho_e - \rho_h)^2]}}; \quad (4.12)$$

elles coïncident avec les intégrales P_i définies en (3.20), aux bornes d'intégration près qui sont ici étendues à l'infini. Les fonctions F_i sont toujours définies par :

$$\begin{aligned}
 F_1(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) &= [f_e(\rho_e) f_h(\rho_h) \exp(-\alpha\rho_{eh})]^2 \\
 F_3(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) &= \frac{1}{\rho_{eh}} F_1(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) \\
 F_4(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) &= - \frac{\rho_{eh}^2 + \rho_e^2 - \rho_h^2}{\rho_e \rho_{eh}} f_e(\rho_e) f_e'(\rho_e) [f_h(\rho_h) \exp(-\alpha\rho_{eh})]^2 \\
 F_5(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) &= - \frac{\rho_{eh}^2 + \rho_h^2 - \rho_e^2}{\rho_h \rho_{eh}} f_h(\rho_h) f_h'(\rho_h) [f_e(\rho_e) \exp(-\alpha\rho_{eh})]^2
 \end{aligned}
 \tag{4.13}$$

4.2.7. Résultats du calcul variationnel

Afin de mettre en évidence l'effet du couplage électron-trou nous définirons à nouveau l'énergie de corrélation $\langle W \rangle$ en retranchant de l'énergie totale l'énergie de paire $E_e + E_h$.

$$\langle W \rangle = \langle E \rangle - (E_e + E_h)
 \tag{4.14}$$

Les figures qui suivent représentent les résultats obtenus.

La figure (4.2) représente l'énergie de corrélation en fonction du rayon du disque dans le cas d'un trou lourd ($\sigma = 0.196$) pour diverses valeurs du pourcentage x d'aluminium dans le substrat. On observe que cette énergie de corrélation présente un minimum pour $R \simeq 0.5 a_X^{3D}$. Ce minimum est d'autant plus marqué que le pourcentage en aluminium est plus important. Lorsque R devient très faible, malgré une certaine instabilité des résultats numériques, on retrouve l'énergie de corrélation dans le matériau massif. Dès que R dépasse $4 a_X^{3D}$, il n'y a plus de différence notable avec l'énergie prévue par le modèle du puits infini.

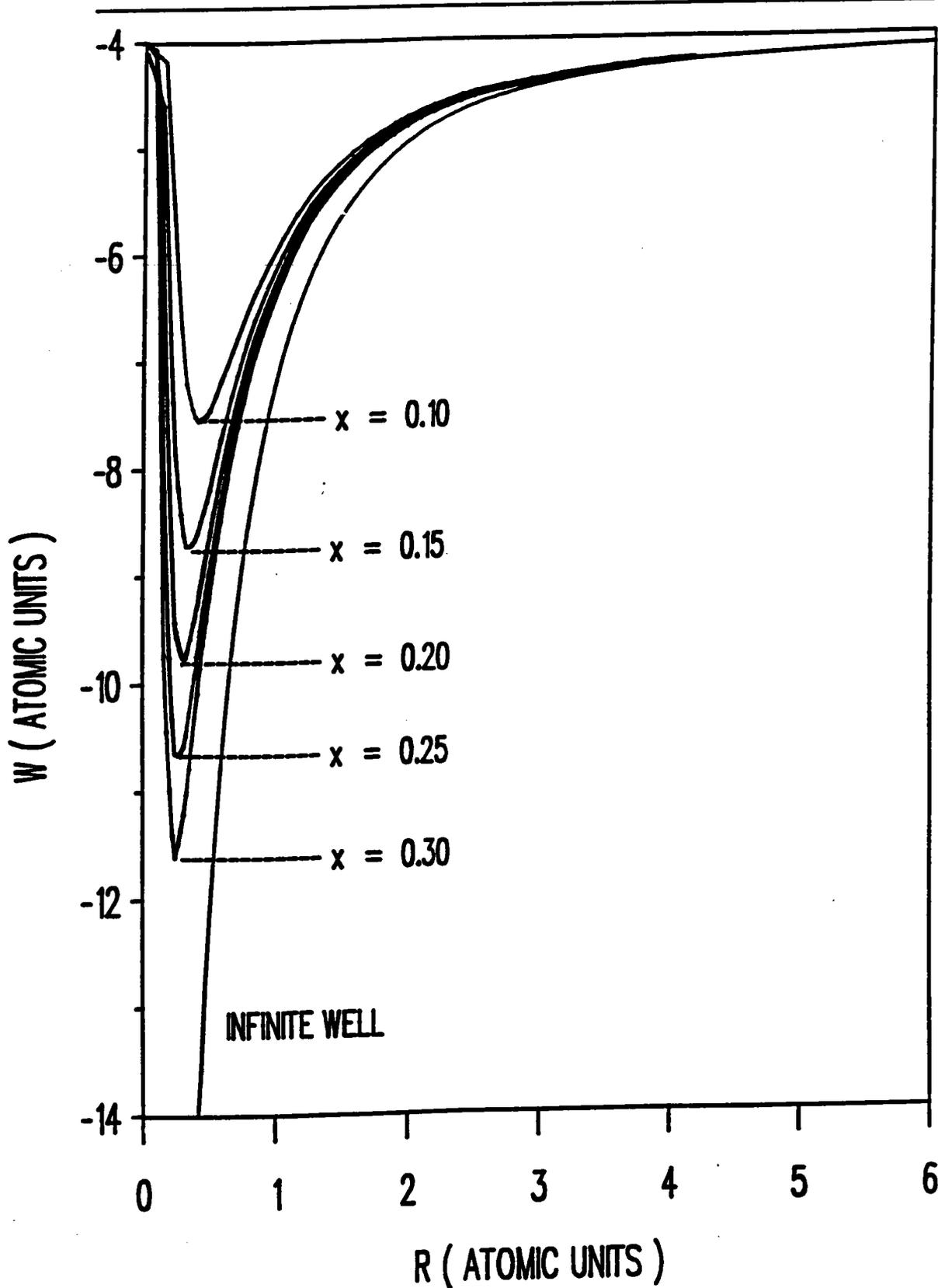


FIG. 42.

Energie de corrélation $W = E - U$ d'un exciton confiné dans un disque représentée en fonction du rayon R pour différentes valeurs de x et dans l'approximation du puits de potentiel infini.

Les figures (4.3) et (4.4) représentent l'énergie de corrélation pour le trou lourd et pour le trou léger :

- La figure (4.3) utilise pour unités atomiques les unités excitoniques pour un pourcentage $x = 0.15$ en aluminium dans le substrat ; il en résulte que le comportement asymptotique est le même pour les grandes valeurs de R . L'inconvénient de cette représentation est d'utiliser sur un même graphe des unités qui ont des valeurs différentes pour le trou lourd et le trou léger.

- La figure (4.4) utilise au contraire pour unités atomiques les unités du donneur définies respectivement par :

$$a_D^{3D} = \frac{\kappa \hbar^2}{m_*} \quad (\text{unité de longueur})$$

et $2 | E_D^{3D} | = \frac{e^2}{\kappa a_D^{3D}} \quad (\text{unité d'énergie}).$

En reprenant les valeurs numériques précédentes, on obtient numériquement :

$$a_D^{3D} = 99.5 \text{ Angström} \quad \text{et} \quad 2 | E_D^{3D} | = 11.58 \text{ meV} ;$$

ce choix présente l'avantage d'utiliser une unité qui a la même valeur pour les deux types de trous.

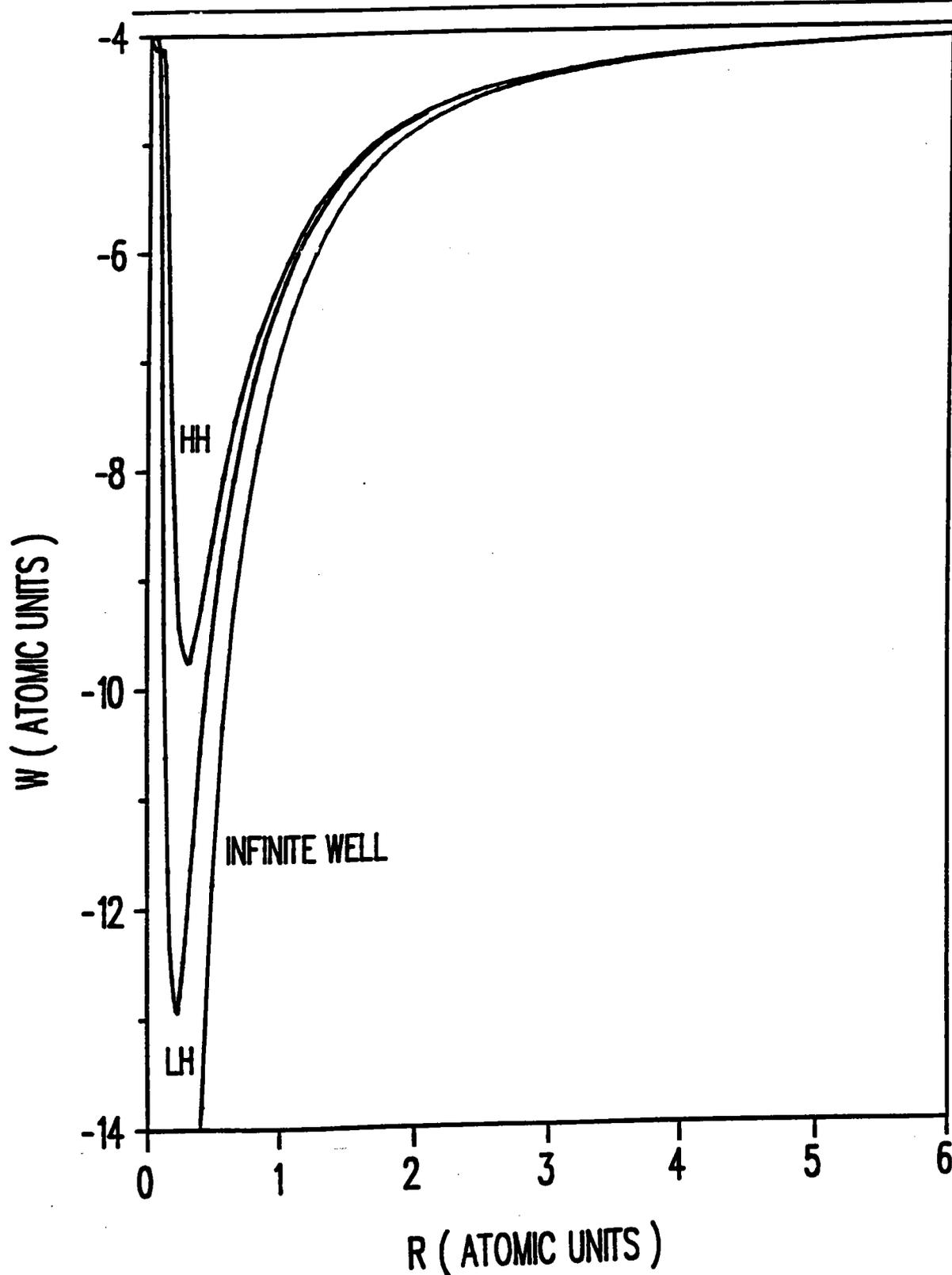


FIG. 4.3.

Energies de corrélation $W = E - U$ tracées en fonction du rayon R pour un exciton confiné dans un disque pour deux valeurs du rapport de masses : $\sigma = 0,196$ (trou lourd) et $\sigma = 0,707$ (trou léger) pour un puits fini correspondant à $x = 0,2$ et dans l'approximation du puits infini. L'utilisation des unités excitoniques a pour conséquence le fait que les courbes se confondent dans l'approximation du puits infini et que les asymptotes sont communes lorsque $R \rightarrow \infty$.

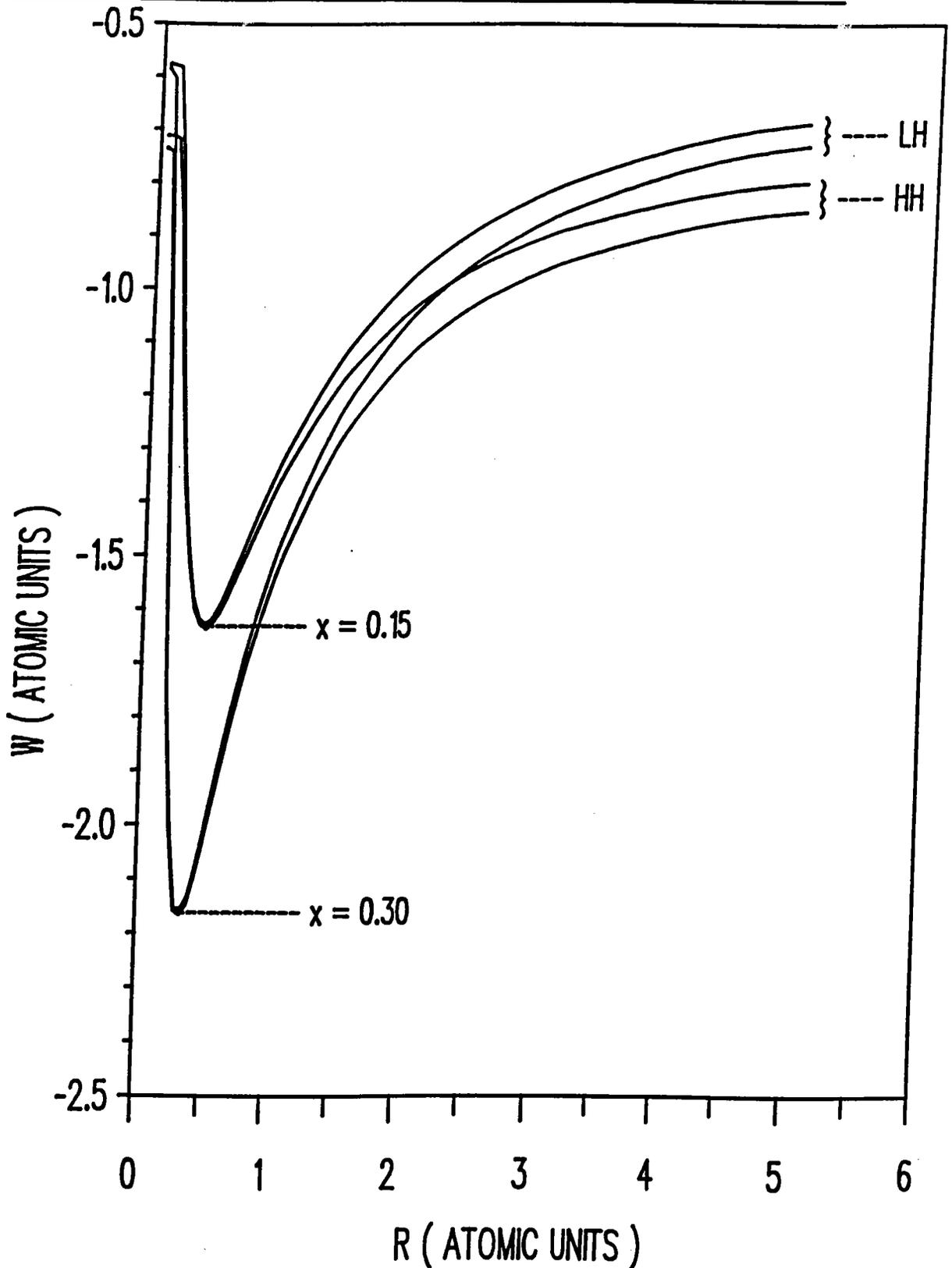


FIG. 4.4.

Energies de corrélation $W = E - U$ tracées en fonction du rayon R pour un exciton confiné dans un disque pour deux valeurs du rapport de masses : $\sigma = 0,196$ (trou lourd) et $\sigma = 0,707$ (trou léger) pour des puits finis correspondant à $x = 0,15$ et $x = 0,30$. L'utilisation des unités de donneur a pour conséquence le fait que les courbes n'ont plus la même asymptote lorsque $R \rightarrow \infty$ pour deux valeurs de σ .

La figure (4.5) représente la variation en fonction de R de la valeur du paramètre variationnel α rendant l'énergie minimale. On observe un comportement proche du modèle du puits infini pour R suffisamment grand ($R > 2$). Contrairement au modèle du puits infini, α n'est pas une fonction croissante de R , mais présente un minimum pour une valeur de R comprise entre 0.5 et 1. Il n'est pas étonnant d'observer un comportement particulier de la fonction d'onde dans ce domaine, car c'est là que l'énergie de corrélation est la plus grande en valeur absolue. C'est donc dans ce domaine que les propriétés excitoniques sont les plus nettes : la stabilité de l'exciton y est maximale et on peut également présumer que les propriétés optiques sont les plus favorables dans ces conditions. En revanche, la limite pour $R \rightarrow 0$ n'est pas tout à fait satisfaisante : on ne retrouve pas la limite attendue $\alpha = 2$, car l'extrapolation des courbes suggère une limite supérieure. Ceci peut être imputé à des instabilités numériques, car la fonction d'onde s'étend alors considérablement à l'extérieur du disque, et la qualité de l'évaluation numérique des intégrales se dégrade dans ces conditions de façon sensible.

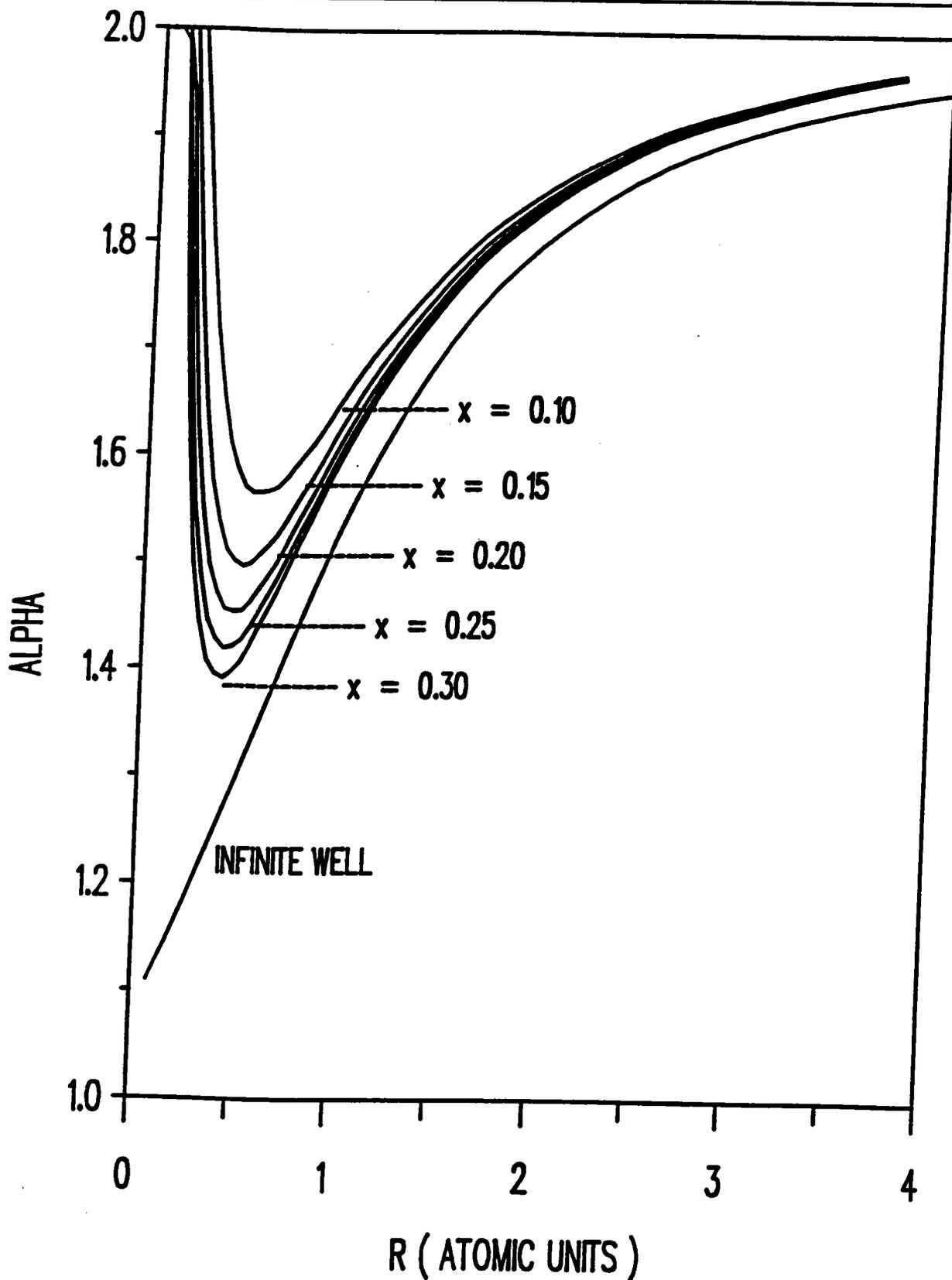


FIG. 4.5.

Paramètre variationnel α de la fonction d'onde d'un exciton dans un disque représenté en fonction du rayon R pour différentes valeurs de x et dans l'approximation du puits infini.

4.3. CAS GENERAL DU CYLINDRE QUANTIQUE

4.3.1. Etats à une particule

Considérons une boîte cylindrique d'un semi-conducteur noyé dans un autre semi-conducteur de gap d'énergie plus élevé. On désignera par R le rayon de la boîte et par H sa hauteur. Nous supposons à nouveau que les écarts entre les bandes de valence et de conduction sont suffisamment faibles pour que l'on puisse utiliser l'approximation de la fonction enveloppe dans un modèle à deux bandes. Dans le cas de bandes paraboliques non dégénérées, l'Hamiltonien effectif à une particule a pour expression :

$$H = - \frac{\hbar^2}{2m_i^*} \nabla_i^2 + V_w^i(r_i) \quad \text{pour } i = e, h \quad (4.14)$$

où m_e^* et m_h^* désignent respectivement les masses effectives de l'électron et du trou. V_w^e et V_w^h sont respectivement le potentiel de confinement de l'électron et du trou, provenant du décalage entre les bandes des deux semi-conducteurs :

$$V_w^i = \begin{cases} 0 & \text{à l'intérieur de la boîte} \\ V_0^i & \text{à l'extérieur de la boîte} \end{cases} \quad (i = e, h) \quad (4.15)$$

Nous reprenons le même paramétrage qu'au chapitre 3 : z_e et z_h sont les coordonnées de l'électron et du trou le long de l'axe z , choisi selon l'axe de symétrie du révolution du cylindre, tandis que ρ_e et ρ_h sont les coordonnées polaires de l'électron et du trou dans un plan perpendiculaire à l'axe du cylindre. Ce paramétrage permet d'exprimer analytiquement le potentiel de confinement sous la forme :

$$V_w^i(\rho_i, z_i) = V_i \theta(\rho_i - R) \theta\left(|z_i| - \frac{H}{2}\right) \quad (i = e, h) \quad (4.16)$$

où V_e et V_h sont respectivement les hauteurs des barrières de potentiel relatives à l'électron et au trou, et θ la fonction saut de Heaviside.

