



AVERTISSEMENT

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

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

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

Contact : ddoc-theses-contact@univ-lorraine.fr

LIENS

Code de la Propriété Intellectuelle. articles L 122. 4

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

http://www.cfcopies.com/V2/leg/leg_droi.php

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

Université de Metz

U.F.R. Sci.F.A

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 25 Juin 1998

pour l'obtention du

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

par

Mostafa AZAITOUNI

| | |
|--|------------|
| BIBLIOTHEQUE UNIVERSITAIRE - - METZ | |
| N° inv. | 19980425 |
| Cote | S/M3 98/20 |
| Loc | Magasin |

Effet d'un champ électrique sur les trions excitoniques dans les puits quantiques $GaAs/AlGaAs$

Composition du jury

| | | |
|-----------------------------|--|---|
| <i>Rapporteurs :</i> | B. HÖNERLAGE L. STAUFFER | Université de Strasbourg. Université de Mulhouse. |
| <i>Examineurs :</i> | J.P. LAURENTI B. LEPLEY B. STEBE | Université de Metz. Université de Metz. Université de Metz. |
| <i>Directeur de thèse :</i> | F. DUJARDIN | Université de Metz. |

*A la mémoire de mon père,
à ma mère, mes sœurs et mes frères,*

Remerciements

Ce présent travail a été réalisé au sein du groupe de Photoélectronique Théorique dirigé par B. STEBE et s'inscrit dans une étude générale des trions ponctuée par les thèses de E. FEDDI (1987), A. AINANE (1991) et A. EL-HASSANI (1997). Cette thèse a été préparé sous la direction de Monsieur F. DUJARDIN, Maître de Conférences. Je tiens à lui exprimer ma profonde reconnaissance pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail.

Je remercie vivement Madame L. STAUFFER, Professeur à l'université de Mulhouse et Monsieur B. HÖNERLAGE, Professeur à l'Université de Strasbourg d'avoir bien voulu juger ce travail.

Je remercie également Monsieur J.P. LAURENTI, B. LEPLEY et B. STEBE, Professeurs à l'université de Metz pour l'honneur qu'ils me font en acceptant de participer au jury de cette thèse.

Je remercie vivement A. EL HASSANI et B. HARTI de leur soutiens durant toute la période de ce travail trouvent ici le témoignage de ma sincère amitié.

Mes remerciements s'adressent également à tous les collègues de l'Institut de Physique de Metz, qui ont contribué à une ambiance amicale durant la période de la thèse, en particulier L. KOUTTI, A. MAKRADI, A. MORADI, S. BAHRAOUI et M. BESTANDJI.

Je ne pourrais oublier le soutien de la famille NACHET de son aide tout le long de cette thèse.

Table des matières

| | |
|---|-----------|
| 1 Généralités | 5 |
| 1.1 Introduction générale | 7 |
| 1.2 Généralités sur les trions excitoniques | 12 |
| 2 Energie fondamentale du trion négatif X^- dans un puits quantique en présence d'un champ électrique | 17 |
| 2.1 Equation de la masse effective | 22 |
| 2.2 Séparation du mouvement relatif et du mouvement du centre de masse | 23 |
| 2.3 Calcul variationnel de l'énergie fondamentale | 25 |
| 2.3.1 Choix de la fonction d'essai | 25 |
| 2.3.2 Energie de l'état fondamental du trion négatif | 28 |
| 2.3.3 Résultats du calcul variationnel | 32 |
| 3 Stabilité du trion dans le puits quantique en présence du champ électrique | 45 |
| 3.1 Stabilité du trion | 47 |
| 3.2 Comparaison avec l'expérience | 52 |
| 4 Propriétés optiques des trions excitoniques en présence du champ électrique | 57 |
| 4.1 Interaction rayonnement-matière avec un système électron-trou . . | 60 |
| 4.1.1 Approximation dipolaire électrique | 65 |
| 4.1.2 Transition à un photon | 66 |
| 4.2 Absorption par les trions excitoniques en champ électrique uniforme | 68 |

Table des matières

| | | |
|----------|---|------------|
| 4.2.1 | Eléments de matrice de transition dipolaire | 68 |
| 4.2.2 | Calcul des coefficients C_i | 69 |
| 4.2.3 | Probabilité de transition | 74 |
| 4.2.4 | Coefficient d'absorption | 76 |
| 4.3 | Résultats numériques | 77 |
| | Conclusion générale | 84 |
| A | Méthode de la masse effective | 87 |
| A.1 | Approximation de la masse effective | 87 |
| A.2 | Energie d'une particule dans un puits quantique avec saut de masse | 92 |
| A.2.1 | Cas d'un électron | 92 |
| A.2.2 | Cas d'un trou | 97 |
| A.3 | Etat d'une particule dans un puits quantique en présence du champ électrique | 108 |
| B | Calcul des éléments de matrice | 117 |
| B.1 | Evaluation de l'élément de matrice de H_{\perp} | 117 |
| B.2 | Approximation dans le calcul de l'énergie potentielle | 120 |
| B.2.1 | Ecriture de V_c | 120 |
| B.2.2 | Calcul de V_{1h} | 121 |
| B.2.3 | Evaluation de $(V'_{1h})_{pqr}^{p'q'r'}$ | 122 |
| B.2.4 | Calcul de a_{1h} et b_{1h} | 123 |
| C | Energie de liaison de l'exciton | 125 |
| C.1 | Equation effective de l'exciton | 125 |
| C.2 | Séparation du mouvement du centre de masse et du mouvement relatif | 126 |
| C.3 | Choix de la fonction d'essai | 128 |
| C.4 | Calcul des éléments de matrice | 129 |
| C.5 | Résultats du calcul variationnel | 131 |
| | Bibliographie | 137 |

Introduction

Le présent travail est consacré à l'étude des trions négatifs, résultant de l'interaction d'un exciton avec un électron dans un semi-conducteur à puits quantique de type I soumis à un champ électrique longitudinal parallèle à la direction de croissance.

Quand nous avons commencé ce travail, les études théoriques et expérimentales étaient rares. Récemment les trions excitoniques ont été identifiés dans les hétérostructures à puits quantique dopés par des accepteurs ou par des donneurs en présence d'un champ magnétique et électrique. La mise en évidence par les expériences de photoluminescence en champ électrique longitudinal nous a permis de comparer l'énergie de liaison du deuxième électron par rapport à l'expérience.

Dans le premier chapitre, nous rappelons les travaux théoriques et expérimentaux qui ont été consacrés à l'étude des puits quantiques en présence du champ électrique, puis nous rappelons les études qui ont été effectuées sur les trions excitoniques.

Dans le second chapitre, nous appliquons l'approximation de la masse effective pour calculer l'état fondamental du trion négatif dans un puits quantique en présence d'un champ électrique de même direction que le confinement par la méthode variationnelle de Ritz, en utilisant une fonction d'onde d'essai exprimée en coordonnées elliptiques.

Dans le troisième chapitre, nous discutons un des deux processus de dissociation du trion négatif, ($\text{trion} \rightarrow \text{exciton} + \text{électron}$), puis nous comparons l'énergie de liaison du deuxième électron du trion négatif par rapport aux résultats expérimentaux.

Dans le quatrième chapitre, nous rappelons l'Hamiltonien d'interaction rayonnement-matière dans un modèle à deux bandes simples. Nous utilisons ce

Hamiltonien pour étudier l'absorption d'un photon par un électron en formant avec l'exciton le trion négatif, en calculant tout simplement l'intensité d'oscillateur du trion négatif au voisinage du bord d'absorption.

Chapitre 1

Généralités

1.1 Introduction générale

Depuis les premiers travaux d'Esaki et Tsu [1] sur la propagation des électrons dans des super-réseaux, de nouvelles propriétés furent observées, c'est ainsi qu'Esaki et Chang [2] mettaient en évidence la résistance négative des super-réseaux, tandis que Dingle et al. [3] prouvaient l'existence des niveaux d'énergie dans les puits quantiques. Depuis, la réalisation des empilements de différents composés de semi-conducteur est devenu possible grâce à l'apparition des nouvelles techniques de croissance cristalline en couche mince (épitaxie par jets moléculaire ou organométalliques).

Un puits quantique simple est constitué d'une couche très mince d'un semi-conducteur prise en sandwich entre deux couches d'un autre semi-conducteur de largeur de bande interdite différente et de structure cristallographique très voisine. A titre d'exemple, la couche de *GaAs* dans le cas du système *GaAs/AlGaAs* représente un puits de potentiel pour les électrons de la bande de conduction et les trous de la bande de valence. En conséquence le mouvement des particules dans le plan perpendiculaire à la direction de croissance reste libre, tandis que dans la direction parallèle, les particules sont confinées et leurs énergies sont alors quantifiées. Cette nouvelle structure modifie la densité d'états.

De nombreuses expériences d'électroabsorption et de photoluminescence dans les systèmes semi-conducteurs à puits quantiques, principalement les systèmes (*GaAs/Al_xGa_{1-x}As*) ont permis l'observation des pics excitoniques [4-7].

Récemment l'effet d'un champ électrique appliqué dans la direction de confinement a été sujet de nombreuses études expérimentales et théoriques. Lorsqu'on applique un champ électrique sur des semi-conducteurs massifs, nous obtenons

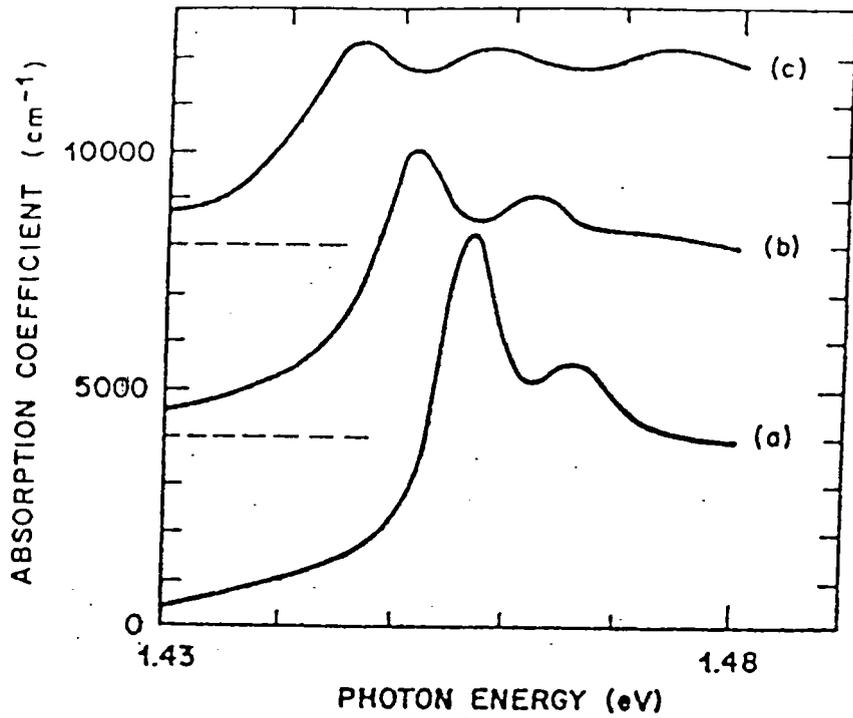


FIG. 1.1: Le coefficient d'absorption en fonction de l'énergie de photon, pour le système $GaAs/Al_{0.32}Ga_{0.68}As$ de largeur 95 \AA , pour différentes valeurs du champ électrique. (a) $= 1 \times 10^4 \text{ V/cm}$; (b) $= 4.7 \times 10^4 \text{ V/cm}$; (c) $= 7.4 \times 10^4 \text{ V/cm}$ Miller et al. [12].

un élargissement (déplacement) du bord d'absorption. Ce phénomène est connu sous l'effet "Franz-Keldysh" [8]. C'est à partir de 1970 que Dow et Redfield [9] ont étudié l'électroabsorption de l'exciton en présence d'un champ électrique uniforme, ils ont constaté un déplacement des résonances excitoniques vers les plus basses énergies. Ce phénomène est déjà connu sous le nom d'effet Stark dans le cas de l'atome d'hydrogène. Mendez et al. [4] ont étudié l'effet d'un champ électrique longitudinal sur des puits quantiques de type $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$, ils ont observé une forte diminution du signal de photoluminescence, et un décalage vers le rouge des pics au fur et à mesure que le champ électrique augmente. Ces résultats ont été interprétés par la séparation des particules dans le puits, et la modification des états d'énergie. D'autres part ces résultats ont été expliqués qualitativement par Bastard et al. [10] au moyen d'un calcul variationnel des états propres d'un puits quantique soumis à un champ électrique longitudinal, tandis que Miller et Gossard [6] ont observé des raies de luminescence intrinsèque et extrinsèque dans des puits $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ dopés par des atomes accepteurs (Beryllium) sous champ électrique longitudinal. Ils ont aussi constaté suite à l'augmentation du champ électrique, un faible déplacement des pics de photoluminescence de l'exciton lourd vers l'exciton lié à l'accepteur.

L'effet d'un champ électrique appliqué à un puits quantique ($GaAs/AlGaAs$) déplace le pic d'absorption excitonique vers les faibles énergies, c'est l'effet Stark de confinement quantique (Miller et al. 1984, Chemla 1985 [11, 13]). La principale différence par rapport à l'effet de "Franz-Keldysh", réside dans l'existence de résonances excitoniques pour des valeurs du champ électrique supérieures à $10^4 V/cm$ pour le GaAs massif. Comme le montre la figure (1.1) l'augmentation du champ électrique appliqué à un puits quantique $GaAs/Al_{0.32}Ga_{0.68}As$ de largeur 95 Å déplace les raies d'absorption vers les basses énergies.

Les études théoriques sur l'énergie de liaison de l'exciton dans des puits quantiques soumis à un champ électrique longitudinal par le calcul variationnel (Brum et al. [14]) et par la méthode variationnelle perturbative (Chuu et al. [15])

ont permis d'interpréter l'effet Stark de confinement quantique.

Depuis, de nombreuses études théoriques et expérimentales sur l'électroabsorption et électroluminescence ont été effectuées sur des puits quantiques simples ou multiples soumis à des champs électriques longitudinaux [16, 24].

L'effet Stark de confinement quantique joue un rôle important dans des dispositifs optoélectroniques, comme les modulateurs optiques ultra-rapides [7, 25], dans les détecteurs à longueur d'onde sélective (Weiner et al. [26]), et dans les modulateurs linéaires (Miller et al. [28]) et intervient aussi dans la bistabilité optique (Miller et al. [27]). A titre d'exemple, la figure (1.2) montre un détecteur à puits quantiques $GaAs/AlGaAs$ et la réponse du photocourant.

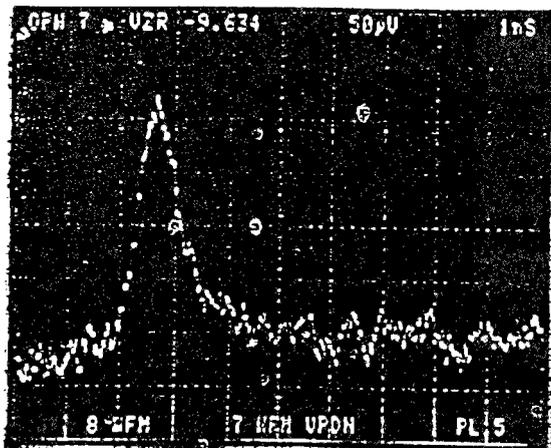
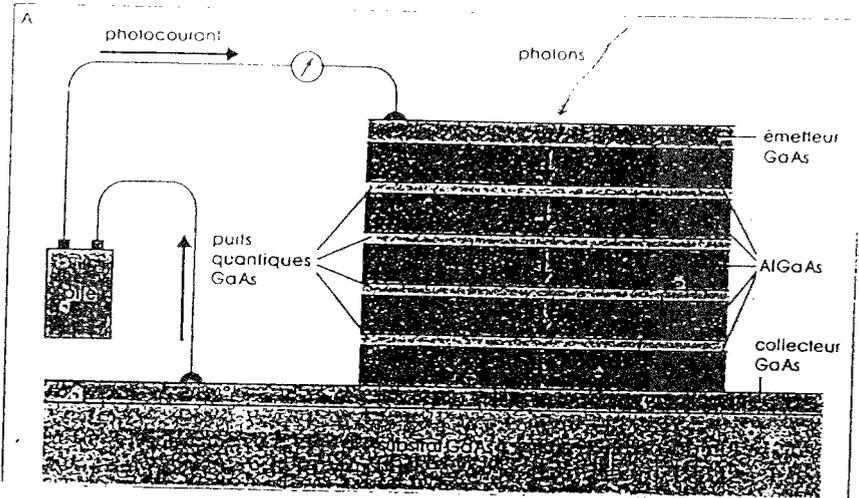


FIG. 1.2: Schéma d'un détecteur à puits quantique GaAs/AlGaAs et la réponse du photocourant résolue en temps, éclairé par un laser pulsé de 4 ps et de longueur d'onde $\lambda = 861 \text{ nm}$ Wood et al. [25].

1.2 Généralités sur les trions excitoniques

Dans ce paragraphe nous rappelons les principaux travaux expérimentaux et théoriques sur les trions excitoniques dans les semi-conducteurs massifs, les puits quantiques, et les points quantiques (quantum dots).

Par analogie avec certains petits systèmes moléculaires et atomiques stables, par exemple les édifices hydrogènoïdes H^- , H_2^+ et H_2 , Lampert [29] a suggéré l'existence de plusieurs complexes excitoniques dans les semi-conducteurs massifs, tout simplement en généralisant le concept d'exciton de Wannier [30]. Les complexes excitoniques pouvant résulter de la liaison d'un exciton avec des impuretés neutres ou ionisées sont connus sous le nom de "complexes localisés" ou d'un exciton avec des quasi-particules neutres ou chargées sont "les complexes mobiles".

Parmi les complexes localisés, la liaison d'un exciton avec une impureté, conduit suivant l'état de charge de l'impureté aux différents complexes exciton-donneur neutre (D^0, X), exciton-accepteur neutre (A^0, X), ou encore exciton-donneur ionisé (D^+, X), qui ont été observés pour la première fois dans les spectres de photoluminescence du Silicium (Haynes [31]) et dans d'autres semi-conducteurs [32, 34].

L'exciton est libre de se déplacer dans le cristal, mais peut également se lier à un autre exciton pour donner naissance à un complexe excitonique mobile et neutre, le biexciton ou molécule excitonique X_2 . Le biexciton a été identifié dans le Silicium (Haynes [35]), le Germanium (Benoit et al. [36]), le $CuCl$ [37, 38], et dans les puits quantiques $GaAs/AlGaAs$ (Miller et al. [39]).

Les excitons chargés ou trions excitoniques sont des complexes à trois particules. Ils sont mobiles et chargés et peuvent être rassemblés en deux types:

- les trions positifs X_2^+ (e, h, h) résultant de l'interaction coulombienne entre deux trous et un électron.
- les trions négatifs X_2^- (e, e, h) résultant de l'interaction coulombienne entre deux électrons et un trou.

Notre étude concerne essentiellement les trions négatifs X^- dans un puits quantique $GaAs/AlGaAs$ en présence d'un champ électrique longitudinal.

Des études théoriques ont montré la stabilité des trions excitoniques dans les semi-conducteurs massifs (Munchy et al. [40], Insepov et al. [41]), et dans les milieux bidimensionnels par un calcul variationnel (Stébé et al. [42]) ou par un calcul analytique (Thilagam [43]) de l'énergie de liaison du trion. Les trions excitoniques ont été observés par des expériences de luminescence pour la première fois dans le Germanium massif à basse température (Thomas et al. [44]), et également par des expériences de luminescence et d'absorption dans des films minces de $CuCl$ massif (Stébé [45]). En général, les observations d'excitons chargés dans les semi-conducteurs massifs ne sont pas convaincantes à cause de leur faible énergie de liaison.

Le calcul variationnel de l'énergie de liaison des trions excitoniques dans les milieux ($2D$) a montré que cette énergie est dix fois plus grande que dans les systèmes $3D$ (Stébé et al. [42]), ce qui montre que l'effet de confinement a pour conséquence d'augmenter l'énergie de liaison. Par conséquent les trions excitoniques sont plus facilement observables dans les structures de basses dimensionalité (surfaces et interfaces, super-réseaux, puits quantiques, points quantiques) que dans les semi-conducteurs massifs ($3D$).

Les trions excitoniques X^- ont été observés par les expériences de magnéto-absorption dans des hétérostructures semi-conductrices, à savoir dans des puits quantiques $CdTe/Zn_xCd_{1-x}Te$ de largeur 100 \AA dopés dans les barrières avec des donneurs indium pour produire un excès d'électrons dans le puits, (Kheng et al. [46, 47]). Ces observations n'ont pas été faciles à cause du faible écart énergétique des raies excitoniques du complexe (D^0, X) et du trion négatif X^- . A titre d'indication l'énergie de liaison du deuxième électron, c'est à dire l'écart énergétique des raies de l'exciton et du trion, est de l'ordre de 2.65 meV , et celui de $(X - (D^0, X))$ est de l'ordre de 4.4 meV à champ nul. Cette différence des énergies est due à un fort potentiel de localisation créé au centre du puits par le

donneur chargé positif et qui est absent pour le trion X^- .

Les récentes expériences de magnétophotoluminescence dans la direction de confinement sur des puits quantiques ($GaAs/AlGaAs$) simples ou doubles (Buhman et al., Shields et al. [48, 50]), ont montré que l'intensité de la raie du trion dépend à la fois de la concentration des électrons dans le puits et de la température. L'écart énergétique entre la raie de l'exciton et du trion augmente lorsqu'on fait varier l'intensité du champ magnétique.

Les trions positifs X_2^+ ont été mis en évidence par les expériences de photoluminescence et de photoréfectance en champ magnétique dans des puits quantiques ($GaAs/AlGaAs$) dopés par des accepteurs de Silicium (Shields et al. [51], Finkelstein et al. [52]). Ces expériences ont montré que l'augmentation de la température favorise la dissociation thermique $X_2^+ \rightarrow X + h$, et que l'énergie de liaison du deuxième trou dans le trion positif est faiblement différente de celle correspondant à l'énergie du deuxième électron dans le trion négatif. Contrairement aux calculs réalisés par Stébé et al. [42] dans le cas des semi-conducteurs à deux dimensions montrant que la différence de l'énergie de liaison est de plus de 30%.

Les premières études théoriques sur l'état fondamental des trions excitoniques X^- et X_2^+ dans les semi-conducteurs (2D) et (3D) à gap direct en présence d'un champ électrique uniforme par un calcul variationnel (Katih et al. [53], El-Hassani [54]), ont montré le renforcement de l'énergie de liaison pour des valeurs particulières du rapport des masses effectives de l'électron et du trou.

Les récentes expériences de photoluminescence dans les puits quantiques ($GaAs/AlGaAs$) de largeur 300 Å soumis à un champ électrique de même direction que le confinement Shields et al. [55], ont montré un déplacement du pic du trion négatif X^- vers les faibles énergies et une réduction de l'énergie du deuxième électron lorsque l'intensité du champ électrique augmente. Comme le montre la figure (1.3) l'augmentation du champ électrique appliqué à un puits $GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As$ de largeur 300 Å déplace le pic de X^- vers les faibles

énergies, c'est l'effet Stark de confinement quantique.

Les études théoriques des trions excitoniques confinés dans les points quantiques en présence d'un champ magnétique perpendiculaire ont montré que le spectre d'absorption dépend de la polarisation de la lumière. L'énergie de liaison du deuxième électron est de l'ordre de 3.7 meV pour le système *GaAs* (Wojs et al. [56]).

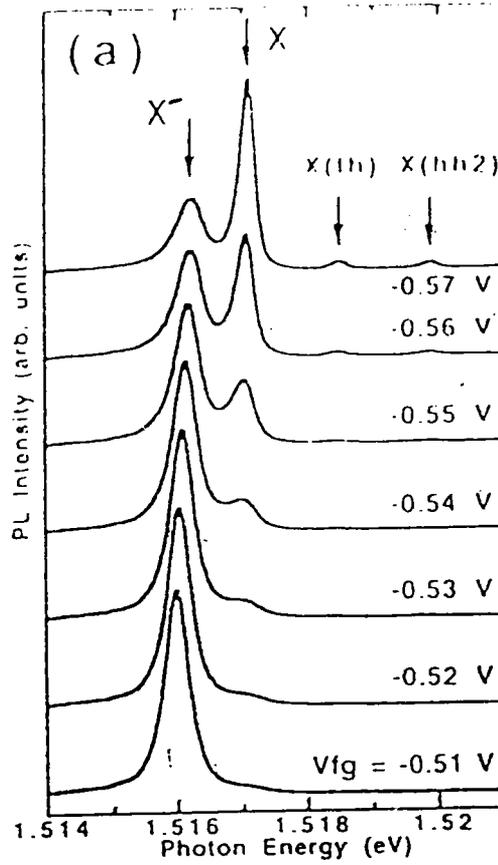


FIG. 1.3: Spectre de photoluminescence en fonction de l'énergie de photon pour le puits $GaAs/Al_{0.33}Ga_{0.67}As$ de largeur 300 \AA , réalisé à $T = 2K$ pour différentes valeurs du champ électrique Shields et al. [55].

Chapitre 2

Energie fondamentale du trion
négatif X^- dans un puits quantique
en présence d'un champ électrique

Introduction

Le problème de l'application du champ électrique dans un puits quantique a suscité de nombreuses études théoriques et expérimentales. Quand il est appliqué suivant la direction de croissance, il est désigné sous l'expression de champ longitudinal et lorsqu'il est appliqué suivant la direction perpendiculaire, il est désigné sous l'expression de champ transversal.

Dans le présent chapitre, nous calculons par la méthode variationnelle l'énergie de l'état fondamental du trion X^- , issu de l'interaction coulombienne entre deux électrons et un trou, dans un puits quantique de semi-conducteur de type I soumis à un champ électrique longitudinal (voir Fig.(2.1)).

Au paragraphe (2.2) nous donnons l'équation de Schrödinger effective du système dans le cadre de l'approximation de la fonction enveloppe. Au paragraphe (2.3) nous résolvons cette équation pour l'état fondamental en utilisant la méthode variationnelle de Ritz, dans ce même paragraphe nous précisons le choix de la fonction d'onde d'essai exprimée dans un système de coordonnées elliptiques. Cette fonction d'essai sera utilisée au chapitre 4, pour l'étude des propriétés optiques.

Nous particularisons nos résultats à un puits quantique $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. Nous calculons plus précisément les énergies de corrélation, un tel calcul a été effectué sans tenir compte de la différence des masses effectives des porteurs de charges dans le puits et les barrières. Ces énergies de corrélation sont calculées pour deux concentrations d'Aluminium $x = 0.15$ et $x = 0.30$, nous choisissons ces valeurs de concentration d'Aluminium afin de pouvoir retrouver les résultats de Stébé et al. [58] à champ nul. Les énergies de corrélation sont calculées en

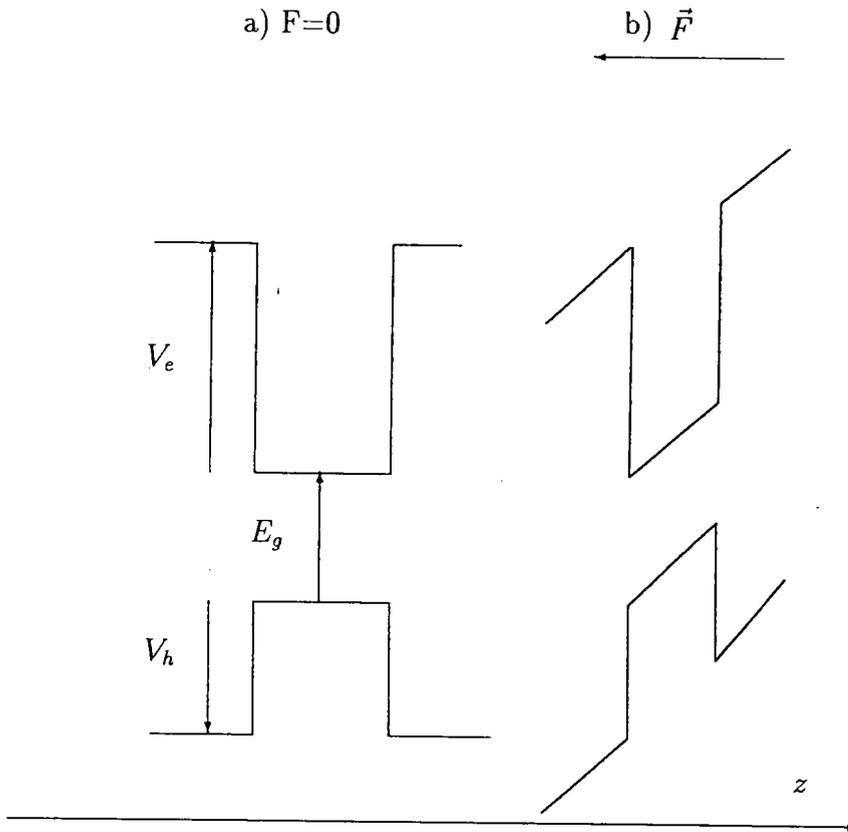


FIG. 2.1: Le puits quantique en absence du champ (a) et en présence du champ électrique (b) vu par un électron et un trou.

fonction de la largeur pour des puits finis, et pour deux valeurs du rapport des masses effectives de l'électron et du trou :

$\sigma = 0.196$: masse d'électron/masse du trou lourd

$\sigma = 0.707$: masse d'électron/masse du trou léger

Nous avons traité séparément les trous lourds et légers avec deux hauts de bande de valence différents ce qui n'est exact que pour $k=0$. Les énergies obtenues nous permettrons dans le chapitre 3, de discuter la stabilité du trion par rapport à celle de l'exciton.

2.1 Equation de la masse effective

Nous étudions le trion négatif X^- formé de deux électrons et un trou, assimilable au trion positif X_2^+ par échange des électrons et des trous, confiné dans un puits quantique de semi-conducteur de type I de largeur L , soumis à un champ électrique longitudinal \vec{F} .

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective, et dans un modèle à deux bandes paraboliques simples non dégénérées, l'Hamiltonien s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} (\Delta_1 + \Delta_2) - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \Delta_h + \frac{e^2}{\epsilon} \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1h}} - \frac{1}{r_{2h}} \right) + V_w + eF(z_1 + z_2 - z_h) \quad (2.1)$$

avec :

$$V_w = V_e \theta \left(|z_1| - \frac{L}{2} \right) + V_e \theta \left(|z_2| - \frac{L}{2} \right) + V_h \theta \left(|z_h| - \frac{L}{2} \right) \quad (2.2)$$

Les origines de potentiel électrostatique et des distances sont pris au milieu du puits quantique, m_e^* et m_h^* sont les masses effectives de l'électron et du trou, supposées constantes dans le puits et dans les barrières, ϵ est la constante diélectrique, tenant compte de l'effet d'écran de l'ensemble des électrons dans le cristal, ainsi que de la polarisation des ions, supposée identique dans les deux matériaux, V_e et V_h sont les hauteurs des barrières de potentiel de confinement pour l'électron et le trou. $\theta(x)$ est la fonction d'Heaviside :

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{si } x < 0. \end{cases} \quad (2.3)$$

r_{12} , r_{1h} et r_{2h} désignent respectivement les distances électron-électron et électron-trou. z_1 , z_2 et z_h sont les coordonnées respectives des électrons 1, 2 et du trou le long de l'axe (oz). L'énergie et la fonction d'onde du trion sont solutions de l'équation de Schrödinger :

$$H\Psi(r_1, r_2, r_h) = E\Psi(r_1, r_2, r_h). \quad (2.4)$$

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

L'Hamiltonien effectif défini ci-dessus dépend de neuf coordonnées repérant les trois particules. Les coordonnées dans le plan peuvent être représentées par les coordonnées relatives et celle du centre de masse $(\vec{r}, \vec{R}, \vec{R}_0)$.

$$\begin{aligned}\vec{r} &= \vec{\rho}_1 - \vec{\rho}_2, \quad \vec{R} = \frac{\vec{\rho}_1 + \vec{\rho}_2}{2} - \vec{\rho}_h \\ \vec{R}_0 &= \frac{\sum_i m_i^* \vec{\rho}_i}{\sum_i m_i^*}, \quad i = 1, 2, h\end{aligned}\quad (2.5)$$

où $\vec{\rho}_1, \vec{\rho}_2$ et $\vec{\rho}_h$ sont les projections dans le plan, des vecteurs positions des trois particules. En utilisant ces coordonnées, l'Hamiltonien (2.1) s'écrit :

$$\begin{aligned}H &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_e} \nabla_{\vec{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (\nabla_{z_1}^2 + \nabla_{z_2}^2) - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_{z_h}^2 + V_w + V_c \\ &+ eF(z_1 + z_2 - z_h) - \frac{\hbar^2}{2M_0} \nabla_{\vec{R}_0}^2 \\ &= H_{rel} + H_{c.m.}\end{aligned}\quad (2.6)$$

V_c représente l'énergie potentielle coulombienne. $H_{c.m.}$ représente l'Hamiltonien de la partie plane du mouvement du centre de masse. Le terme noté H_{rel} ne correspond pas uniquement au mouvement relatif mais décrit aussi la projection du mouvement suivant l'axe z . On obtient alors :

$$\begin{aligned}H_{rel} &= -\frac{\hbar^2}{2\mu_e} \nabla_{\vec{r}}^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (\nabla_{z_1}^2 + \nabla_{z_2}^2) - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_{z_h}^2 + V_w \\ &+ V_c + eF(z_1 + z_2 - z_h) \\ H_{c.m.} &= -\frac{\hbar^2}{2M_0} \nabla_{\vec{R}_0}^2\end{aligned}\quad (2.7)$$

et :

$$\mu_e = \frac{m_e^*}{2}; \quad M_0 = 2m_e^* + m_h^*; \quad M = \frac{2m_e^*m_h^*}{2m_e^* + m_h^*} \quad (2.8)$$

La fonction d'onde de l'Hamiltonien H peut être factorisée en une fonction d'onde du mouvement relatif et celle du mouvement du centre de masse :

$$\Psi(r_1, r_2, r_h) = \Psi_{rel}(r, R, z_1, z_2, z_h) \times \Psi_{c.m}(R_0) \quad (2.9)$$

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

$$H_{c.m} \Psi_{c.m} = E_{c.m} \Psi_{c.m}, \quad (2.10)$$

et $E_{c.m}$ représente l'énergie du centre de masse :

$$E_{c.m} = \frac{\hbar^2 K_0^2}{2M_0} \quad (2.11)$$

K_0 est le vecteur d'onde dans le plan du centre de masse du trion. La fonction d'onde solution de l'équation (2.10) est une onde plane. L'Hamiltonien du mouvement relatif peut se simplifier en utilisant le système d'unités atomiques. Nous prenons comme unité de longueur le rayon de Bohr effectif $a^* = \epsilon \hbar^2 / m_e^* e^2$, comme unité d'énergie deux fois le Rydberg effectif $2R^* = e^2 / \epsilon a^*$, et comme unité du champ électrique $F_0 = e / \epsilon a^{*2}$. L'Hamiltonien du mouvement relatif s'écrit donc :

$$\begin{aligned} H_{rel} = & -\nabla_{\vec{r}}^2 - \frac{2\sigma + 1}{4} \nabla_{\vec{R}}^2 - \frac{1}{2} (\nabla_{z_1}^2 + \nabla_{z_2}^2) - \frac{\sigma}{2} \nabla_{z_h}^2 + \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1h}} - \frac{1}{r_{2h}} \right) \\ & + V_w + (z_1 + z_2 - z_h) f \end{aligned} \quad (2.12)$$

où σ représente le rapport des masses effectives entre l'électron et le trou, $f = F/F_0$ est le paramètre sans dimension pour l'intensité du champ électrique. L'énergie correspondant au mouvement relatif est donnée par :

$$H_{rel} \Psi_{rel}(\vec{r}, \vec{R}, z_1, z_2, z_h) = E_{X^-} \Psi_{rel}(\vec{r}, \vec{R}, z_1, z_2, z_h) \quad (2.13)$$

Cette dernière équation est caractérisée par sept degrés de liberté. Comme le système est invariant par rotation autour de l'axe \vec{z} , nous pouvons alors nous limiter à six degrés de liberté. Dans le paragraphe suivant nous précisons notre choix de coordonnées.

2.3 Calcul variationnel de l'énergie fondamentale

Du fait de l'interaction coulombienne entre les deux électrons et le trou, l'équation de la masse effective pour le mouvement relatif n'admet pas de solution analytique. Seule une méthode approchée peut résoudre le problème, nous avons opté pour la méthode variationnelle de Ritz.

2.3.1 Choix de la fonction d'essai

La présence de l'interaction coulombienne entre les trois particules, nous suggère d'opter pour le système de coordonnées utilisé par Hylleraas [57] pour l'atome d'Hélium. Nous avons choisi un système de coordonnées elliptiques (s, t, u) défini à partir des trois coordonnées relatives dans le plan ρ_{12} , ρ_{1h} et ρ_{2h} désignant les distances interparticules.

$$\begin{aligned} s &= \rho_{1h} + \rho_{2h}; \quad t = \rho_{1h} - \rho_{2h}; \quad u = \rho_{12} \\ s &\geq 0; \quad -u \leq t \leq +u; \quad 0 \leq u \leq s \end{aligned} \quad (2.14)$$

L'Hamiltonien du mouvement relatif se transforme alors en l'expression suivante :

$$\begin{aligned} H_{rel} &= - \left[\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{1}{u} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{2s}{s^2 - t^2} \frac{\partial}{\partial s} \right. \\ &\quad \left. - \frac{2t}{s^2 - t^2} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{2s}{u} \frac{u^2 - t^2}{s^2 - t^2} \frac{\partial^2}{\partial s \partial u} + \frac{2t}{u} \frac{s^2 - u^2}{s^2 - t^2} \frac{\partial^2}{\partial t \partial u} \right] \\ &\quad - 2\sigma \left[\frac{s}{s^2 - t^2} \frac{\partial}{\partial s} - \frac{t}{s^2 - t^2} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{s^2 - u^2}{s^2 - t^2} \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{u^2 - t^2}{s^2 - t^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \\ &\quad - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - \frac{\sigma}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + V_w + (z_1 + z_2 - z_h) f + V_c \end{aligned} \quad (2.15)$$

Pour résoudre l'équation (2.13), nous choisissons une fonction d'onde variationnelle qui ne dépend que de s, t, u, z_1, z_2 et z_h .

La fonction d'onde que nous utilisons est du même type que celle utilisée par Stébé et al. [58] pour l'étude de l'énergie de liaison du trion excitonique à champ nul :

$$\psi_{rel}(s, t, u, z_1, z_2, z_h) = \mathcal{N} \Psi(s, t, u, z_1, z_2, z_h) \quad (2.16)$$

où :

$$\begin{aligned} \Psi(s, t, u, z_1, z_2, z_h) &= \sum_{lmnpqr} C_{lmnpqr} [a_p(z_1) a_q(z_2) + a_q(z_1) a_p(z_2)] b_r(z_h) \\ &\times \exp(-\kappa s/2) s^l u^m t^n \chi_e(z_1) \chi_e(z_2) \chi_h(z_h) \end{aligned} \quad (2.17)$$

avec :

$$\begin{aligned} a_p(z_1) &= z_1^p \exp(-\alpha_e z_1^2) \\ a_q(z_2) &= z_2^q \exp(-\alpha_e z_2^2) \\ b_r(z_h) &= z_h^r \exp(-\alpha_h z_h^2) \end{aligned} \quad (2.18)$$

La différence essentielle par rapport à la fonction sans champ (Stébé et al. [58]) est qu'ici, $\chi_e(z_i)_{i=1,2}$ et $\chi_h(z_h)$ sont respectivement les fonctions d'ondes de l'électron et du trou dans un puits quantique en présence du champ électrique longitudinal (Brum et al. [14]) :

$$\chi_e(z) = \begin{cases} A_e \exp(-\beta_e z) \exp(-q_e |z|) & |z| > L/2 \\ B_e \exp(-\beta_e z) \cos(k_e z) & |z| \leq L/2 \end{cases} \quad (2.19)$$

et

$$\chi_h(z) = \begin{cases} A_h \exp(\beta_h z) \exp(-q_h |z|) & |z| > L/2 \\ B_h \exp(\beta_h z) \cos(k_h z) & |z| \leq L/2 \end{cases} \quad (2.20)$$

Les constantes A_e, B_e, A_h et B_h sont obtenues en écrivant les conditions de continuité en ($z = \pm L/2$) des fonctions $\chi_e(z)$ et $\chi_h(z)$ et de leurs dérivées premières.

2.3. Calcul variationnel de l'énergie fondamentale

β_e et β_h sont des paramètres variationnels dépendant du champ, les détails sont donnés en Annexe A.

Les coefficients C_{lmnpqr} , les paramètres variationnels α_e , α_h ainsi que κ sont déterminés de façon à rendre l'énergie

$$E_{X^-} = \frac{\langle \Psi | H_{rel} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (2.21)$$

minimale, les entiers l, m, n, p, q et r sont positifs ou nuls tels que :

$$l + m + n \leq w_1; \text{ et } p + q + r \leq w_2. \quad (2.22)$$

Sachant que l'état fondamental de l'ion H^- est obtenu pour une fonction d'onde symétrique par rapport à l'échange des deux électrons, nous nous limitons aux valeurs paires de n , pour que la fonction d'onde d'essai soit symétrique. w_1 et w_2 sont des entiers positifs ou nuls, qui fixent le nombre de termes de la fonction d'onde dans l'expression (2.17). En l'absence du champ, ils ont été choisis à $w_1 = 4$ et $w_2 = 2$ avec la condition $p + q + r$ pair due à la symétrie du puits suivant oz , ce qui correspond à une fonction d'onde à 66 termes. Dans notre cas, le champ électrique casse la symétrie suivant oz et la parité de $p + q + r$ n'est plus alors définie, ce qui conduit à 154 termes. \mathcal{N} désigne la constante de normation qui satisfait à la condition suivante :

$$\langle \psi_{rel}(s, t, u, z_1, z_2, z_h) | \psi_{rel}(s, t, u, z_1, z_2, z_h) \rangle = \mathcal{N}^2 \int dV \Psi^* \Psi = 1 \quad (2.23)$$

où l'intégration porte à la fois sur les coordonnées elliptiques (s, t, u) , et sur (z_1, z_2, z_h) . L'élément de volume s'écrit :

$$dV = \frac{\pi u (s^2 - t^2)}{\sqrt{u^2 - t^2} \sqrt{s^2 - u^2}} ds dt du dz_1 dz_2 dz_h \quad (2.24)$$

2.3.2 Energie de l'état fondamental du trion négatif

L'Hamiltonien effectif du mouvement relatif peut se mettre sous la forme suivante :

$$H_{rel} = H_{\parallel} + H_{\perp} + V_c \quad (2.25)$$

où H_{\parallel} représente l'opérateur énergie cinétique suivant le plan xy .

$$\begin{aligned} H_{\parallel} = & - \left[\frac{\partial^2}{\partial u^2} + \frac{1}{u} \frac{\partial}{\partial u} + \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{2s}{s^2 - t^2} \frac{\partial}{\partial s} \right. \\ & - \left. \frac{2t}{s^2 - t^2} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{2s}{u} \frac{u^2 - t^2}{s^2 - t^2} \frac{\partial^2}{\partial s \partial u} + \frac{2t}{u} \frac{s^2 - u^2}{s^2 - t^2} \frac{\partial^2}{\partial t \partial u} \right] \\ & - 2\sigma \left[\frac{s}{s^2 - t^2} \frac{\partial}{\partial s} - \frac{t}{s^2 - t^2} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{s^2 - u^2}{s^2 - t^2} \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{u^2 - t^2}{s^2 - t^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \end{aligned} \quad (2.26)$$

et

$$H_{\perp} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - \frac{\sigma}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + V_w + (z_1 + z_2 - z_h) f. \quad (2.27)$$

L'opérateur énergie potentielle coulombienne totale V_c s'écrit :

$$V_c = \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1h}} - \frac{1}{r_{2h}} = (V_c)_{12} + (V_c)_{1h} + (V_c)_{2h}. \quad (2.28)$$

L'énergie moyenne dans l'état $|\Psi\rangle$ a pour expression :

$$E_{X^-} = \frac{\sum_{lmnpqr} \sum_{l'm'n'p'q'r'} C_{lmnpqr} C_{l'm'n'p'q'r'} H_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'}}{\sum_{lmnpqr} \sum_{l'm'n'p'q'r'} C_{lmnpqr} C_{l'm'n'p'q'r'} S_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'}} \quad (2.29)$$

avec :

$$H_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'} = (H_{\parallel})_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'} + (H_{\perp})_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'} + (V_c)_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'} \quad (2.30)$$

2.3. Calcul variationnel de l'énergie fondamentale

$S_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'}$ désigne la matrice de normation.

$$S_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'} = S_{lmn}^{l'm'n'} S_{pqr}^{p'q'r'} \quad (2.31)$$

Sauf pour le potentiel coulombien, nous pouvons séparer les intégrales en s, t, u et en z . Tous ces éléments de matrice peuvent être exprimés à l'aide de l'intégrale triple $J_{lmn}^{l'm'n'}$ définie pour les valeurs paires du paramètre n et qui s'écrit :

$$\begin{aligned} J_{lmn}^{l'm'n'}(\lambda, \mu, \nu) &= 2\pi \int_0^\infty \exp(-\kappa s) s^{l+l'+\lambda} ds \int_0^s \frac{u^{m+m'+\mu}}{\sqrt{s^2-u^2}} du \int_0^u \frac{t^{n+n'+\nu}}{\sqrt{u^2-t^2}} dt \\ &= 2\pi \frac{(l+l'+\lambda+m+m'+\mu+n+n'+\nu)!}{\kappa^{l+l'+\lambda+m+m'+\mu+n+n'+\nu+1}} I_{m+m'+\mu+n+n'+\nu} I_{n+n'+\nu} \end{aligned} \quad (2.32)$$

où

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

Les éléments de matrice des opérateurs H_{\parallel} et H_{\perp} sont données par :

$$(H_{\parallel})_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'} = (H_{\parallel})_{lmn}^{l'm'n'} S_{pqr}^{p'q'r'}$$

avec :

$$\begin{aligned} (H_{\parallel})_{lmn}^{l'm'n'} &= -\frac{k^2}{4} [J_i^j(2, 1, 0) - J_i^j(0, 1, 2)] \\ &+ k(l+m+1) J_i^j(1, 1, 0) - kl J_i^j(-1, 1, 2) \\ &+ m(m+2l) J_i^j(0, -1, 2) - m(m+2n) J_i^j(2, -1, 0) \\ &+ l(l-1) J_i^j(-2, 1, 2) - n(n-1) J_i^j(2, 1, -2) \\ &- km J_i^j(1, -1, 2) + (n-l)(n+l+2m+1) J_i^j(0, 1, 0) \\ &- \sigma \frac{k^2}{2} [J_i^j(2, 1, 0) - J_i^j(0, 3, 0)] \\ &- 2\sigma kl J_i^j(-1, 3, 0) + \sigma k(2l+1) J_i^j(1, 1, 0) \\ &+ 2\sigma l(l-1) J_i^j(-2, 3, 0) - 2\sigma n(n-1) J_i^j(0, 3, -2) \\ &- 2\sigma (l^2 - n^2) J_i^j(0, 1, 0) \end{aligned} \quad (2.34)$$

et :

$$(H_{\perp})_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'} = (H_{\perp})_{pqr}^{p'q'r'} S_{lmn}^{l'm'n'}$$

avec :

$$\begin{aligned} (H_{\perp})_{pqr}^{p'q'r'} &= 2(2E_e + E_h) W_e^0(p', p) W_e^0(q', q) W_h^0(r', r) \\ &- 2 \left(W_e^1(p', p) + \frac{1}{2} W_e^2(p', p) \right) W_e^0(q', q) W_h^0(r', r) \\ &- 2 \left(W_e^1(q', q) + \frac{1}{2} W_e^2(q', q) \right) W_e^0(p', p) W_h^0(r', r) \\ &- 2\sigma \left(W_h^1(r', r) + \frac{1}{2} W_h^2(r', r) \right) W_e^0(p', p) W_e^0(q', q) \\ &+ 2(2E_e + E_h) W_e^0(p', q) W_e^0(q', p) W_h^0(r', r) \\ &- 2 \left(W_e^1(p', q) + \frac{1}{2} W_e^2(p', q) \right) W_e^0(q', p) W_h^0(r', r) \\ &- 2 \left(W_e^1(q', p) + \frac{1}{2} W_e^2(q', p) \right) W_e^0(p', q) W_h^0(r', r) \\ &- 2\sigma \left(W_h^1(r', r) + \frac{1}{2} W_h^2(r', r) \right) W_e^0(p', q) W_e^0(q', p) \quad (2.35) \end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned} W_e^0(p', p) &= \langle \chi_e(z_1) a_{p'}(z_1) | \chi_e(z_1) a_p(z_1) \rangle \\ W_e^1(p', p) &= \langle \chi_e(z_1) a_{p'}(z_1) | \chi_e'(z_1) a_p'(z_1) \rangle \\ W_e^2(p', p) &= \langle \chi_e(z_1) a_{p'}(z_1) | \chi_e''(z_1) a_p''(z_1) \rangle \quad (2.36) \end{aligned}$$

$a_p'(z_1)$ et $a_p''(z_1)$ désignent respectivement les dérivées première et seconde par rapport à la variable z_1 . Les expressions de $W_e^\lambda(q', q)$ et $W_h^\lambda(r', r)$, avec $\lambda = 0, 1, 2$ s'en déduisent facilement. Le calcul explicite de l'élément de matrice $(H_{\perp})_{pqr}^{p'q'r'}$ est reporté en Annexe B.