Dans le modèle du potentiel de confinement fini, le problème est nettement plus délicat, car, contrairement au cas du potentiel infini, le potentiel de confinement ne peut plus être mis sous la forme d'une somme $V_{wp}^i(\rho_i) + V_{wb}^i(z_i)$ d'un potentiel dans le plan et d'un potentiel en z . On voit qu'au contraire, le potentiel de confinement apparaît dans (4.16) comme le produit d'une fonction de z_i par une fonction de ρ_i . Ceci a pour conséquence qu'un produit d'une fonction de la distance à l'axe $f_i(\rho_i)$ par une fonction de l'abscisse sur l'axe $g_i(z_i)$ n'est plus solution de l'équation de Schrödinger à une particule ; plus précisément, on peut montrer que la seule solution de l'équation de Schrödinger de la forme $f_i(\rho_i) g_i(z_i)$ est la solution triviale identiquement nulle.

Nous avons étudié dans le paragraphe 4.2 le cas du disque quantique, qui correspond à un confinement latéral seul. L'autre cas extrême est le cas du confinement axial seul, c'est-à-dire le cas du puits quantique. Dans l'état fondamental, la fonction d'onde est séparable en deux facteurs, l'un ayant un caractère d'onde progressive dans les directions x et y , l'autre ayant un caractère d'onde stationnaire dans la direction z du confinement. Ce dernier facteur est de la forme (voir par exemple Bastard, 1990 page 3) :

$$g_i(z_i) = \begin{cases} \cos(\pi_i z_i / H) & \text{pour } |z_i| < H/2 \\ B_i \exp(-k_i |z_i|) & \text{pour } |z_i| > H/2 \end{cases} \quad (4.17)$$

$$\text{avec } k_i = \left[\frac{V_i}{\tau_i} - \left(\frac{\pi_i}{H} \right)^2 \right]^{1/2} . \quad (4.18)$$

π_i et B_i sont des constantes déterminées par les conditions aux limites pour $z_i = \pm \frac{H}{2}$, qui traduisent les continuités de la fonction d'onde et de sa dérivée première :

$$B_i = \frac{\cos(\pi_i/2)}{\exp(-k_i H/2)} \quad \text{et} \quad \tan(\pi_i/2) = k_i H/\pi_i \quad (4.19)$$

L'énergie correspondante est :

$$E_{i\pm} = \tau_i (\pi_i / H)^2 \quad (4.20)$$

Qualitativement, le résultat est très voisin de (4.6) ; la décroissance en $1/H^2$ n'est à nouveau qu'apparente car la "constante" π_i dépend de H , et en particulier, elle tend vers 0 lorsque H tend vers 0. Lorsque H devient suffisamment grand, π_i tend vers π , ce qui correspond au cas du potentiel infini. La figure (4.6) montre le comportement de π_e et π_h en fonction de H dans le cas d'un trou lourd pour $x = 0.15$. On remarquera la grande ressemblance de ces courbes et des courbes représentant θ_e et θ_h en fonction de R représentées sur la figure (4.1).

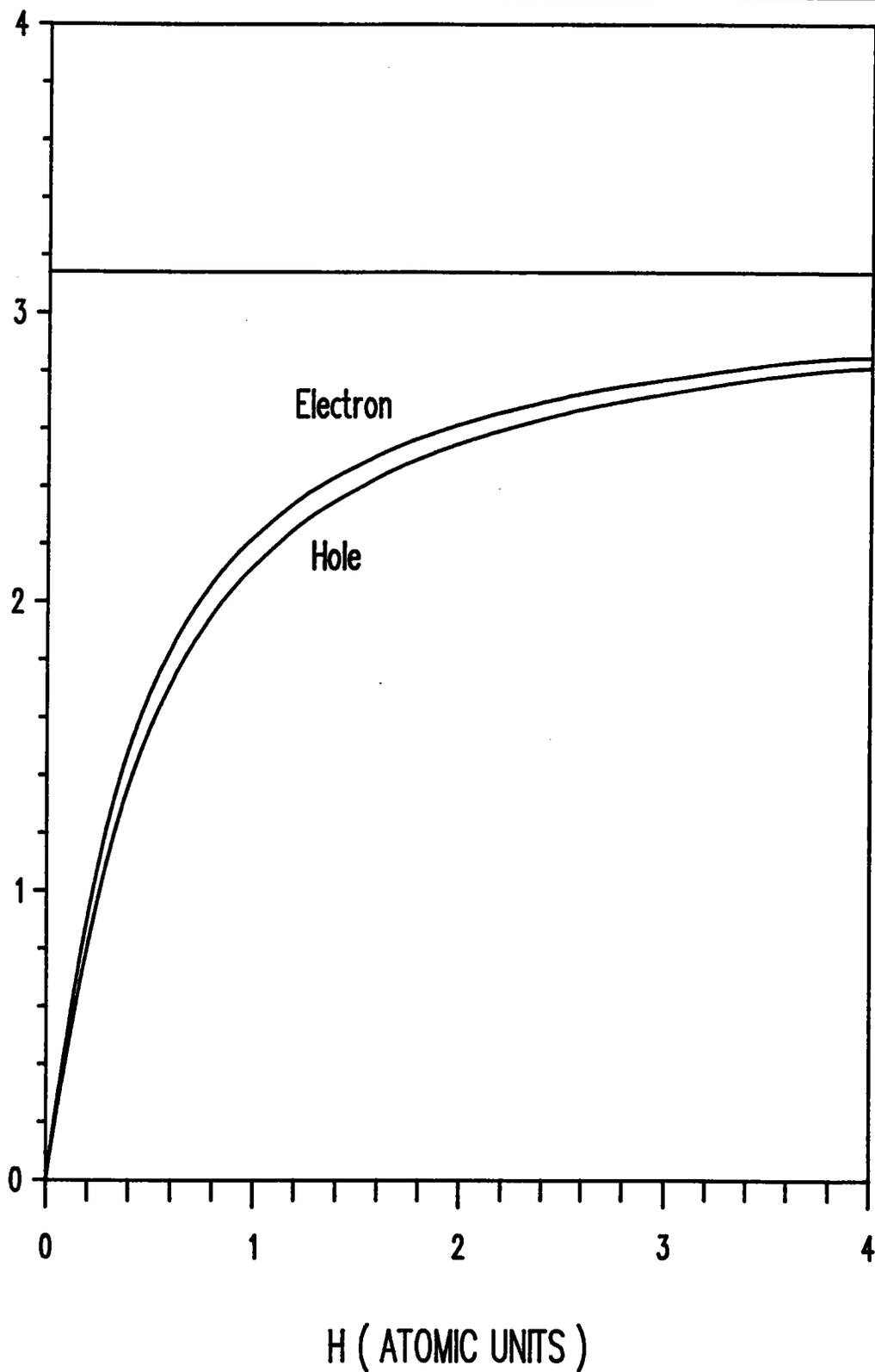


FIG. 4.6.

Paramètre π_i de la fonction d'onde à une particule en fonction de la hauteur H .

Dans le cas qui nous intéresse ici, où les confinements latéral et axial coexistent, bien que le produit $f_i(\rho_i) g_i(z_i)$ ne soit plus solution de l'équation de Schrödinger effective, nous allons utiliser f_i et g_i pour construire notre fonction d'essai. Réécrivons le potentiel de confinement sous la forme :

$$V_{\mathbf{w}}^i(\mathbf{r}_i) = V_{\mathbf{wp}}^i(\rho_i) + V_{\mathbf{wz}}^i(z_i) - \delta V_i(\rho_i, z_i) \quad (4.21)$$

où $V_{\mathbf{wp}}^i$ et $V_{\mathbf{wz}}^i$ sont respectivement les potentiels de confinement latéral et axial tandis que δV_i est un terme correctif ; ils sont définis par :

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{wp}}^i(\rho_i) &= V_i \theta(\rho_i - R) \\ V_{\mathbf{wz}}^i(z_i) &= V_i \theta\left(|z_i| - \frac{H}{2}\right) \\ \delta V_i &= \begin{cases} 0 & \text{si } \theta_i < R \text{ ou } |z_i| < H/2 \\ V_i & \text{sinon} \end{cases} \end{aligned} \quad (4.22)$$

Si l'on considère $-\delta V_i$ comme un potentiel de perturbation, l'énergie de la particule dans l'état fondamental peut être approximée par :

$$\begin{aligned} E_i &= E_{ip} + E_{iz} - \langle \delta V_i \rangle \\ &= \tau_i [(\theta_i/R)^2 + (\pi_i/H)^2] - \frac{\langle f_i g_i | \delta V_i | f_i g_i \rangle}{\langle f_i g_i | f_i g_i \rangle} \end{aligned} \quad (4.23)$$

Pour des cylindres de grandes dimensions, le terme correctif dû à $-\delta V_i$ s'annule. A la limite, l'expression (4.24) se réduit à l'expression :

$$E_i = \tau_i [(\theta_o/R)^2 + (\pi/H)^2] \quad (4.25)$$

correspondant au puits infini.

4.3.2. Hamiltonien effectif de l'exciton

L'hamiltonien effectif a pour expression

$$H = - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_h^2 - \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} + V_w^e(\mathbf{r}_e) + V_w^h(\mathbf{r}_h) \quad (4.26)$$

où m_e^* et m_h^* désignent les masses effectives de l'électron et du trou. Nous les supposons toujours identiques dans le cylindre et dans le semi-conducteur environnant. La constante diélectrique κ , supposée identique dans les deux matériaux, tient compte phénoménologiquement des effets de polarisation.

Cet hamiltonien se réduit, dans les unités atomiques que nous avons choisies :

$$\begin{aligned} H = & - \frac{1}{1+\sigma} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho_e^2} + \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial}{\partial \rho_e} + \frac{\rho_{eh}^2 + \rho_e^2 - \rho_h^2}{\rho_e \rho_{eh}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_e \partial \rho_{eh}} + \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} \right] \\ & - \frac{\sigma}{1+\sigma} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho_h^2} + \frac{1}{\rho_h} \frac{\partial}{\partial \rho_h} + \frac{\rho_{eh}^2 + \rho_h^2 - \rho_e^2}{\rho_h \rho_{eh}} \frac{\partial^2}{\partial \rho_h \partial \rho_{eh}} + \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} \right] \\ & - \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho_{eh}^2} + \frac{1}{\rho_{eh}} \frac{\partial}{\partial \rho_{eh}} \right] - \frac{2}{\sqrt{\rho_{eh}^2 + (z_e - z_h)^2}} \\ & + V_w^e(\rho_e, z_e) + V_w^h(\rho_h, z_h) \end{aligned} \quad (4.27)$$

où nous avons noté $\sigma = m_e^*/m_h^*$ le rapport des masses effectives de l'électron et du trou.

L'énergie E et la fonction d'onde enveloppe Ψ_X sont obtenues par résolution de l'équation de Schrödinger effective :

$$H \Psi_X = (\epsilon - \epsilon_g) \Psi_X = E \Psi_X \quad (4.28)$$

où ϵ_g correspond au gap entre les bandes de conduction et de valence pour le matériau de la boîte. La solution de (4.28) n'est bien évidemment pas connue. Nous aurons à nouveau recours à une détermination de l'état fondamental par la méthode

variationnelle de Ritz.

4.3.3. Fonction d'essai

Nous nous proposons à nouveau d'utiliser une fonction d'onde de la forme :

$$\Psi_X = F_e(\rho_e, z_e) F_h(\rho_h, z_h) F_{eh}(\rho_{eh}, |z_e - z_h|) \quad (4.29)$$

Cette fois, ce n'est plus le facteur de corrélation F_{eh} qui pose le plus de problème ; nous reconduisons le facteur choisi précédemment, qui, malgré ses faiblesses, autorise une limitation des calculs numériques à des intégrales de multiplicité au plus égale à 3 :

$$F_{eh}(\rho_{eh}, |z_e - z_h|) = \exp(-\alpha\rho_{eh}) \exp(-\gamma(z_e - z_h)^2) \quad (4.30)$$

L'élément nouveau est le fait de ne plus disposer de solution analytique du problème à une particule. Nous nous contenterons d'une fonction d'onde électronique plus imparfaite :

$$F_e(\rho_e, z_e) = f_e(\rho_e) g_e(z_e) \quad (4.31)$$

qui n'est, plus modestement, qu'un produit de solutions exactes (4.4) et (4.17) dans deux cas particuliers : le disque et le puits quantique simple. Le facteur F_h est construit de la même façon.

4.3.4. Calcul variationnel de l'énergie de liaison

La fonction d'onde et l'énergie dans l'état fondamental sont toujours déterminées par la minimisation de l'énergie moyenne :

$$\langle E(\alpha, \gamma) \rangle = \frac{\langle \Psi_X | H | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} \quad (4.32)$$

par rapport aux paramètres α et γ .

L'énergie moyenne (4.32) est alors donnée par :

$$\begin{aligned} \langle E(\alpha, \gamma) \rangle = & \frac{1}{1+\sigma} [(\theta_e / R)^2 + \sigma (\theta_h / R)^2 + (\pi_e / H)^2 + \sigma (\pi_h / H)^2] \\ & - \alpha^2 + (\alpha - 2) \frac{P_3(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} - \frac{\alpha}{1+\sigma} \frac{P_4(\alpha, R) + \sigma P_5(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} \\ & + 2\gamma - 4\gamma^2 \frac{Z_2(\gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} + \frac{4\gamma}{1+\sigma} \frac{Z_3(\gamma, H) + \sigma Z_4(\gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} + \langle V_{\text{coul}} \rangle \\ & - V_e \left[1 - \frac{P_7(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} \right] \left[1 - \frac{Z_5(\gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} \right] - V_h \left[1 - \frac{P_8(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} \right] \left[1 - \frac{Z_6(\gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} \right] \end{aligned} \quad (4.33)$$

Les intégrales P_i ont été définies précédemment (4.12) ; il apparaît ici deux nouvelles intégrales de cette famille, P_7 et P_8 , qui correspondent aux fonctions F_7 et F_8 définies ci-dessous :

$$\begin{aligned} F_7(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) &= F_1(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) \theta(R - \rho_e) \\ F_8(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) &= F_1(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) \theta(R - \rho_h) \end{aligned} \quad (4.34)$$

tandis que les intégrales doubles Z_i sont définies par :

$$Z_i = \int_{-\infty}^{\infty} dz_e \int_{-\infty}^{\infty} dz_h G_i(z_e, z_h) \quad (4.35)$$

$$\begin{aligned}
 \text{avec } G_1(z_e, z_h) &= [g_e(z_e) g_h(z_h) \exp(-\gamma(z_e - z_h)^2)]^2 \\
 G_2(z_e, z_h) &= (z_e - z_h)^2 G_1(z_e, z_h) \\
 G_3(z_e, z_h) &= (z_e - z_h) g_e(z_e) g_e'(z_e) [g_h(z_h) \exp(-\gamma(z_e - z_h)^2)]^2 \\
 G_4(z_e, z_h) &= (z_h - z_e) g_h(z_h) g_h'(z_h) [g_e(z_e) \exp(-\gamma(z_e - z_h)^2)]^2 \\
 G_5(z_e, z_h) &= G_1(z_e, z_h) \theta(H/2 - |z_e|) \\
 G_6(z_e, z_h) &= G_1(z_e, z_h) \theta(H/2 - |z_h|)
 \end{aligned} \tag{4.36}$$

Elles sont tout à fait similaires aux intégrales Z_i rencontrées dans le chapitre 3, à la différence près que les bornes d'intégration sont étendues à l'infini.

4.3.4. Résultats du calcul variationnel

Les deux figures qui suivent représentent l'énergie de corrélation de l'exciton obtenues pour un pourcentage en aluminium $x = 0.15$, dans le cas d'un trou lourd ($\sigma = 0.196$).

Dans la figure (4.7), nous avons représenté l'énergie de corrélation en fonction de R pour trois valeurs de H . Il apparaît que dans chaque cas, la courbe présente un minimum pour une valeur de R voisine de 0.5 unités atomiques, soit environ 60 Angströms. En ce qui concerne la valeur de l'énergie dans la géométrie optimale, on voit que, pour une hauteur de 5 unités atomiques (600 Angströms), l'énergie de liaison atteint le double de l'énergie de liaison dans le semi-conducteur massif, tandis qu'elle atteint même 4 fois cette valeur pour une hauteur de 1 unité atomique (120 Angströms). La relative médiocrité de la fonction d'onde a pour conséquence que ces valeurs sont sous-évaluées ; ceci peut se voir pour les petites valeurs de R sur la courbe $H = 5$, qui dépasse l'ordonnée -1 correspondant au semi-conducteur massif. Pour $H = 5$, le confinement axial n'a donc pratiquement plus d'effet et le comportement est celui d'un exciton dans un fil quantique.

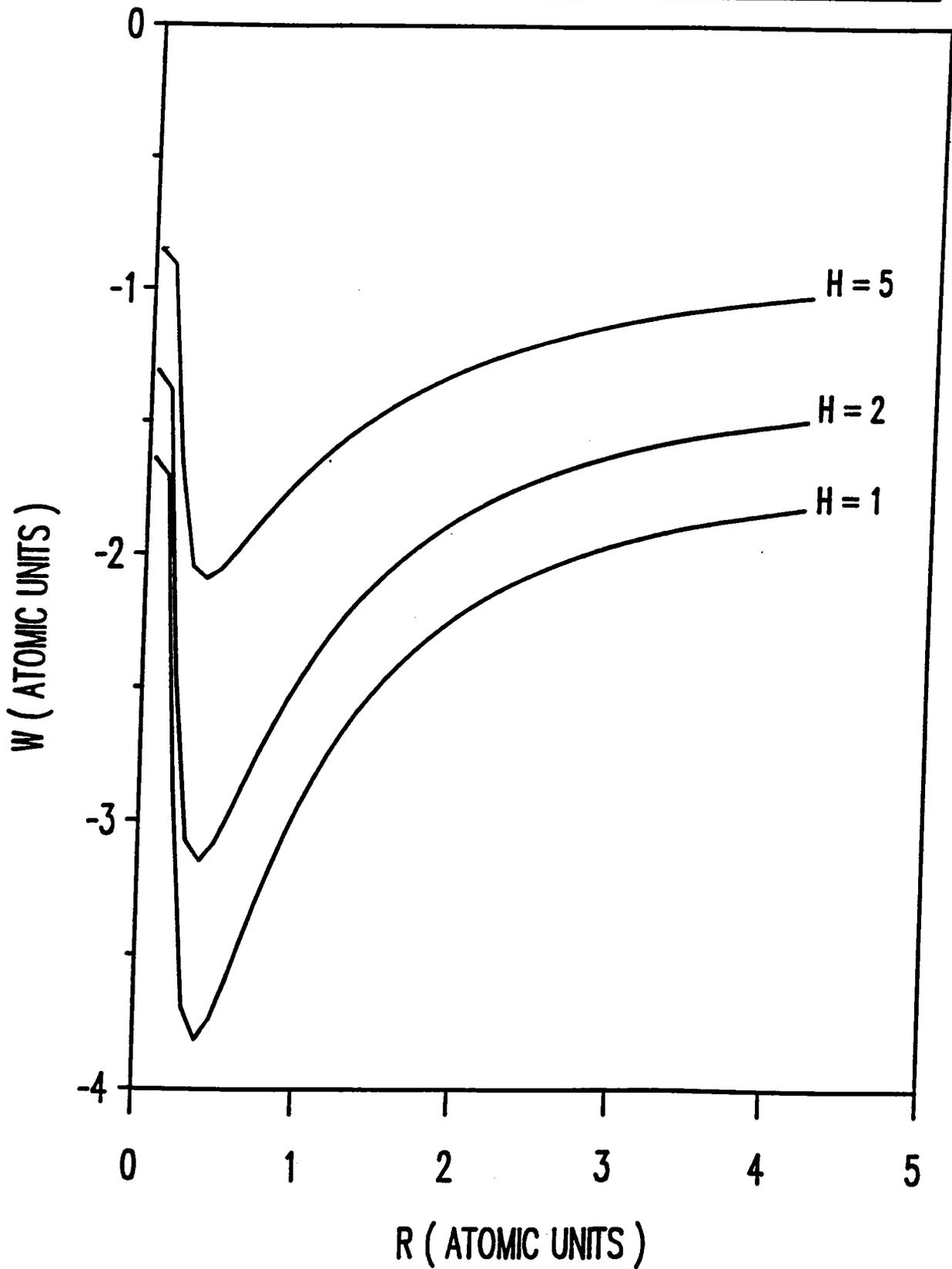


FIG. 4.7.

Energies de corrélation $W = E - U$ tracées en fonction du rayon R pour un exciton confiné dans un cylindre pour différentes valeurs de H ($\sigma = 0,196$ et $x = 0,15$).

Dans la figure (4.8), nous représentons l'énergie de corrélation en fonction de H pour quatre valeurs de R . Les courbes présentent à nouveau toutes un minimum pour des valeurs de H de l'ordre de 60 à 80 Angströms.

Si l'on compare ces courbes à celles de la figure précédente, on peut constater que les minima sont moins prononcés. L'influence de la hauteur est moins grande que celle du rayon. Ce phénomène pouvait déjà être constaté dans le modèle du puits infini car l'énergie de corrélation tend vers $-\infty$ lorsque R tend vers zéro à H fixée (figure 3.4), tandis qu'elle reste bornée lorsque H tend vers zéro à R fixé (figure 3.5). On peut attribuer cette différence au fait qu'une variation de rayon joue sur 2 dimensions, tandis qu'une variation de hauteur n'en affecte qu'une seule.

Pour $R = 4$ unités atomiques (500 Angströms), il n'y a pratiquement plus de confinement latéral ; nous nous retrouvons pratiquement dans le cas d'un puits quantique simple.