Les éléments de matrice $S_{lmn}^{l'm'n'}$ et $S_{pqr}^{p'q'r'}$ sont donnés par :

$$\begin{aligned} S_{lmn}^{l'm'n'} &= J_i^j(2, 1, 0) - J_i^j(0, 1, 2) \\ S_{pqr}^{p'q'r'} &= 2 \left[W_e^0(p', p) W_e^0(q', q) + W_e^0(p', q) W_e^0(q', p) \right] W_h^0(r', r). \quad (2.37) \end{aligned}$$

L'énergie potentielle s'écrit :

$$\begin{aligned}
 (V_c)_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'} &= \langle l'm'n'p'q'r' | V_c | lmnpqr \rangle \\
 &\simeq 2S_{lmn}^{l'm'n'} \left[Z_{1h}(p', r', p, r) W_e^0(q', q) + Z_{1h}(p', r', q, r) W_e^0(q', p) \right. \\
 &\quad + Z_{2h}(q', r', q, r) W_e^0(p', p) + Z_{2h}(q', r', p, r) W_e^0(p', q) \\
 &\quad \left. + Z_{12}(p', q', p, q) + Z_{12}(p', q', q, p) \right] W_h^0(r', r). \quad (2.38)
 \end{aligned}$$

Pour le calcul de $(V_c)_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'}$, nous avons utilisé une méthode approchée (Dujardin et al. [59]) (voir (Annexe B)). Par exemple, pour le calcul de l'élément de matrice du potentiel d'interaction entre les deux électrons, on a :

$$V_{c12} = \frac{1}{\sqrt{\rho_{12}^2 + (z_1 - z_2)^2}} \quad (2.39)$$

⇒

$$(V_{c12})_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'} = \langle p'q'r' | (V_{c12})_{lmn}^{l'm'n'} | pqr \rangle \quad (2.40)$$

avec :

$$(V_{c12})_{lmn}^{l'm'n'} \simeq \frac{S_{lmn}^{l'm'n'}}{b_{12+} |z_1 - z_2|} = V_{c'12} \quad (2.41)$$

⇒

$$(V_{c'12})_{pqr}^{p'q'r'} = 2 \left\{ Z_{12}(p', q', p, q) + Z_{12}(p', q', q, p) \right\} W_h^0(r', r) \quad (2.42)$$

avec :

$$\begin{aligned}
 Z_{12}(p', q', p, q) &= \langle a_{p'}(z_1) a_{q'}(z_2) \chi_e(z_1) \chi_e(z_2) | (V_{c'12}) | a_p(z_1) a_q(z_2) \chi_e(z_1) \chi_e(z_2) \rangle \\
 Z_{12}(p', q', q, p) &= \langle a_{p'}(z_1) a_{q'}(z_2) \chi_e(z_1) \chi_e(z_2) | (V_{c'12}) | a_q(z_1) a_p(z_2) \chi_e(z_1) \chi_e(z_2) \rangle
 \end{aligned} \quad (2.43)$$

Les intégrales W_e^λ, W_h^λ et Z_{ij} sont évaluées numériquement par les méthodes de Gauss-Legendre et Gauss-Laguerre.

2.3.3 Résultats du calcul variationnel

Les résultats obtenus sont appliqués à un puits quantique de semi-conducteur de type I, $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. Nous travaillerons avec les données suivantes (Miller et al. [12]), $m_e^*/m_0 = 0.067$, $m_{hh}^*/m_0 = 0.34$, et $m_{lh}^*/m_0 = 0.094$ sont respectivement les masses effectives de l'électron, du trou lourd et du trou léger. Pour les applications numériques nous utilisons la règle de Dingle, les band-offsets sont donnés par $V_e = Q_e \Delta E_g$ et $V_h = Q_h \Delta E_g$, où $Q_e = 1 - Q_h$, nous supposons que la différence de la bande interdite ΔE_g et le pourcentage x d'Aluminium sont reliés par la relation suivante (Lee et al. [60]):

$$\Delta E_g = 1.155x + 0.37x^2 \text{ eV}. \quad (2.44)$$

La répartition de la différence de gap entre les bandes de valence et de conduction reste un problème délicat, pour l'application numérique nous avons pris $Q_e = 0.57$, donné par Miller et al. [12], nous obtenons alors pour $x = 0.30$, $V_e = 216.5 \text{ meV}$ et $V_h = 163.314 \text{ meV}$ et pour $x = 0.15$, $V_e = 103.5 \text{ meV}$ et $V_h = 78.1 \text{ meV}$. Nous prenons pour constante diélectrique $\epsilon = 12.5$ (Greene et al. [61]).

Les figures qui suivent représentent l'énergie de corrélation du trion négatif en fonction de la largeur du puits pour différentes valeurs du champ électrique, obtenues pour deux concentrations d'Aluminium $x = 0.15$ et $x = 0.30$, dans le cas d'un trou lourd $\sigma = 0.196$ et d'un trou léger $\sigma = 0.707$. Nous utilisons une fonction d'onde d'essai à 154 termes ($w_1 = 4$, $w_2 = 2$), ce développement est suffisant pour avoir une bonne convergence pour les valeurs propres.

L'énergie de corrélation du trion X^- est définie par :

$$E_c = E_{X^-} - 2E_e - E_h \quad (2.45)$$

où E_e et E_h sont les énergies de l'état fondamental de l'électron et du trou dans un même puits quantique en présence du champ électrique longitudinal mais en l'absence d'interaction coulombienne.

2.3. Calcul variationnel de l'énergie fondamentale

Dans les figures (2.2) et (2.3) nous avons la variation de l'énergie de corrélation en fonction du champ électrique pour le trou lourd et le trou léger, pour une concentration d'Aluminium $x = 0.30$, et pour quatre valeurs de la largeur du puits. L'énergie de corrélation, le champ électrique, et la largeur du puits sont donnés en unités atomiques. Avec $a^* = 9.95 \text{ nm}$, pour la largeur, $2R^* = 11.58 \text{ meV}$, pour l'énergie, et $F_0 = 11.63 \times 10^5 \text{ V/m}$, pour le champ électrique. Nous constatons que l'énergie de corrélation augmente avec le champ, cette augmentation est négligeable pour des puits étroits, mais devient significative pour des valeurs plus élevées de la largeur.

Dans les figures (2.4) et (2.5) nous avons la variation de l'énergie de corrélation en fonction de la largeur du puits pour quatre valeurs du champ électrique, pour le trou lourd et léger. Pour le champ nul nous obtenons des résultats identiques à ceux de Stébé et al. [58]. L'énergie de corrélation augmente avec la largeur, quelque soit le champ électrique appliqué. Nous remarquons que les courbes présentent un minimum pour une valeur de la largeur du puits voisine de 0.4 unités atomiques, soit environ 4 nm . C'est dans ce domaine que l'effet de confinement est maximum, donc le trion est plus lié, car c'est là que l'énergie de corrélation est la plus grande en valeur absolue. Nous constatons que le minimum de ces courbes diminue avec la concentration en Aluminium. Pour des puits plus étroits, l'énergie de corrélation du trion négatif varie peu avec un champ électrique perpendiculaire, et l'effet du champ électrique est plus prononcé pour des puits plus larges.

Nous remarquons, que pour un champ nul et pour une largeur de 0.4 unités atomiques, soit environ 4 nm , l'énergie de corrélation atteint le double de la valeur correspondant à une largeur de 5 unités atomiques.

Le champ électrique tend à repousser les deux électrons et le trou vers les interfaces opposées, ce qui entraîne une augmentation de la séparation moyenne entre les particules, et conduit à une réduction de l'énergie potentielle coulombienne, donc à une diminution de l'énergie de corrélation en valeur absolue, comme on peut le constater sur les figures (2.4) et (2.5) pour de grandes largeurs.

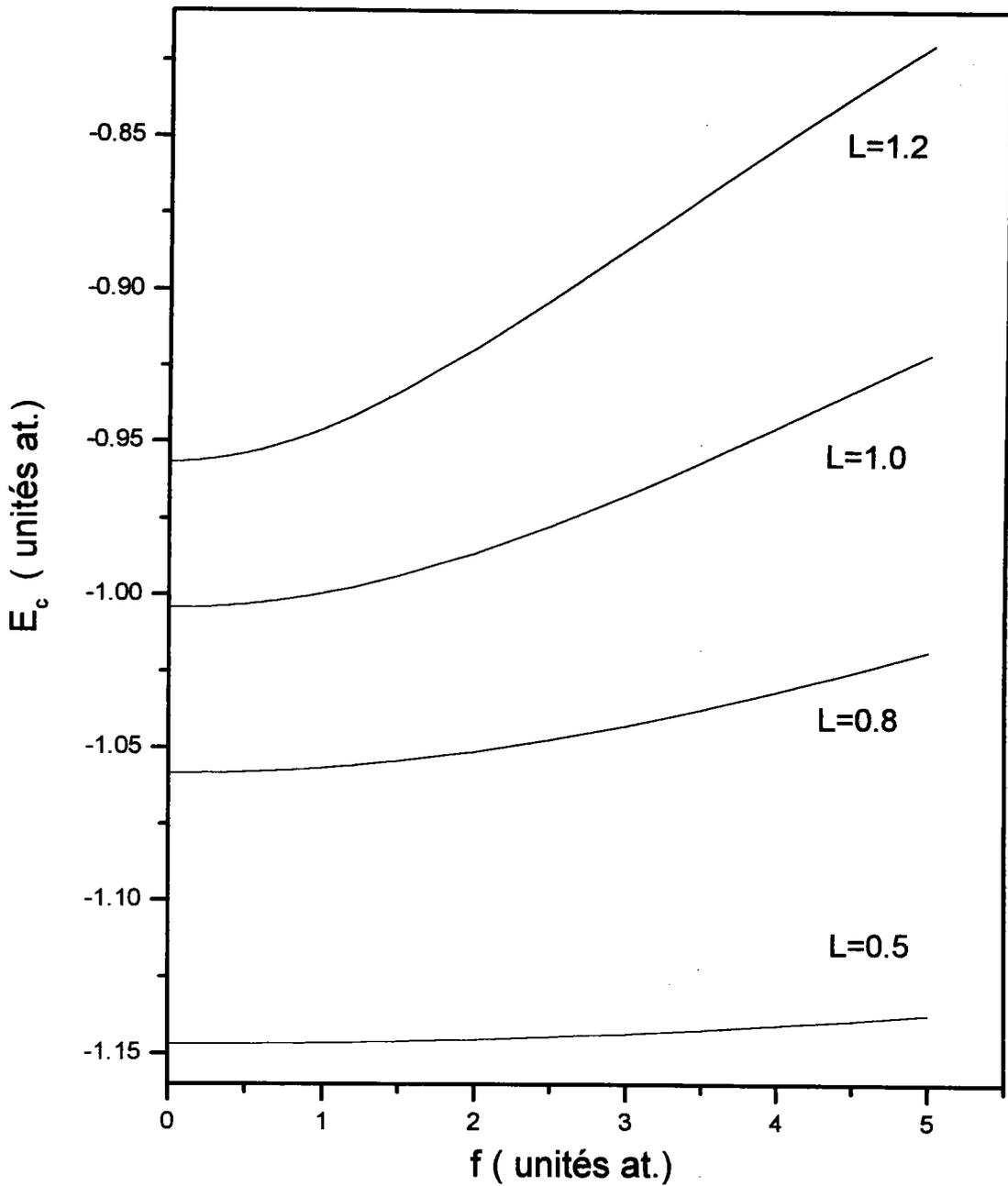


FIG. 2.2: Variation de l'énergie de corrélation en fonction du champ électrique pour le trou lourd ($\sigma = 0.196$), pour la concentration $x = 0.30$, et pour quatre valeurs de la largeur du puits.

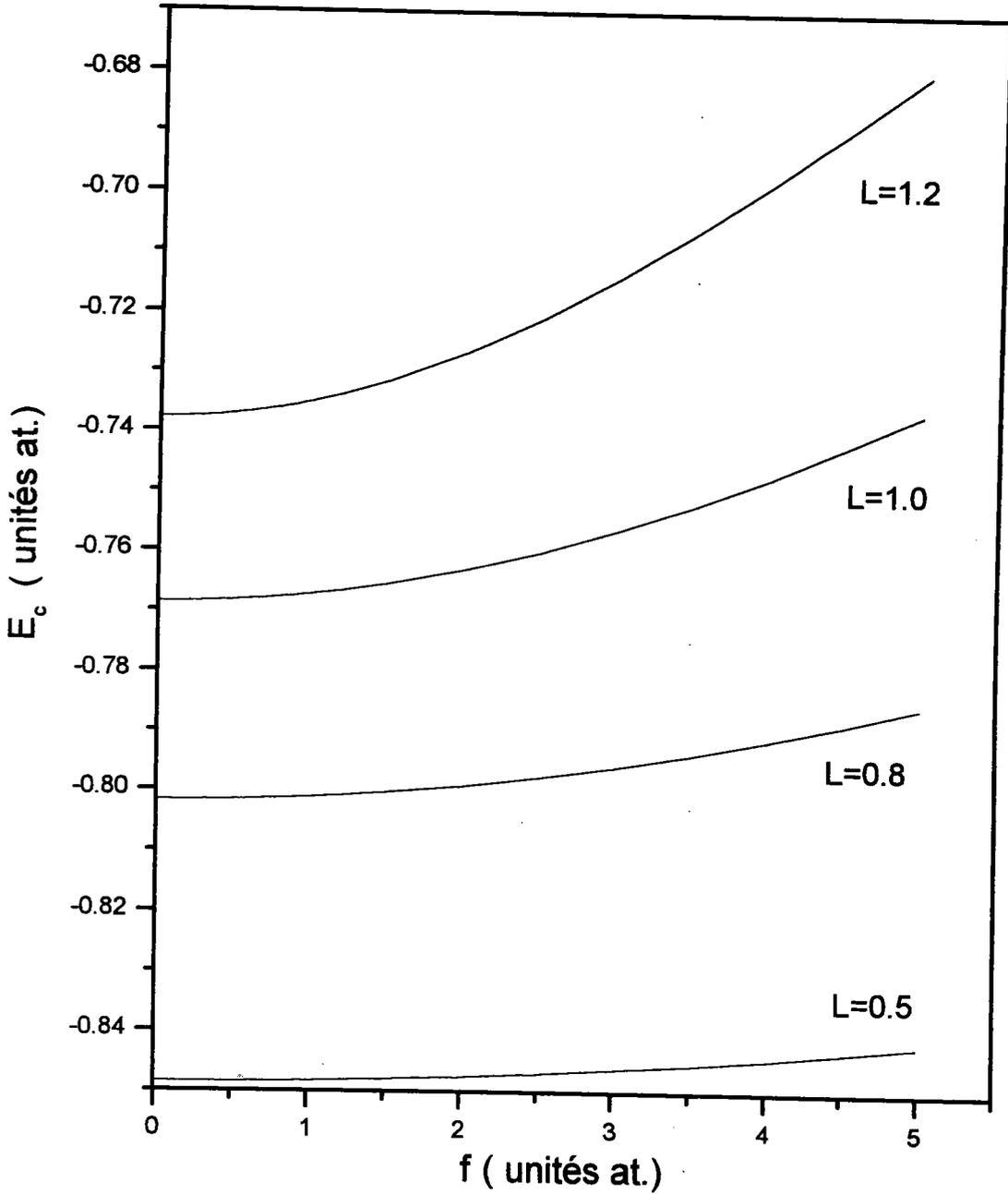


FIG. 2.3: Variation de l'énergie de corrélation en fonction du champ électrique pour le trou léger ($\sigma = 0.707$), pour la concentration $x = 0.30$, et pour quatre valeurs de la largeur du puits.

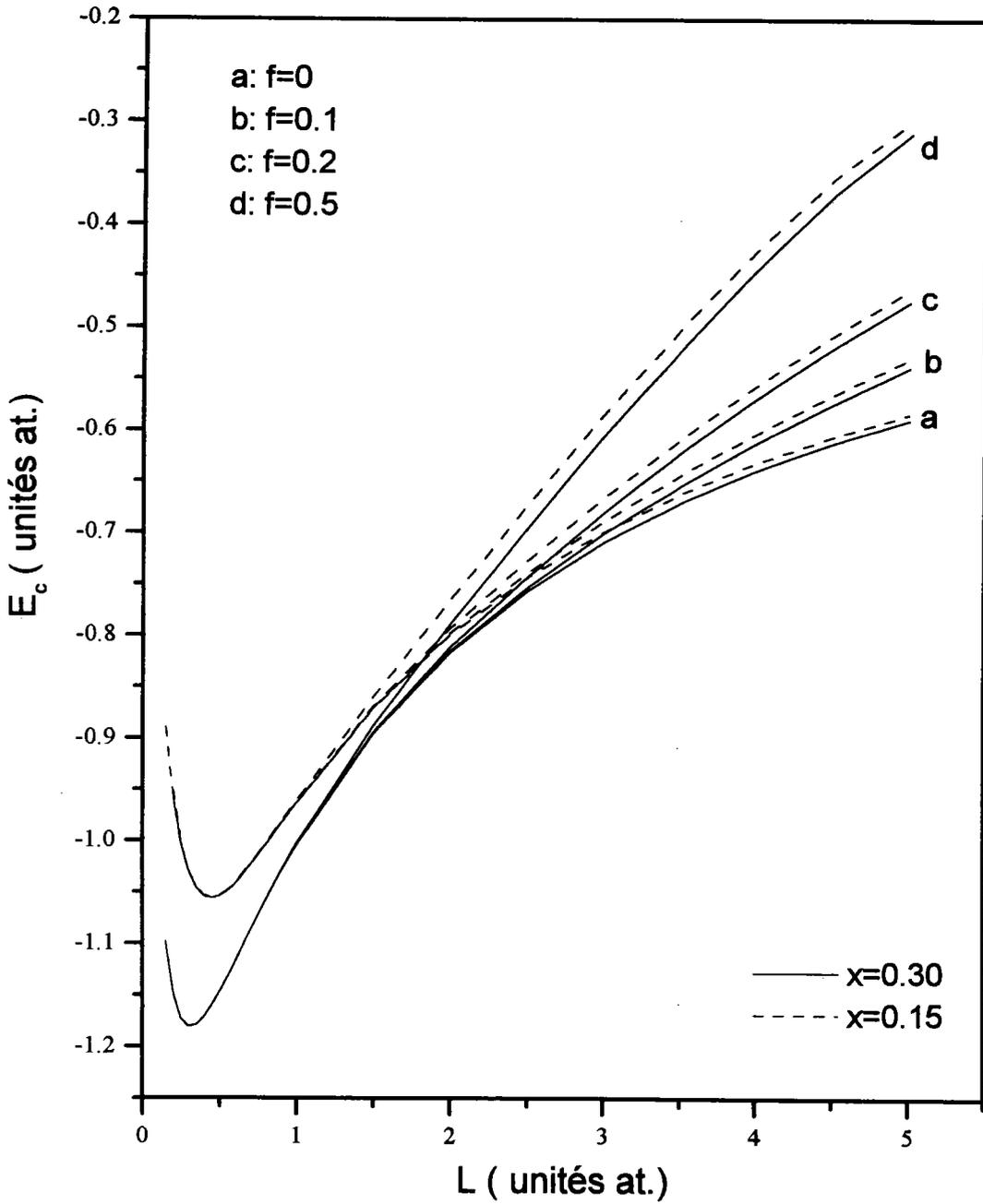


FIG. 2.4: Variation de l'énergie de corrélation en fonction de la largeur du puits, pour différentes valeurs du champ électrique, pour le trou lourd ($\sigma = 0.196$), et pour deux concentrations ($x = 0.30$ et $x = 0.15$).