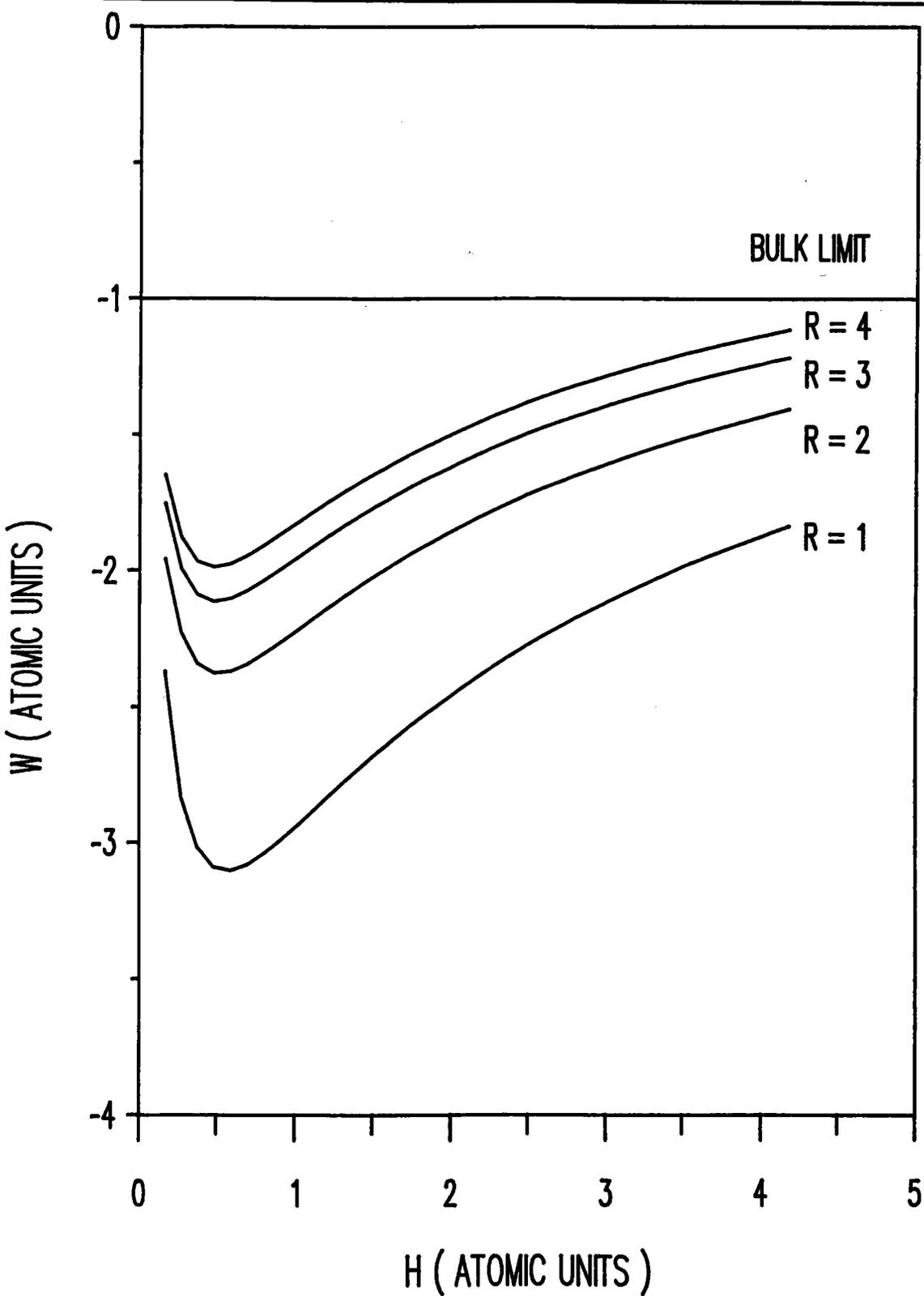


FIG. 4.8.

Energies de corrélation $W = E - U$ en fonction de la hauteur H pour un exciton confiné dans un cylindre pour différentes valeurs de R ($\sigma = 0,196$ et $x = 0,15$).

Dans les deux figures qui suivent, nous représentons respectivement l'écart quadratique latéral électron-trou

$$\rho_{eh}^2 = \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2}. \quad (4.37)$$

et l'écart quadratique axial électron-trou :

$$z_{eh}^2 = \sqrt{(z_e - z_h)^2}. \quad (4.38)$$

On peut calculer analytiquement (cf annexe D) les écarts quadratiques latéraux dans deux cas limites : le cristal massif 3D et le cas strictement bidimensionnel ; on obtient respectivement :

$$\rho_{eh}^{(2)3D} = \sqrt{2} a_X^{3D} . \quad (4.39)$$

et
$$\rho_{eh}^{(2)2D} = \sqrt{\frac{3}{8}} a_X^{3D} \simeq 0.61 a_X^{3D} . \quad (4.40)$$

Les courbes représentées sur la figure (4.9) sont relatives à un confinement dans un cylindre ou un disque de GaAs environné de $Ga_xAl_{1-x}As$, pour $x = 0.15$, et dans le cas d'une paire électron-trou lourd. Elles montrent, aussi bien dans le cas du disque, que pour différentes hauteurs de cylindre, que cet écart latéral présente un minimum pour une valeur de R dépendant peu de H , et voisine de la valeur rendant minimale l'énergie de corrélation (environ 60 Angströms). La valeur de cet écart minimal est un peu plus faible dans le cas du disque (47 Angströms), pour lequel le mouvement des particules est bidimensionnel, que dans le cas du cylindre (60 Angströms), où il présente la propriété remarquable de ne pratiquement pas dépendre de la hauteur H . L'extrapolation "visuelle" de la courbe relative au disque dans les limites $R \rightarrow 0$ et $R \rightarrow \infty$ semble en accord avec la limite théorique de $0.61 a_X^{3D} \simeq 72$ Angströms. En revanche, pour les grandes valeurs de H , les mêmes limites conduisent à un écart quadratique latéral dépassant la valeur correcte $1.4 a_X^{3D} \simeq 170$ Angströms. Ceci situe une des limites de validité de notre fonction d'onde.

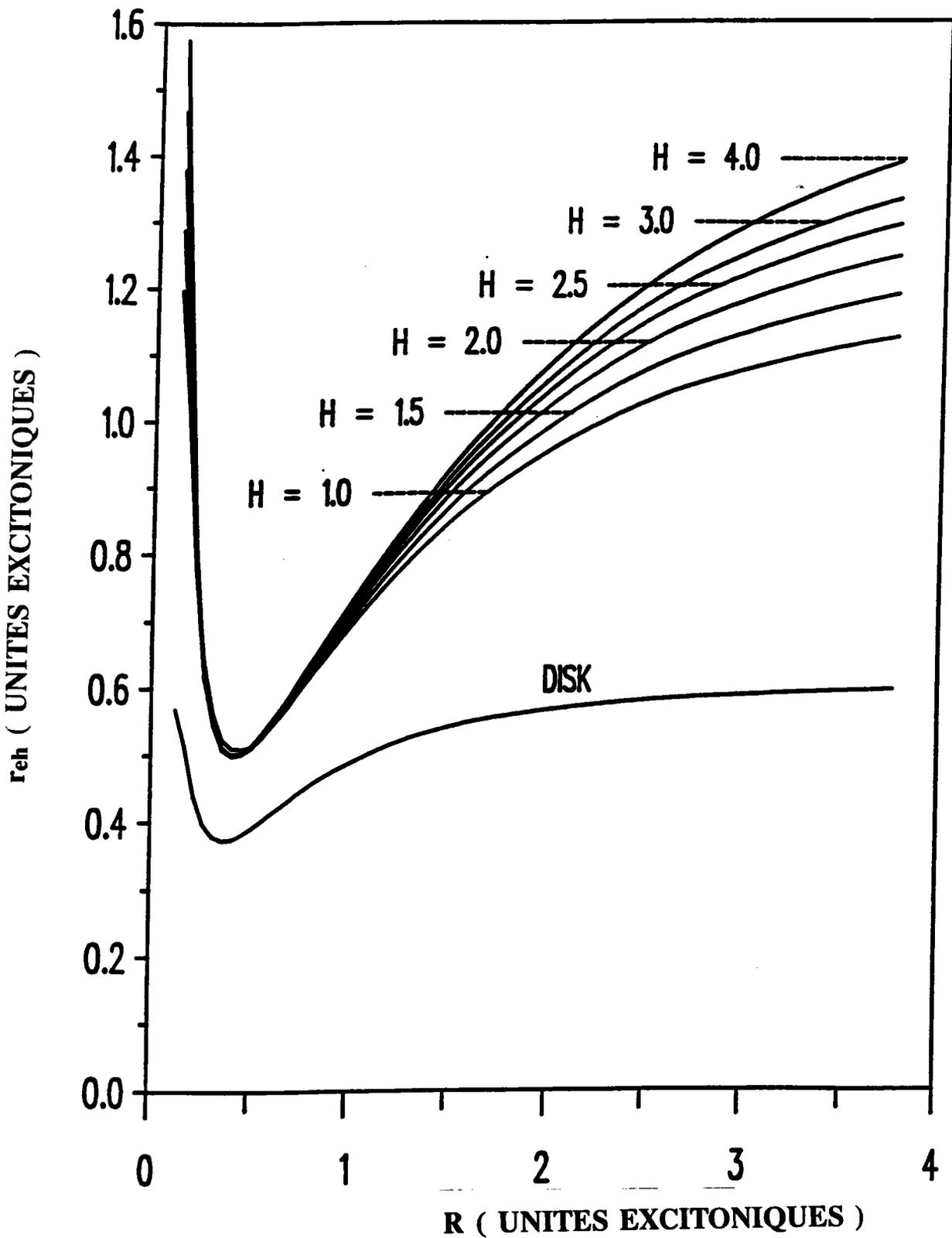


FIG. 4.9.

Ecart latéral quadratique moyen r_{eh} tracé en fonction du rayon R pour un exciton confiné dans un cylindre pour différentes valeurs de H , et dans le modèle du disque ($\sigma = 0,196$ et $x = 0,15$).

L'écart quadratique axial n'a pas d'intérêt dans la limite strictement bidimensionnelle, puisqu'il est alors rigoureusement nul. Il reste calculable dans le cas du cristal massif 3D (cf annexe D).

$$z_{eh}^{(2)3D} = a_X^{3D} \quad (4.41)$$

Les courbes représentées sur la figure (4.10) sont relatives à un confinement dans un cylindre de GaAs noyé dans un cristal de $Ga_xAl_{1-x}As$, pour $x = 0.15$, et dans le cas d'une paire électron-trou lourd. Elles montrent également un minimum de l'écart quadratique axial, pour une valeur un peu plus élevée du rayon du cylindre. Ce minimum est moins marqué que pour l'écart latéral. Pour $H = 5$ et pour $R \rightarrow 0$ ou $R \rightarrow \infty$, cet écart reste nettement inférieur à la limite attendue de 1 unité atomique, ce qui laisse à penser que, contrairement à l'écart latéral qui était surévalué, l'écart axial est dans ces conditions peut être sous-évalué. Toutefois, dans une étude conduite dans le cadre d'un potentiel de confinement infini (Kayanuma 1991), les courbes relatives à l'écart axial sont encore très en dessous de l'asymptote, même pour des valeurs de R et H plus importantes (1000 Angströms).

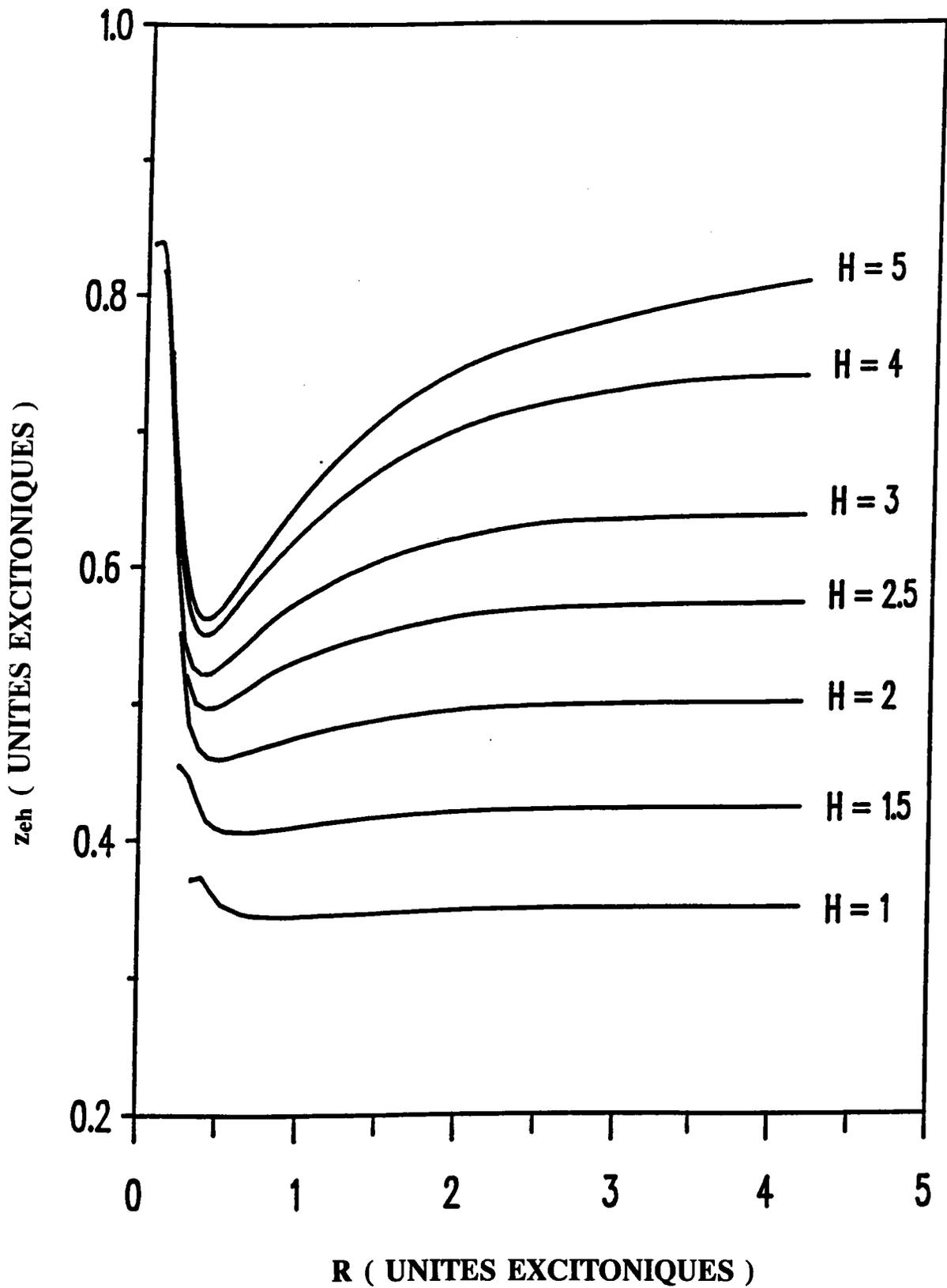


FIG. 4.10.

Ecart axial quadratique moyen z_{eh} tracé en fonction du rayon R pour un exciton confiné dans un cylindre pour différentes valeurs de H , et dans le modèle du disque ($\sigma = 0,196$ et $x = 0,15$).

4.4. CONCLUSION

Notre étude montre que, quel que soit le critère retenu, énergie de liaison ou géométrie de la paire électron-trou, l'effet du confinement est d'augmenter la corrélation coulombienne. Mais, contrairement aux prévisions du modèle du puits de potentiel infini, cette augmentation n'est pas maximale pour des dimensions tendant vers 0, mais pour des dimensions de l'ordre de 0,5 u.a. à 1 u.a., soit de 6 nm à 12 nm, selon les critères envisagés, et selon qu'il s'agit de R ou de H . En ce qui concerne H , ces dimensions peuvent facilement être obtenues dans l'état actuel des technologies de fabrication, puisqu'il est actuellement possible de réaliser des monocouches. En revanche, elles sont un peu en deçà des valeurs couramment réalisables en ce qui concerne R (30 à 300 nm par interdiffusion sélective sous encapsulant de silice ; Pépin *et al* , 1992). Pour obtenir une augmentation maximale de la corrélation coulombienne, ce qui permet d'espérer multiplier par 4 celle du matériau massif, il semble donc souhaitable de travailler à $H \simeq 0,7$ u.a. $\simeq 8,5$ nm, en cherchant à se rapprocher de la valeur optimale de R qui est alors de 0,45 u.a. $\simeq 5,5$ nm.

CONCLUSION GENERALE

Nous avons étudié l'état fondamental d'un exciton dans une boîte quantique de géométrie cylindrique.

Dans le premier chapitre, nous avons rappelé les méthodes utilisées dans les semi-conducteurs massifs : les approximations de Born-Oppenheimer, Hartree-Fock et de la fonction enveloppe qui ont été adaptées aux milieux confinés.

Dans le second chapitre, nous avons passé en revue diverses géométries de confinement pour lesquelles l'approximation de la fonction enveloppe a été appliquée avec succès. Nous avons décrit les arguments heuristiques guidant les auteurs dans leurs choix de fonction d'onde.

Dans le troisième chapitre, nous avons décrit notre premier modèle pour l'état fondamental d'un exciton soumis à un confinement par une boîte de géométrie cylindrique. Dans cette première approche, le confinement est modélisé par un puits de potentiel infini. Nous avons construit une fonction d'onde simple en nous inspirant des travaux cités au chapitre 2 concernant les autres géométries de confinement. Par une approche variationnelle, nous avons déterminé l'état fondamental de l'exciton confiné dans une boîte cylindrique. A cette occasion, nous avons mis l'accent sur l'énergie que nous avons appelé *énergie de corrélation* qui nous a permis d'examiner les cas limites $R \rightarrow 0$, $R \rightarrow \infty$, $H \rightarrow 0$, $H \rightarrow \infty$.

La limite des petites dimensions dans le modèle du puits infini est physiquement inacceptable, car elle conduit à une énergie de corrélation non bornée. Aussi avons-nous envisagé dans le chapitre 4 un modèle de puits carré fini. Après avoir discuté du choix de la fonction d'essai, nous avons donné les principales étapes du calcul variationnel. Nous avons montré qu'il existe une géométrie optimale pour une boîte d'arséniure de gallium enchâssée dans de l'arséniure aluminure de gallium pour laquelle l'énergie de liaison des excitons est minimale (maximale en valeur absolue). Cette géométrie correspond à une hauteur H voisine de 0.7 u.a., soit 8.5 nm pour les

Conclusion

trous lourds, et à un rayon de 0.5 u.a. soit 6 nm. L'énergie de liaison des excitons (4.84 meV dans le cas du trou lourd et 3.39 meV dans le cas du trou léger pour un cristal 3D) peut alors être renforcée d'un facteur multiplicatif de 4 dans la géométrie optimale. Cette énergie se rapproche de l'énergie $k_B T \simeq 26$ meV caractéristique des processus thermiques à température ambiante.

Dans la perspective d'utilisation de boîtes quantiques pour réaliser des microlasers, nous envisageons ultérieurement de poursuivre notre étude énergétique par une étude des propriétés optiques. On s'attend à une force d'oscillateur maximale pour des dimensions qui optimisent la liaison électron-trou. On peut en attendre une amélioration importante des propriétés optiques, mais beaucoup plus limitée que celle qui est suggérée par le modèle du puits infini (Kayanuma 1991) qui prévoit une force d'oscillateur qui tend vers l'infini lorsque les dimensions de boîtes tendent vers 0.

Dans le modèle du puits fini, l'effet tunnel rend également possibles des phénomènes collectifs mettant en jeu plusieurs boîtes, dont nous n'avons pas abordé l'étude. Or, bien qu'il semble que l'on puisse expérimentalement isoler des phénomènes relatifs à un point quantique unique (Que 1992), les expérimentateurs disposent d'échantillons comportant un grand nombre de boîtes. Il y a donc là une autre direction possible de développement pour nos travaux.

**PARAMETRAGE GEOMETRIQUE D'UN EXCITON
DANS UNE BOITE QUANTIQUE CYLINDRIQUE**

Dans cette annexe sont exposés les détails des calculs utilitaires relatifs aux coordonnées qui sont utilisées dans les chapitres 3 et 4 :

- choix et définition des coordonnées adaptées à l'étude d'un système de deux particules soumises à un potentiel de confinement à géométrie cylindrique ;
- expression de l'Hamiltonien dans ce système de coordonnées ;
- expression de l'intégrale sur l'espace de configuration des deux particules d'une fonction invariante par rotation globale du système autour de l'axe du cylindre.

A.1. Paramétrage géométrique d'une particule

La description de la position d'une particule comporte trois paramètres, qui peuvent être les coordonnées cartésiennes (x, y, z) , cylindriques (ρ, ϕ, z) , ou sphériques (r, θ, ϕ) . Dans une boîte cylindrique, il est naturel de retenir les coordonnées cylindriques, qui permettent d'exploiter les propriétés d'invariance par rotation du cylindre autour de son axe.

A.2. Paramétrage géométrique d'un système de deux particules

Le paramétrage le plus immédiat d'un système de deux particules 1 et 2 consiste à reprendre séparément le paramétrage de chacune des particules constituant le système ; dans le cas d'un confinement cylindrique, nous sommes amenés au paramétrage $(\rho_1, \phi_1, z_1, \rho_2, \phi_2, z_2)$.

L'hamiltonien est invariant par rotation globale du système autour de l'axe du cylindre. Le paramétrage précédent n'exploite pas cette propriété d'invariance. Introduisons les angles $\chi = \phi_2 - \phi_1$ et $\phi = (\phi_1 + \phi_2)/2$. La correspondance entre (ϕ_1, ϕ_2) et (χ, ϕ) est bijective car $\phi_1 = \phi - \chi/2$ et $\phi_2 = \phi + \chi/2$. Ce paramétrage est donc tout à fait licite et permet d'exploiter commodément l'invariance par rotation du système : elle se traduit par une fonction d'onde dans l'état fondamental indépendante de ϕ , c'est-à-dire dépendant des 5 paramètres $(\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \chi)$.

Toutefois, il peut sembler préférable de disposer d'une fonction d'onde dépendant de paramètres ayant chacun les dimensions d'une longueur. Il convient alors de remplacer χ par une longueur ; c'est le cas de la distance ρ des projections des positions des deux particules dans un plan perpendiculaire à l'axe du cylindre (Fig A.1). Cette distance s'exprime en fonction de l'angle χ par :

$$\rho = \sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2\cos\chi} \quad (\text{A.1})$$

C'est ce que nous appellerons le paramétrage de Hylleraas, car il s'inspire du paramétrage utilisé lors de l'étude de l'Helium (Hylleraas 1929). Le défaut de ce paramétrage est de ne plus être bijectif, car deux valeurs de χ conduisent à une même valeur de ρ . La donnée des 5 paramètres $(\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho)$ conduit non pas à une configuration mais à deux configurations du système (à une rotation globale d'angle ϕ près). La figure A.2 montre deux configurations distinctes correspondant à un même jeu de paramètres.