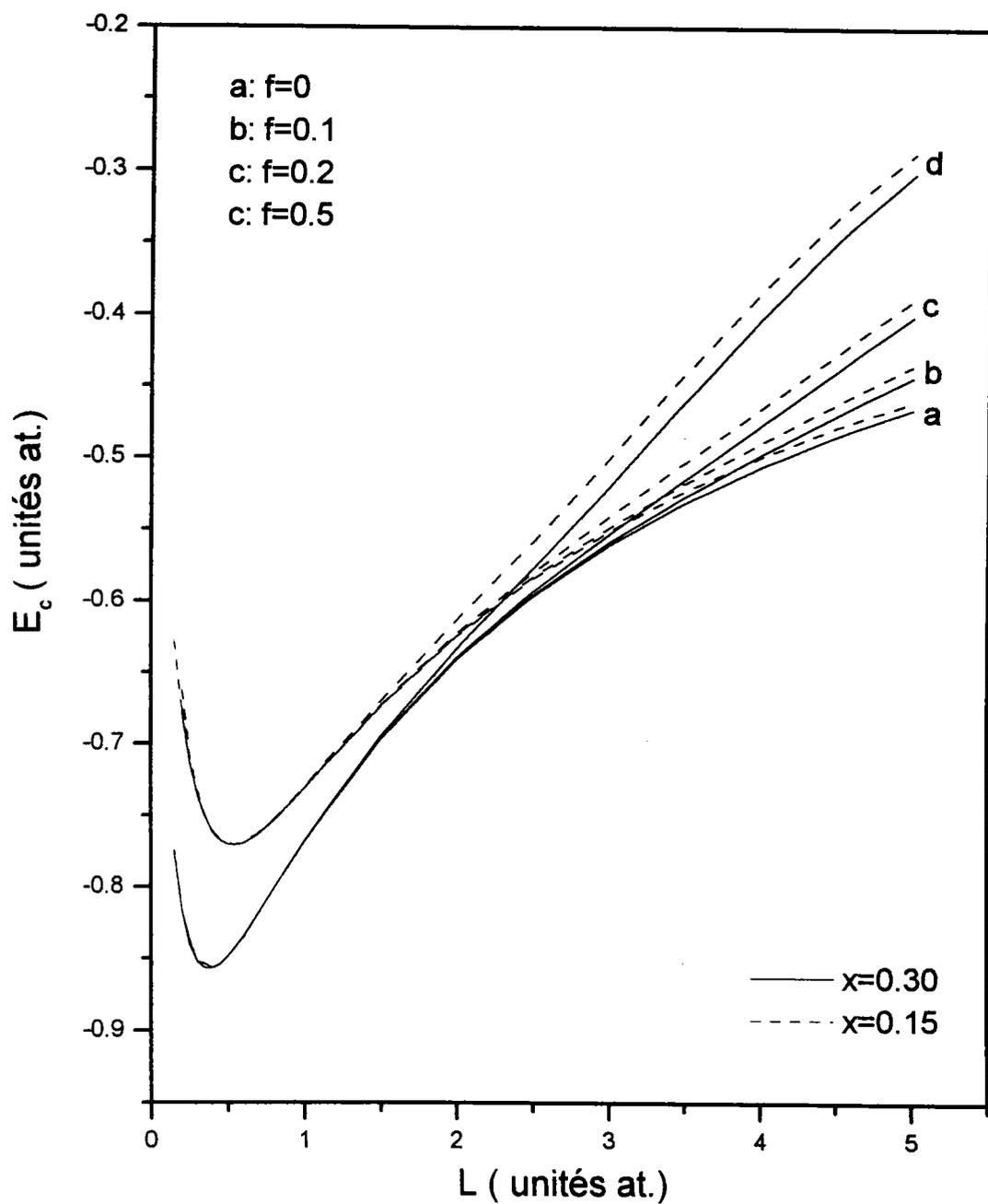


FIG. 2.5: Variation de l'énergie de corrélation en fonction de la largeur du puits, pour différentes valeurs du champ électrique, pour le trou léger ($\sigma = 0.707$), et pour deux concentrations ($x = 0.30$ et $x = 0.15$).

Nous notons que l'énergie de corrélation du trion à trou lourd est inférieure à celle du trou léger. Nous en déduisons que le trion à trou lourd est plus lié que celui du trou léger.

Nous présentons dans la figure (2.6) la variation de la séparation moyenne z_{1h} en fonction du champ électrique pour le trou lourd et pour une largeur du puits de 1.2 unités atomiques. Nous remarquons que la séparation moyenne entre l'électron et le trou augmente avec le champ électrique.

Dans les figures (2.7) et (2.8) nous avons la variation du paramètre variationnel κ en fonction du champ électrique pour le trou lourd et léger, pour $x = 0.30$, et pour quatre valeurs de la largeur. Nous remarquons qu'il est plus important pour les puits étroits et dans ce cas varie peu en fonction du champ électrique. Nous constatons que le paramètre variationnel diminue lorsque la largeur du puits augmente et dans ce cas il varie d'avantage avec le champ. Notons aussi que la valeur est plus importante dans le cas du trou lourd. On peut dire qu'une petite valeur de κ correspond à une grande extension spatiale dans le plan. Ainsi les résultats précédents peuvent être interprétés par une localisation plus importante pour le trou lourd que pour le trou léger et plus importante dans des puits étroits. D'autre part l'effet du champ électrique sur la séparation des particules est plus important dans les puits larges.

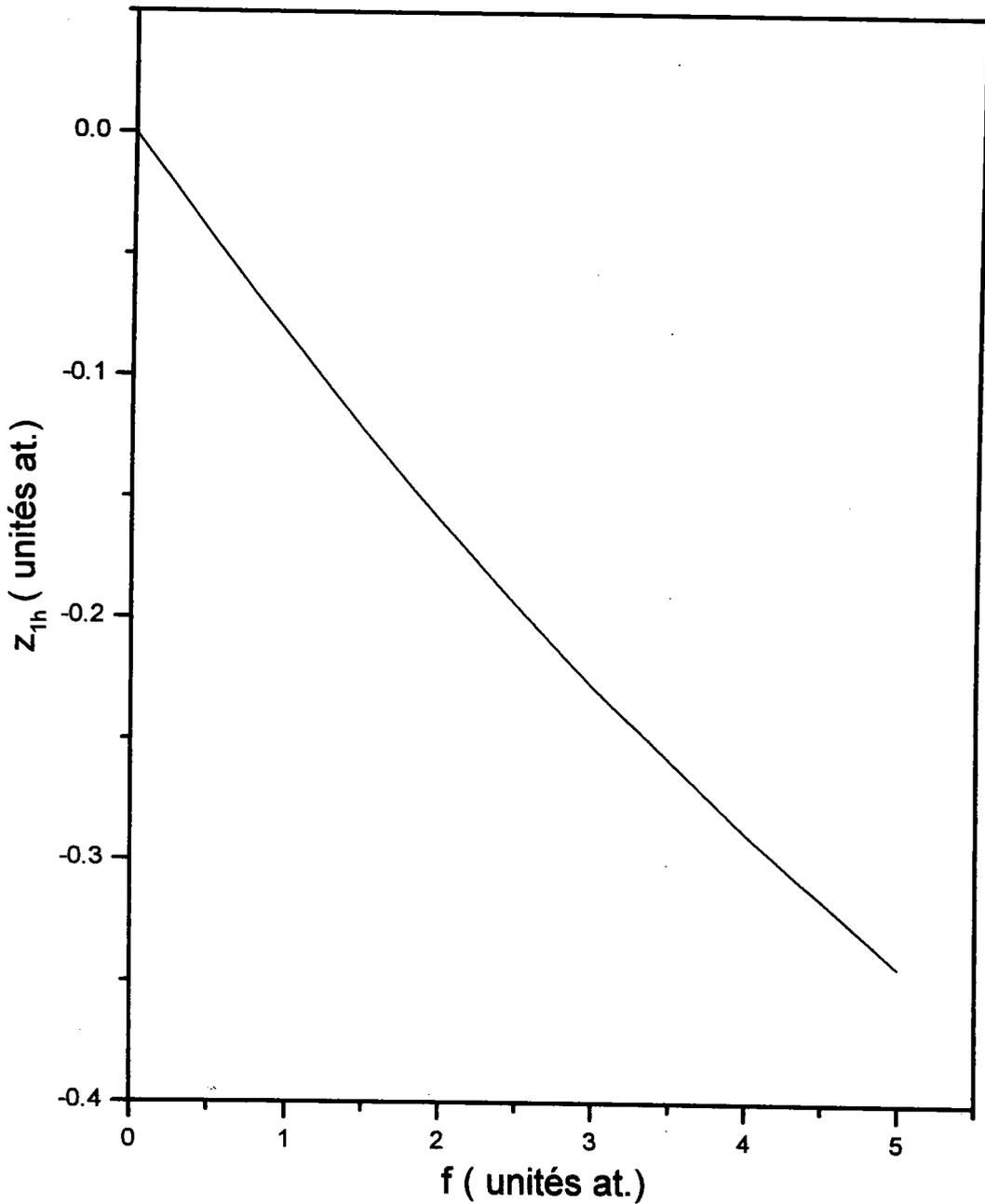


FIG. 2.6: Variation de la séparation moyenne z_{1h} en fonction du champ électrique pour le trou lourd ($\sigma = 0.196$), pour une largeur de 1.2 u. at., et pour la concentration $x = 0.15$.

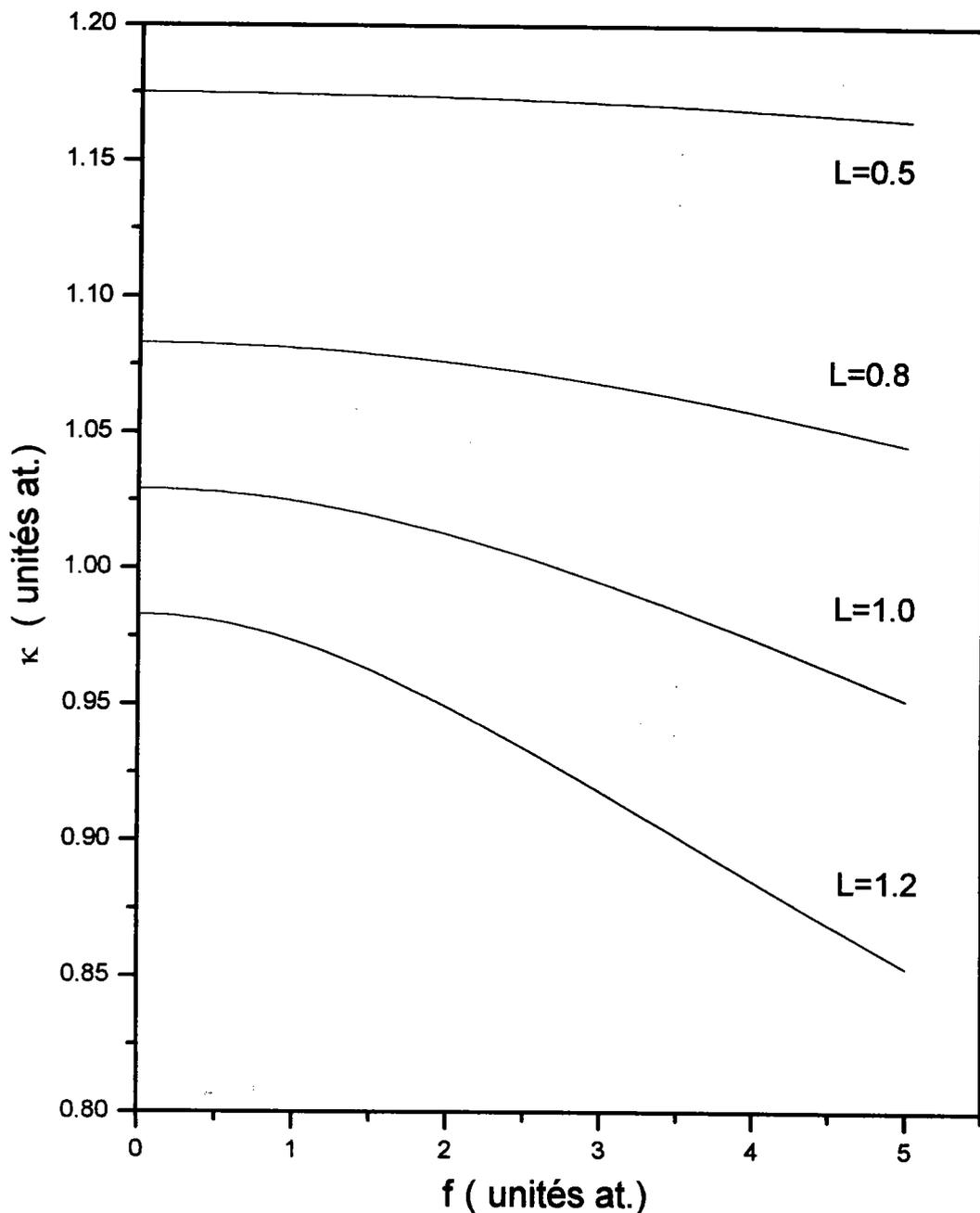


FIG. 2.7: Variation du paramètre κ en fonction du champ électrique pour le trou lourd ($\sigma = 0.196$), pour la concentration $x = 0.30$, et pour différentes valeurs de la largeur.

2.3. Calcul variationnel de l'énergie fondamentale

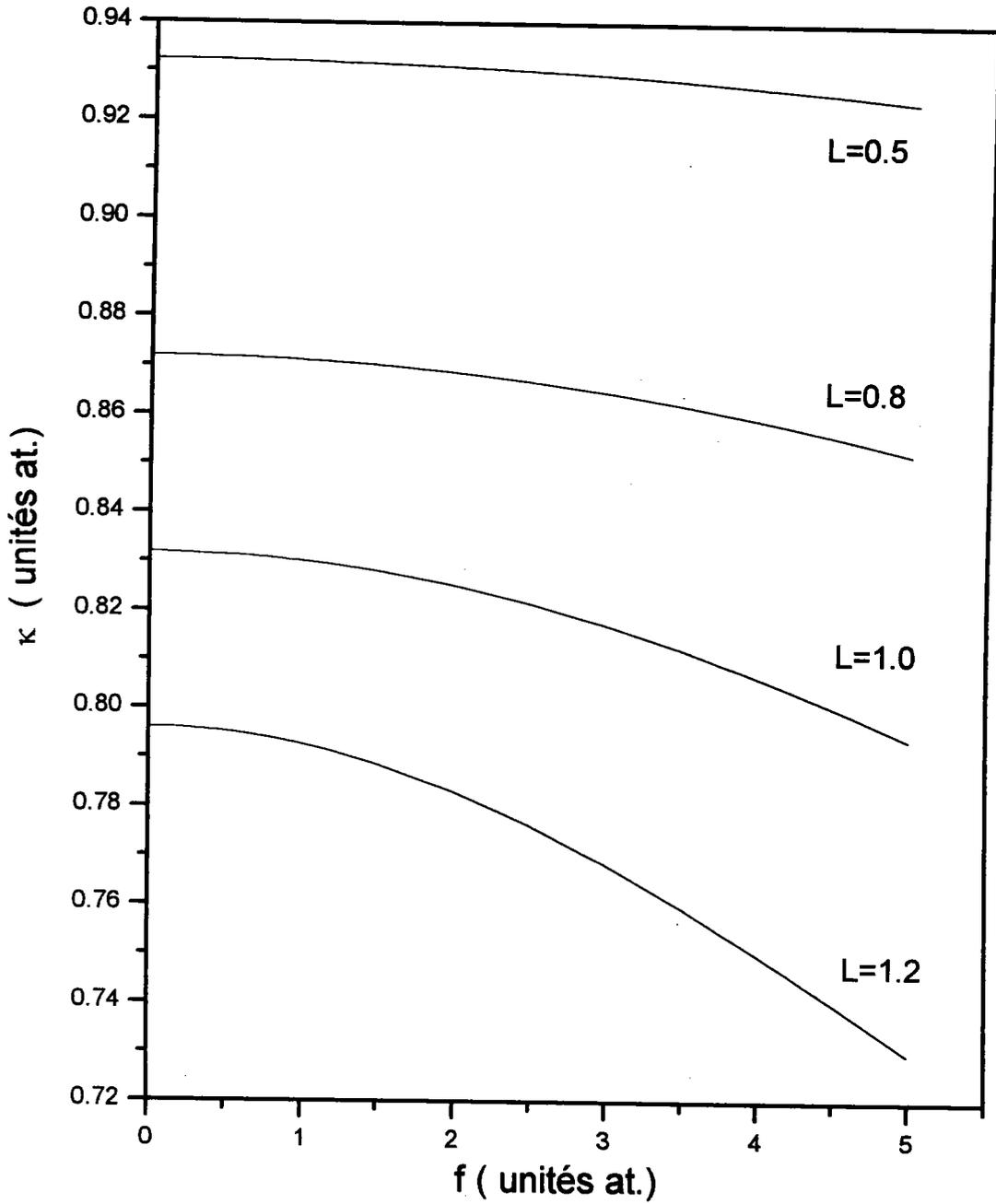


FIG. 2.8: Variation du paramètre κ en fonction du champ électrique pour le trou léger ($\sigma = 0.707$), pour la concentration $x = 0.30$, et pour différentes valeurs de la largeur.

CONCLUSION

Nous avons utilisé la méthode de l'approximation de la masse effective, et en utilisant la méthode variationnelle avec un choix de la fonction d'onde d'essai à 154 termes, nous avons calculé l'énergie fondamentale du trion négatif dans un puits quantique en présence d'un champ électrique uniforme. Les résultats obtenus nous ont permis de déduire que pour les puits étroits le champ électrique a peu d'effet sur les trions excitoniques, et que l'effet du champ est plus important pour des puits larges, de plus le trion à trou lourd est plus favorable à observer, car son énergie de liaison est plus importante.

Chapitre 3

Stabilité du trion dans le puits quantique en présence du champ électrique

Introduction

Nous nous proposons d'étudier dans ce chapitre la dissociation du trion négatif X^- en un exciton X et un électron pour deux valeurs de σ . Dans la première partie nous discutons la stabilité du trion en calculant l'énergie de liaison W de X^- en présence d'un champ électrique uniforme. Cette énergie est désignée dans la littérature par énergie du deuxième électron, au paragraphe (3.2) nous comparons nos résultats avec l'expérience.

3.1 Stabilité du trion

Nous présentons dans la figure (3.1) le diagramme énergétique intervenant dans les transitions. Nous caractérisons l'état initial par la présence d'un électron et l'état final par la présence du trion négatif. La conservation de la quantité de mouvement implique l'égalité des vecteurs d'onde de l'électron et du trion. La condition de stabilité :

$$\zeta_{X^-} < \zeta_X + \zeta_e \quad (3.1)$$

où ζ_{X^-} , ζ_X , et ζ_e sont respectivement les énergies totales du trion, de l'exciton et de l'électron en présence du champ électrique, devient alors :

$$E_{X^-} < E_X + E_e + \frac{\hbar^2 K_0^2}{2m_e^*} \left(\frac{1 + \sigma}{1 + 2\sigma} \right) \quad (3.2)$$

où E_{X^-} , E_X , et E_e représentent respectivement les énergies relatives du trion négatif, de l'exciton (Annexe C), et l'énergie de confinement de l'électron dans un puits quantique en présence du champ électrique longitudinal. Les énergies

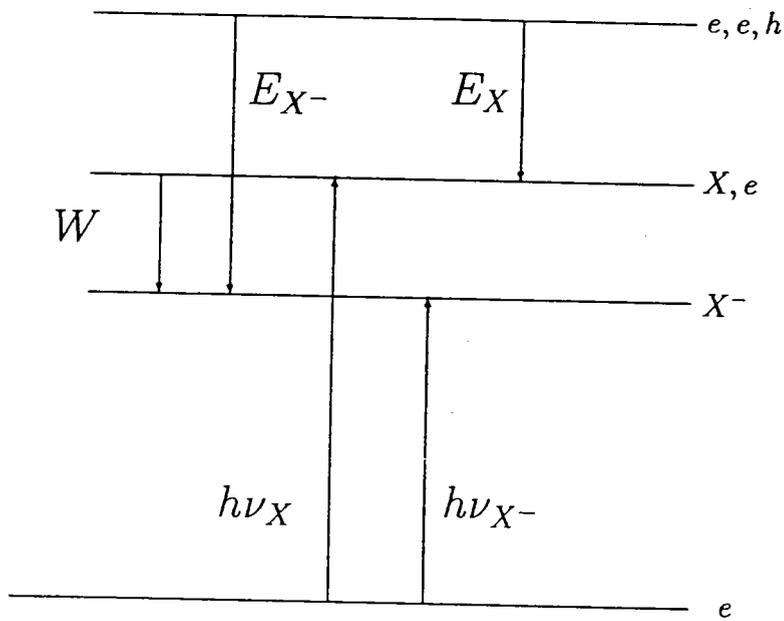


FIG. 3.1: Diagramme de transitions entre un état initial d'électron et un état final du trion négatif X^- .

relatives sont exprimées en fonction des énergies de corrélation $E_{X^-}^c$ et E_X^c telles que :

$$\begin{aligned} E_{X^-} &= E_{X^-}^c + 2E_e + E_h \\ E_X &= E_X^c + E_e + E_h \end{aligned} \quad (3.3)$$

où E_h est l'énergie de confinement du trou dans un puits quantique en présence du champ électrique longitudinal. L'énergie de liaison du trion, qui est aussi définie comme l'énergie du second électron, est donnée par :

$$W = E_{X^-} - E_X - E_e = E_{X^-}^c - E_X^c \quad (3.4)$$

Nous remarquons d'après le diagramme (3.1) que l'énergie de liaison n'est autre que l'écart énergétique entre les raies d'absorption de l'exciton et du trion au bord d'absorption. Nous définissons l'écart des énergies de transition par :

$$\Delta h\nu = h\nu_{X^-}(K_0) - h\nu_X = W - \frac{\hbar^2 K_0^2}{2m_e^*} \left(\frac{1 + \sigma}{1 + 2\sigma} \right) \quad (3.5)$$

où $h\nu_{X^-}$ et $h\nu_X$ désignent respectivement les énergies des transitions associées au trion et à l'exciton.

Nous présentons dans les figures (3.2) et (3.3) la variation de l'énergie de liaison en fonction du champ électrique pour une largeur de 1.2 unités atomiques, pour deux valeurs de concentrations $x = 0.30$ et $x = 0.15$, et pour le trou lourd ($\sigma = 0.196$) et le trou léger ($\sigma = 0.707$). Nous constatons que l'énergie de liaison augmente avec le champ électrique, ceci est en accord avec le fait que les deux raies d'absorption du trion et de l'exciton deviennent de plus en plus proches (Shields et al. [55]), et traduit la diminution de la stabilité lorsque le champ augmente. Cette augmentation est importante pour des valeurs du champ électrique inférieures à 3 unités atomiques, soit environ (35 kV/cm) et devient moins importante pour des valeurs supérieures. Comme pour l'énergie de corrélation du trion (Fig (2.4) et (2.5)), nous constatons que l'énergie de liaison du trion à trou lourd est plus importante en valeur absolue que celle du trion à trou léger. Notons aussi que l'écart énergétique augmente quand la largeur du puits diminue (Dujardin et al. [62]).

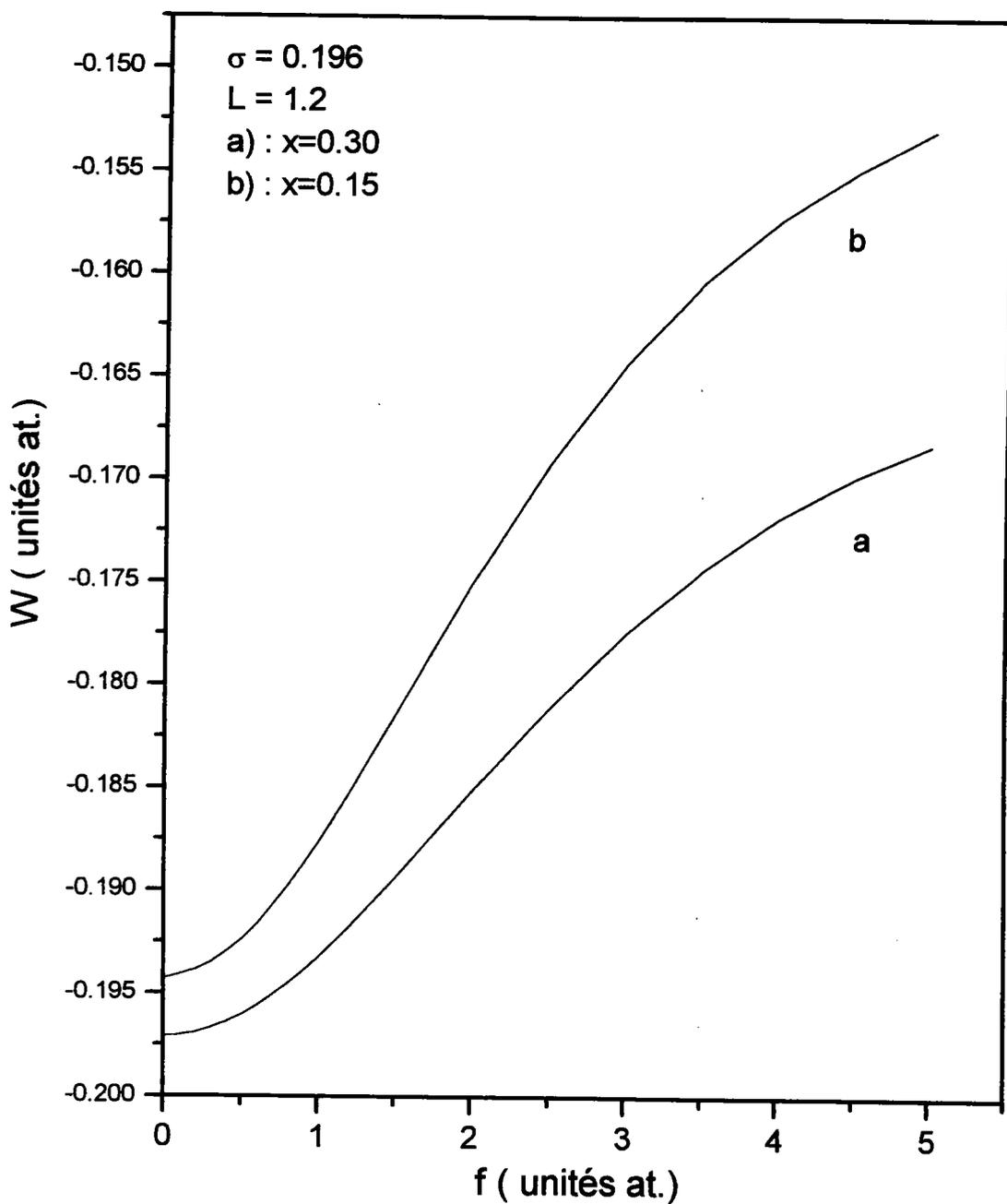


FIG. 3.2: Variation de l'énergie de liaison en fonction du champ électrique pour le trou lourd ($\sigma = 0.196$), pour une largeur de 1.2 u. at., et pour deux concentrations ($x = 0.30$ et $x = 0.15$).

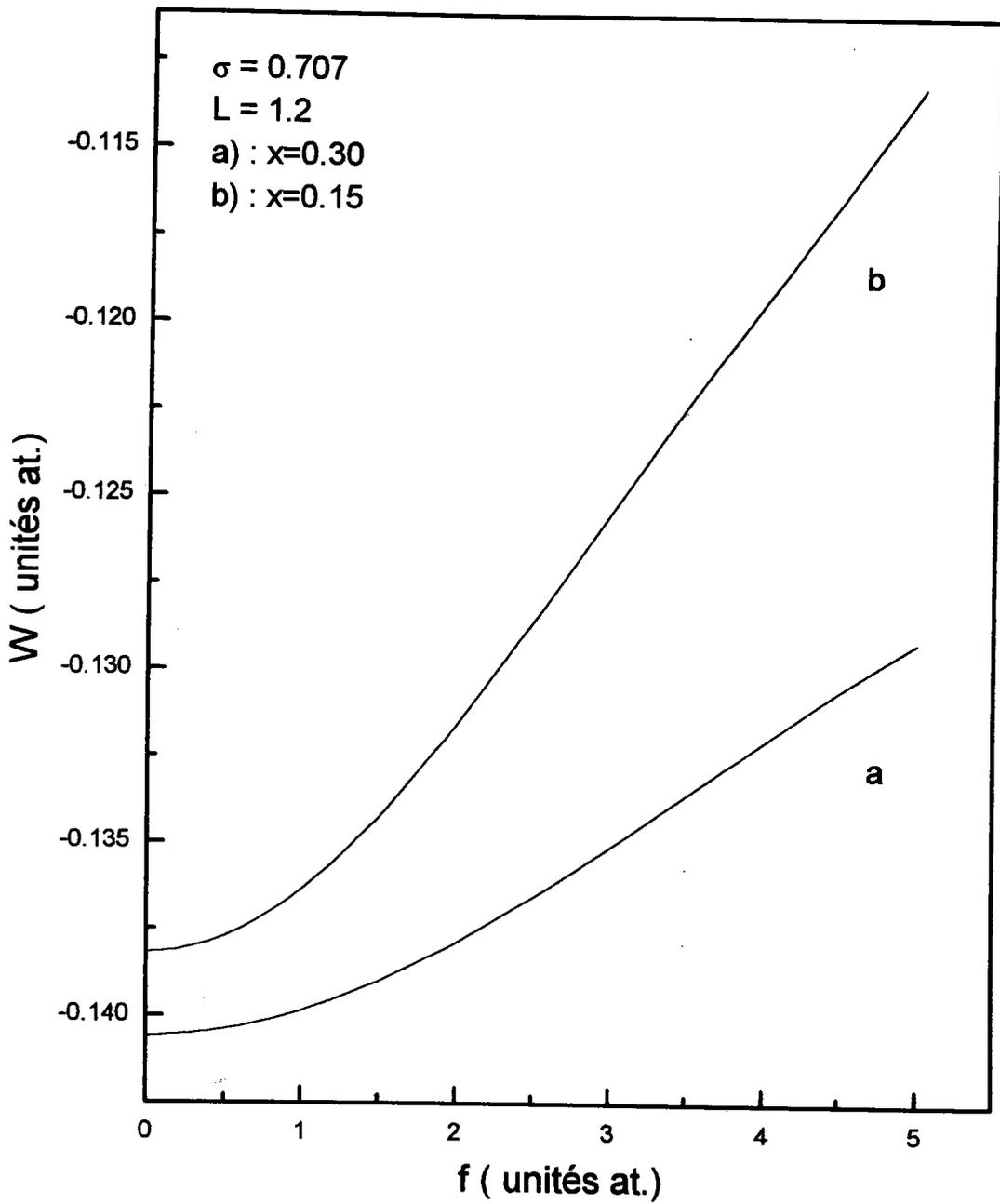


FIG. 3.3: Variation de l'énergie de liaison en fonction du champ électrique pour le trou léger ($\sigma = 0.707$), pour une largeur de 1.2 u. at., et pour deux concentrations ($x = 0.30$ et $x = 0.15$).

3.2 Comparaison avec l'expérience

Dans ce paragraphe, nous essayons de confronter nos résultats théoriques avec ceux de l'expérience (Shields et al. [55]), pour l'écart énergétique des raies d'absorption de l'exciton et du trion, c'est à dire l'énergie de liaison du deuxième électron, pour le système $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$.

Nous présentons dans la figure (3.4) la comparaison de l'énergie du deuxième électron $E_{2b} = (E_X + E_e) - E_{X-}$, pour le trou lourd ($\sigma = 0.2$), pour une concentration d'Aluminium $x = 0.33$, et pour une largeur du puits quantique de 30 nm , les band-offsets sont donnés par $V_e = 247\text{ meV}$ et $V_h = 144\text{ meV}$. Nous prenons comme constante diélectrique $\epsilon = 12.5$. Nous constatons pour les valeurs de champs électriques compris entre 0 et 10 kV/cm , un accord qualitatif, l'allure des deux courbes étant la même, il subsiste un écart d'environ 1 meV entre la valeur expérimentale et la valeur calculée. Cette différence est probablement due aux différentes approximations utilisées. D'une part, nous n'avons pas tenu compte de la différence de masses effectives et de constantes diélectriques entre les deux matériaux. En ce qui concerne la différence de masses, nous avons montré (Annexe A) que pour un puits de largeur 300 \AA , l'écart obtenu sur les énergies de confinement des particules est très faible. Les constantes diélectriques de $GaAs$ (12.5) et $AlAs$ (10.1) étant assez proches, on peut penser que pour des puits larges cette différence a peu d'influence. D'autre part, la méthode approchée utilisée pour le calcul des éléments de matrice du potentiel coulombien peut également modifier les énergies de quelques %. De plus d'après la relation (3.5), l'écart énergétique des transitions entre le trion et l'exciton est fonction du vecteur d'onde du centre de masse du trion et notre calcul a été fait au bord d'absorption ($K_0 = 0$). Enfin, nous n'avons pas tenu compte du potentiel de corrélation d'échange entre les électrons.

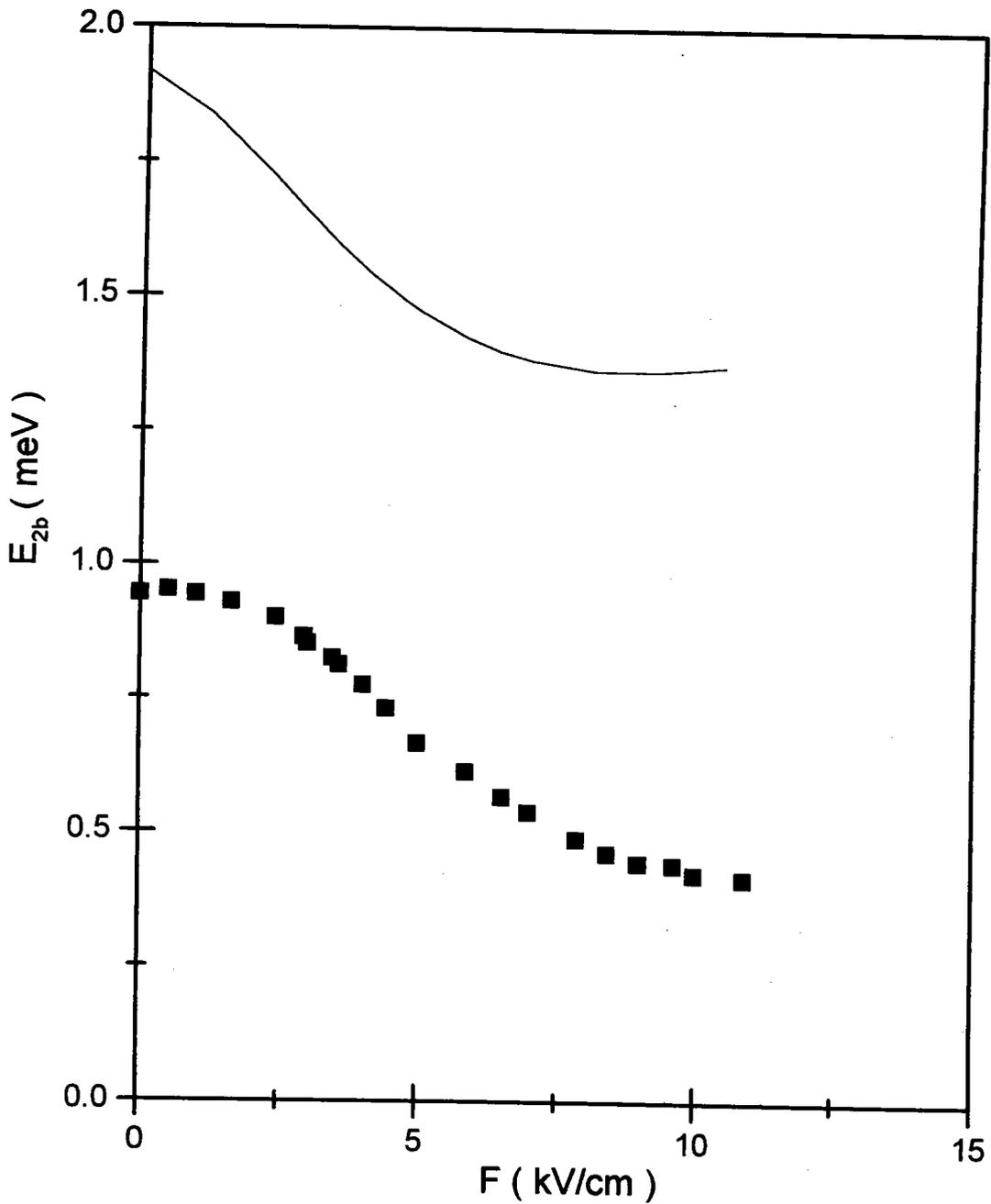


FIG. 3.4: Comparaison entre le calcul théorique (trait plein) et l'expérience (carrés) pour la différence de pics de l'exciton et du trion négatif pour le trou lourd ($\sigma = 0.2$), pour une largeur de 30 nm et pour la concentration $x = 0.33$.

CONCLUSION

Dans ce chapitre nous avons étudié la stabilité du trion par rapport au produit de dissociation en exciton et en électron, en calculant l'énergie de liaison du trion négatif ou l'énergie du deuxième électron. Cette énergie diminue en valeur absolue avec le champ, ce qui traduit une diminution de la stabilité. L'écart des énergies de transition entre l'exciton et le trion diminue avec le champ électrique ce qui est en accord avec les résultats expérimentaux.

Chapitre 4

Propriétés optiques des trions excitoniques en présence du champ électrique

Introduction

Dans ce chapitre, nous étudions les propriétés optiques du trion négatif X^- dans un puits quantique en présence du champ électrique longitudinal. Nous déterminons plus particulièrement l'intensité d'oscillateur associé à une transition entre un état initial correspondant à un électron et un état final du trion négatif.

Au paragraphe (4.1) nous rappelons la forme de l'Hamiltonien d'interaction rayonnement-matière dans un modèle à deux bandes. Nous nous limitons au cas de l'absorption linéaire monophotonique.

Au paragraphe (4.2) nous donnons les éléments de matrice de transitions dipolaires électriques, puis nous déterminons la probabilité de transition.

Au paragraphe (4.3) nous particularisons nos résultats à un puits quantique $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. Nous calculons plus précisément l'intensité d'oscillateur pour des valeurs particulières du champ électrique et de la largeur du puits.

4.1 Interaction rayonnement-matière avec un système électron-trou

Nous rappelons dans ce paragraphe la théorie de l'absorption dipolaire électrique d'une onde électromagnétique pour un système electron-trou dans un modèle à deux bandes (Haken [63], Weisbuch et al. [64], Bastard [65]). Nous nous limitons aux transitions à un photon et négligeons toute contribution d'origine non linéaire.

L'Hamiltonien du système des électrons dans un puits quantique en interaction avec une onde électromagnétique et en présence d'un champ électrique longitudinal s'écrit en deuxième quantification :

$$H = \int \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left\{ \frac{1}{2m} [\mathbf{P} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r})]^2 + V(\mathbf{r}) + V_F(z) \right\} \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}' d^3\mathbf{r} \quad (4.1)$$

où $\Psi^\dagger(\mathbf{r})$ et $\Psi(\mathbf{r})$ sont les opérateurs champs de fermions correspondant respectivement à la création et l'annihilation d'un électron au point \mathbf{r} , m est la masse d'un électron au repos, $V(\mathbf{r})$ est l'opérateur énergie potentielle d'un électron dans le champ des noyaux supposés fixes, c'est le potentiel périodique. $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ désigne le potentiel vecteur qui décrit l'onde électromagnétique pour une polarisation λ et s'écrit en représentation de Schrödinger :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_{q\lambda} \frac{c}{n} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{q\lambda}\Omega}} \{ \epsilon_{q\lambda} b_{q\lambda} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} + \epsilon_{q\lambda}^* b_{q\lambda}^\dagger e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \} \quad (4.2)$$

$b_{q\lambda}$ désigne l'opérateur d'annihilation d'un photon de vecteur d'onde \mathbf{q} , de polarisation λ et de pulsation $\omega_{q\lambda}$, $\epsilon_{q\lambda}$ est le vecteur unitaire caractérisant la polarisation de l'onde électromagnétique incidente tel que $\epsilon_{q\lambda} \cdot \mathbf{q} = 0$ en compatibilité avec la jauge de coulomb $\nabla \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) = 0$, c désigne la vitesse de la lumière dans le vide, n est l'indice de réfraction du semiconducteur considéré, Ω représente le volume de

4.1. Interaction rayonnement-matière avec un système électron-trou

l'échantillon. Le potentiel $V_F(z)$ est la somme de deux contributions :

$$V_F(z) = V_w(z) + eFz \quad (4.3)$$

où F est le champ électrique dirigé suivant l'axe de croissance, c'est à dire l'axe \vec{z} et $V_w(z)$ est le potentiel du puits

$$V_w(z) = \begin{cases} V_e & \text{si } |z| \geq L/2 \\ 0 & \text{si } |z| < L/2 \end{cases} \quad (4.4)$$

où V_e est la hauteur de la barrière du confinement. En développant l'expression (4.1), l'Hamiltonien du système électronique interagissant avec l'onde électromagnétique s'écrit :

$$H = \int \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left\{ \frac{1}{2m} \left[\mathbf{P}^2 + \frac{e}{c} \mathbf{P} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{P} + \mathbf{A}^2(\mathbf{r}) \right] + V(\mathbf{r}) + V_F(z) \right\} \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \\ + \frac{1}{2} \int \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}' d^3\mathbf{r} \quad (4.5)$$

qui peut se réécrire sous la forme suivante :

$$H = H^e + H^{e-h} + H_1^{e-r} + H_2^{e-r} \quad (4.6)$$

où :

$$H^e = \int \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \left\{ \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + V_F(z) \right\} \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (4.7)$$

désigne la somme des énergies des électrons sans interaction placés dans un puits

quantique en présence du champ électrique longitudinal.

$$H^{e-h} = \frac{1}{2} \int \Psi^\dagger(\mathbf{r}) \Psi^\dagger(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \Psi(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}' d^3\mathbf{r} \quad (4.8)$$

traduit l'interaction coulombienne entre les électrons de la bande de conduction et les trous de la bande de valence.

$$H_1^{e-r} = \frac{e}{mc} \int \Psi^\dagger(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}) \mathbf{P} \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (4.9)$$

représente l'interaction rayonnement-matière linéaire en champ.

$$H_2^{e-r} = \frac{e^2}{2mc^2} \int \Psi^\dagger(\mathbf{r}) A^2(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (4.10)$$

désigne le terme d'interaction rayonnement-matière quadratique, il intervient principalement dans les effets d'optique non linéaire et dans l'effet polariton, que nous excluons dans cette étude. Dans un modèle à deux bandes, les opérateurs champs de fermions ont pour expressions :

$$\begin{aligned} \Psi^\dagger(\mathbf{r}) &= \Psi_h(\mathbf{r}) + \Psi_e^\dagger(\mathbf{r}) \\ \Psi(\mathbf{r}) &= \Psi_h^\dagger(\mathbf{r}) + \Psi_e(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (4.11)$$

Nous reportons ces deux expressions dans l'équation (4.9) :

$$H_1^{e-r} = \frac{e}{mc} \int (\Psi_h(\mathbf{r}) + \Psi_e^\dagger(\mathbf{r})) A(\mathbf{r}) \mathbf{P} (\Psi_h^\dagger(\mathbf{r}) + \Psi_e(\mathbf{r})) d^3\mathbf{r}. \quad (4.12)$$

4.1. Interaction rayonnement-matière avec un système électron-trou

Par la suite nous ne tenons pas compte des termes correspondant à la création (annihilation) suivie d'annihilation (création) d'une même particule dans une même bande, l'Hamiltonien (4.12) se réduit à l'équation suivante :

$$H_1^{e-r} = \frac{e}{mc} \int \left\{ \Psi_e^\dagger(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}) \mathbf{P} \Psi_h^\dagger(\mathbf{r}) + \Psi_h(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}) \mathbf{P} \Psi_e(\mathbf{r}) \right\} d^3\mathbf{r} \quad (4.13)$$

Nous développons les opérateurs champs de fermions dans la base des fonctions d'ondes des électrons et de trous :

$$\begin{aligned} \Psi_e(\mathbf{r}) &= \sum_k a_k \phi_{ek}(\mathbf{r}) \\ \Psi_e^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_k a_k^\dagger \phi_{ek}^*(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.14)$$

où a_k et a_k^\dagger sont respectivement les opérateurs d'annihilation et de création d'un électron dans l'état k qui vérifient les règles de commutation :

$$\begin{aligned} [a_\mu, a_\nu^\dagger] &= \delta_{\mu\nu} \\ [a_\mu^\dagger, a_\nu^\dagger] &= 0. \end{aligned} \quad (4.15)$$

L'Hamiltonien (4.13) devient :

$$\begin{aligned} H_1^{e-r} &= \frac{e}{mc} \int \left\{ \sum_{kk'} a_k^\dagger d_{k'}^\dagger \phi_{ek}^*(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}) \mathbf{P} \phi_{hk'}^*(\mathbf{r}) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{kk'} d_k a_{k'} \phi_{hk}(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}) \mathbf{P} \phi_{ek'}(\mathbf{r}) \right\} d^3\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Le premier terme correspond à l'absorption d'un photon suivie de la création

d'une paire électron-trou. Le second terme traduit l'annihilation d'une paire électron-trou suivie de l'émission d'un photon. Dans l'approximation de la masse effective, les fonctions $\phi(\mathbf{r})$ s'écrivent sous la forme d'un produit de la partie périodique d'une fonction de Bloch développée au centre de la zone de Brillouin, par une fonction d'onde enveloppe des électrons (trous). Les parties périodiques des fonctions de Bloch des deux semiconducteurs qui contribuent à la formation du puits sont supposées égales.

$$\begin{aligned}\phi_{ek}(\mathbf{r}) &= c(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \\ \phi_{hk}(\mathbf{r}) &= v^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\end{aligned}\quad (4.17)$$

En substituant le développement des fonctions $\phi(\mathbf{r})$ dans l'Hamiltonien d'interaction rayonnement-matière (4.16) nous obtenons :

$$\begin{aligned}H_1^{e-r} &= \frac{e}{mc} \sum_{kk'} \left\{ a_k^\dagger d_{k'}^\dagger \int d^3\mathbf{r} c^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} A(\mathbf{r}) \mathbf{P} v(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \right. \\ &\quad \left. + d_k a_{k'} \int d^3\mathbf{r} v^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} A(\mathbf{r}) \mathbf{P} c(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \right\}\end{aligned}\quad (4.18)$$

Nous supposons par ailleurs que les fonctions de Bloch $c(\mathbf{r})$ et $v(\mathbf{r})$ sont normalisées sur une cellule unité. L'Hamiltonien d'interaction rayonnement-matière peut alors se réécrire :

$$\begin{aligned}H_1^{e-r} &= \frac{e}{mc} \sum_k a_k^\dagger d_k^\dagger \int d^3\mathbf{r} c^*(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}) \mathbf{P} v(\mathbf{r}) \\ &\quad + \frac{e}{mc} \sum_k d_k a_k \int d^3\mathbf{r} v^*(\mathbf{r}) A(\mathbf{r}) \mathbf{P} c(\mathbf{r})\end{aligned}\quad (4.19)$$

où les intégrales sont évaluées sur une cellule élémentaire.