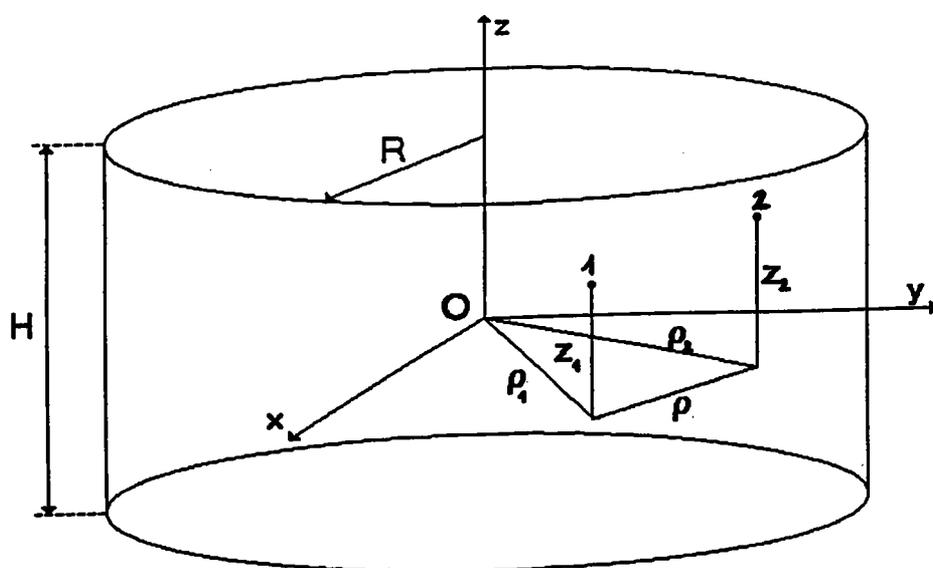


FIG. A.1.

Paramétrage géométrique d'un système de deux particules 1 et 2 localisées dans un cylindre.

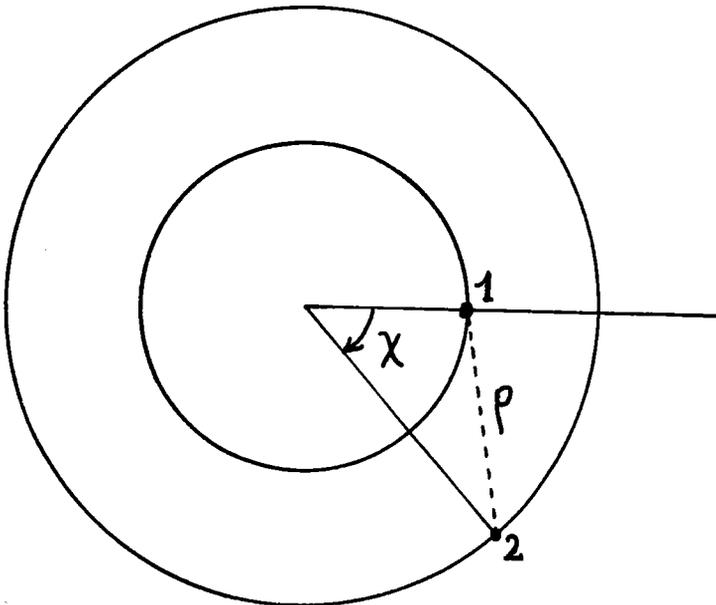
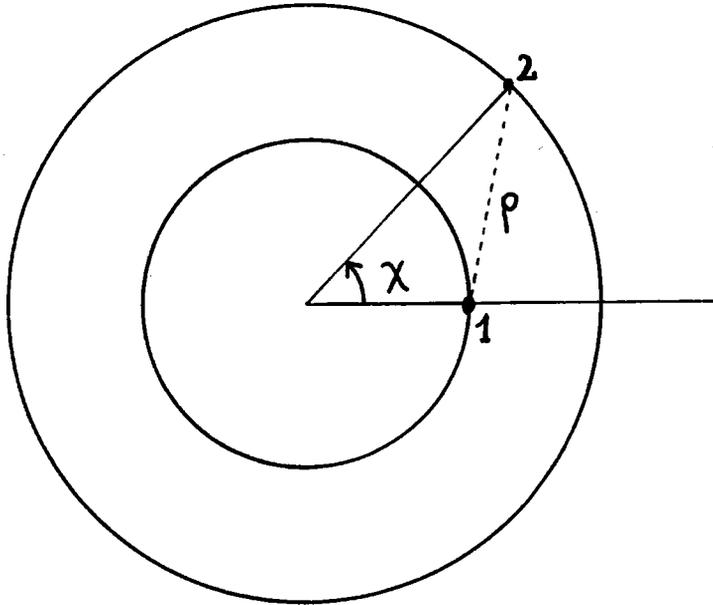


FIG. A.2.

Configurations distinctes correspondant à un même jeu de paramètres.

A.3. Expression de l'opérateur hamiltonien en coordonnées de Hylleraas dans le cas particulier d'une fonction d'onde indépendante de ϕ

Comme nous ne nous intéressons qu'à l'état fondamental, nous nous limitons à une fonction d'onde indépendante de ϕ , soit de la forme :

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = F(\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho) \quad (\text{A.2})$$

En désignant par $V_{\mathbf{w}}^1$ et $V_{\mathbf{w}}^2$ les potentiels de confinement respectifs des deux particules, l'hamiltonien est de la forme :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{\kappa |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + V_{\mathbf{w}}^1(\mathbf{r}_1) + V_{\mathbf{w}}^2(\mathbf{r}_2) \quad (\text{A.3})$$

avec, en coordonnées cartésiennes :

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \quad (\text{A.4})$$

Evaluons les dérivées partielles successives par rapport à x_1 en utilisant le paramétrage de Hylleraas :

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x_1} = \frac{\partial \rho_1}{\partial x_1} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_1} + \frac{\partial \rho}{\partial x_1} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} = \frac{x_1}{\rho_1} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_1} + \frac{x_1 - x_2}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \quad (\text{A.5})$$

donc

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_1^2} = \frac{\partial}{\partial x_1} \left[\frac{x_1}{\rho_1} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_1} + \frac{x_1 - x_2}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right] \quad (\text{A.6})$$

soit, en explicitant la dérivée des termes dans le crochet :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_1^2} &= \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_1} - \frac{x_1}{\rho_1^2} \frac{\partial \rho_1}{\partial x_1} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_1} + \frac{x_1}{\rho_1} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \rho_1} \right) \\
&+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} - \frac{(x_1-x_2)^2}{\rho^3} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{(x_1-x_2)x_1}{\rho \rho_1} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_1} + \frac{(x_1-x_2)^2}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} \\
&= \left(1 - \frac{x_1^2}{\rho_1^2} \right) \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_1} + \frac{x_1^2}{\rho_1^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_1^2} + \frac{2(x_1-x_2)x_1}{\rho \rho_1} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_1} \\
&+ \left(1 - \frac{(x_1-x_2)^2}{\rho^2} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{(x_1-x_2)^2}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} \tag{A.7}
\end{aligned}$$

En procédant de même, on obtient pour la coordonnée y_1 :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y_1^2} &= \left(1 - \frac{y_1^2}{\rho_1^2} \right) \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_1} + \frac{y_1^2}{\rho_1^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_1^2} + \frac{2(y_1-y_2)y_1}{\rho \rho_1} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_1} \\
&+ \left(1 - \frac{(y_1-y_2)^2}{\rho^2} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{(y_1-y_2)^2}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} \tag{A.8}
\end{aligned}$$

L'opérateur ∇_1^2 appliqué à Ψ s'exprime ainsi par :

$$\begin{aligned}
\nabla_1^2 \Psi &= \left(2 - \frac{\rho_1^2}{\rho_1^2} \right) \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_1} + \frac{\rho_1^2}{\rho_1^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_1^2} + \frac{2(x_1^2 + y_1^2 - x_1 x_2 - y_1 y_2)}{\rho \rho_1} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_1} \\
&+ \left(2 - \frac{\rho^2}{\rho^2} \right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{\rho^2}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \\
&= \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_1} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_1^2} + \frac{2(\rho_1^2 - x_1 x_2 - y_1 y_2)}{\rho \rho_1} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_1} \\
&+ \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \tag{A.9}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{or } \rho^2 &= (x_1-x_2)^2 + (y_1-y_2)^2 \\
&= x_1^2 - 2x_1x_2 + x_2^2 + y_1^2 - 2y_1y_2 + y_2^2 \\
&= \rho_1^2 + \rho_2^2 - 2(x_1x_2 + y_1y_2) \tag{A.10}
\end{aligned}$$

$$\text{donc } 2(x_1x_2 + y_1y_2) = \rho_1^2 + \rho_2^2 - \rho^2 \tag{A.11}$$

soit finalement :

$$\begin{aligned} \nabla_1^2 \Psi = & \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_1} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_1^2} + \frac{2(\rho^2 + \rho_1^2 - \rho_2^2)}{\rho \rho_1} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_1} \\ & + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z_1^2} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

et de même :

$$\begin{aligned} \nabla_2^2 \Psi = & \frac{1}{\rho_2} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho_2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho_2^2} + \frac{2(\rho^2 + \rho_2^2 - \rho_1^2)}{\rho \rho_2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho \partial \rho_2} \\ & + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z_2^2} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

L'Hamiltonien prend donc pour expression :

$$\begin{aligned} H = & -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{\kappa \sqrt{\rho^2 + (z_1 - z_2)^2}} + V_w^1(\rho_1, z_1) + V_w^2(\rho_2, z_2) \\ = & -\frac{\hbar^2}{2m_1} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho_1^2} + \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial}{\partial \rho_1} + \frac{2(\rho^2 + \rho_1^2 - \rho_2^2)}{\rho \rho_1} \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \rho_1} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} \right] \\ & - \frac{\hbar^2}{2m_2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho_2^2} + \frac{1}{\rho_2} \frac{\partial}{\partial \rho_2} + \frac{2(\rho^2 + \rho_2^2 - \rho_1^2)}{\rho \rho_2} \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \rho_2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \right] \\ & - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \right] - \frac{e^2}{\kappa \sqrt{\rho^2 + (z_1 - z_2)^2}} + V_w^1(\rho_1, z_1) + V_w^2(\rho_2, z_2) \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Il en résulte que $H\Psi$ est, comme Ψ , une fonction des seules variables $\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho$. Nous nous proposons de vérifier que ce paramétrage, bien que ne décrivant pas bijectivement les configurations du système, permet de calculer les valeurs moyennes d'une large catégorie d'observables dans l'état Ψ .

A.4. Intégration d'une fonction $F(\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho)$ sur l'espace de configuration

A condition de n'envisager que des opérateurs A faisant intervenir les seules variables $\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho$, $A\Psi$ est une fonction de ces 5 variables. Le problème est alors de montrer que l'intégrale d'une fonction $F(\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho)$ lorsque les particules 1 et 2 décrivent tout l'espace (en fait l'intérieur de la boîte cylindrique lorsque le potentiel de confinement est infini à l'extérieur de la boîte), peut se mettre sous la forme d'une intégrale quintuple :

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dz_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz_2 F(\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho) \\ &= \int_0^{+\infty} d\rho_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dz_1 \int_0^{+\infty} d\rho_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz_2 \int_{|\rho_2 - \rho_1|}^{\rho_1 + \rho_2} d\rho F(\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho) W(\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho) \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

où W est une fonction de pondération que nous déterminerons ; nous verrons qu'elle est en fait indépendante de z_1 et de z_2 .

Lorsque nous passons des coordonnées cartésiennes aux coordonnées cylindriques, il apparaît une fonction de pondération $W_1(\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho) = \rho_1 \rho_2$, qui est égale au jacobien du changement de variables.

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dz_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz_2 F(\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho) \\ &= \int_0^{+\infty} \rho_1 d\rho_1 \int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dz_1 \int_0^{+\infty} \rho_2 d\rho_2 \int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz_2 F(\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho) \\ &= \int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_1 \int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_2 f(\cos(\phi_2 - \phi_1)) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

avec

$$f(\cos(\phi_2 - \phi_1)) = g(\rho) = \int_0^{+\infty} \rho_1 d\rho_1 \int_{-\infty}^{+\infty} dz_1 \int_0^{+\infty} \rho_2 d\rho_2 \int_{-\infty}^{+\infty} dz_2 F(\rho_1, z_1, \rho_2, z_2, \rho) \quad (\text{A.17})$$

car ρ est une fonction de $\cos(\phi_2 - \phi_1)$ donnée par l'expression (A.1).

La fonction à intégrer étant une fonction de ϕ_2 périodique et de période 2π , nous pouvons effectuer l'intégration sur la période $[-\pi - \phi_1; \pi - \phi_1]$ au lieu de $[-\pi, \pi]$ sans changer la valeur de l'intégrale :

$$\int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_1 \int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_2 f(\cos(\phi_2 - \phi_1)) = \int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_1 \int_{-\pi - \phi_1}^{+\pi - \phi_1} d\phi_2 f(\cos(\phi_2 - \phi_1)) \quad (\text{A.18})$$

soit, en posant $\chi = \phi_2 - \phi_1$:

$$\int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_1 \int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_2 f(\cos(\phi_2 - \phi_1)) = \int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_1 \int_{-\pi}^{+\pi} d\chi f(\cos\chi) \quad (\text{A.19})$$

Dans le second membre, l'intégration par rapport à ϕ_1 est alors triviale :

$$\int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_1 \int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_2 f(\cos(\phi_2 - \phi_1)) = 2\pi \int_{-\pi}^{+\pi} d\chi f(\cos\chi) \quad (\text{A.20})$$

Comme nous intégrons une fonction paire χ sur un intervalle symétrique par rapport à l'origine, cette intégrale peut se réécrire :

$$\int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_1 \int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_2 f(\cos(\phi_2 - \phi_1)) = 4\pi \int_0^{+\pi} d\chi f(\cos\chi) \quad (\text{A.21})$$

Il reste maintenant à passer de la variable χ à la variable ρ ; grâce à la propriété de parité précédente, la correspondance est bijective entre χ et ρ et l'on a, en posant $f(\cos\chi) = g(\rho)$:

$$\int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_1 \int_{-\pi}^{+\pi} d\phi_2 f(\cos(\phi_2 - \phi_1)) = 4\pi \int_{\rho(0)}^{\rho(\pi)} \frac{d\chi}{d\rho} g(\rho) d\rho \quad (\text{A.22})$$

Calculons $d\rho/d\chi$ en dérivant l'expression (A.1) :

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{d\chi} &= \frac{d}{d\chi} [\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos\chi]^{1/2} \\ &= \frac{\rho_1\rho_2 \sin\chi}{[\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos\chi]^{1/2}} \\ &= \frac{\rho_1\rho_2}{\rho} \sin\chi \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

$$\text{or } \cos\chi = \frac{\rho_1^2 + \rho_2^2 - \rho^2}{2\rho_1\rho_2} \quad (\text{A.24})$$

$$\begin{aligned} \text{donc } 1 - \cos^2\chi &= \frac{4\rho_1^2\rho_2^2 - (\rho_1^2 + \rho_2^2 - \rho^2)^2}{4\rho_1^2\rho_2^2} \\ &= \frac{(2\rho_1\rho_2 - \rho_1^2 - \rho_2^2 + \rho^2)(2\rho_1\rho_2 + \rho_1^2 + \rho_2^2 - \rho^2)}{4\rho_1^2\rho_2^2} \\ &= \frac{[\rho^2 - (\rho_1 - \rho_2)^2][(\rho_1 + \rho_2)^2 - \rho^2]}{4\rho_1^2\rho_2^2} \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

$$\text{et } \frac{d\rho}{d\chi} = \frac{\sqrt{[\rho^2 - (\rho_1 - \rho_2)^2][(\rho_1 + \rho_2)^2 - \rho^2]}}{2\rho} \quad (\text{A.26})$$

L'intégrale à calculer prend donc pour expression :

$$4\pi \int_{\rho(0)}^{\rho(\pi)} \frac{d\chi}{d\rho} g(\rho) d\rho = 4\pi \int_{|\rho_2 - \rho_1|}^{\rho_1 + \rho_2} \frac{2\rho g(\rho) d\rho}{\sqrt{[\rho^2 - (\rho_1 - \rho_2)^2][(\rho_1 + \rho_2)^2 - \rho^2]}} \quad (\text{A.27})$$

En reprenant l'expression (A.16) de $g(\rho)$, on vérifie que les intégrales sur l'espace de configuration des deux particules sont bien de la forme (A.14) avec une fonction de pondération :

$$W(\rho_1, \rho_2, \rho) = \frac{8\pi\rho\rho_1\rho_2}{\sqrt{[\rho^2 - (\rho_1 - \rho_2)^2][(\rho_1 + \rho_2)^2 - \rho^2]}} \quad (\text{A.28})$$

**DETAIL DES CALCULS ANALYTIQUES
DANS LE CAS DU PUIT INFINI**

Dans cette annexe sont exposés les détails des calculs de dérivées partielles et d'intégrales multiples intervenant dans l'étude variationnelle de l'exciton confiné dans une boîte cylindrique par un potentiel de confinement infini.

B.1. Dérivées de la fonction d'essai

B.1.1. Expression des opérateurs de dérivation

L'écriture de l'équation de Schrödinger dans le système de coordonnées $\rho_1, \rho_2, \rho, \chi, z_1, z_2$ définies dans l'annexe A nécessite de savoir exprimer les laplaciens respectifs $\Delta_1 F$ et $\Delta_2 F$ d'une fonction $F(\rho_1, \rho_2, \rho, \chi, z_1, z_2)$ par rapport aux coordonnées des particules 1 et 2.

Nous connaissons l'expression des laplaciens d'une fonction $G(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2)$. La difficulté réside uniquement dans les coordonnées latérales $\rho_1, \rho_2, \rho, \chi$, à cause du couplage par l'intermédiaire des paramètres ρ et χ des coordonnées des deux particules. Ce couplage n'existe pas entre les coordonnées axiales z_1 et z_2 . Il suffit donc, pour résoudre tous les cas que nous aurons à traiter ultérieurement, d'envisager une fonction de la forme $F(\rho_1, \rho_2, \rho, \chi)$. Comme nous l'avons précisé dans l'annexe

A, n'aurons à appliquer notre calcul qu'à des fonctions d'essai indépendantes de l'angle χ . Il nous suffit donc en fait de déterminer l'expression du laplacien d'une fonction $F(\rho_1, \rho_2, \rho)$.

B.1.1.a. Dérivées premières de F

Le calcul est fastidieux mais élémentaire ; les variables ρ_1 et ρ étant des fonctions de x_1 , tandis que ρ_2 est indépendante de x_1 , on a :

$$\frac{\partial F}{\partial x_1} = \frac{\partial \rho_1}{\partial x_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + \frac{\partial \rho}{\partial x_1} \frac{\partial F}{\partial \rho} = \frac{x_1}{\rho_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + \frac{x_1 - x_2}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} \quad (\text{B.1})$$

De même :

$$\frac{\partial F}{\partial y_1} = \frac{\partial \rho_1}{\partial y_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + \frac{\partial \rho}{\partial y_1} \frac{\partial F}{\partial \rho} = \frac{y_1}{\rho_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + \frac{y_1 - y_2}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho}$$

$$\frac{\partial F}{\partial x_2} = \frac{\partial \rho_2}{\partial x_2} \frac{\partial F}{\partial \rho_2} + \frac{\partial \rho}{\partial x_2} \frac{\partial F}{\partial \rho} = \frac{x_2}{\rho_2} \frac{\partial F}{\partial \rho_2} + \frac{x_2 - x_1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho}$$

$$\frac{\partial F}{\partial y_2} = \frac{\partial \rho_2}{\partial y_2} \frac{\partial F}{\partial \rho_2} + \frac{\partial \rho}{\partial y_2} \frac{\partial F}{\partial \rho} = \frac{y_2}{\rho_2} \frac{\partial F}{\partial \rho_2} + \frac{y_2 - y_1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} \quad (\text{B.2})$$

Par commodité, nous conservons provisoirement cette expression hybride contenant à la fois les anciennes et les nouvelles coordonnées ; nous n'éliminerons complètement les variables x_1, x_2, y_1 et y_2 qu'en fin de calcul, lors de l'expression de l'opérateur Laplacien.

B.1.1.b. Dérivées secondes de F

Il suffit de dériver $\frac{\partial F}{\partial x_1}$ une nouvelle fois par rapport à x_1 en utilisant le même procédé ; on obtient :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 F}{\partial x_1^2} &= \frac{\partial}{\partial x_1} \left[\frac{x_1}{\rho_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + \frac{x_1 - x_2}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} \right] \\
&= \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + x_1 \left[-\frac{1}{\rho_1^2} \right] \frac{\partial \rho_1}{\partial x_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + \frac{x_1}{\rho_1} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial F}{\partial \rho_1} \right) \\
&\quad + \frac{1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} + (x_1 - x_2) \left[-\frac{1}{\rho^2} \right] \frac{\partial \rho}{\partial x_1} \frac{\partial F}{\partial \rho} + \frac{x_1}{\rho_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + \frac{x_1 - x_2}{\rho} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial F}{\partial \rho} \right) \\
&= \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} - \frac{x_1^2}{\rho_1^3} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + \frac{x_1^2}{\rho_1^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho_1^2} + \frac{x_1(x_1 - x_2)}{\rho_1 \rho} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho \partial \rho_1} \\
&\quad + \frac{1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} - \frac{(x_1 - x_2)^2}{\rho^3} \frac{\partial F}{\partial \rho} + \frac{(x_1 - x_2)x_1}{\rho \rho_1} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho_1 \partial \rho} + \frac{(x_1 - x_2)^2}{\rho^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} \\
&= \left[1 - \frac{x_1^2}{\rho_1^2} \right] \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + \frac{x_1^2}{\rho_1^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho_1^2} + \frac{2x_1(x_1 - x_2)}{\rho_1 \rho} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho \partial \rho_1} \\
&\quad + \left[1 - \frac{(x_1 - x_2)^2}{\rho^2} \right] \frac{1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} + \frac{(x_1 - x_2)^2}{\rho^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} \tag{B.3}
\end{aligned}$$

De même, on obtient :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 F}{\partial y_1^2} &= \left[1 - \frac{y_1^2}{\rho_1^2} \right] \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + \frac{y_1^2}{\rho_1^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho_1^2} + \frac{2y_1(y_1 - y_2)}{\rho_1 \rho} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho \partial \rho_1} \\
&\quad + \left[1 - \frac{(y_1 - y_2)^2}{\rho^2} \right] \frac{1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} + \frac{(y_1 - y_2)^2}{\rho^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} \tag{B.4}
\end{aligned}$$

B.1.1.c. Laplacien de F

Remarquons que :

$$x_1^2 + y_1^2 = \rho_1^2 \quad \text{et} \quad (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 = \rho^2 \quad (\text{B.5})$$

Le laplacien par rapport aux coordonnées de la particule 1 peut alors s'expliciter par :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial y_1^2} &= \left(2 - \frac{\rho_1^2}{\rho_1^2}\right) \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + \frac{\rho_1^2}{\rho_1^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho_1^2} + 2 \frac{x_1^2 + y_1^2 - x_1 x_2 - y_1 y_2}{\rho_1 \rho} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho \partial \rho_1} \\ &\quad + \left(2 - \frac{\rho^2}{\rho^2}\right) \frac{1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} + \frac{\rho^2}{\rho^2} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} \\ &= \frac{\partial^2 F}{\partial \rho_1^2} + \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} + 2 \frac{\rho_1^2 - x_1 x_2 - y_1 y_2}{\rho_1 \rho} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho \partial \rho_1} \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

or

$$\begin{aligned} \rho^2 &= (x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 = x_1^2 - 2 x_1 x_2 + x_2^2 + y_1^2 - 2 y_1 y_2 + y_2^2 \\ &= \rho_1^2 + \rho_2^2 - 2(x_1 x_2 + y_1 y_2) \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

On en déduit :

$$2(x_1 x_2 + y_1 y_2) = \rho_1^2 + \rho_2^2 - \rho^2, \quad (\text{B.8})$$

ce qui permet d'éliminer définitivement les variables x_1, x_2, y_1, y_2 :

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial y_1^2} = \frac{\partial^2 F}{\partial \rho_1^2} + \frac{1}{\rho_1} \frac{\partial F}{\partial \rho_1} + \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} + 2 \frac{\rho_2 + \rho_1^2 - \rho_2^2}{\rho_1 \rho} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho \partial \rho_1} \quad (\text{B.9})$$

Par le même procédé, on obtient l'expression suivante pour le laplacien par rapport aux coordonnées de la particule 2 :

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 F}{\partial y_2^2} = \frac{\partial^2 F}{\partial \rho_2^2} + \frac{1}{\rho_2} \frac{\partial F}{\partial \rho_2} + \frac{\partial^2 F}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial F}{\partial \rho} + 2 \frac{\rho_2 + \rho_2^2 - \rho_1^2}{\rho_2 \rho} \frac{\partial^2 F}{\partial \rho \partial \rho_2} \quad (\text{B.10})$$

Lorsque l'on aura à calculer le laplacien d'une fonction d'onde dépendant également des variables z_1 et z_2 , il suffira de rajouter respectivement les termes $\frac{\partial^2 F}{\partial z_1^2}$ et $\frac{\partial^2 F}{\partial z_2^2}$ dans les laplaciens relatifs aux coordonnées des particules 1 et 2.

B.1.2. Application à la fonction d'onde de l'opérateur énergie cinétique

B.1.2.a. Cas du disque

Il s'agit de calculer les laplaciens par rapport aux coordonnées des particules 1 et 2 de la fonction suivante :

$$\Psi_X = J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho} \quad (\text{B.11})$$

dont nous avons discuté le choix dans le chapitre 3. Le calcul des dérivées de la fonction de Bessel J_0 s'effectue à l'aide des formules de récurrence suivantes (Abramowitz 1970) :

$$\begin{aligned} J_{\nu-1}(x) + J_{\nu+1}(x) &= \frac{2\nu}{x} J_\nu(x) \\ J_{\nu-1}(x) - J_{\nu+1}(x) &= 2 J'_\nu(x) \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

d'où l'on déduit les dérivées de J_0 et J_1 :

$$J'_0(x) = -J_1(x) \quad \text{et} \quad J'_1(x) = J_0(x) - \frac{1}{x} J_1(x) \quad (\text{B.13})$$

On en déduit successivement :

- les dérivées premières de Ψ_X :

$$\frac{\partial \Psi_X}{\partial \rho} = -\alpha J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho}$$

$$\frac{\partial \Psi_X}{\partial \rho_1} = -\beta J_1(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho}$$

$$\frac{\partial \Psi_X}{\partial \rho_2} = -\beta J_0(\beta \rho_1) J_1(\beta \rho_2) e^{-\alpha \rho} \quad (\text{B.14})$$

- les dérivées secondes de Ψ_X :

$$\frac{\partial^2 \Psi_X}{\partial \rho^2} = \alpha^2 J_0(\beta \rho_1) J_0(\beta \rho_2) e^{-\alpha \rho}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_X}{\partial \rho \partial \rho_1} = \alpha \beta J_1(\beta \rho_1) J_0(\beta \rho_2) e^{-\alpha \rho}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_X}{\partial \rho \partial \rho_2} = \alpha \beta J_0(\beta \rho_1) J_1(\beta \rho_2) e^{-\alpha \rho}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_X}{\partial \rho_1^2} = -\beta^2 \left[J_0(\beta \rho_1) - \frac{1}{\beta \rho_1} J_1(\beta \rho_1) \right] J_0(\beta \rho_2) e^{-\alpha \rho}$$

$$\frac{\partial^2 \Psi_X}{\partial \rho_2^2} = -\beta^2 J_0(\beta \rho_1) \left[J_0(\beta \rho_2) - \frac{1}{\beta \rho_2} J_1(\beta \rho_2) \right] e^{-\alpha \rho} \quad (\text{B.15})$$

- les laplaciens de Ψ_X :

$$\Delta_1 \Psi_X = \left[\alpha^2 - \beta^2 - \frac{\alpha}{\rho} \right] J_0(\beta \rho_1) J_0(\beta \rho_2) e^{-\alpha \rho} + \alpha \beta \frac{\rho^2 + \rho_1^2 - \rho_2^2}{\rho \rho_1} J_1(\beta \rho_1) J_0(\beta \rho_2) e^{-\alpha \rho}$$

$$\Delta_2 \Psi_X = \left[\alpha^2 - \beta^2 - \frac{\alpha}{\rho} \right] J_0(\beta \rho_1) J_0(\beta \rho_2) e^{-\alpha \rho} + \alpha \beta \frac{\rho^2 + \rho_2^2 - \rho_1^2}{\rho \rho_2} J_0(\beta \rho_1) J_1(\beta \rho_2) e^{-\alpha \rho}$$

(B.16)

Soit T l'opérateur énergie cinétique, dont l'expression en unités atomiques est :

$$T = -\frac{1}{1+\sigma} \Delta_1 - \frac{\sigma}{1+\sigma} \Delta_2; \quad (\text{B.17})$$

son application à la fonction d'onde Ψ_X conduit à :

$$\begin{aligned}
 T\Psi_X &= \left(\beta^2 - \alpha^2 + \frac{\alpha}{\rho} \right) J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho} \\
 &- \frac{\alpha\beta}{1+\sigma} \frac{\rho^2 + \rho_1^2 - \rho_2^2}{\rho\rho_1} J_1(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho} \\
 &- \frac{\sigma\alpha\beta}{1+\sigma} \frac{\rho^2 + \rho_2^2 - \rho_1^2}{\rho\rho_2} J_0(\beta\rho_1) J_1(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho}
 \end{aligned} \tag{B.18}$$

B.1.2.b. Cas général du cylindre

Il s'agit de calculer les laplaciens par rapport aux coordonnées des particules 1 et 2 de la fonction suivante :

$$\Psi_X = J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) \exp(-\alpha\rho) \cos\left(\frac{\pi z_1}{H}\right) \cos\left(\frac{\pi z_2}{H}\right) \exp(-\gamma(z_2-z_1)^2) \tag{B.19}$$

Les termes correspondant aux dérivées par rapport à ρ , ρ_1 et ρ_2 se calculent de façon tout à fait analogue au cas du disque, tandis qu'il apparaît des termes supplémentaires provenant des dérivées par rapport à z_1 et z_2 . Ces termes ont pour expressions respectives :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial^2 \Psi_X}{\partial z_1^2} &= J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho} \cos\left(\frac{\pi z_2}{H}\right) \exp(-\gamma(z_2-z_1)^2) \\
 &\times \left[\cos\left(\frac{\pi z_1}{H}\right) \left(4\gamma^2(z_2-z_1)^2 - \frac{\pi^2}{H^2} - 2\gamma \right) + \sin\left(\frac{\pi z_1}{H}\right) \frac{4\pi\gamma}{H} (z_1-z_2) \right] \\
 \\
 \frac{\partial^2 \Psi_X}{\partial z_2^2} &= J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho} \cos\left(\frac{\pi z_1}{H}\right) \exp(-\gamma(z_2-z_1)^2) \\
 &\times \left[\cos\left(\frac{\pi z_2}{H}\right) \left(4\gamma^2(z_2-z_1)^2 - \frac{\pi^2}{H^2} - 2\gamma \right) + \sin\left(\frac{\pi z_2}{H}\right) \frac{4\pi\gamma}{H} (z_2-z_1) \right]
 \end{aligned} \tag{B.20}$$

B.2. Recensement des intégrales à calculer

B.2.1. Intégrales provenant de l'opérateur énergie cinétique

B.2.1.a. Cas du disque

$$\begin{aligned}
\Psi_X T \Psi_X &= \left(\beta^2 - \alpha^2 + \frac{\alpha}{\rho} \right) (J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho})^2 \\
&\quad - \frac{\alpha\beta}{1+\sigma} \frac{\rho^2 + \rho_1^2 - \rho_2^2}{\rho\rho_1} J_0(\beta\rho_1) J_1(\beta\rho_1) (J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho})^2 \\
&\quad - \frac{\sigma\alpha\beta}{1+\sigma} \frac{\rho^2 + \rho_2^2 - \rho_1^2}{\rho\rho_2} J_0(\beta\rho_2) J_1(\beta\rho_2) (J_0(\beta\rho_1) e^{-\alpha\rho})^2 \\
&= (\beta^2 - \alpha^2) F_1(\rho_1, \rho_2, \rho) + \alpha F_3(\rho_1, \rho_2, \rho) - \frac{\alpha}{1+\sigma} (F_4(\rho_1, \rho_2, \rho) + \sigma F_5(\rho_1, \rho_2, \rho))
\end{aligned} \tag{B.21}$$

où nous avons noté :

$$\begin{aligned}
F_1(\rho_1, \rho_2, \rho) &= (J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho})^2 \\
F_2(\rho_1, \rho_2, \rho) &= \frac{1}{\rho} (J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho})^2 \\
F_4(\rho_1, \rho_2, \rho) &= \beta \frac{\rho^2 + \rho_1^2 - \rho_2^2}{\rho\rho_1} J_0(\beta\rho_1) J_1(\beta\rho_1) (J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho})^2 \\
F_5(\rho_1, \rho_2, \rho) &= \beta \frac{\rho^2 + \rho_2^2 - \rho_1^2}{\rho\rho_2} J_0(\beta\rho_2) J_1(\beta\rho_2) (J_0(\beta\rho_1) e^{-\alpha\rho})^2
\end{aligned} \tag{B.22}$$

On en déduit la valeur moyenne de l'énergie cinétique, en intégrant sur ρ_1 , ρ_2 et ρ , avec la fonction de pondération W introduite en (A.27) :

$$\frac{\langle \Psi_X | T | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} = \beta^2 - \alpha^2 + \frac{\alpha P_3(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} - \frac{\alpha}{1+\sigma} \frac{P_4(\alpha, R) + \sigma P_5(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} \tag{B.23}$$

avec

$$P_i(\alpha, R) = \int_0^R d\rho_1 \int_0^R d\rho_2 \int_{|\rho_2 - \rho_1|}^{\rho_1 + \rho_2} d\rho F(\rho_1, \rho_2, \rho) W(\rho_1, \rho_2, \rho) \quad (\text{B.24})$$

où

$$W(\rho_1, \rho_2, \rho) = \frac{8\pi\rho\rho_1\rho_2}{\sqrt{[\rho^2 - (\rho_1 - \rho_2)^2][(\rho_1 + \rho_2)^2 - \rho^2]}} \quad (\text{B.25})$$

B.2.1.b. Cas du cylindre

On passe de la fonction d'onde du disque à celle du cylindre en multipliant la première par un facteur $\cos(\pi z_1/H) \cos(\pi z_2/H) \exp(-\gamma(z_2 - z_1)^2)$, tandis que l'opérateur énergie cinétique peut se décomposer de la façon suivante :

$$T_{\text{cylindre}} = T_{\text{disque}} + T_z \quad (\text{B.26})$$

avec, en unités atomiques :

$$T_z = -\frac{1}{1+\sigma} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} - \frac{\sigma}{1+\sigma} \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} \quad (\text{B.27})$$

L'opérateur T_{disque} n'agissant pas sur les termes dépendant de z_1 et z_2 , on a, en notant

$$G_1(z_1, z_2) = \left[\cos\left(\frac{\pi z_1}{H}\right) \cos\left(\frac{\pi z_2}{H}\right) \exp\left(-\gamma(z_2 - z_1)^2\right) \right]^2, \quad (\text{B.28})$$

on obtient

$$\Psi_X T_{\text{disque}} \Psi_X = \left[(\beta^2 - \alpha^2) F_1(\rho_1, \rho_2, \rho) + \alpha F_3(\rho_1, \rho_2, \rho) - \frac{\alpha}{1+\sigma} (F_4(\rho_1, \rho_2, \rho) + \sigma F_5(\rho_1, \rho_2, \rho)) \right] G_1(z_1, z_2) \quad (\text{B.29})$$

Les opérateurs de dérivation par rapport à z_1 et z_2 n'agissent pas sur les facteurs en ρ_1 , ρ_2 et ρ ; on a donc, de la même façon :

$$\Psi_X T_z \Psi_X = F_1(\rho_1, \rho_2, \rho) \left[\left(\frac{\pi^2}{H^2} + 2\gamma \right) G_1(z_1, z_2) - 4\gamma^2 G_2(z_1, z_2) + \frac{4\gamma}{1+\sigma} (G_3(z_1, z_2) + \sigma G_4(z_1, z_2)) \right] \quad (\text{B.30})$$

avec $G_2(z_1, z_2) = (z_1 - z_2)^2 G_1(z_1, z_2)$

$$G_3(z_1, z_2) = -\frac{\pi}{H} (z_1 - z_2) \cos\left(\frac{\pi z_1}{H}\right) \sin\left(\frac{\pi z_1}{H}\right) \left[\cos\left(\frac{\pi z_2}{H}\right) \exp\left[-\gamma(z_2 - z_1)^2\right] \right]^2$$

$$G_4(z_1, z_2) = -\frac{\pi}{H} (z_2 - z_1) \cos\left(\frac{\pi z_2}{H}\right) \sin\left(\frac{\pi z_2}{H}\right) \left[\cos\left(\frac{\pi z_1}{H}\right) \exp\left[-\gamma(z_2 - z_1)^2\right] \right]^2 \quad (\text{B.31})$$

En intégrant sur z_1 et z_2 , nous sommes amenés à introduire une nouvelle famille d'intégrales doubles :

$$Z_1(\gamma, H) = \int_{-\frac{H}{2}}^{+\frac{H}{2}} dz_1 \int_{-\frac{H}{2}}^{+\frac{H}{2}} dz_2 G_1(z_1, z_2) \quad (\text{B.32})$$

On en déduit la valeur moyenne de l'énergie cinétique, en intégrant sur ρ_1 , ρ_2 , ρ , z_1 et z_2 :

$$\frac{\langle \Psi_X | T | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} = \beta^2 - \alpha^2 + \frac{\alpha P_3(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} - \frac{\alpha}{1+\sigma} \frac{P_4(\alpha, R) + \sigma P_5(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} + \frac{\pi^2}{H^2} + 2\gamma - 4\gamma^2 \frac{Z_2(\gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} + \frac{4\gamma}{1+\sigma} \frac{Z_3(\gamma, H) + \sigma Z_4(\gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} \quad (\text{B.33})$$

B.2.2. Intégrales provenant de l'opérateur énergie potentielle coulombienne

B.2.2.a. Cas du disque

Dans la limite du disque, la distance électron-trou est directement décrite par le paramètre ρ . Le terme coulombien s'exprime donc de façon élémentaire en fonction des intégrales déjà définies.

$$\Psi_X V_{\text{coul}} \Psi_X = -\frac{2}{\rho} F_1(\rho_1, \rho_2, \rho) = -2 F_2(\rho_1, \rho_2, \rho) \quad (\text{B.34})$$

$$\frac{\langle \Psi_X | V_{\text{coul}} | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} = -2 \frac{P_2(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)}. \quad (\text{B.35})$$

B.2.2.b. Cas du cylindre

Cette fois, le terme coulombien réalise un couplage entre les coordonnées latérales ρ_1 , ρ_2 et ρ et les coordonnées axiales z_1 et z_2 par l'intermédiaire de la distance électron-trou $\sqrt{\rho^2 + (z_2 - z_1)^2}$.

$$\Psi_X V_{\text{coul}} \Psi_X = -\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z_2 - z_1)^2}} F_1(\rho_1, \rho_2, \rho) G_1(z_1, z_2) \quad (\text{B.36})$$

La séparation de l'intégrale quintuple en un produit d'une intégrale triple par une

intégrale double n'est plus possible. Comme le choix de la fonction d'onde a été partiellement dicté par le souci de ne pas évaluer d'intégrales de multiplicité plus grande que 3, nous aurons recours à une approximation qui permet de forcer cette séparation. Le détail de cette approximation est présenté au paragraphe 3.4.1. Elle garantit une évaluation satisfaisante du potentiel coulombien à la fois pour $H \rightarrow 0$ et pour $H \rightarrow \infty$. On obtient :

$$\frac{\langle \Psi_X | V_{\text{coul}} | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} = -2 \frac{Z_c(\alpha, R, \gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} \quad (\text{B.37})$$

où Z_c est une intégrale du type Z_1 , avec :

$$G_c(z_1, z_2) = \frac{G_1(z_1, z_2)}{\frac{P_1(\alpha, R)}{P_3(\alpha, R)} + |z_2 - z_1|} \quad (\text{B.38})$$

B.2.3. Expressions de l'énergie

B.2.3.a. Cas du disque

En ajoutant le terme d'énergie cinétique moyenne au terme d'énergie potentielle moyenne, nous obtenons l'expression :

$$\frac{\langle \Psi_X | H | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} = \beta^2 - \alpha^2 + (\alpha - 2) \frac{P_3(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} - \frac{\alpha}{1+\sigma} \frac{P_4(\alpha, R) + \sigma P_5(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)}; \quad (\text{B.39})$$

on retrouve l'expression (3.28) en remarquant (3.24) que $P_4(\alpha, R) = P_5(\alpha, R)$.

B.2.3.b. Cas du cylindre

En ajoutant le terme d'énergie cinétique moyenne au terme d'énergie potentielle moyenne, nous obtenons l'expression (3.19) de l'énergie.

$$\begin{aligned}
 \frac{\langle \Psi_X | H | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} &= \beta^2 - \alpha^2 + \frac{\alpha P_3(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} - \frac{\alpha}{1+\sigma} \frac{P_4(\alpha, R) + \sigma P_5(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} \\
 &+ \frac{\pi^2}{H^2} + 2\gamma - 4\gamma^2 \frac{Z_2(\gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} + \frac{4\gamma}{1+\sigma} \frac{Z_3(\gamma, H) + \sigma Z_4(\gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)} \\
 &- 2 \frac{Z_c(\alpha, R, \gamma, H)}{Z_1(\gamma, H)}
 \end{aligned} \tag{B.40}$$

B.3. Réduction des intégrales quintuples à des intégrales quadruples

Toutes les intégrales quintuples à calculer peuvent se ramener à l'une des deux formes suivantes :

$$\mathcal{J} = \int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} dz_e \int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} dz_h \cos^2\left(\frac{\pi z_e}{H}\right) \cos^2\left(\frac{\pi z_h}{H}\right) \phi(z_e - z_h) \quad (\text{B.41})$$

$$\mathcal{J} = \int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} dz_e \int_{-\frac{H}{2}}^{\frac{H}{2}} dz_h \cos\left(\frac{\pi z_e}{H}\right) \sin\left(\frac{\pi z_e}{H}\right) \cos^2\left(\frac{\pi z_h}{H}\right) \psi(z_e - z_h) \quad (\text{B.42})$$

où la fonction $x \rightarrow \phi(x)$ est paire tandis que la fonction $x \rightarrow \psi(x)$ est impaire.

B.3.1. Calcul des intégrales de type \mathcal{J}

On passe des variables (z_e, z_h) aux variables (ζ, z) définies par :

$$\zeta = z_e - z_h ; z = \frac{1}{2} (z_e + z_h) \quad (\text{B.43})$$

On a alors :

$$\cos\left(\frac{\pi z_e}{H}\right) \cos\left(\frac{\pi z_h}{H}\right) = \frac{1}{2} \left[\cos\left(\frac{2\pi z}{H}\right) + \cos\left(\frac{\pi \zeta}{H}\right) \right] \quad (\text{B.44})$$

$$\cos^2\left(\frac{\pi z_e}{H}\right) \cos^2\left(\frac{\pi z_h}{H}\right) = \frac{1}{4} \left[\cos^2\left(\frac{2\pi z}{H}\right) + 2 \cos\left(\frac{2\pi z}{H}\right) \cos\left(\frac{\pi \zeta}{H}\right) + \cos^2\left(\frac{\pi \zeta}{H}\right) \right] \quad (\text{B.45})$$

Le domaine d'intégration \mathcal{D} sur les variables originales (z_e, z_h) est un carré (Fig. B.1) ; le domaine d'intégration \mathcal{D}' sur les nouvelles variables (z, ζ) est un losange (Fig. B.2) qui se décompose naturellement en quatre triangles rectangles $\mathcal{D}'_{++}, \mathcal{D}'_{-+}, \mathcal{D}'_{--}, \mathcal{D}'_{+-}$.

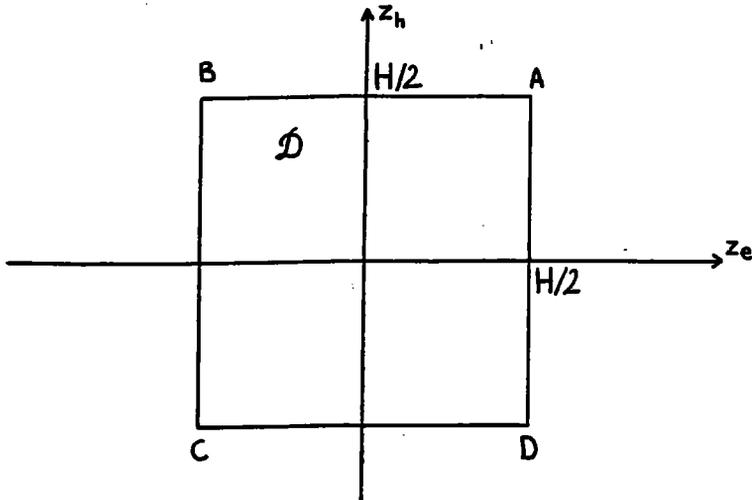


FIG. B.1.

Domaine d'intégration pour les variables originales z_e et z_h .