4.1.1 Approximation dipolaire électrique

Les deux termes de l'Hamiltonien d'interaction rayonnement-matière ci-dessus correspondent respectivement à l'absorption d'un photon avec création d'une paire électron-trou et à l'émission d'un photon par annihilation d'une paire électron-trou. Dans la suite nous nous restreignons aux cas de l'absorption d'un photon de vecteur d'onde \mathbf{q} très petit par rapport aux vecteurs de la zone de Brillouin tel que $|\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}| \ll 1$. Dans ces conditions nous pouvons développer en série le facteur $e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}$ au voisinage de zéro :

$$e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = 1 + i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + O(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}). \quad (4.20)$$

L'approximation dipolaire électrique consiste à négliger le terme $i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}$ et les termes d'ordres supérieurs, en ne gardant que le premier terme dans l'équation (4.20). Les termes suivants donnent lieu à des corrections intervenant à un ordre de perturbation supérieur et nous les négligeons. Le potentiel vecteur \mathbf{A} a pour expression :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \sum_{q_\lambda} \frac{c}{n} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{q_\lambda} \Omega}} \{ \epsilon_{q_\lambda} b_{q_\lambda} + \epsilon_{q_\lambda}^* b_{q_\lambda}^+ \}. \quad (4.21)$$

Dans ce qui suit, nous nous intéressons au cas de l'absorption d'un seul photon de vecteur d'onde \mathbf{q} et de pulsation ω_{q_λ} . L'Hamiltonien d'interaction rayonnement-matière s'écrit :

$$H_{abs}^{e-r} = \frac{1}{mn} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{q_\lambda} \Omega}} \sum_k a_k^\dagger d_k^\dagger b_{q_\lambda} \epsilon_{q_\lambda} \int d^3\mathbf{r} c^*(\mathbf{r}) e^{\mathbf{P} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{r})} \quad (4.22)$$

En simplifiant l'écriture, l'Hamiltonien ci-dessus peut se réécrire :

$$H_{abs}^{e-r} = \frac{1}{mn} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{q\lambda}\Omega}} \sum_k a_k^\dagger d_k^\dagger b_{q\lambda} \epsilon_{q\lambda} \mathbf{D}^* \quad (4.23)$$

où \mathbf{D}^* représente le vecteur dipolaire électrique :

$$\mathbf{D}^* = \int d^3\mathbf{r} c^*(\mathbf{r}) e \mathbf{P} v(\mathbf{r}) \quad (4.24)$$

4.1.2 Transition à un photon

La probabilité de transition par unité de temps d'un photon d'énergie $\hbar\omega$ entre deux états $|i\rangle$ et $|f\rangle$ est donnée par :

$$W_{abs}^{i,f} = \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{abs}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \quad (4.25)$$

où H'_{abs} est l'élément de matrice de transition entre l'état initial $|i\rangle$ et final $|f\rangle$ du système électronique :

$$H'_{abs} = \langle f | H_{abs}^{e-r} | i \rangle \quad (4.26)$$

où

$$\begin{aligned} |i\rangle &= |\phi_i, N_{q\lambda}\rangle \\ |f\rangle &= |\phi_f, N_{q\lambda} - 1\rangle \end{aligned} \quad (4.27)$$

où $N_{q\lambda}$ désigne le nombre de photons de vecteur d'onde \mathbf{q} et de polarisation λ existant à l'état initial. A l'état final, le nombre de photons du système électronique est diminué d'une unité suite à l'absorption d'un photon.

$$H'_{abs} = \frac{1}{mn} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{q\lambda}\Omega}} \langle \phi_f, N_{q\lambda} - 1 | \sum_k a_k^\dagger d_k^\dagger b_{q\lambda} | N_{q\lambda}, \phi_i \rangle \epsilon_{q\lambda} \mathbf{D}^*. \quad (4.28)$$

4.1. Interaction rayonnement-matière avec un système électron-trou

En utilisant les propriétés des opérateurs d'annihilation de photons, nous obtenons en particulier :

$$b_{q\lambda} | N_{q\lambda} \rangle = \sqrt{N_{q\lambda}} | N_{q\lambda} - 1 \rangle. \quad (4.29)$$

L'élément de matrice H'_{abs} devient alors :

$$H'_{abs} = \frac{1}{mn} \sqrt{\frac{2\pi\hbar N_p}{\omega_{q\lambda}}} \langle \phi_f | \sum_k a_k^\dagger d_k^\dagger | \phi_i \rangle \epsilon_{q\lambda} \mathbf{D}^* \quad (4.30)$$

avec $N_p = N_{q\lambda}/\Omega$. Dans le paragraphe suivant nous nous proposons d'établir l'expression du coefficient d'absorption d'un photon d'énergie $\hbar\omega$ entre les états d'électron et du trion négatif ($e^- + photon \rightleftharpoons X^-$).

4.2 Absorption par les trions excitoniques en champ électrique uniforme

Le problème d'absorption optique du trion négatif X^- dans un semiconducteur à deux dimensions a été étudié par Ainane [66] en absence et en présence du champ magnétique. Dans le présent paragraphe nous déterminons l'intensité d'oscillateur du trion négatif dans un puits quantique en présence du champ électrique longitudinal.

4.2.1 Eléments de matrice de transition dipolaire

Nous limitons notre étude à l'absorption d'un photon d'énergie $\hbar\omega$ comparable à la largeur de la bande interdite. L'état initial caractérisé par la présence d'un électron :

$$|\phi_i\rangle = |\phi_e\rangle = \sum_k C_k a_k^\dagger |\phi_0\rangle \quad (4.31)$$

où $|\phi_0\rangle$ caractérise la bande de valence pleine, C_k est le transformé de Fourier de la fonction d'onde enveloppe de l'électron. L'état final est caractérisé par la présence du trion X^- défini par la combinaison linéaire des états à trois particules non liées :

$$|\phi_f\rangle = |\phi_{X^-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{k_1 k_2 k_3} C_{k_1 k_2 k_3} a_{k_1}^\dagger a_{k_2}^\dagger d_{k_3}^\dagger |\phi_0\rangle \quad (4.32)$$

où les coefficients $C_{k_1 k_2 k_3}$ sont les transformés de Fourier des fonctions d'ondes enveloppes des trions. L'élément de matrice de transition peut se mettre sous la forme suivante :

$$H'_{abs} = \frac{1}{mn} \sqrt{\frac{\pi \hbar N_p}{\omega_{q\lambda}}} \langle \phi_0 | \sum_k \sum_{k'} \sum_{k_1 k_2 k_3} C_{k_1 k_2 k_3}^* C_k d_{k_3} a_{k_2} a_{k_1} a_{k'}^\dagger d_{k'}^\dagger a_k^\dagger | \phi_0 \rangle \times \epsilon_{q\lambda} \mathbf{D}^*. \quad (4.33)$$

Par suite du passage des opérateurs d'annihilation à droite par l'utilisation des relations de commutation de fermions, H'_{abs} devient :

$$H'_{abs} = \frac{2}{mn} \sqrt{\frac{\pi \hbar N_p}{\omega_{q\lambda}}} \epsilon_{q\lambda} \mathbf{D}^* \sum_{kk'} C_{k'kk'}^* C_k \quad (4.34)$$

4.2.2 Calcul des coefficients C_i

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective les coefficients C_i peuvent être obtenus à partir de la fonction d'onde enveloppe du trion et de l'électron.

$$\varphi_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \Omega^{-3/2} \sum_{k_1 k_2 k_3} C_{k_1 k_2 k_3} e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2 - \mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r}_3)} \quad (4.35)$$

Les coefficients $C_{k_1 k_2 k_3}$ sont obtenus en multipliant par $\Omega^{-3/2} e^{-i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2 - \mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r}_3)}$ et en intégrant sur $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ et sur \mathbf{r}_3 .

$$C_{k_1 k_2 k_3} = \Omega^{-3/2} \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 d^3 \mathbf{r}_3 \varphi_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) e^{-i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2 - \mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r}_3)} \quad (4.36)$$

Nous en déduisons :

$$C_{k'kk'} = \Omega^{-3/2} \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 d^3 \mathbf{r}_3 \varphi_{X^-}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) e^{-i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3)} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2} \quad (4.37)$$

soit encore :

$$C_{k'kk'}^* = \Omega^{-3/2} \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 d^3 \mathbf{r}_3 \varphi_{X^-}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) e^{i\mathbf{k}' \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3)} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_2} \quad (4.38)$$

de la même façon on a :

$$C_k = \Omega^{-1/2} \int d^3\mathbf{r} \Phi_e(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (4.39)$$

Nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} \sum_{k'k} C_{k'kk'}^* C_k &= \Omega^{-2} \sum_{k'k} \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_3 d^3\mathbf{r} \varphi_{X^-}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \Phi_e(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_3)} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}_2-\mathbf{r})} \\ &= \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 d^3\mathbf{r}_3 d^3\mathbf{r} \varphi_{X^-}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \Phi_e(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3) \delta(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}) \\ &= \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \varphi_{X^-}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \Phi_e(\mathbf{r}_2) \end{aligned} \quad (4.40)$$

Nous utilisons les coordonnées du mouvement du centre de masse et du mouvement relatif; l'équation ci dessus peut se réécrire :

$$\begin{aligned} \sum_{k'k} C_{k'kk'}^* C_k &= S^{-1/2} \int d^2\mathbf{r} d^2\mathbf{R}_0 dz_1 dz_2 \varphi_{X^-}^*\left(\mathbf{r}, \frac{\mathbf{r}}{2}, \mathbf{R}_0, z_1, z_2, z_1\right) \\ &\quad \times \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{R}_0 + \frac{m_e^* + m_h^*}{M_0} \mathbf{r})) \chi_e(z_2) \end{aligned} \quad (4.41)$$

Nous avons déjà noté que la fonction d'onde enveloppe du trion peut s'écrire en un produit de la fonction d'onde du mouvement du centre de masse par une fonction d'onde du mouvement relatif.

$$\varphi_{X^-}\left(\mathbf{r}, \frac{\mathbf{r}}{2}, \mathbf{R}_0, z_1, z_2, z_1\right) = S^{-1/2} \exp(i\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{R}_0) \Psi_{rel}\left(r, \frac{r}{2}, z_1, z_2, z_1\right) \quad (4.42)$$

où \mathbf{K}_0 désigne le vecteur d'onde du centre de masse du trion dans le plan.

L'équation (4.41) devient alors :

$$\begin{aligned} \sum_{k'k} C_{k'kk'}^* C_k &= S^{-1} \int d^2\mathbf{r} d^2\mathbf{R}_0 dz_1 dz_2 \exp(-i(\mathbf{K}_0 - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_0) \Psi_{rel}\left(r, \frac{r}{2}, z_1, z_2, z_1\right) \\ &\quad \times \exp\left(i\left(\frac{m_e^* + m_h^*}{M_0} \mathbf{k} \mathbf{r}\right)\right) \chi_e(z_2) \\ &= \int d^2\mathbf{r} dz_1 dz_2 \Psi_{rel}\left(r, \frac{r}{2}, z_1, z_2, z_1\right) \exp\left(i\left(\frac{m_e^* + m_h^*}{M_0} \mathbf{k} \mathbf{r}\right)\right) \\ &\quad \times \chi_e(z_2) \delta_{\mathbf{K}_0 \mathbf{k}} \end{aligned} \quad (4.43)$$

4.2. Absorption par les trions excitoniques en champ électrique uniforme

où $\Psi_{rel}(r, \frac{r}{2}, z_1, z_2, z_1)$ représente l'amplitude de probabilité pour qu'un électron et le trou se trouvent au même point. D'après la relation (4.43), nous constatons que les éléments de matrice des transitions dipolaires électriques s'annulent lorsque le vecteur d'onde de l'électron à l'état initial \mathbf{k} est différent du vecteur d'onde \mathbf{K}_0 du centre de masse du trion à l'état final. Cela traduit la conservation de la quantité du mouvement lors des transitions optiques directes. Les éléments de matrices des transitions dipolaires électriques s'écrivent pour $\mathbf{K}_0 = \mathbf{k}$:

$$|H'_{abs}|^2 = \frac{4\pi\hbar N_p}{m^2 n^2 \omega_{q\lambda}} |\epsilon_{q\lambda} \mathbf{D}^*|^2 \left| \sum_{k'k} C_{k'kk'}^* C_k \right|^2. \quad (4.44)$$

Pour simplifier l'équation ci-dessus, nous posons la relation suivante:

$$I_{X-(K_0)} = \left| \sum_{k'k} C_{k'kk'}^* C_k \right|^2 \quad (4.45)$$

en utilisant la fonction d'onde d'essai définie au chapitre 2:

$$\begin{aligned} \Psi_{rel}(r, \frac{r}{2}, z_1, z_2, z_1) &= \mathcal{N} \sum_{lmnpqr} C_{lmnpqr} \chi_e(z_1) \chi_e(z_2) \chi_h(z_1) (z_1^p z_2^q + z_1^q z_2^p) z_1^r \\ &\times \exp(-\alpha_e(z_1^2 + z_2^2)) \exp(-\alpha_h z_1^2) \exp(-\kappa \frac{r}{2})(r)^{l+m+n} \end{aligned} \quad (4.46)$$

où κ , α_e et α_h sont des paramètres variationnels, l, m, n, p, q et r sont des entiers positifs ou nuls. Nous rappelons que nous avons travaillé avec une fonction d'onde définie par ($l + m + n \leq 4$) et ($p + q + r \leq 2$), \mathcal{N} est la constante de normation donnée par:

$$\mathcal{N} = \left\{ \sum_{lmnpqr} \sum_{l'm'n'p'q'r'} C_{lmnpqr} C_{l'm'n'p'q'r'}^* \langle l'm'n'p'q'r' | lmnpqr \rangle \right\}^{-1/2} \quad (4.47)$$

$\chi_e(z)$ et $\chi_h(z)$ sont respectivement les fonctions d'ondes de l'électron et du trou

dans un puits quantique en présence du champ électrique longitudinal (voir (2.19) et (2.20)).

L'intégrale $I_{X^-}(K_0)$ devient alors :

$$\begin{aligned}
 I_{X^-}(K_0) &= \mathcal{N}^2 \left| \sum_{lmnpqr} C_{lmnpqr} \int dz_1 dz_2 \chi_e(z_1) \chi_e(z_2)^2 \chi_h(z_1) \right. \\
 &\times (z_1^p z_2^q + z_1^q z_2^p) z_1^r \exp(-\alpha_e(z_1^2 + z_2^2)) \exp(-\alpha_h z_1^2) \\
 &\times \left. \int d^2 r \exp(i\alpha \mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{r}) \exp(-\kappa \frac{r}{2}) (r)^{l+m+n} \right|^2 \quad (4.48)
 \end{aligned}$$

avec $\alpha = (m_e^* + m_h^*)/M_0$, \mathbf{K}_0 et \mathbf{r} sont des vecteurs dans le plan, leur produit scalaire est fonction de l'angle que fait le vecteur position \mathbf{r} avec le vecteur \mathbf{K}_0 .

$$\mathbf{K}_0 \cdot \mathbf{r} = K_0 r \cos \theta. \quad (4.49)$$

En introduisant les coordonnées (r, θ) l'intégrale $I_{X^-}(K_0)$ se réécrit :

$$\begin{aligned}
 I_{X^-}(K_0) &= \mathcal{N}^2 \left| \sum_{lmnpqr} C_{lmnpqr} \int dz_1 dz_2 \chi_e(z_1) \chi_e(z_2)^2 \chi_h(z_1) \right. \\
 &\times (z_1^p z_2^q + z_1^q z_2^p) z_1^r \exp(-\alpha_e(z_1^2 + z_2^2)) \exp(-\alpha_h z_1^2) \\
 &\times \left. \int_0^\infty \int_{-\pi}^{+\pi} r dr d\theta \exp(i\alpha K_0 r \cos \theta) \exp(-\kappa \frac{r}{2}) (r)^{l+m+n} \right|^2 \quad (4.50)
 \end{aligned}$$

Soit :

$$I_1 = \int_{-\pi}^{+\pi} d\theta \exp(i\alpha K_0 r \cos \theta) \quad (4.51)$$

qui peut être calculée en effectuant un changement de variable ($x = -\cos\theta$) :

$$\begin{aligned}
 I_1 &= 2 \int_{-1}^{+1} dx \frac{\exp(-i\alpha K_0 r x)}{\sqrt{1-x^2}} \\
 &= 2\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) J_0(\alpha K_0 r) \quad (4.52)
 \end{aligned}$$

4.2. Absorption par les trions excitoniques en champ électrique uniforme

où $J_0(\alpha K_0 r)$ est une fonction de Bessel d'ordre zéro, et $\Gamma(\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}$, Gradshteyn et Ryzhik [67]. J_0 peut être évaluée par un développement en série :

$$J_0(\alpha K_0 r) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i (\alpha K_0 r)^{2i}}{2^{2i} (i!)^2} \quad (4.53)$$

i est un entier positif ou nul. Après l'intégration sur r nous obtenons :

$$\begin{aligned} I_{X^-(K_0)} &= \frac{64\pi^2 \mathcal{N}^2}{\kappa^4} \left| \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i (\alpha K_0)^{2i}}{\kappa^{2i} (i!)^2} \sum_{lmnpqr} C_{lmnpqr} \int dz_1 dz_2 \chi_e(z_1) \chi_e(z_2)^2 \right. \\ &\times \chi_h(z_1) (z_1^p z_2^q + z_1^q z_2^p) z_1^r \exp(-\alpha_e(z_1^2 + z_2^2)) \exp(-\alpha_h z_1^2) \\ &\times \left. (2/\kappa)^{(l+m+n)} [(l+m+n+2i+1)!] \right|^2 \end{aligned} \quad (4.54)$$

Dans le but de simplifier les notations nous posons :

$$\begin{aligned} I_2 &= \int dz_1 dz_2 \chi_e(z_1) \chi_e(z_2)^2 \chi_h(z_1) (z_1^p z_2^q + z_1^q z_2^p) z_1^r \\ &\times \exp(-\alpha_e(z_1^2 + z_2^2)) \exp(-\alpha_h z_1^2) \\ &= \{W_1(p+r) W_2(q) + W_1(q+r) W_2(p)\} \end{aligned} \quad (4.55)$$

avec :

$$\begin{aligned} W_1(p+r) &= \int dz_1 \chi_e(z_1) \chi_h(z_1) z_1^{p+r} \exp(-(\alpha_e + \alpha_h) z_1^2) \\ W_2(q) &= \int dz_2 \chi_e(z_2)^2 z_2^q \exp(-\alpha_e z_2^2) \end{aligned} \quad (4.56)$$

L'intégrale $I_{X^-(K_0)}$ s'écrit finalement :

$$\begin{aligned} I_{X^-(K_0)} &= \frac{64\pi^2 \mathcal{N}^2}{\kappa^4} \left| \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i (\alpha K_0)^{2i}}{\kappa^{2i} (i!)^2} \sum_{lmnpqr} C_{lmnpqr} [(l+m+n+2i+1)!] \right. \\ &\times \left. (2/\kappa)^{(l+m+n)} \{W_1(p+r) W_2(q) + W_1(q+r) W_2(p)\} \right|^2 \end{aligned} \quad (4.57)$$

L'intégrale $I_{X^-(K_0)}$ dépend à la fois de α , du paramètre variationnel κ , du module K_0 du vecteur d'onde du centre de masse du trion négatif et dépend aussi des intégrales W_1 et de W_2 .

4.2.3 Probabilité de transition

La probabilité de transition par unité de temps, entre un état $|i\rangle$ et un état $|f\rangle$ suite à l'absorption d'un photon d'énergie $\hbar\omega$ s'écrit :

$$W_{abs}^{i,f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k, K_0} \delta_{k, K_0} |H'_{abs}(K_0)|^2 \delta(E_f(K_0) - E_i(k) - \hbar\omega) \quad (4.58)$$

où E_i et E_f désignent respectivement les énergies correspondant aux états initiaux et finaux du système électronique, nous pouvons remplacer la sommation discrète par une sommation continue dans l'espace réciproque, (espace des \mathbf{k}), sachant que :

$$\sum_{K_0} \rightarrow \frac{2S}{(2\pi)^2} \int dK_{0x} \int dK_{0y} \quad (4.59)$$

$W_{abs}^{i,f}$ peut alors s'écrire :

$$W_{abs}^{i,f} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{2S}{(2\pi)^2} \int |H'_{abs}(K_0)|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d^2 K_0 \quad (4.60)$$

où $(2\pi)^2/S$ est la surface relative à un état quantique dans l'espace réciproque, le facteur 2 est introduit à cause de la dégénérescence de spin. En utilisant (4.44) $W_{abs}^{i,f}$ devient alors :

$$W_{abs}^{i,f} = \frac{4SN_p}{m^2 n^2 \omega_{q\lambda}} |\epsilon_{q\lambda} D^*|^2 \times \int I_{X^-(K_0)} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) 2\pi K_0 dK_0. \quad (4.61)$$

Les énergies correspondant aux états initiaux et finaux sont données par :

$$\begin{aligned} E_i &= E_0 + E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*} + E_e \\ E_f &= E_0 + 2E_g + \frac{\hbar^2 K_0^2}{2M_0} + E_{X^-} \end{aligned} \quad (4.62)$$

4.2. Absorption par les trions excitoniques en champ électrique uniforme

où E_0 est l'énergie de la bande de valence pleine, E_g correspond au gap entre les bandes de conduction et de valence, E_e et E_{X^-} sont respectivement l'énergie de confinement de l'électron dans le puits quantique en présence du champ électrique longitudinal et l'énergie relative du trion négatif. La règle de sélection nous impose la conservation de la quantité de mouvement lors d'une transition optique directe, c'est à dire $k = K_0$, donc on obtient :

$$E_f - E_i - \hbar\omega = E_g + E_{X^-} - E_e - \alpha \frac{\hbar^2 K_0^2}{2m_e^*} - \hbar\omega \quad (4.63)$$

Pour évaluer l'intégrale qui intervient dans l'équation (4.61), nous utilisons une des propriétés de la distribution de delta de Dirac.

$$\int_a^b g(x)\delta[f(x)]dx = \sum_{x_0} g(x_0) \left| \frac{dx}{df(x)} \right|_{x=x_0} \quad (4.64)$$

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

$$\begin{aligned} g(K_0) &= 2\pi K_0 I_{X^-}(K_0) \\ f(K_0) &= E_g + E_{X^-} - E_e - \alpha \frac{\hbar^2 K_0^2}{2m_e^*} - \hbar\omega \end{aligned} \quad (4.65)$$

par conséquent la racine positive Q de $f(K_0)$ et la quantité $\left| \frac{dK_0}{df(K_0)} \right|_{K_0=Q}$ sont données par :

$$\begin{aligned} Q &= \sqrt{\frac{2m_e^*}{\alpha\hbar^2} [E_g + E_{X^-} - E_e - \hbar\omega]^{1/2}} \\ \left| \frac{dK_0}{df(K_0)} \right|_{K_0=Q} &= \sqrt{\frac{m_e^*}{2\alpha\hbar^2} [E_g + E_{X^-} - E_e - \hbar\omega]^{-1/2}}. \end{aligned} \quad (4.66)$$

En posant :

$$\gamma = \frac{4SN_p}{m^2 n^2 \omega_{q\lambda}} \left| \epsilon_{q\lambda} D^* \right|^2. \quad (4.67)$$

La probabilité de transition est finalement donnée par :

$$W_{abs}^{i,f} = 2\pi \frac{\gamma m_e^*}{\alpha \hbar^2} I_{X-}(Q) \quad (4.68)$$

où $I_{X-}(Q)$ est l'intensité d'oscillateur.