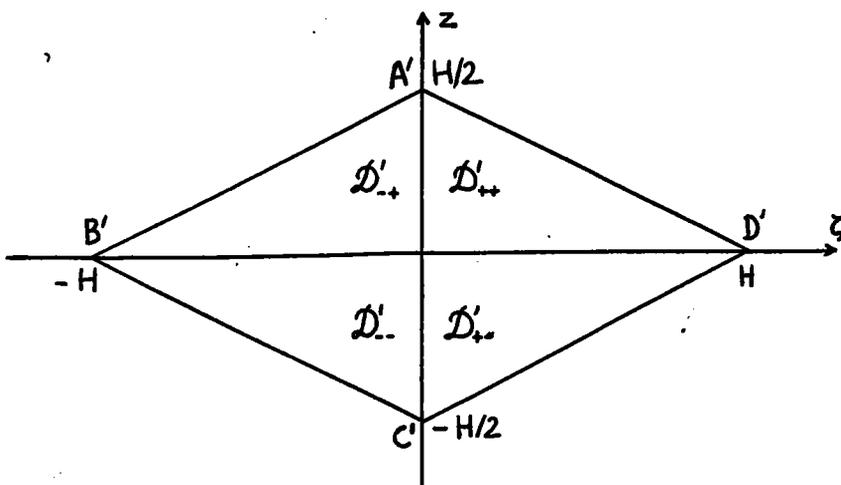


FIG. B.2.

Domaine d'intégration pour les nouvelles variables ζ et z .

Compte tenu des propriétés de parité des fonctions à intégrer, l'intégrale sur chacun des trois triangles prend la même valeur ; l'intégrale sur \mathcal{D}' est donc égale à quatre fois l'intégrale sur \mathcal{D}'_{++} , soit :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{I} &= \iint_{(x,y) \in \mathcal{D}'} \frac{1}{4} \left[\cos^2 \left(\frac{2\pi z}{H} \right) + 2 \cos \left(\frac{2\pi z}{H} \right) \cos \left(\frac{\pi \zeta}{H} \right) + \cos^2 \left(\frac{\pi \zeta}{H} \right) \right] \phi(\zeta) dz d\zeta \\
 &= \iint_{(x,y) \in \mathcal{D}'_{++}} \left[\cos^2 \left(\frac{2\pi z}{H} \right) + 2 \cos \left(\frac{2\pi z}{H} \right) \cos \left(\frac{\pi \zeta}{H} \right) + \cos^2 \left(\frac{\pi \zeta}{H} \right) \right] \phi(\zeta) dz d\zeta \\
 &= \int_0^H d\zeta \phi(\zeta) \int_0^{\frac{H}{2} \left(1 - \frac{\zeta}{H} \right)} dz \left[\cos^2 \left(\frac{2\pi z}{H} \right) + 2 \cos \left(\frac{2\pi z}{H} \right) \cos \left(\frac{\pi \zeta}{H} \right) + \cos^2 \left(\frac{\pi \zeta}{H} \right) \right] \\
 &= \mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2 + \mathcal{I}_3 \tag{B.46}
 \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}
 \mathcal{I}_1 &= \int_0^H d\zeta \phi(\zeta) \int_0^{\frac{H}{2} \left(1 - \frac{\zeta}{H} \right)} dz \cos^2 \left(\frac{2\pi z}{H} \right) \\
 \mathcal{I}_2 &= 2 \cos \left(\frac{\pi \zeta}{H} \right) \int_0^H d\zeta \phi(\zeta) \int_0^{\frac{H}{2} \left(1 - \frac{\zeta}{H} \right)} dz \cos \left(\frac{2\pi z}{H} \right) \\
 \mathcal{I}_3 &= \cos^2 \left(\frac{\pi \zeta}{H} \right) \int_0^H d\zeta \phi(\zeta) \int_0^{\frac{H}{2} \left(1 - \frac{\zeta}{H} \right)} dz \tag{B.47}
 \end{aligned}$$

Dans \mathcal{I}_1 , \mathcal{I}_2 et \mathcal{I}_3 , on peut alors intégrer analytiquement par rapport à la variable z ; on obtient respectivement :

$$\int_0^{\frac{H}{2} \left(1 - \frac{\zeta}{H}\right)} dz \cos^2 \left(\frac{2\pi z}{H} \right) = \frac{1}{2} \left[\frac{H}{2} \left(1 - \frac{\zeta}{H}\right) - \frac{H}{4\pi} \sin \left(\frac{2\pi \zeta}{H} \right) \right]$$

$$\int_0^{\frac{H}{2} \left(1 - \frac{\zeta}{H}\right)} dz \cos \left(\frac{2\pi z}{H} \right) = \frac{H}{2\pi} \sin \left(\frac{\pi \zeta}{H} \right)$$

$$\int_0^{\frac{H}{2} \left(1 - \frac{\zeta}{H}\right)} dz = \frac{H}{2} \left(1 - \frac{\zeta}{H}\right) \tag{ B.48 }$$

soit, en rassemblant les résultats précédents :

$$\mathcal{F} = \frac{H}{2} \int_0^H \left[\left(1 - \frac{\zeta}{H}\right) \left[2 + \cos \left(\frac{2\pi \zeta}{H} \right) \right] + \frac{3}{2\pi} \sin \left(\frac{2\pi \zeta}{H} \right) \right] \phi(\zeta) d\zeta \tag{ B.49 }$$

B.3.2. Calcul des intégrales de type \mathcal{F}

Le changement de variables est le même que dans le cas précédent ; au lieu d'intégrer sur le triangle \mathcal{D}'_{++} , on intègre cette fois sur le triangle isocèle $\mathcal{D}'_{++} \cup \mathcal{D}'_{+-}$. A l'aide de l'identité :

$$\sin \left(\frac{\pi z_e}{H} \right) \cos \left(\frac{\pi z_h}{H} \right) = \frac{1}{2} \left[\sin \left(\frac{2\pi z}{H} \right) + \sin \left(\frac{\pi \zeta}{H} \right) \right] \tag{ B.50 }$$

et de l'identité (B.44), la fonction à intégrer peut s'écrire, dans les nouvelles variables, sous la forme :

$$\sin\left(\frac{\pi z_e}{H}\right)\cos\left(\frac{\pi z_e}{H}\right)\cos^2\left(\frac{\pi z_h}{H}\right) = \frac{1}{4}\left[\cos\left(\frac{2\pi z}{H}\right)\sin\left(\frac{2\pi z}{H}\right) + \cos\left(\frac{2\pi z}{H}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{H}\right) + \cos\left(\frac{\pi z}{H}\right)\sin\left(\frac{2\pi z}{H}\right) + \cos\left(\frac{\pi z}{H}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{H}\right)\right], \quad (\text{B.51})$$

ce qui permet de mettre \mathcal{J} successivement sous les formes suivantes :

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &= \frac{1}{4} \iint_{(x,y) \in \mathcal{D}'} \left[\cos\left(\frac{2\pi z}{H}\right)\sin\left(\frac{2\pi z}{H}\right) + \cos\left(\frac{2\pi z}{H}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{H}\right) \right. \\ &\quad \left. + \cos\left(\frac{\pi z}{H}\right)\sin\left(\frac{2\pi z}{H}\right) + \cos\left(\frac{\pi z}{H}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{H}\right) \right] \psi(\zeta) dz d\zeta \\ &= \frac{1}{4} \iint_{(x,y) \in \mathcal{D}'} \left[\cos\left(\frac{2\pi z}{H}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{H}\right) + \frac{1}{2}\sin\left(\frac{2\pi z}{H}\right) \right] \psi(\zeta) dz d\zeta \\ &= \frac{1}{4} \iint_{(x,y) \in \mathcal{D}'_{++} \cup \mathcal{D}'_{+-}} \left[2\cos\left(\frac{2\pi z}{H}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{H}\right) + \sin\left(\frac{2\pi z}{H}\right) \right] \psi(\zeta) dz d\zeta \\ &= \frac{1}{4} \int_0^H d\zeta \psi(\zeta) \int_{-\frac{H}{2}\left(1-\frac{\zeta}{H}\right)}^{\frac{H}{2}\left(1-\frac{\zeta}{H}\right)} dz \left[2\cos\left(\frac{2\pi z}{H}\right)\sin\left(\frac{\pi z}{H}\right) + \sin\left(\frac{2\pi z}{H}\right) \right] \\ &= \frac{1}{2} \int_0^H d\zeta \sin\left(\frac{\pi \zeta}{H}\right) \psi(\zeta) \int_{-\frac{H}{2}\left(1-\frac{\zeta}{H}\right)}^{\frac{H}{2}\left(1-\frac{\zeta}{H}\right)} dz \cos\left(\frac{2\pi z}{H}\right) \\ &\quad + \frac{1}{4} \int_0^H d\zeta \sin\left(\frac{2\pi \zeta}{H}\right) \psi(\zeta) \int_{-\frac{H}{2}\left(1-\frac{\zeta}{H}\right)}^{\frac{H}{2}\left(1-\frac{\zeta}{H}\right)} dz. \end{aligned} \quad (\text{B.52})$$

Il reste deux intégrales élémentaires en z qui se calculent analytiquement :

$$\int_{-\frac{H}{2} \left(1 - \frac{\zeta}{H}\right)}^{\frac{H}{2} \left(1 - \frac{\zeta}{H}\right)} \cos\left(\frac{2\pi z}{H}\right) dz = \frac{H}{\pi} \sin\left(\frac{\pi\zeta}{H}\right)$$

$$\int_{-\frac{H}{2} \left(1 - \frac{\zeta}{H}\right)}^{\frac{H}{2} \left(1 - \frac{\zeta}{H}\right)} dz = H \left(1 - \frac{\zeta}{H}\right) \quad (\text{B.53})$$

En rassemblant les résultats, on obtient donc :

$$\mathcal{J} = \frac{H}{4} \int_0^H \left[\left(1 - \frac{\zeta}{H}\right) \sin\left(\frac{2\pi\zeta}{H}\right) + \frac{2}{\pi} \sin^2\left(\frac{\pi\zeta}{H}\right) \right] \psi(\zeta) d\zeta \quad (\text{B.54})$$

Les intégrales quintuples apparaissant dans les calculs lors de l'étude en potentiel de confinement infini peuvent donc toutes être réduites à des intégrales quadruples. En revanche, il nous semble peu vraisemblable qu'une telle réduction soit encore possible dans un modèle où l'on envisage un potentiel de confinement fini. En effet, les différentes étapes de la réduction sont étroitement liées au fait que l'électron et le trou non corrélés ont des fonctions d'onde identiques, or cette propriété est caduque dans le cas du puits fini.

**EXCITON DANS UN DISQUE QUANTIQUE
DE RAYON QUASI-NUL EN POTENTIEL INFINI**

C.1. Rappel des résultats de l'étude générale

Dans la limite du disque quantique ($H \rightarrow 0$), nous avons utilisé la fonction d'onde :

$$\Psi_X = f(\rho_e) f(\rho_h) \exp(-\alpha \rho_{eh}) \quad \text{où } f(\rho) = J_0(\theta_0 \rho/R) \quad (\text{C.1})$$

qui conduit à une énergie moyenne :

$$\langle E(\alpha, R) \rangle = \frac{\theta_0^2}{R^2} - \alpha^2 + (\alpha - 2) \frac{P_3(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} - \alpha \frac{P_4(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} \quad (\text{C.2})$$

où les intégrales P_i sont définies par :

$$P_i = 8\pi \int_0^R d\rho_e \int_0^R d\rho_h \int_{|\rho_e - \rho_h|}^{\rho_e + \rho_h} \frac{F_i(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) \rho_e \rho_h \rho_{eh} d\rho_{eh}}{\sqrt{[(\rho_e + \rho_h)^2 - \rho_{eh}^2] [\rho_{eh}^2 - (\rho_e - \rho_h)^2]}} \quad (\text{C.3})$$

avec : $F_1(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) = [f(\rho_e) f(\rho_h) \exp(-\alpha \rho_{eh})]^2$

$$F_3(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) = \frac{1}{\rho_{eh}} F_1(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh})$$

$$F_4(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) = - \frac{\rho_{eh}^2 + \rho_e^2 - \rho_h^2}{\rho_e \rho_{eh}} f(\rho_e) f(\rho_e) [f(\rho_h) \exp(-\alpha \rho_{eh})]^2 \quad (\text{C.4})$$

C.2. Approximation des particules non corrélées

Par des raisonnements semi-qualitatifs, confirmés d'ailleurs par les résultats du calcul variationnel, nous avons affirmé dans le chapitre 3 que l'énergie cinétique est prépondérante devant l'énergie potentielle coulombienne pour les disques de très petits rayons ; précisons ce que l'on obtient si l'on pousse ce point de vue en choisissant une fonction d'onde sans facteur de corrélation, ce qui revient à prendre $\alpha = 0$ dans (C.1) et (C.2).

En passant des variables $\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}$ aux variables $u_e = \frac{\rho_e}{R}, u_h = \frac{\rho_h}{R}, u_{eh} = \frac{\rho_{eh}}{R}$, on montre que :

$$\begin{aligned} P_1(0, R) &= R^4 P_1(0, 1) \\ P_3(0, R) &= R^3 P_3(0, 1) \\ P_4(0, R) &= R^3 P_4(0, 1) \end{aligned} \quad (C.5)$$

On en déduit l'expression suivante pour l'énergie :

$$\langle E(0, R) \rangle = \frac{\theta_0^2}{R^2} - \frac{2\lambda_3}{R} \quad \text{avec} \quad \lambda_3 = \frac{P_3(0, 1)}{P_1(0, 1)} \quad (C.7)$$

Il ne faut pas s'étonner de trouver un terme résiduel d'énergie potentielle, car, si l'attraction coulombienne n'a pas été prise en compte dans la fonction d'onde, elle demeure présente dans l'Hamiltonien conduisant à l'expression (C.7) de l'énergie. Le terme en $\frac{1}{R}$ donne une première indication sur l'influence de l'attraction coulombienne pour les faibles valeurs de R .

C.3. Evaluation des intégrales triples pour R petit

Lorsque R est petit, on s'attend à une diminution de la corrélation, donc de la valeur optimale du paramètre variationnel α . La distance électron-trou ρ_{eh} étant inférieure à $2R$ dans le cas présent du potentiel de confinement infini, le produit $\alpha\rho_{eh}$ sera petit devant 1. Il est donc naturel de procéder à un développement limité au premier ordre des facteurs $(\exp(-\alpha\rho_{eh}))^2$ dans les intégrales P_1 , P_3 et P_4 .

$$(\exp(-\alpha\rho_{eh}))^2 = (1 - \alpha\rho_{eh})^2 + \alpha(\alpha\rho_{eh}) = 1 - 2\alpha\rho_{eh} + \alpha(\alpha\rho_{eh}) \quad (\text{C.8})$$

Introduisons les deux nouvelles fonctions :

$$\begin{aligned} F_2(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) &= \rho_{eh} F_1(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) \\ F_9(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) &= \rho_{eh} F_4(\rho_e, \rho_h, \rho_{eh}) \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Les intégrales triples s'expriment par :

$$\begin{aligned} P_1(\alpha, R) &\simeq P_1(0, R) - 2\alpha P_2(0, R) + \alpha(\alpha R) \\ P_3(\alpha, R) &\simeq P_3(0, R) - 2\alpha P_1(0, R) + \alpha(\alpha R) \\ P_4(\alpha, R) &\simeq P_4(0, R) - 2\alpha P_9(0, R) + \alpha(\alpha R) \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

Par le même changement de variables que pour démontrer (C.5), on montre que :

$$\begin{aligned} P_2(0, R) &= R^5 P_2(0, 1) \\ P_9(0, R) &= R^4 P_9(0, 1) \end{aligned} \quad (\text{C.11})$$

On en déduit que :

$$\begin{aligned}
 \frac{P_3(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} &\simeq \frac{R^3(P_3(0, R) - 2\alpha R P_1(0, R))}{R^4(P_1(0, R) - 2\alpha P_2(0, R))} + \alpha(\alpha R) \\
 &\simeq \frac{1}{R} \frac{\lambda_3 - 2\alpha R}{1 - 2\alpha R \lambda_2} + \alpha(\alpha R) \\
 &\simeq \frac{1}{R} [\lambda_3 - 2\alpha R(1 - \lambda_2 \lambda_3)] + \alpha(\alpha R) \\
 \frac{P_4(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} &\simeq \frac{R^3(P_4(0, R) - 2\alpha R P_9(0, R))}{R^4(P_1(0, R) - 2\alpha R P_2(0, R))} + \alpha(\alpha R) \\
 &\simeq \frac{1}{R} \frac{\lambda_4 - 2\alpha R \lambda_9}{1 - 2\alpha \lambda_2} + \alpha(\alpha \rho_{eh}) \\
 &\simeq \frac{1}{R} [\lambda_4 - 2\alpha R(\lambda_9 - \lambda_2 \lambda_4)] + \alpha(\alpha R)
 \end{aligned} \tag{C.12}$$

en posant $\lambda_4 = \frac{P_4(0, 1)}{P_1(0, 1)}$ et $\lambda_9 = \frac{P_9(0, 1)}{P_1(0, 1)}$.

L'énergie peut s'exprimer par :

$$\begin{aligned}
 \langle E(\alpha, R) \rangle &= \frac{\theta_0^2}{R^2} - \alpha^2 + \frac{\alpha - 2}{R} [\lambda_3 - 2\alpha R(1 - \lambda_2 \lambda_3)] \\
 &\quad - \frac{\alpha}{R} [\lambda_4 - 2\alpha R(\lambda_9 - \lambda_2 \lambda_4)] + \alpha(\alpha R)
 \end{aligned} \tag{C.13}$$

La dépendance de E en α et R est alors explicite, car il ne reste plus que trois constantes λ_3 , λ_4 et λ_9 calculables numériquement.

C.4. Recherche du paramètre variationnel optimal

C.4.1. Expression de la valeur optimale du paramètre variationnel

Ordonnons l'expression (C.13) de l'énergie suivant les puissances de α . Nous obtenons :

$$\begin{aligned} \langle E(\alpha, R) \rangle = & \frac{\theta_0^2}{R^2} - \frac{2\lambda_3}{R} + \alpha \left[\frac{\lambda_3 - \lambda_4}{R} + 4(1 - \lambda_2\lambda_3) \right] \\ & + \alpha^2 [-3 + 2(\lambda_2\lambda_3 + \lambda_9 - \lambda_2\lambda_4)] \end{aligned} \quad (C.14)$$

La valeur optimale de α est α_0 telle que $\frac{\partial \langle E(\alpha, R) \rangle}{\partial \alpha} = 0$, soit :

$$\left[\frac{\lambda_3 - \lambda_4}{R} + 4(1 - \lambda_2\lambda_3) \right] + 2\alpha_0 [-3 + 2(\lambda_2\lambda_3 + \lambda_9 - \lambda_2\lambda_4)] = 0 \quad (C.15)$$

Elle a donc pour expression :

$$\alpha_0 = - \frac{\frac{\lambda_3 - \lambda_4}{R} + 4(1 - \lambda_2\lambda_3)}{2[-3 + 2(\lambda_2\lambda_3 + \lambda_9 - \lambda_2\lambda_4)]} \quad (C.16)$$

Lorsque R tend vers 0, cette expression n'est pas bornée si $\lambda_3 \neq \lambda_4$. L'évaluation numérique de λ_3 et λ_4 conduit à des valeurs dont la différence peut raisonnablement être imputée à des erreurs d'arrondi, mais ceci ne peut être considéré comme une preuve de l'égalité de ces deux coefficients. Nous avons donc tenté de démontrer analytiquement la conjecture :

$$\lambda_3 = \lambda_4 \quad (C.17)$$

qui conditionne le comportement du coefficient α pour les petites valeurs de R . En effet, une différence, aussi minime soit-elle, entre les deux coefficients conduirait à un paramètre variationnel tendant vers l'infini.

C.4.2. Démonstration sur des arguments physiques de la conjecture (C.17)

Après avoir vérifié que les intégrales P_3 et P_4 ne sont pas trivialement identiques, nous avons tenté de montrer analytiquement qu'elles sont égales lorsque $\alpha = 0$ et $R = 1$. Après des tentatives infructueuses, nous avons tenté une démonstration par l'absurde. Il s'agit donc de montrer que la négation de (C.17) conduit à des prévisions fausses.

Pour cela, nous considérons un système de deux particules soumises au même potentiel de confinement, mais n'interagissant pas par attraction coulombienne. Il faut donc retrancher à l'Hamiltonien la partie coulombienne. Il n'y a plus de couplage entre les deux particules. La fonction d'onde et l'énergie dans l'état fondamental de ce système de deux particules indépendantes sont connues et ont pour expression :

$$\Psi_0 = J_0(\theta_0 \rho_e / R) J_0(\theta_0 \rho_h / R) ; E_0 = \frac{\theta_0^2}{R^2} \quad (C.18)$$

Malgré cela, appliquons à ce système une procédure variationnelle en prenant la fonction d'essai suivante :

$$\Psi_\alpha = J_0(\theta_0 \rho_e / R) J_0(\theta_0 \rho_h / R) \exp(-\alpha \rho_{eh}) \quad (C.19)$$

La fonction d'onde exacte fait partie des fonctions d'onde d'essai puisqu'elle correspond à $\alpha = 0$; la valeur optimale du paramètre variationnel doit donc être égale à 0 pour R quelconque.

L'énergie à minimiser se déduit de (C.2) en y supprimant le terme d'énergie potentielle coulombienne - 2 $\frac{P_3(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)}$; il reste :

$$\langle E(\alpha, R) \rangle = \frac{\theta_0^2}{R^2} - \alpha^2 + \alpha \frac{P_3(\alpha, R) - P_4(\alpha, R)}{P_1(\alpha, R)} \quad (C.20)$$

soit, dans le cas particulier des petites valeurs de R :

$$\begin{aligned} \langle E(\alpha, R) \rangle &\simeq \frac{\theta_0^2}{R^2} - \alpha^2 + \frac{\alpha}{R} [\lambda_3 - \lambda_4 - 2\alpha R(1 - \lambda_2\lambda_3 + \lambda_2\lambda_4 - \lambda_9)] \\ &= \frac{\theta_0^2}{R^2} + \alpha \frac{\lambda_3 - \lambda_4}{R} - \alpha^2[-3 + 2\lambda_2\lambda_3 - 2\lambda_2\lambda_4 + 2\lambda_9] \end{aligned} \quad (C.21)$$

$$\frac{\partial \langle E(\alpha, R) \rangle}{\partial \alpha} \simeq \frac{\lambda_3 - \lambda_4}{R} - 2\alpha [-3 + 2\lambda_2\lambda_3 - 2\lambda_2\lambda_4 + 2\lambda_9] \quad (C.22)$$

La valeur optimale du paramètre est :

$$\alpha_0 = \frac{\lambda_3 - \lambda_4}{2R[-3 + 2\lambda_2\lambda_3 - 2\lambda_2\lambda_4 + 2\lambda_9]} \quad (C.23)$$

Cette valeur est non nulle si $\lambda_3 \neq \lambda_4$, ce qui est contradictoire. La conjecture est donc démontrée.

C.5. Expression analytique de l'énergie en fonction du rayon ; domaine de validité

En reprenant les résultats (C.14) et (C.16) compte tenu de (C.17), on obtient :

$$\langle E(\alpha, R) \rangle = \frac{\theta_0^2}{R^2} - \frac{2\lambda_3}{R} + 4\alpha (1 - \lambda_2\lambda_3) + \alpha^2(-3 + 2\lambda_9) \tag{ C.24 }$$

$$\alpha_0 = \frac{2(1 - \lambda_2\lambda_3)}{3 - 2\lambda_9} \tag{ C.25 }$$

La valeur optimale de l'énergie est alors :

$$\langle E(\alpha, R) \rangle = \frac{\theta_0^2}{R^2} - \frac{2\lambda_3}{R} - \frac{4(1 - \lambda_2\lambda_3)^2}{2\lambda_9 - 3} \tag{ C.26 }$$

En reportant les valeurs numériques des paramètres λ_i :

$$\lambda_2 = 0.5917341 ; \lambda_3 = 2.5945107 ; \lambda_9 = 2.0000000 \tag{ C.27 }$$

on obtient les résultats annoncés dans le chapitre 3 :

$$\alpha_0 = 1.071 \tag{ C.28 }$$

$$\langle E(\alpha, R \rightarrow 0) \rangle \simeq \frac{\theta_0^2}{R^2} - \frac{5.189}{R} - 1.146 \tag{ C.29 }$$

Il est remarquable que le raisonnement très simple consistant à prendre la fonction d'onde décorrélée ($\alpha = 0$) donnait correctement (C.7) les deux premiers termes de ce développement en puissances croissantes de R . La valeur de λ_9 , qui semble être une valeur entière, a été obtenue après de longs calculs numériques, puisqu'il s'agit du quotient de deux intégrales triples évaluées numériquement ; cette valeur doit vraisemblablement pouvoir être obtenue par une autre méthode, mais nous ne sommes actuellement pas en mesure d'en donner une justification analytique.

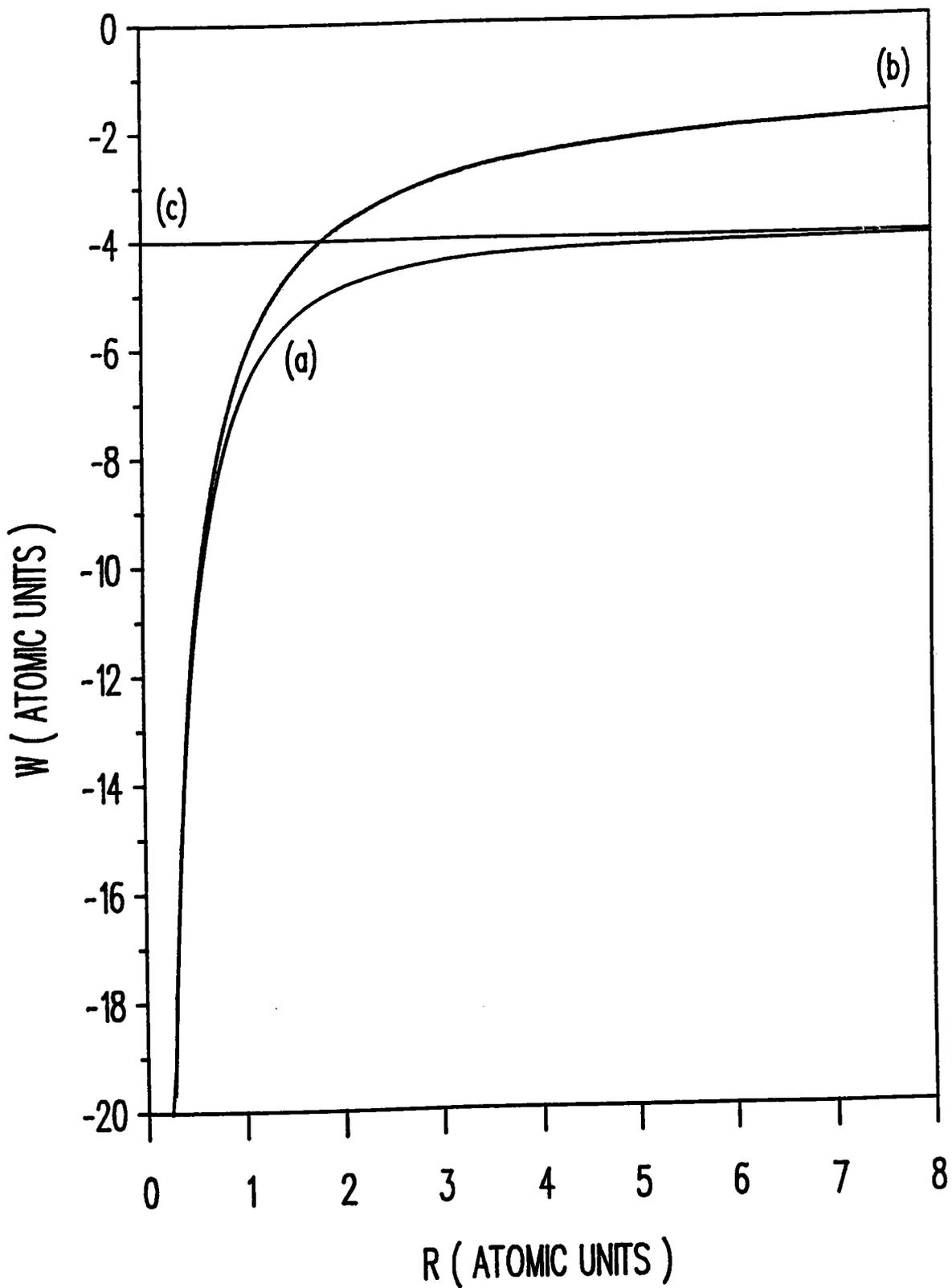


FIG. C.1.

Energie de liaison d'un exciton confiné dans un disque en fonction du rayon R du disque. (a) correspond au calcul variationnel, (b) à la formule approchée (C.29), et (c) à la limite 2D.

On voit sur la figure C.1. que la courbe (a) obtenue par le calcul variationnel interpole la courbe (b) correspondant à la formule approchée (C.29), valable pour les petites valeurs de R , et la limite $2D$ représentée par la droite (c). La validité de la formule (C.29) va au-delà de ce que l'on attendait, puisque les courbes (a) et (b) sont pratiquement confondues pour $R < 0.7$ u.a.

**DISTANCE ELECTRON-TROU
EN L'ABSENCE DE CONFINEMENT QUANTIQUE**

Dans cette annexe, nous calculons les valeurs moyennes et quadratiques moyennes de la distance électron-trou dans les cas limites pour lesquels les calculs analytiques sont possibles, c'est-à-dire dans le cas du cristal massif 3D et dans le cas strictement bidimensionnel. Ces cas limites servent de test pour la fonction d'onde variationnelle utilisée dans les chapitres 3 et 4. Nous calculons également la valeur moyenne de l'inverse de la distance électron-trou, qui permet d'évaluer l'énergie potentielle d'interaction coulombienne directe électron-trou.

D.1. Définition des grandeurs à calculer

Nous appellerons distance moyenne électron-trou la valeur moyenne de la distance électron-trou :

$$r_{eh}^{(1)} = \langle \sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + (z_e - z_h)^2} \rangle ; \quad (D.1)$$

tandis que la distance quadratique moyenne électron-trou est définie par :

$$r_{eh}^{(2)} = \sqrt{\langle (x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + (z_e - z_h)^2 \rangle}. \quad (D.2)$$

En raison de l'anisotropie des domaines de confinement, il est utile d'étudier séparément la contribution axiale (parallèlement à Oz) et la contribution latérale (perpendiculairement à Oz) à ces distances. On introduit pour cela quatre nouveaux paramètres :

- la distance latérale moyenne électron-trou :

$$\rho_{eh}^{(1)} = \langle \sqrt{((x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2)} \rangle ; \quad (D.3)$$

- la distance latérale quadratique moyenne électron-trou :

$$\rho_{eh}^{(2)} = \sqrt{\langle (x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 \rangle}. \quad (D.4)$$

- la distance axiale moyenne électron-trou :

$$z_{eh}^{(1)} = \langle \sqrt{(z_e - z_h)^2} \rangle = \langle |z_e - z_h| \rangle ; \quad (D.5)$$

- la distance axiale quadratique moyenne électron-trou :

$$z_{eh}^{(2)} = \sqrt{\langle (z_e - z_h)^2 \rangle}. \quad (D.6)$$

Enfin, pour l'étude de l'énergie potentielle d'interaction coulombienne directe électron-trou, nous introduisons le paramètre $r_{eh}^{(-1)}$ défini par :

$$\frac{1}{r_{eh}^{(-1)}} = \langle ((x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + (z_e - z_h)^2)^{-\frac{1}{2}} \rangle . \quad (D.7)$$

D.2. Cas du cristal massif 3D

Pour le cas du cristal massif, dans l'approximation d'un modèle à deux bandes simples, isotropes et paraboliques, la fonction enveloppe dans l'état fondamental est donnée par les expressions (1.95) et (1.96) :

$$\psi_X^{3D} = \exp(-\alpha r), \text{ avec } \alpha = \frac{1}{a_X^{3D}} = \frac{\mu e^2}{\kappa \hbar^2}. \quad (\text{D.8})$$

Introduisons l'intégrale $I_n(\alpha)$ définie par :

$$I_n(a) = \int_0^\infty r^n \exp(-ar) dr, \quad (\text{D.9})$$

qui se calcule aisément et a pour expression (Gradshteyn et Ryzhik 1980 p 310) :

$$I_n(a) = \frac{n!}{a^{n+1}}. \quad (\text{D.10})$$

En exprimant les distances précédemment introduites dans le premier paragraphe, on obtient :

$$r_{\text{eh}}^{(1)3D} = \frac{4\pi I_3(2/a_X^{3D})}{4\pi I_2(2/a_X^{3D})} = \frac{3}{2} a_X^{3D}, \quad (\text{D.11})$$

et

$$r_{\text{eh}}^{(2)3D} = \sqrt{\frac{4\pi I_4(2/a_X^{3D})}{4\pi I_2(2/a_X^{3D})}} = \sqrt{3} a_X^{3D}. \quad (\text{D.12})$$

En raison de la symétrie sphérique, $\langle x^2 \rangle = \langle y^2 \rangle = \langle z^2 \rangle$, or $\langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle = (a_X^{3D})^2$ donc :

$$z_{eh}^{(2)SD} = \frac{1}{\sqrt{3}} r_{eh}^{(2)SD} = a_X^{SD} \quad (D.13)$$

et

$$\rho_{eh}^{(2)SD} = \sqrt{\frac{2}{3}} r_{eh}^{(2)SD} = \sqrt{2} a_X^{SD} . \quad (D.14)$$

$z_{eh}^{(1)SD}$ et $\rho_{eh}^{(1)SD}$ demandent un calcul spécifique ; en coordonnées sphériques, on a $|z| = r |\cos \theta|$ et $\rho = r \sin \theta$, ce qui conduit à :

$$\begin{aligned} z_{eh}^{(1)SD} &= \frac{1}{4\pi I_2(2/a_X^{SD})} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty r^3 \sin \theta |\cos \theta| \exp\left[-\frac{2r}{a_X^{SD}}\right] \\ &= \frac{2\pi I_3(2/a_X^{SD})}{4\pi I_2(2/a_X^{SD})} = \frac{3}{4} a_X^{SD} , \end{aligned} \quad (D.15)$$

et

$$\begin{aligned} \rho_{eh}^{(1)SD} &= \frac{1}{4\pi I_2(2/a_X^{SD})} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \int_0^\infty r^3 \sin^2 \theta \exp\left[-\frac{2r}{a_X^{SD}}\right] \\ &= \frac{\pi^2 I_3(2/a_X^{SD})}{4\pi I_2(2/a_X^{SD})} = \frac{3\pi}{8} a_X^{SD} . \end{aligned} \quad (D.16)$$

Enfin, le dernier paramètre $r_{eh}^{(-1)SD}$ a pour expression :

$$r_{eh}^{(-1)SD} = \frac{4\pi I_2(2/a_X^{SD})}{4\pi I_1(2/a_X^{SD})} = a_X^{SD} , \quad (D.17)$$

D.3. Cas strictement 2D

Pour le cas bidimensionnel, toujours dans l'approximation d'un modèle à deux bandes simples, isotropes et paraboliques, la fonction enveloppe dans l'état fondamental est une fonction d'onde hydrogénoïde. La solution analytique du problème de l'atome d'Hydrogène 2D est connue (Zaslow, Zandler 1967). On obtient :

$$\psi_X^{2D} = \exp(-\alpha r), \quad \text{avec } \alpha = \frac{1}{a_X^{2D}} = \frac{2}{a_X^{3D}}. \quad (\text{D.18})$$

Les composantes sur l'axe Oz de l'électron et du trou étant identiquement nulles, on a évidemment dans ce cas :

$$z_{\text{eh}}^{(1)2D} = 0 \quad ; \quad \rho_{\text{eh}}^{(1)2D} = r_{\text{eh}}^{(1)2D} \quad ; \quad z_{\text{eh}}^{(2)2D} = 0 \quad ; \quad \rho_{\text{eh}}^{(2)2D} = r_{\text{eh}}^{(2)2D}. \quad (\text{D.19})$$

Il reste donc à calculer $\rho_{\text{eh}}^{(1)2D}$ et $\rho_{\text{eh}}^{(2)2D}$. On obtient successivement :

$$\rho_{\text{eh}}^{(1)2D} = \frac{2\pi I_2(2/a_X^{2D})}{2\pi I_1(2/a_X^{2D})} = a_X^{2D} = \frac{1}{2} a_X^{3D}, \quad (\text{D.20})$$

et

$$\rho_{\text{eh}}^{(2)2D} = \frac{2\pi I_3(2/a_X^{2D})}{2\pi I_1(2/a_X^{2D})} = \sqrt{\frac{3}{2}} a_X^{2D} = \sqrt{\frac{3}{8}} a_X^{3D}. \quad (\text{D.21})$$

Enfin, le dernier paramètre est :

$$r_{\text{eh}}^{(-1)2D} = \frac{2\pi I_1(2/a_X^{2D})}{2\pi I_0(2/a_X^{2D})} = \frac{1}{2} a_X^{2D}. \quad (\text{D.22})$$

UTILISATION D'UNE FONCTION D'ESSAI
A CORRELATION LATÉRALE GAUSSIENNE

Nous reportons dans cet appendice les résultats d'une tentative d'utilisation d'une fonction d'onde à facteur de corrélation latérale de type gaussien dans le cas du confinement dans un disque par un potentiel infini.

E.1. Application à la fonction d'onde de l'opérateur énergie cinétique

Il s'agit de calculer les laplaciens par rapport aux coordonnées des particules 1 et 2 de la fonction suivante :

$$\Psi_{\mathbf{X}} = J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \quad (\text{E.1})$$

où $\beta = \frac{\theta_0}{R}$, $\theta_0 = 2,405$ désignant le premier zéro de J_0 ,

dont nous avons discuté le choix dans le chapitre 3. Rappelons les expressions des dérivées de J_0 et J_1 établies dans l'annexe B :

$$J_0'(x) = -J_1(x) \quad \text{et} \quad J_1'(x) = J_0(x) - \frac{1}{x} J_1(x) \quad (\text{E.2})$$

On en déduit successivement :

- les dérivées premières de Ψ_X :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi_X}{\partial \rho} &= - 2\alpha\rho J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \\ \frac{\partial \Psi_X}{\partial \rho_1} &= - \beta J_1(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \\ \frac{\partial \Psi_X}{\partial \rho_2} &= - \beta J_0(\beta\rho_1) J_1(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \end{aligned} \tag{E.3}$$

- les dérivées secondes de Ψ_X :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \Psi_X}{\partial \rho^2} &= (4\alpha^2\rho^2 - 2\alpha) J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \\ \frac{\partial^2 \Psi_X}{\partial \rho \partial \rho_1} &= 2\alpha\beta\rho J_1(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \\ \frac{\partial^2 \Psi_X}{\partial \rho \partial \rho_2} &= 2\alpha\beta\rho J_0(\beta\rho_1) J_1(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \\ \frac{\partial^2 \Psi_X}{\partial \rho_1^2} &= - \beta^2 \left[J_0(\beta\rho_1) - \frac{1}{\beta\rho_1} J_1(\beta\rho_1) \right] J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \\ \frac{\partial^2 \Psi_X}{\partial \rho_2^2} &= - \beta^2 J_0(\beta\rho_1) \left[J_0(\beta\rho_2) - \frac{1}{\beta\rho_2} J_1(\beta\rho_2) \right] e^{-\alpha\rho^2} \end{aligned} \tag{E.4}$$

- les laplaciens de Ψ_X :

$$\begin{aligned} \Delta_1 \Psi_X &= (4\alpha^2\rho^2 - \beta^2 - 4\alpha) J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \\ &\quad + 2\alpha\beta \frac{\rho^2 + \rho_1^2 - \rho_2^2}{\rho_1} J_1(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta_2 \Psi_X &= (4\alpha^2 \rho^2 - \beta^2 - 4\alpha) J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \\ &+ 2\alpha\beta \frac{\rho^2 + \rho_2^2 - \rho_1^2}{\rho_2} J_0(\beta\rho_1) J_1(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

Soit T l'opérateur énergie cinétique, dont l'expression en unités atomiques est :

$$T = - \frac{1}{1+\sigma} \Delta_1 - \frac{\sigma}{1+\sigma} \Delta_2 ; \quad (\text{E.6})$$

son application à la fonction d'onde Ψ_X conduit à :

$$\begin{aligned} T\Psi_X &= (\beta^2 + 4\alpha - 4\alpha^2\rho^2) J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \\ &- \frac{2\alpha\beta}{1+\sigma} \frac{\rho^2 + \rho_1^2 - \rho_2^2}{\rho_1} J_1(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \\ &- \frac{2\sigma\alpha\beta}{1+\sigma} \frac{\rho^2 + \rho_2^2 - \rho_1^2}{\rho_2} J_0(\beta\rho_1) J_1(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2} \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

E.2. Recensement des intégrales à calculer

E.2.1. Intégrales provenant de l'opérateur énergie cinétique

$$\begin{aligned}
 \Psi_X T \Psi_X &= (\beta^2 + 4\alpha - 4\alpha^2 \rho^2) (J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2})^2 \\
 &- \frac{2\alpha\beta}{1+\sigma} \frac{\rho^2 + \rho_1^2 - \rho_2^2}{\rho_1} J_0(\beta\rho_1) J_1(\beta\rho_1) (J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2})^2 \\
 &- \frac{2\sigma\alpha\beta}{1+\sigma} \frac{\rho^2 + \rho_2^2 - \rho_1^2}{\rho_2} J_0(\beta\rho_2) J_1(\beta\rho_2) (J_0(\beta\rho_1) e^{-\alpha\rho^2})^2 \\
 &= (\beta^2 + 4\alpha)\Phi_1(\rho_1, \rho_2, \rho) - 4\alpha^2\Phi_3(\rho_1, \rho_2, \rho) \\
 &- \frac{\alpha}{1+\sigma} (\Phi_4(\rho_1, \rho_2, \rho) + \sigma\Phi_5(\rho_1, \rho_2, \rho))
 \end{aligned} \tag{E.8}$$

où nous avons noté :

$$\begin{aligned}
 \Phi_1(\rho_1, \rho_2, \rho) &= [J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2}]^2 \\
 \Phi_3(\rho_1, \rho_2, \rho) &= \rho^2 [J_0(\beta\rho_1) J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2}]^2 \\
 \Phi_4(\rho_1, \rho_2, \rho) &= 2\beta \frac{\rho^2 + \rho_1^2 - \rho_2^2}{\rho_1} J_0(\beta\rho_1) J_1(\beta\rho_1) (J_0(\beta\rho_2) e^{-\alpha\rho^2})^2 \\
 \Phi_5(\rho_1, \rho_2, \rho) &= 2\beta \frac{\rho^2 + \rho_2^2 - \rho_1^2}{\rho_2} J_0(\beta\rho_2) J_1(\beta\rho_2) (J_0(\beta\rho_1) e^{-\alpha\rho^2})^2
 \end{aligned} \tag{E.9}$$

On en déduit la valeur moyenne de l'énergie cinétique, en intégrant sur ρ_1 , ρ_2 et ρ , avec la fonction de pondération W introduite en (A-27) :

$$\frac{\langle \Psi_X | T | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} = \beta^2 + 4\alpha - \frac{4\alpha^2 \Pi_3(\alpha, R)}{\Pi_1(\alpha, R)} - \frac{\alpha}{1+\sigma} \frac{\Pi_4(\alpha, R) + \sigma \Pi_5(\alpha, R)}{\Pi_1(\alpha, R)} \tag{E.10}$$

avec

$$\Pi_i(\alpha, R) = \int_0^R d\rho_1 \int_0^R d\rho_2 \int_{|\rho_2 - \rho_1|}^{\rho_1 + \rho_2} d\rho \Phi(\rho_1, \rho_2, \rho) W(\rho_1, \rho_2, \rho) \quad (\text{E.11})$$

où

$$W(\rho_1, \rho_2, \rho) = \frac{8\pi\rho\rho_1\rho_2}{\sqrt{[\rho^2 - (\rho_1 - \rho_2)^2][(\rho_1 + \rho_2)^2 - \rho^2]}} \quad (\text{E.12})$$

Ces intégrales Π_i présentent un avantage appréciable sur les intégrales P_i obtenues lors de l'utilisation de la fonction d'onde à facteur de corrélation coulombien $e^{-\alpha\rho}$. En effet, l'intégration sur ρ peut être effectuée analytiquement, ce qui permet de limiter les intégrations numériques à l'évaluation d'intégrales doubles. Effectuons le calcul sur l'exemple de Π_1 :

$$\begin{aligned} \Pi_1(\alpha, R) &= 8\pi \int_0^R d\rho_1 \rho_1 J_0(\beta\rho_1)^2 \int_0^R d\rho_2 \rho_2 J_0(\beta\rho_2)^2 \\ &\quad \int_{|\rho_2 - \rho_1|}^{\rho_1 + \rho_2} d\rho \rho \frac{\exp(-2\alpha\rho^2)}{\sqrt{[\rho^2 - (\rho_1 - \rho_2)^2][(\rho_1 + \rho_2)^2 - \rho^2]}} \end{aligned} \quad (\text{E.13})$$

Posons

$$\psi_\alpha(u, v) = \int_u^v \frac{\exp(-2\alpha\rho^2)\rho d\rho}{\sqrt{[\rho^2 - u^2][v^2 - \rho^2]}} \quad (\text{E.14})$$