4.2.4 Coefficient d'absorption

Le coefficient d'absorption est défini comme étant le rapport de l'énergie absorbée par unité de volume et par le flux d'énergie (Bassani et al. [68]).

$$\mu = \frac{\hbar\omega W_{abs}^{i,f}}{S L_w} \frac{1}{N_p \hbar\omega c/n} \quad (4.69)$$

où n est l'indice de réfraction du milieu absorbant, c est la vitesse de la lumière dans le vide, N_p désigne le nombre de photons incidents, L_w est la dimension de l'échantillon. En remplaçant l'expression $W_{abs}^{i,f}$ dans l'équation ci-dessus, le coefficient d'absorption a alors pour expression :

$$\mu = \frac{8\pi m_e^*}{m^2 n c L_w \alpha \hbar} \frac{|\epsilon_{q\lambda} D^*|^2}{\hbar\omega_{q\lambda}} I_{X-}(Q) \quad (4.70)$$

Dans le système d'unités atomiques Q a pour expression :

$$Q = \sqrt{\frac{2}{\alpha}} [\omega_0 - \omega]^{1/2} = \sqrt{\frac{2\Delta\omega}{\alpha}} \quad (4.71)$$

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

4.3 Résultats numériques

Les courbes obtenues sont relatives à un puits quantique $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ et ont été calculées pour deux concentrations x d'Aluminium, $x = 0.30$ et $x = 0.15$ et pour deux valeurs de sigma, $\sigma = 0.196$ pour le trou lourd et $\sigma = 0.707$ pour le trou léger. Nous présentons dans les figures (4.1) et (4.2) la variation de l'intensité d'oscillateur $I_{X-}(Q)$ en fonction de l'écart de fréquence $\Delta\omega = \omega_0 - \omega$ relatif à la fréquence ω_0 correspondant au bord d'absorption, pour une valeur particulière de la largeur du puits $L = 2$ unités atomiques, pour le trou lourd ($\sigma = 0.196$), pour $x = 0.30$ et $x = 0.15$ et pour différentes valeurs du champ électrique. Nous remarquons que l'intensité d'oscillateur est importante au voisinage du bord d'absorption puis décroissante vers les basses énergies. Nous constatons que l'intensité d'oscillateur décroît lorsque le champ électrique augmente, c'est la conséquence de l'effet Stark de confinement quantique (Miller et al. [11]).

Nous présentons dans la figure (4.3) la variation de l'intensité d'oscillateur $I_{X-}(Q)$ en fonction de l'écart de fréquence $\Delta\omega$ pour le trou léger ($\sigma = 0.707$). Nous faisons la même constatation que pour le trou lourd. Nous notons que l'intensité d'oscillateur pour le trou lourd est plus importante que celle du trou léger.

Nous montrons dans les figures (4.4) et (4.5) la variation de l'intensité d'oscillateur $I_{X-}(Q)$ en fonction de l'écart de fréquence $\Delta\omega$ pour une valeur particulière du champ électrique $f = 0.5$ unités atomiques, pour trois valeurs de la largeur du puits et pour les deux concentrations x d'Aluminium. Nous remarquons que pour de faibles valeurs de $\Delta\omega$ l'intensité d'oscillateur est plus importante pour de grandes valeurs de la largeur, et aussi lorsque l'écart de fréquence augmente l'intensité d'oscillateur est plus grande pour les puits étroits.

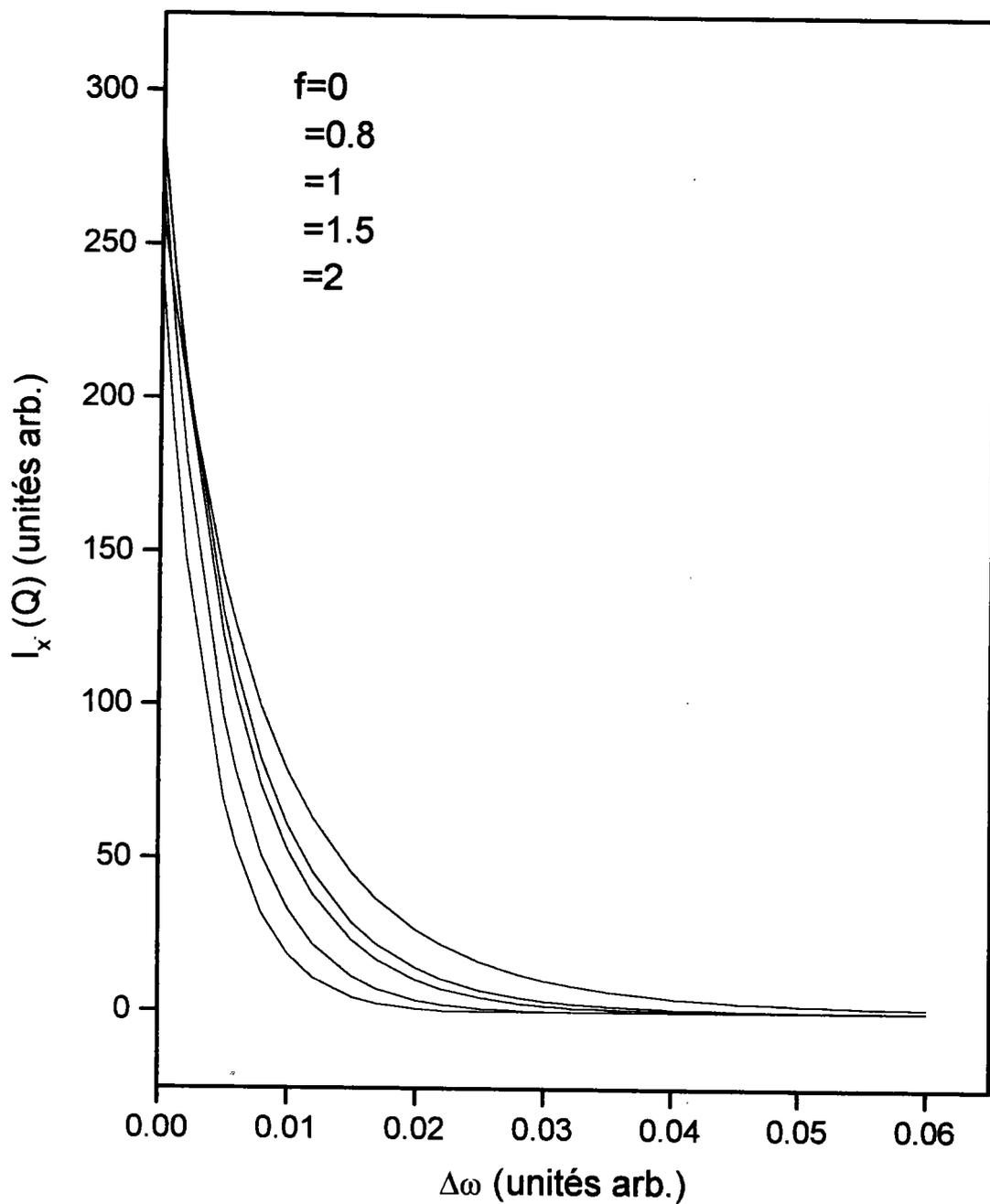


FIG. 4.1: Variation de l'intensité d'oscillateur en fonction de l'écart de fréquence $\Delta\omega$ relatif à la fréquence ω_0 , pour le trou lourd ($\sigma = 0.196$), pour une largeur de 2 u. at., pour différentes valeurs du champ électrique et pour la concentration $x = 0.30$.

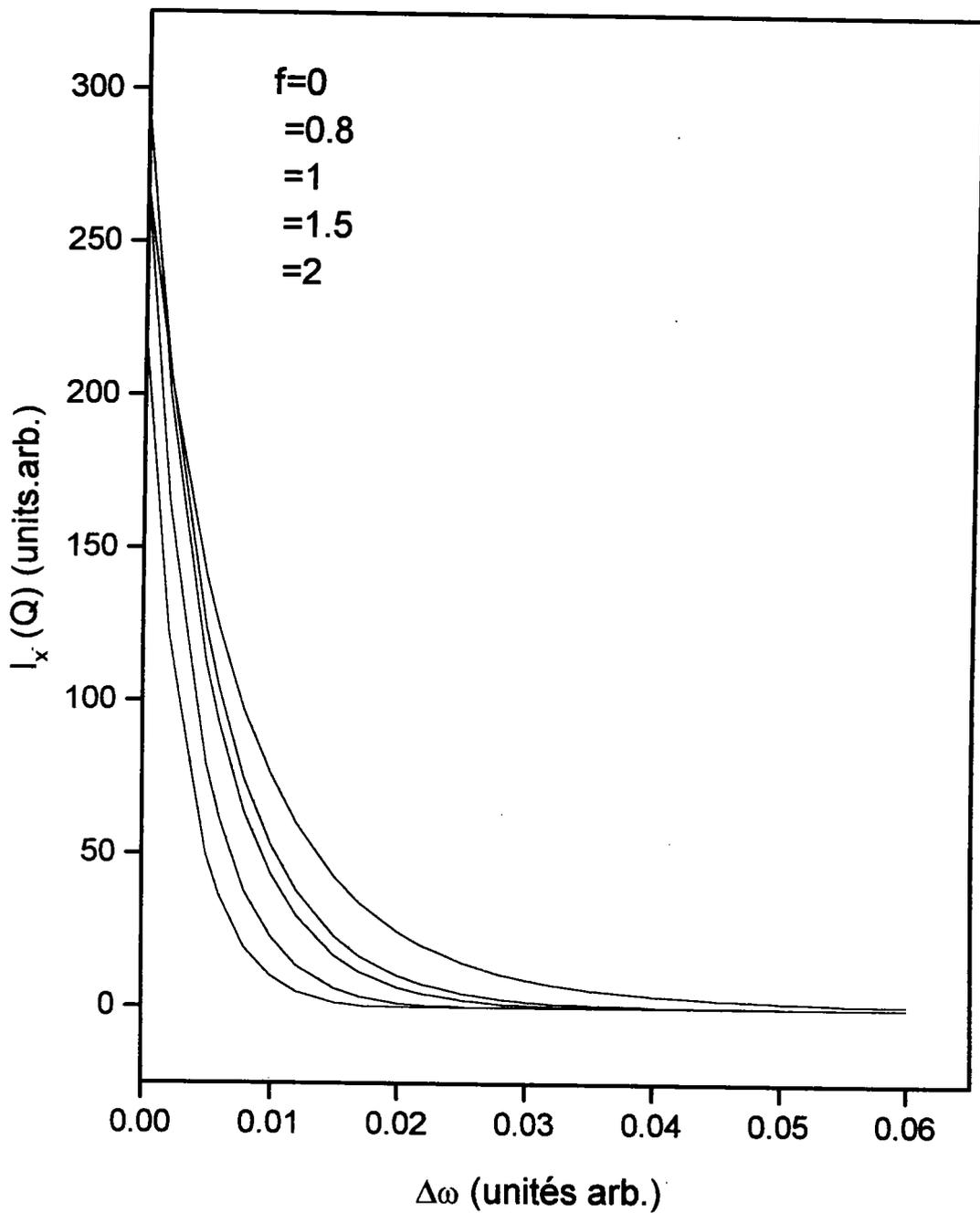


FIG. 4.2: Variation de l'intensité d'oscillateur en fonction de l'écart de fréquence $\Delta\omega$ relatif à la fréquence ω_0 , pour le trou lourd ($\sigma = 0.196$), pour une largeur de 2 u. at., pour différentes valeurs du champ électrique et pour la concentration $x = 0.15$.

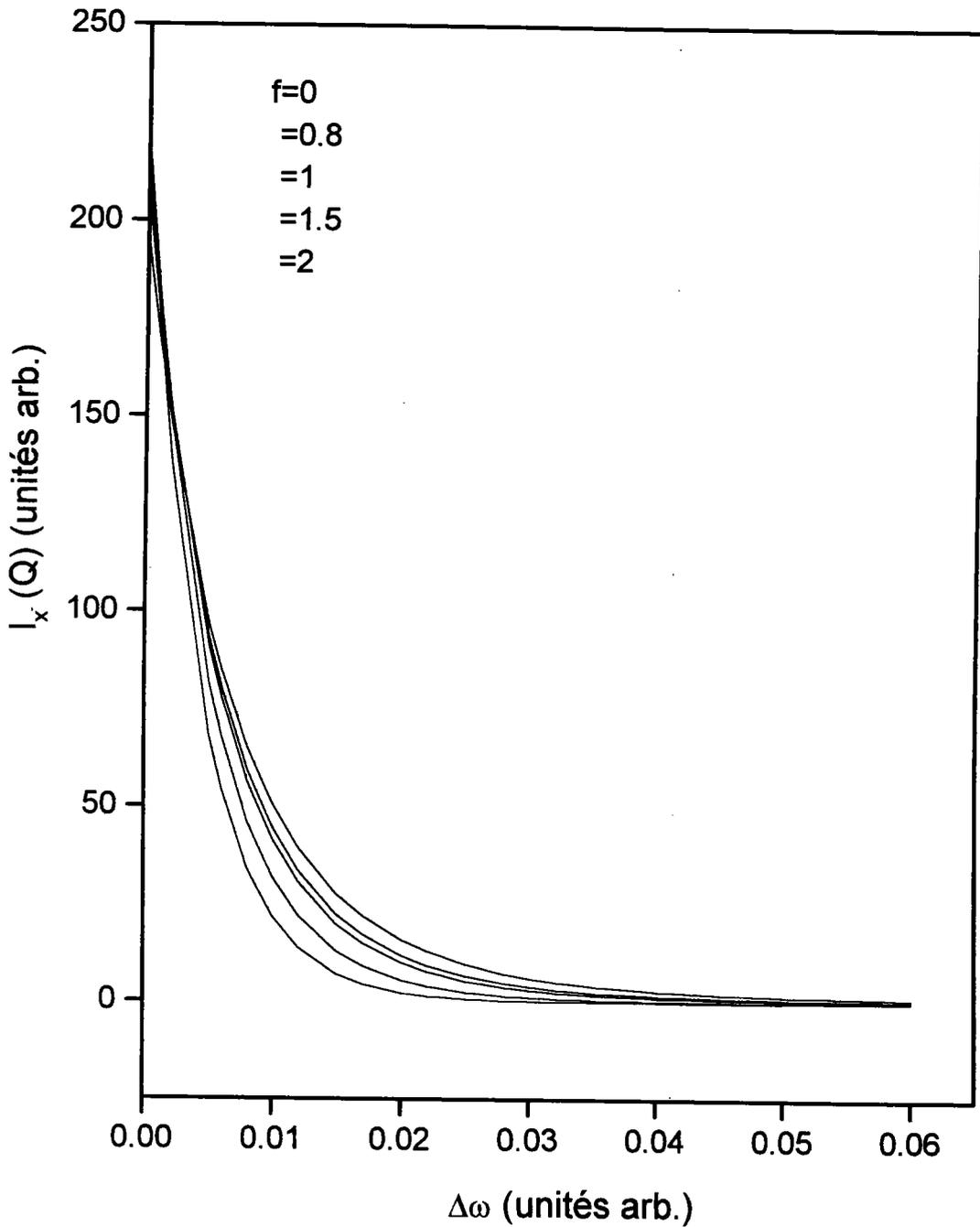


FIG. 4.3: Variation de l'intensité d'oscillateur en fonction de l'écart de fréquence $\Delta\omega$ relatif à la fréquence ω_0 , pour le trou léger ($\sigma = 0.707$), pour une largeur de 2 u. at., pour différentes valeurs du champ électrique et pour la concentration $x = 0.30$.

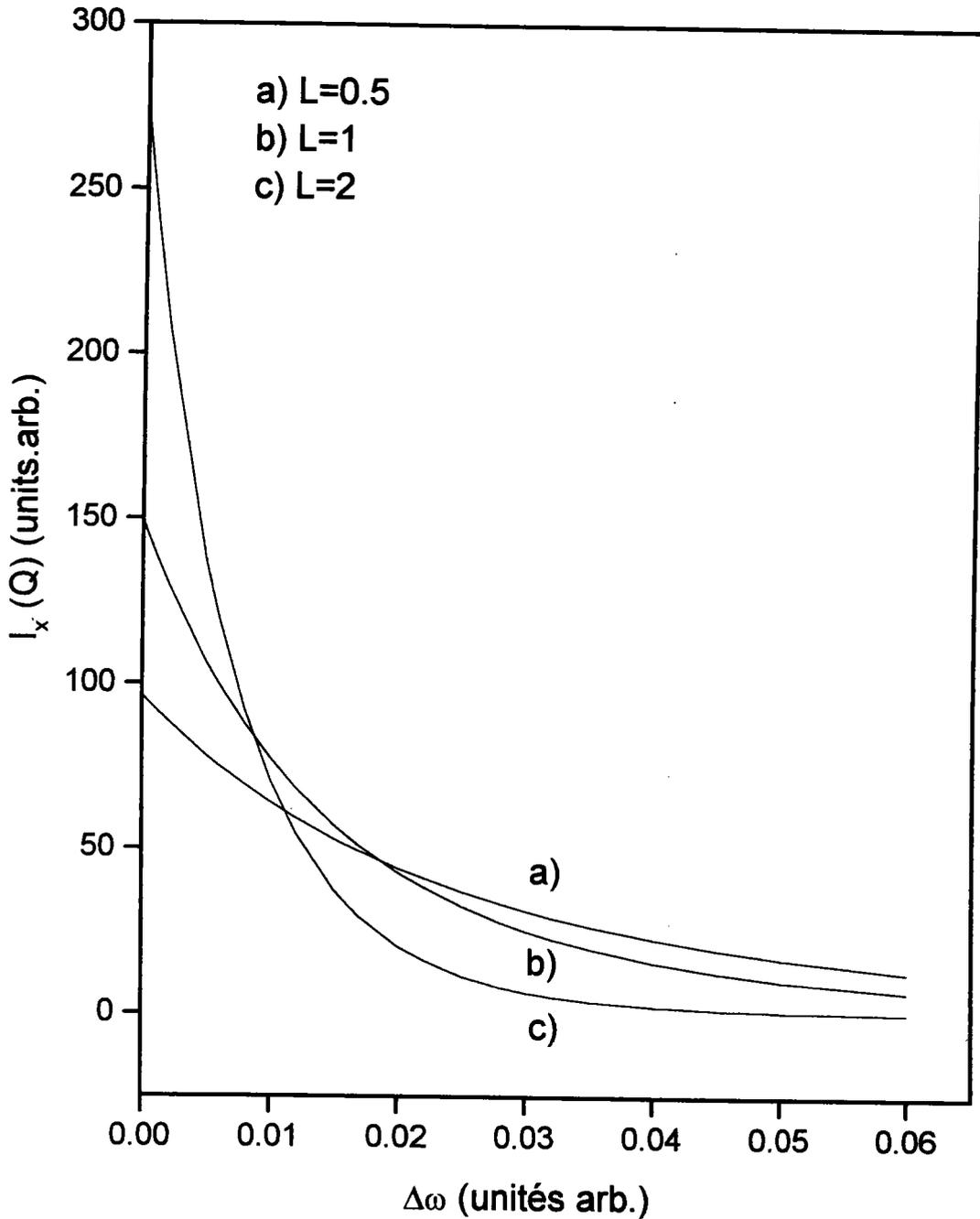


FIG. 4.4: Variation de l'intensité d'oscillateur en fonction de l'écart de fréquence $\Delta\omega$ relatif à la fréquence ω_0 , pour le trou lourd ($\sigma = 0.196$), pour une valeur du champ électrique de 0.5 u. at., pour trois valeurs de la largeur et pour la concentration $x = 0.30$.

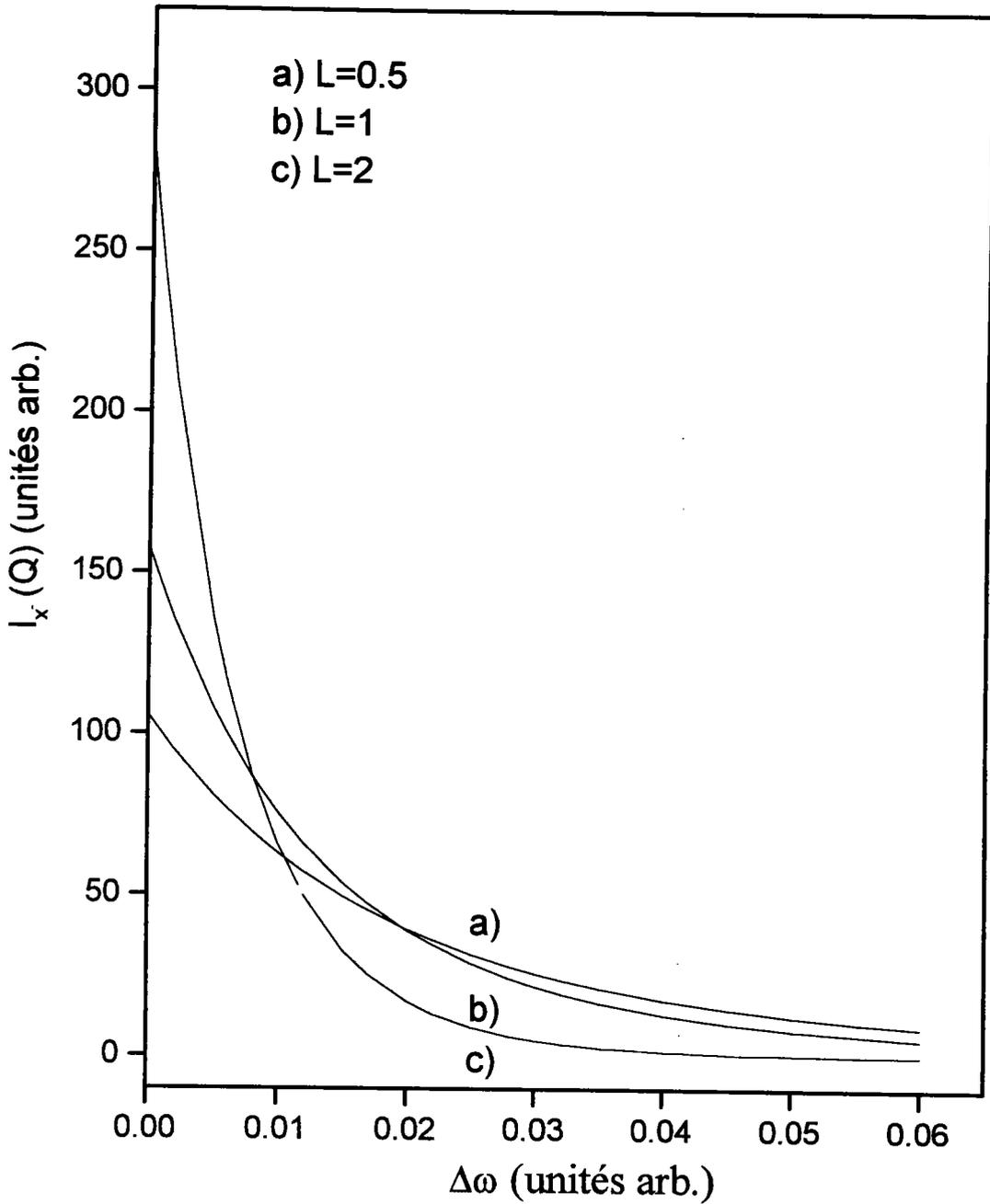


FIG. 4.5: Variation de l'intensité d'oscillateur en fonction de l'écart de fréquence $\Delta\omega$ relatif à la fréquence ω_0 , pour le trou lourd ($\sigma = 0.196$), pour une valeur du champ électrique de 0.5 u. at., pour trois valeurs de la largeur et pour la concentration $x = 0.15$.