Effectuons dans l'intégrale le changement de variable $\rho \rightarrow y = \rho^2$.

$$\psi_\alpha(u, v) = \frac{1}{2} \int_{u^2}^{v^2} \frac{\exp(-2\alpha y) dy}{\sqrt{[y - u^2][v^2 - y]}} \quad (\text{E.15})$$

La variable y décrit l'intervalle $[u^2 ; v^2]$; on peut paramétrer par la variable z décrivant l'intervalle $[-1 ; 1]$ et définie par

$$y = \frac{u^2 + v^2}{2} + z \frac{v^2 - u^2}{2}. \quad (\text{E.16})$$

Avec cette nouvelle variable, le dénominateur se simplifie considérablement ; on obtient successivement :

$$\begin{aligned} v^2 - y &= \frac{v^2 - u^2}{2} - z \frac{v^2 - u^2}{2} = \frac{v^2 - u^2}{2} (1 - z) \\ y - u^2 &= \frac{v^2 - u^2}{2} + z \frac{v^2 - u^2}{2} = \frac{v^2 - u^2}{2} (1 + z) \\ \sqrt{[y - u^2][v^2 - y]} &= \frac{v^2 - u^2}{2} \sqrt{1 - z^2} \end{aligned} \quad (\text{E.17})$$

ce qui conduit à l'expression suivante de ψ_α :

$$\psi_\alpha(u, v) = \frac{1}{2} e^{-\alpha(u^2+v^2)} \int_{-1}^1 e^{-\alpha(v^2-u^2)z} \frac{dz}{\sqrt{1-z^2}} \quad (\text{E.18})$$

L'intégrale qui subsiste peut s'exprimer à l'aide d'une fonction de Bessel modifiée d'ordre 0 (Abramowitz 9.6.18.) :

$$\int_{-1}^1 e^{-\alpha(v^2-u^2)z} \frac{dz}{\sqrt{1-z^2}} = \pi I_0(\alpha(v^2-u^2)) \quad (\text{E.19})$$

Dans l'intégrale triple Π_1 , l'intégrale en ρ peut donc se mettre sous la forme :

$$\psi_\alpha(|\rho_2 - \rho_1|, \rho_1 + \rho_2) = \frac{\pi}{2} e^{-2\alpha(\rho_1^2 + \rho_2^2)} I_0(4\alpha\rho_1\rho_2) \quad (\text{E.20})$$

Π_1 se réduit ainsi à une intégrale double :

$$\Pi_1(\alpha, R) = 4\pi^2 \int_0^R d\rho_1 \rho_1 J_0(\beta\rho_1)^2 e^{-2\alpha\rho_1^2} \int_0^R d\rho_2 \rho_2 J_0(\beta\rho_2)^2 e^{-2\alpha\rho_2^2} I_0(4\alpha\rho_1\rho_2) \quad (\text{E.21})$$

E.2.2. Intégrales provenant de l'énergie potentielle coulombienne

Dans la limite du disque, la distance électron-trou est directement décrite par le paramètre ρ . Le terme coulombien s'exprime donc de façon élémentaire à l'aide d'une intégrale du type Π_i défini en (E.11).

$$\Psi_X V_{\text{coul}} \Psi_X = -\frac{2}{\rho} \Phi_1(\rho_1, \rho_2, \rho) = -2 \Phi_2(\rho_1, \rho_2, \rho) \quad (\text{E.22})$$

soit, en introduisant l'intégrale Π_2 correspondant à $\Phi_2 \equiv \frac{\Phi_1}{\rho}$:

$$\frac{\langle \Psi_X | V_{\text{coul}} | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} = -2 \frac{\Pi_2(\alpha, R)}{\Pi_1(\alpha, R)} \quad (\text{E.23})$$

E.2.3. Energie totale

En ajoutant le terme d'énergie cinétique moyenne au terme d'énergie potentielle moyenne, nous obtenons l'expression :

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Psi_X | H | \Psi_X \rangle}{\langle \Psi_X | \Psi_X \rangle} &= \beta^2 + 4\alpha - \frac{4\alpha^2 \Pi_3(\alpha, R)}{\Pi_1(\alpha, R)} \\ &- \frac{\alpha}{1+\sigma} \frac{\Pi_4(\alpha, R) + \sigma \Pi_5(\alpha, R)}{\Pi_1(\alpha, R)} - 2 \frac{\Pi_2(\alpha, R)}{\Pi_1(\alpha, R)} \end{aligned} \quad (\text{E.24})$$

En remarquant que $\Pi_4(\alpha, R) = \Pi_5(\alpha, R)$, on constate à nouveau que l'énergie est indépendante de σ .

$$E(\alpha, R) = \beta^2 + 4\alpha - \frac{4\alpha^2\Pi_3(\alpha, R)}{\Pi_1(\alpha, R)} - \frac{\alpha\Pi_4(\alpha, R)}{\Pi_1(\alpha, R)} - 2\frac{\Pi_2(\alpha, R)}{\Pi_1(\alpha, R)}. \quad (\text{E.25})$$

E.3. Résultat du calcul variationnel

Le calcul variationnel consiste à minimiser l'énergie par rapport à α . La figure E.1. reporte les résultats obtenus sur la courbe (G). Il apparaît que ces résultats sont notablement moins bons que ceux de la courbe (C), obtenus avec une fonction d'onde utilisant un facteur de corrélation coulombien $e^{-\alpha\rho}$.

En effet, pour $R \in]0 ; 3 \text{ u.a.}]$, l'énergie est plus élevée. La méthode variationnelle nous fournissant une borne supérieure de l'énergie correcte, il s'agit donc d'une moins bonne évaluation de l'énergie.

Pour $R > 3 \text{ u.a.}$, le problème est d'une autre nature. Paradoxalement, nous obtenons une énergie qui devient inférieure à celle prévue par la fonction d'onde coulombienne. Il ne faut pas pour autant en conclure que la fonction d'onde gaussienne devient meilleure dans ce domaine. En effet, le comportement asymptotique attendu pour $R \rightarrow \infty$ n'est pas obtenu. On doit donc mettre sérieusement en doute la validité des résultats dans ce domaine. Nous expliquons ceci par des instabilités numériques causées par la trop grande valeur absolue de $-\alpha\rho^2$ lors de la recherche du minimum, ce qui rend $\exp(-\alpha\rho^2)$ extrêmement proche de 0.

Finalement, en dépit de la possibilité de limiter les calculs numériques à des évaluations d'intégrales doubles, contrairement à la fonction d'onde à facteur coulombien qui conduit à des calculs numériques d'intégrales triples, la médiocrité des résultats obtenus nous a conduit à renoncer à utiliser cette fonction d'onde.

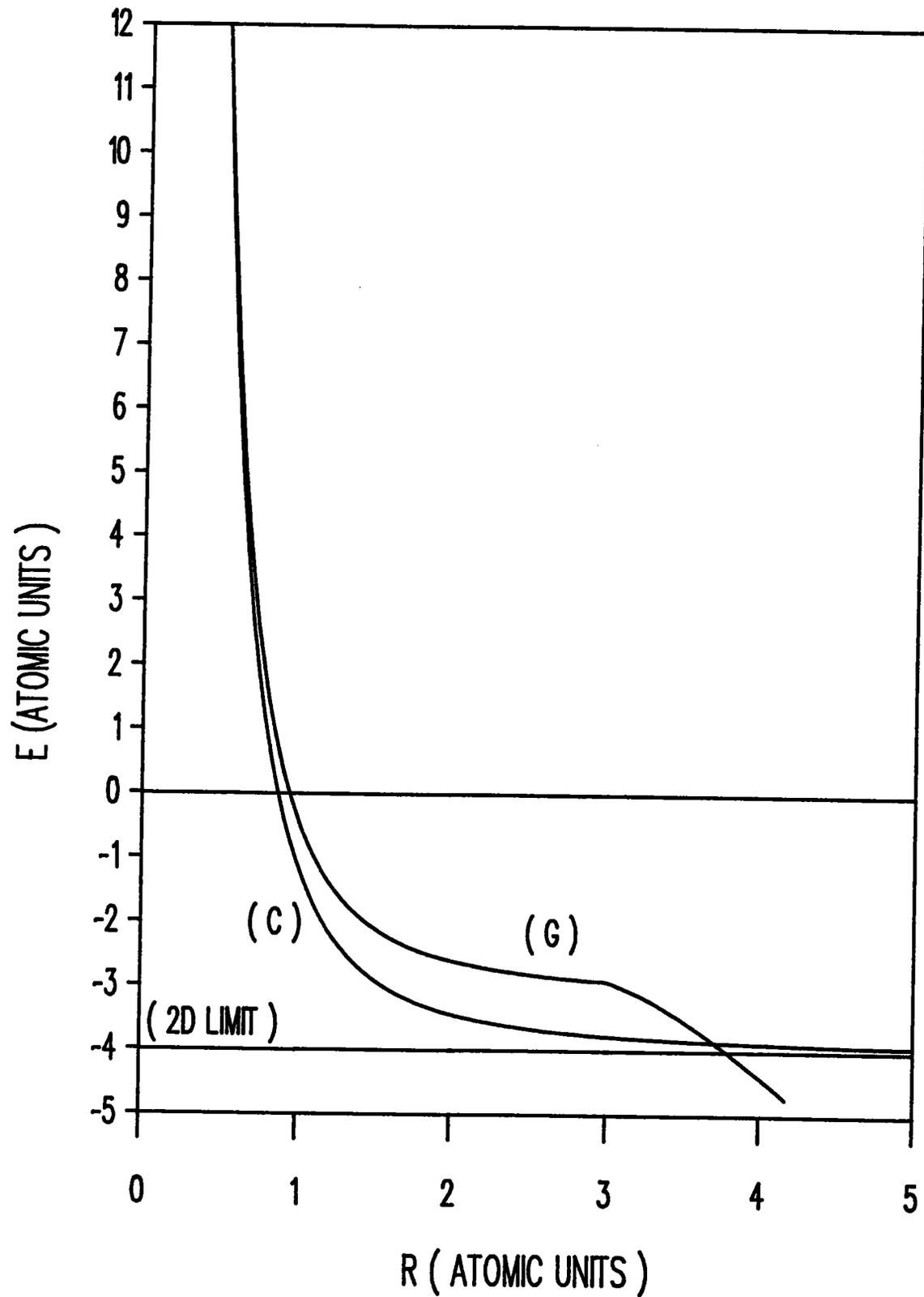


FIG. E.1.

Energie de liaison d'un exciton confiné dans un disque en fonction du rayon R du disque. (C) correspond au calcul variationnel avec un facteur de corrélation $\exp(-\alpha\rho)$, (G) au calcul variationnel avec un facteur de corrélation $\exp(-\alpha\rho^2)$.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- M. Abramowitz, I. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, Dover (1970)
- M. Altarelli, Phys. Rev. B28, 842 (1983)
- M. Altarelli dans *Heterojunctions and Semiconductor Superlattices*, édité par G. Allan, G. Bastard, N. Boccard, M. Lannoo, et M. Voos, Springer (1986)
- L.C. Andreani et A. Pasquarello, Europhys. Lett. 6, 259 (1988).
- L.C. Andreani et A. Pasquarello, Superl. Microstr. 5, 59 (1989).
- E.J. Austin Semicond. Sci. Technol. 3, 960 (1988).
- A. Baldereschi et N.O. Lipari, Phys. Rev. B3, 439 (1971).
- G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, Les Editions de Physique (1990).
- G. Bastard, Phys. Rev. B24, 5693 (1981).
- G. Bastard, Phys. Rev. B25, 7584 (1982).
- G. Bastard, E.E. Mendez, L.L. Chang, L. Esaki, Phys. Rev. B26, 1974 (1982).
- G. Bastard et J.A. Brum dans *Quantum Well Structures, Physics and applications*, IEEE J. Quant. Electr. QE22, 1625 (1986).
- B.J. BenDaniel, C.B. Duke, Phys. Rev. 152, 683 (1966).
- M. Born et J.P. Oppenheimer, *Ann. Phys.* 84, 457 (1927).
- L.E. Brus, J. Chem. Phys., 79, 5566 (1983).

Références

- L.E. Brus, *J. Chem. Phys.*, **80**, 4403 (1984).
- L.E. Brus, *IEEE J. Quant. Electr.*, **QE22**, 1909 (1986).
- J.W. Brown, H.N. Spector, *Phys. Rev. B* **35**, 3009 (1987).
- G.W. Bryant, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 1140 (1987).
- G.W. Bryant, *Phys. Rev. B* **37**, 8763 (1988a).
- G.W. Bryant, *Surface Science* **196**, 596 (1988b).
- G. Burns, *Solid State Physics*, Academic Press (1990).
- M.G. Burt *Semicond. Sci. Technol.* **3**, 1224 (1988).
- J. Callaway, *Quantum Theory of the Solid State*, Academic Press (1974).
- Y.C. Chang, G.D. Sanders, H.Y. Chu, dans *Excitons in Confined Systems*, édité par R. Del Sole, A. D'Andrea et A. Lapicciarella (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1988).
- J. Cibert, P.M. Petroff, G.J. Dolan, S.J. Pearton, J.H. English, *Appl. Phys. Lett.* **19**, 1275 (1986).
- J. Cibert, P.M. Petroff, G.J. Dolan, D.J. Werder, *Superlattices and Microstructures* **3**, 35 (1987).
- C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloe, *Mécanique Quantique*, Hermann (1976).
- E. Corcoran, *Pour la Science* **159**, 78 (1991).
- A. D'Andrea, R. Del Sole, *Solid State Commun.* **74**, 1121 (1990).

-
- P.J. Dean et D.C. Herbert, dans *Excitons*, Vol. 14 des *Topics in Current Physics*, édité par K. Cho (Springer-Verlag, Berlin, 1979).
- J.O. Dimmock, dans *Semiconductors and Semimetals*, vol. 3 édité par R.K. Willardson et A.C. Beer, Academic Press (1963).
- R. Dingle, W. Wiegmann et C.H. Henry, *Phys. Rev. Lett.*, **33**, 827 (1974).
- R. Dingle, A.C Gossard et W. Wiegmann, *Phys. Rev. Lett.*, **34**, 1327 (1975).
- R.D. Dupuis et P.D. Dapkus, *Appl. Phys. Lett.*, **32**, 295, (1978).
- G. Döhler, *Pour la Science* **75**, 84 1984.
- Al.L. Efros, A.L. Efros, *Sov. Phys. Semicond.*, **16**, 772 (1982).
- G.T Einervoll et P.C. Hemmer, *J. Phys. C* **21**, L1193 (1988).
- R.J. Elliott, *Theory of Excitons I*, dans *Polarons and Excitons*, p296 Plenum Press (1963).
- P. Enders, *Phys. Stat. Sol. (b)* **139**, K113 (1987).
- L. Esaki, *IEEE J. Quant. Electr.* **QE22**, 1611 (1986).
- L. Esaki, dans *Physics and Applications of Quantum Wells and Superlattices*, édité par E.E. Mendez et K. von Klitzing, NATO ASI Series, Series B : Physics, Vol. 170 (Plenum Press, New York, 1987), p. 1
- L. Esaki et R. Tsu, IBM Research Note RC-2418 (1969).
- L. Esaki et R. Tsu, *IBM J. Res. Develop.* **14**, 61 (1970).
-

Références

- G. Fishman, *Energie et fonction d'onde des semi-conducteurs*, Les Editions de Physique (1988).
- S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics*, Springer Verlag (1974).
- V. Fock, *Z. Physik* 61, 126 (1930).
- J. Frenkel, *Phys. Rev.* 37, 17, 1276 (1931).
- V.L. Ginzburg, V.V. Kelle, *ZhETF Pis. Red.* 17, 428 (1973).
- I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products*, Academic Press (1980).
- R.L. Greene, K.K. Bajaj, *Solid State Commun.* 45, 825 et 831 (1983).
- R.L. Greene, K.K. Bajaj, D.E. Phelps, *Phys. Rev. B* 29, 1807 (1984).
- H. Haken, *Quantum Field Theory of Solids*, North Holland (1976).
- W.A. Harrison, *Phys. Rev.* 123, 85 (1961).
- D.R. Hartree, *Proc. Cambridge Pjil. Soc.* 24, 89 (1928).
- H. Haug, S.W. Koch, *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, World Scientific (1990).
- C.H. Henry, K. Nassau, *Phys. Rev. B*, 1, 1628 (1970).
- N. Holonyak Jr., R.M. Kolbas, E.A. Rezek et R. Chin, *J. Appl. Phys.* 49, 5392 (1978).
- J.J. Hopfield et D.G. Thomas, *Phys. Rev.* 132,563 (1963).

E.A. Hylleraas, *Z. Phys.* **54**, 347 (1929).

M. Jaros, *Physics and applications of Semiconductor Microstructures*, Oxford Sc. Pub. (1989).

Tsin-Fu Jiang, *Solid State Com.* **50**, 589 (1984).

E.O. Kane *J. Phys. Chem. Solids* **6**, 236 (1958).

E.O. Kane *J. Phys. Chem. Solids* **8**, 38 (1959).

Y. Kayanuma, *Solid State Com.* **59**, 405 (1986).

Y. Kayanuma, *Phys. Rev.* **B38**, 9797 (1988).

Y. Kayanuma, *Phys. Rev.* **B44**, 13085 (1991).

Y. Kayanuma et H. Momiji, *Phys. Rev.* **B41**, 10261 (1990).

C. Kittel, *Théorie quantique du solide*, Dunod (1967).

D.A. Kleinman, *Phys. Rev.* **B28**, 871 (1983).

R.S. Knox, *Theory of Excitons, Solid State Physics*, suppl. 5, édité par F.Seitz et D. Turnbull, Academic Press (1963).

T. Koopmans, *Physica* **1**, 104 (1933).

R.L. Kubena, R.J. Hoyce, J.W. Ward, H.L. Garvin, F.P. Stratton, R.G. Brault, *Appl. Phys. Lett.* **50**(22), 1589 (1987).

H.J. Lee, L.Y. Juravel, J.C. Wolley et A.J. Springthorpe, *Phys. Rev.* **B21**, 659 (1980).

Références

- Y.C. Lee, M.N. Mei et K.C. Liu, *J. Phys. C* 15, L469 (1982).
- S. Le Goff et B. Stébé, *Solid State Com.* 83, 555 (1992).
- S. Le Goff et B. Stébé, à paraître dans *J. Phys. B*.
- S. Le Goff et B. Stébé, à paraître dans *Phys. Rev. B*.
- J.M. Luttinger, *Phys. Rev.* 102, 1030 (1956).
- J.M. Luttinger et W. Kohn, *Phys. Rev.* 97, 869 (1955).
- J.Y. Marzin, *Heterojunctions and Semiconductors Superlattices* édité par G. Allan, G. Bastard, N. Boccara, M. Lannoo et M. Voos (Springer Verlag) 1986.
- H. Mathieu, *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques*, (Masson 1990).
- M. Matsuura et Y. Shinozuka, *J. Phys. Soc. Jpn.* 53, 3138 (1984).
- A. Messiah, *Mécanique Quantique*, Dunod (1969).
- R.C. Miller, D.A. Kleinman, W.T. Tsang et A.C. Gossard, *Phys. Rev. B* 24, 1134 (1981).
- R.C. Miller, A.C. Gossard, W.T. Tsang et O. Munteanu, *Phys. Rev. B* 25, 3871 (1982).
- R.C. Miller, D.A. Kleinman et A.C. Gossard, *Phys. Rev. B* 29, 7085 (1984).
- B.R. Nag, *J. Appl. Phys.* 70 4623 (1991).
- S.V. Nair, S. Sinha, K.C. Rustagi, *Phys. Rev. B* 35, 4098 (1987).

- G.C. Osbourn, *K. Vac. Sci. Technol.* B1, 379 (1983).
- G.C. Osbourn, *IEEE J. Quant. Electr.* QE22, xxxx (1986).
- G. Paasch, P.H. Nguyen et G. Gobsch), *Phys. Stat. Sol. (b)* 167, 581 (1991).
- A. Pépin, C. Vieu, G. Faini, M. Schneider, F. Mollot, Y. Nissim, M. Juhel, L. Birotheau 3èmes Journées de la Matière condensée, sur affiche 2-4 septembre 1992.
- W. Pötz, D.K. Ferry, *Superlattices and Microstructures* 3 57 (1987).
- W. Que, *Solid State Com.* 81, 721 (1992).
- M.A. Reed, R.T. Bate, K. Bradshaw, W.M. Duncan, W.R. Frensley, L.W. Lee, H.D. Shih, *J. Vac. Sci. Technol. B* 4, 358 (1986).
- M.A. Reed, J.N. Randall, R.J. Aggarwal, R.J. Matyi, T.M. Moore, A.E. Wetsel, *Phys. Rev. Let.* 60, 535 (1988).
- D.C. Reynolds et T.C. Collins, *Excitons : Their Properties and Uses*, Academic Press, New York (1981).
- W. Rudin, *Real and complex analysis*, McGraw-Hill (1966).
- B. Sapoval et C. Hermann, *Physique des Semi-conducteurs*, Ellipses (1990).
- G.D. Sanders et Y.C. Chang, *Phys. Rev.* B32, 5517 (1985).
- G.D. Sanders et Y.C. Chang, *Phys. Rev.* B35, 1300 (1987).
- P.C. Sercel et K.J. Vahala, *Phys. Rev* B42 3690 (1990).
- J. Singh, *The Dynamics of Excitons, Solid State Physics*, vol. 38, édité par H.

Références

- Ehrenreich et D. Turnbull, Academic Press (1984).
- J.C. Slater, Phys. Rev. 76, 1592 (1949).
- Van der Ziel, R. Dingle, R.C. Miller, W. Wiegmann et W.A. Nordland Jr. , Appl. Phys. Lett. 32 295 (1978).
- P. Voisin, dans *Two dimensional systems, Heterojunctions and Superlattices* édité par G. Bauer, F. Kuchar et H. Heinrich (Springer Verlag) 1984.
- P. Voisin, Bulletin de L'Union des Physiciens 729 1333 (1990).
- B.A. Vojak, N. Holonyak Jr., D.W. Laidig, K. Hess, J.J. Coleman et P.D. Dapkus, Solid State Commun. 35, 477 (1980).
- G. Wannier, Phys. Rev. 52, 191 (1937).
- C. Weisbuch, S. Beaumont, C. Sotomayor-Torres, J.P. Kotthaus, K. Harmans, P. Van Deale, J. Williamson, F. Briones, La Recherche 22, 1298 (1991).
- B. Zaslów, M.E. Zandler, Am. J. Phys. 35, 1118 (1967).
- G. Zepp, *Mécanique Quantique*, p. 215, Vuibert (1975).
- B. Zhu et K. Huang, Phys. Rev. B36, 8102 (1987).
- B. Zhu, Phys. Rev. B37, 4689 (1988).