CONCLUSION

Nous avons étudié dans ce chapitre l'intensité d'oscillateur du trion négatif dans un puits quantique de semiconducteur de type I en présence d'un champ électrique longitudinal, en utilisant l'Hamiltonien d'interaction rayonnement-matière dans un modèle à deux bandes, cette intensité d'absorption est importante au bord d'absorption puis décroissante vers les basses énergies, et aussi il décroît lorsque le champ électrique augmente, ceci provenant du fait que le champ électrique diminue la stabilité du complexe X^- .

Conclusion générale

Le présent travail a été consacré à l'étude des trions excitoniques dans les semi-conducteurs à puits quantique de type I, en présence du champ électrique longitudinal, récemment mis en évidence par les expériences de photoluminescence en champ électrique.

Dans le premier chapitre, nous avons rappelé dans la première partie quelques travaux qui ont été consacrés à l'étude du puits quantique en présence du champ électrique, ensuite nous avons rappelé les principaux travaux théoriques et expérimentaux sur les complexes excitoniques.

Dans le deuxième chapitre, nous avons étudié l'état fondamental du trion négatif soumis à un confinement par un puits quantique en présence du champ électrique longitudinal. Nous avons construit une fonction d'onde d'essai, en choisissant une fonction paire par rapport à la permutation des deux électrons. Par une approche variationnelle, nous avons déterminé l'énergie fondamentale du trion et étudié la variation de l'énergie de corrélation en fonction de la largeur du puits, et en fonction du champ électrique, pour deux valeurs de σ , pour le trou lourd et pour le trou léger. La conclusion essentielle de ce chapitre est que pour les puits étroits le champ électrique a peu d'effet sur les trions excitoniques, et que l'effet du champ est plus prononcé pour les puits larges.

Dans le troisième chapitre, nous avons étudié la stabilité du trion négatif par rapport au mécanisme de dissociation en exciton et en électron, tout simplement en calculant l'énergie de liaison du trion ou l'énergie du deuxième électron, ce qui nous a permis de comparer cette énergie avec les résultats expérimentaux en fonction du champ électrique pour le cas du trion à trou lourd. Nous avons constaté que l'énergie du second électron diminue en valeur absolue avec le

champ, ce qui traduit une diminution de la stabilité, et aussi cette énergie augmente quand la largeur du puits quantique diminue.

Au dernier chapitre, nous avons étudié les propriétés optiques du trion négatif dans un puits quantique en présence du champ électrique longitudinal. Dans une première approche nous avons rappelé l'Hamiltonien d'interaction rayonnement-matière dans un modèle à deux bandes. Nous avons utilisé ce Hamiltonien pour étudier l'absorption linéaire d'un photon entre les états d'électron et du trion négatif et nous avons calculé le coefficient d'absorption. Puis nous avons étudié la variation de l'intensité d'oscillateur du trion négatif en fonction de l'écart de fréquence relatif à la fréquence correspondant au bord d'absorption, de la largeur du puits quantique et en fonction du champ électrique. La conclusion de ce chapitre est que l'intensité d'oscillateur diminue lorsque le champ électrique augmente, traduisant la diminution de stabilité du trion.

Annexe A

Méthode de la masse effective

Dans cette annexe, nous rappelons dans la première partie la méthode de l'approximation de la masse effective. Puis nous appliquons cette méthode pour calculer l'énergie d'une particule dans un puits quantique soumis à un champ électrique longitudinal. L'approximation de la masse effective (Kohn et Luttinger [69]) est une méthode permettant de tenir compte d'une perturbation $U(r)$ s'ajoutant au potentiel effectif de Hartree-Fock. La perturbation $U(r)$ peut être le potentiel dû à un champ électrique, un champ magnétique, à des impuretés, ou à une hétérogénéité du matériau, elle n'est valable qu'à l'étude au voisinage de $k = 0$.

A.1 Approximation de la masse effective

Nous essayons d'établir l'équation de la masse effective pour la fonction enveloppe d'un semi-conducteur à puits quantique (Chow [70]).

Soit H l'Hamiltonien du système total, d'énergie ϵ_λ et de fonction d'onde $|\Phi_\lambda^{QW}\rangle$.

$$\begin{aligned} H |\Phi_\lambda^{QW}\rangle &= \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta + V_{eff}(r) + V_w \right\} |\Phi_\lambda^{QW}\rangle \\ &= \epsilon_\lambda |\Phi_\lambda^{QW}\rangle \end{aligned} \tag{A.1}$$

où V_{eff} désigne le potentiel périodique créé par les ions du cristal, V_w est le

potentiel perturbateur, c'est le potentiel de confinement des électrons. Nous supposons que ce potentiel varie lentement dans une cellule unité, dans ce cas sa transformée de Fourier est très faible sauf pour des vecteurs d'onde très petits devant la taille de la zone de Brillouin, m_0 est la masse d'un électron libre. Les états propres $|\Phi_\lambda^{QW}\rangle$ de l'Hamiltonien (A.1) s'écrivent comme combinaison linéaire des états $|\Phi_{nk}\rangle$ satisfaisant à l'équation de Hartree-Fock :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + V_{eff}(r) \right\} |\Phi_{nk}\rangle = \epsilon_{nk} |\Phi_{nk}\rangle \quad (\text{A.2})$$

$$|\Phi_\lambda^{QW}\rangle = \sum_{n,k} |\Phi_{nk}\rangle \langle \Phi_{nk} | \Phi_\lambda^{QW} \rangle \quad (\text{A.3})$$

où $\langle \Phi_{nk} | \Phi_\lambda^{QW} \rangle$ représente l'amplitude de probabilité de trouver les états du puits $|\Phi_\lambda^{QW}\rangle$ dans les états massifs $|\Phi_{nk}\rangle$. Dans la représentation $|r\rangle$ l'équation (A.3) s'écrit :

$$\langle r | \Phi_\lambda^{QW} \rangle = \sum_{n,k} \langle r | \Phi_{nk} \rangle \langle \Phi_{nk} | \Phi_\lambda^{QW} \rangle \quad (\text{A.4})$$

le théorème de Bloch permet d'écrire :

$$\langle r | \Phi_{nk} \rangle = e^{ik \cdot r} \langle r | nk \rangle = e^{ik \cdot r} u_{nk}(r) \quad (\text{A.5})$$

où $u_{nk}(r)$ possède la périodicité du cristal.

$$\begin{aligned} \langle r | \Phi_\lambda^{QW} \rangle &= \sum_{n,k} e^{ik \cdot r} \langle r | nk \rangle \langle \Phi_{nk} | \Phi_\lambda^{QW} \rangle \\ &= \sum_{m,n,k} e^{ik \cdot r} \langle r | m \rangle \langle m | nk \rangle \langle \Phi_{nk} | \Phi_\lambda^{QW} \rangle \\ &= \sum_m \left[\sum_k e^{ik \cdot r} W_{\lambda mk} \right] \langle r | m \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

où :

$$W_{\lambda mk} = \sum_n \langle m | nk \rangle \langle \Phi_{nk} | \Phi_\lambda^{QW} \rangle. \quad (\text{A.7})$$

Pour alléger l'écriture de l'équation (A.6). Nous posons la notation suivante :

$$W_{\lambda m}(r) = \sum_k e^{ik \cdot r} W_{\lambda m k} \quad (\text{A.8})$$

l'équation (A.6) peut se réécrire :

$$\langle r | \Phi_\lambda^{QW} \rangle = \sum_m W_{\lambda m}(r) \langle r | m \rangle \quad (\text{A.9})$$

où $W_{\lambda m}(r)$ représente la fonction enveloppe. Nous substituons l'équation (A.6) dans l'équation (A.1), puis on multiplie à gauche par $e^{ik \cdot r} \langle m | r \rangle$ et on intègre sur tout le volume de cristal (V) on obtient :

$$\begin{aligned} & \sum_{n,k} W_{\lambda n k} \frac{1}{V} \int_V d^3 r e^{i(k-k') \cdot r} \langle m | r \rangle \\ & \times \left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \epsilon_n - \epsilon_\lambda + \frac{\hbar}{m_0} k \cdot P + V_w(z) \right\} \langle r | n \rangle = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

La fonction $e^{ik \cdot r}$ varie lentement par rapport à la fonction de Bloch $u_{nk}(r)$. On peut décomposer l'intégrale sur le volume de cristal en une double sommation. Nous supposons par la suite que les fonctions de Bloch sont normées sur une cellule unité, nous obtenons :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \int_V d^3 r e^{i(k-k') \cdot r} \langle m | r \rangle \langle r | n \rangle \\ & = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N e^{i(k-k') \cdot R_\mu} \frac{1}{\mu} \int_\mu d^3 r e^{i(k-k') \cdot r} \langle m | r \rangle \langle r | n \rangle \\ & = \delta_{k,k'} \delta_{m,n} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

et :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \int_V d^3 r e^{i(k-k') \cdot r} \langle m | r \rangle V_w(z) \langle r | n \rangle \\ & = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N e^{i(k-k') \cdot R_\mu} V_w(z_\mu) \frac{1}{\mu} \int_\mu d^3 r e^{i(k-k') \cdot r} \langle m | r \rangle \langle r | n \rangle \\ & = V_{w,k-k'}(z) \delta_{m,n} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

avec :

$$V_{w,k-k'}(z) = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N e^{i(k-k').R_\mu} V_w(z_\mu). \quad (\text{A.13})$$

Les vecteurs \mathbf{k} et \mathbf{k}' sont des vecteurs proches de zéro, d'après la remarque précédente, on aura $e^{i(k-k').r} \simeq 1$, nous obtenons :

$$V_w(z) \simeq V_w(z_\mu) \quad (\text{A.14})$$

l'équation (A.10) s'écrit :

$$\left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \epsilon_m \right\} W_{\lambda m k} + \frac{\hbar}{m_0} \sum_n k \cdot P_{mn} W_{\lambda n k} + \sum_{k'} V_w(z) W_{\lambda m k'} = \epsilon_\lambda W_{\lambda m k}. \quad (\text{A.15})$$

Pour la résolution de cette équation, nous supposons que les bandes ne sont pas dégénérées pour $k = 0$. La théorie de $\mathbf{k} \cdot \mathbf{P}$ permet d'obtenir les expressions approchées de ϵ_λ et $W_{\lambda m k}$ au voisinage de $k = 0$, en première approximation nous négligeons le potentiel de confinement. L'équation ci-dessus se réduit à l'équation suivante :

$$\left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \epsilon_j \right\} W_{\lambda j k} + \frac{\hbar}{m_0} k \cdot P_{jn} W_{\lambda n k} = \epsilon_\lambda W_{\lambda j k}. \quad (\text{A.16})$$

Nous obtenons alors :

$$W_{\lambda j k} = \frac{\hbar}{m_0} \frac{k \cdot P_{jn}}{\epsilon_n - \epsilon_j} W_{\lambda n k}. \quad (\text{A.17})$$

Nous substituons l'équation (A.17) dans l'équation (A.15) nous en déduisons :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} W_{\lambda n k} + \sum_{k'} V_w(z) W_{\lambda n k'} = \epsilon_{\lambda n} W_{\lambda n k} \quad (\text{A.18})$$

où m_n désigne le tenseur de la masse effective qui s'exprime par :

$$\frac{1}{m_n} = \frac{1}{m^*} = \frac{1}{m_0} \left\{ 1 + \frac{2}{m_0} \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | P | n \rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m} \right\}. \quad (\text{A.19})$$

La transformée de Fourier $F(r)$ de $W_{\lambda n}(k)$ est alors solution de l'équation suivante, obtenue par transformation de Fourier de (A.18) :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + V_w(z) \right\} F(r) = \epsilon_{\lambda n} F(r). \quad (\text{A.20})$$

On retrouve l'équation habituelle de la masse effective, dans le cas de potentiel de confinement varie lentement dans une cellule élémentaire.

A.2 Energie d'une particule dans un puits quantique avec saut de masse

A.2.1 Cas d'un électron

Considérons un électron dans un puits quantique de type $GaAs/AlGaAs$ de potentiel fini. En prenant l'origine des énergies au fond du puits, l'Hamiltonien de l'électron à l'intérieur du puits est donné par :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_w^*}\Delta \quad (\text{A.21})$$

et à l'extérieur du puits s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_b^*}\Delta + V_e \quad (\text{A.22})$$

où V_e est le potentiel de confinement, m_w^* et m_b^* sont respectivement les masses effectives de l'électron dans $GaAs$ ($0.067m_0$) et dans $Al_xGa_{1-x}As$. La masse m_b^* est obtenue par interpolation linéaire entre les masses d'électron de $GaAs$ et $AlAs$ (Debernardi et al. [71]) ce qui conduit à $m_b^*/m_0 = 0.067 + 0.057x$. La fonction d'onde de l'électron est de la forme $f(z) \exp(ik_{\parallel}r_{\parallel})$. Il reste à résoudre l'équation de Schrödinger pour obtenir l'énergie E_e de l'électron dans l'état fondamental, ce qui correspond à une fonction propre $f(z)$ symétrique définie par :

$$f(z) = \begin{cases} A_e \exp(-q_e |z|) & |z| > L/2 \\ B_e \cos(k_e z) & |z| \leq L/2 \end{cases} \quad (\text{A.23})$$

avec :

$$k_e = \sqrt{\frac{2m_w^*}{\hbar^2} E_e - k_{\parallel}^2} \quad (\text{A.24})$$

et

$$\begin{aligned} q_e &= \sqrt{\frac{2m_b^*}{\hbar^2} (V_e - E_e) + k_{\parallel}^2} \\ &= \sqrt{\frac{2m_b^*}{\hbar^2} V_e + \left(1 - \frac{m_b^*}{m_w^*}\right) k_{\parallel}^2 - \frac{m_b^*}{m_w^*} k_e^2} \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

A.2. Energie d'une particule dans un puits quantique avec saut de masse

En tenant compte des conditions de continuité de la fonction $f(z)$ et de la densité de courant $1/m_i^* df(z)/dz$ en $z = \pm L/2$, on obtient une deuxième relation entre k_e et q_e :

$$q_e = \frac{m_b^*}{m_w^*} k_e \tan\left(\frac{k_e L}{2}\right) \quad (\text{A.26})$$

Par résolution simultanée des équations (A.25) et (A.26) nous déterminons E_e pour un k_{\parallel} donné.

Les figures qui suivent représentent l'énergie de confinement de l'électron en fonction de k_{\parallel} , pour deux concentrations d'Aluminium $x = 0.30$ et $x = 0.15$ et pour trois valeurs différentes de la largeur du puits. Nous remarquons que pour les puits étroits et pour la concentration $x = 0.30$, l'effet de saut de masse effective entre le puits et les barrières est important sur l'énergie de confinement (5 meV). Cet écart diminue lorsque L augmente, et reste de l'ordre de 0.5 meV pour $L = 150 \text{ \AA}$. Pour $L = 300 \text{ \AA}$ et $x = 0.33$, pour lequel la comparaison avec l'expérience a été réalisée (voir p.52), l'écart est d'environ 0.12 meV .

Annexe A. Méthode de la masse effective

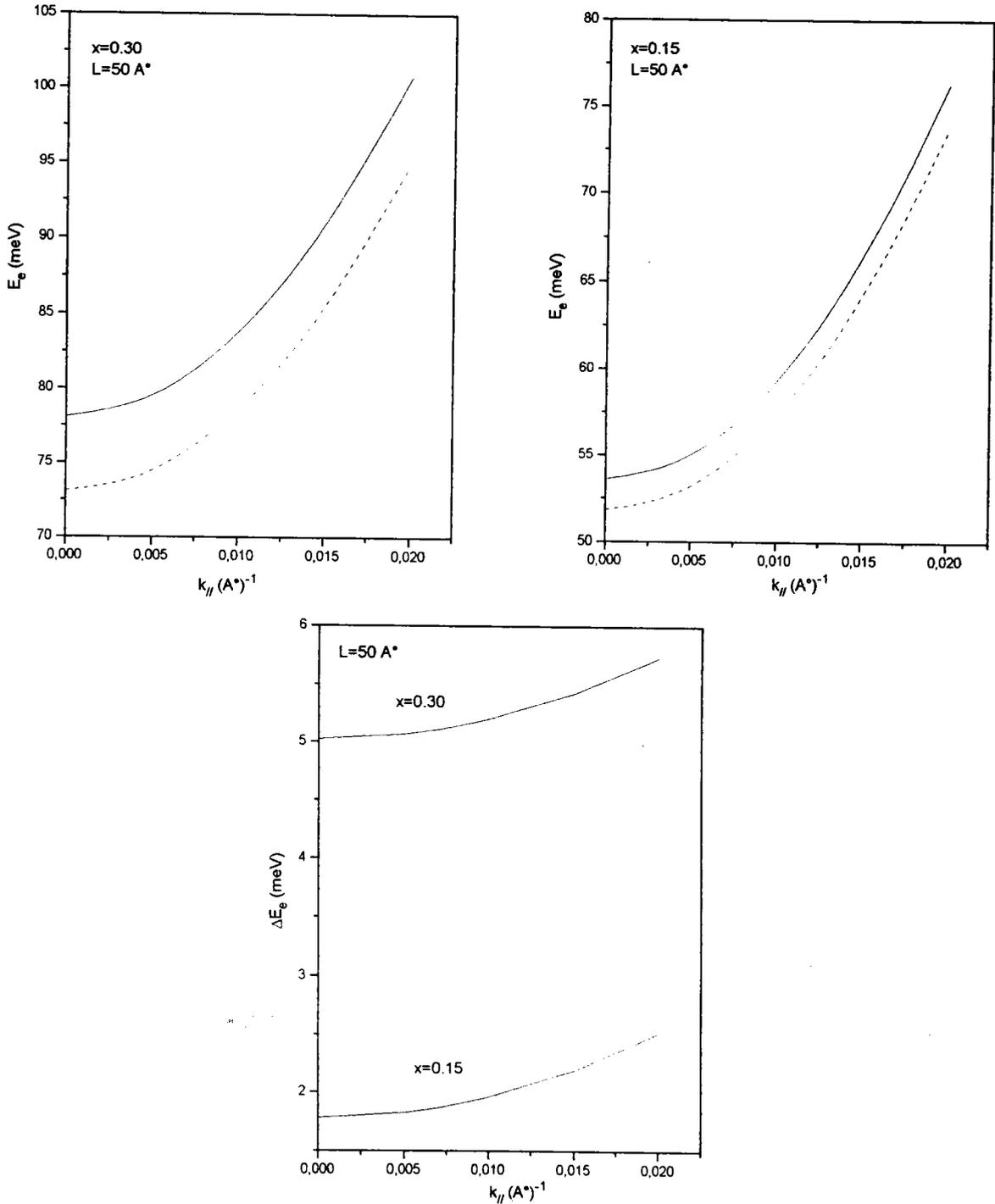


FIG. A.1: Comparaison de l'énergie de confinement de l'électron en fonction de $k_{||}$, sans saut de masse (trait plein), avec saut de masse (pointillés), pour deux concentrations $x = 0.30$ et $x = 0.15$, et pour une largeur de 50 \AA , et leurs différences (ΔE_e)

A.2. Energie d'une particule dans un puits quantique avec saut de masse

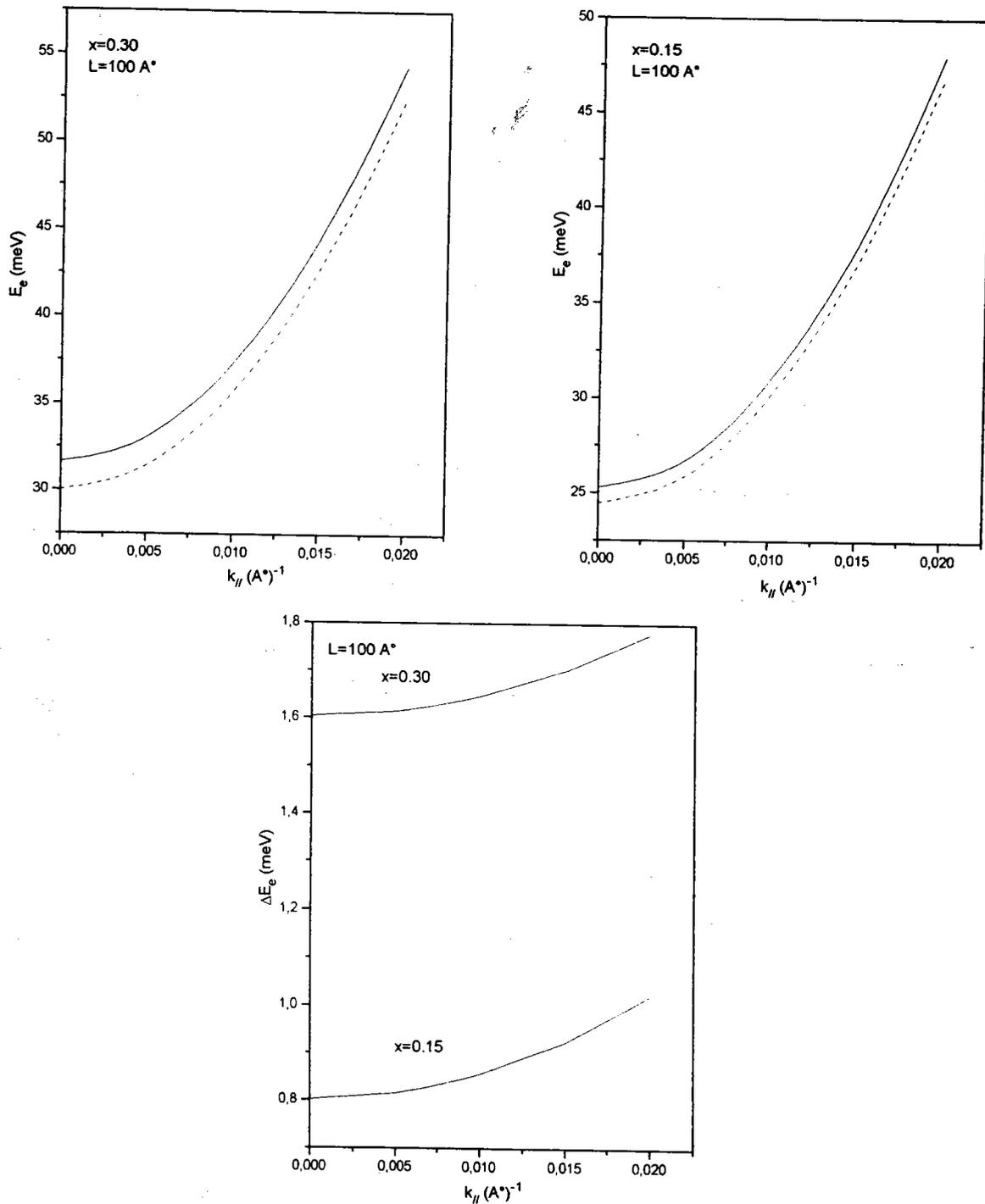


FIG. A.2: Comparaison de l'énergie de confinement de l'électron en fonction de $k_{||}$, sans saut de masse (trait plein), avec saut de masse (pointillés), pour deux concentrations $x = 0.30$ et $x = 0.15$, et pour une largeur de 100 \AA , et leurs différences (ΔE_e)

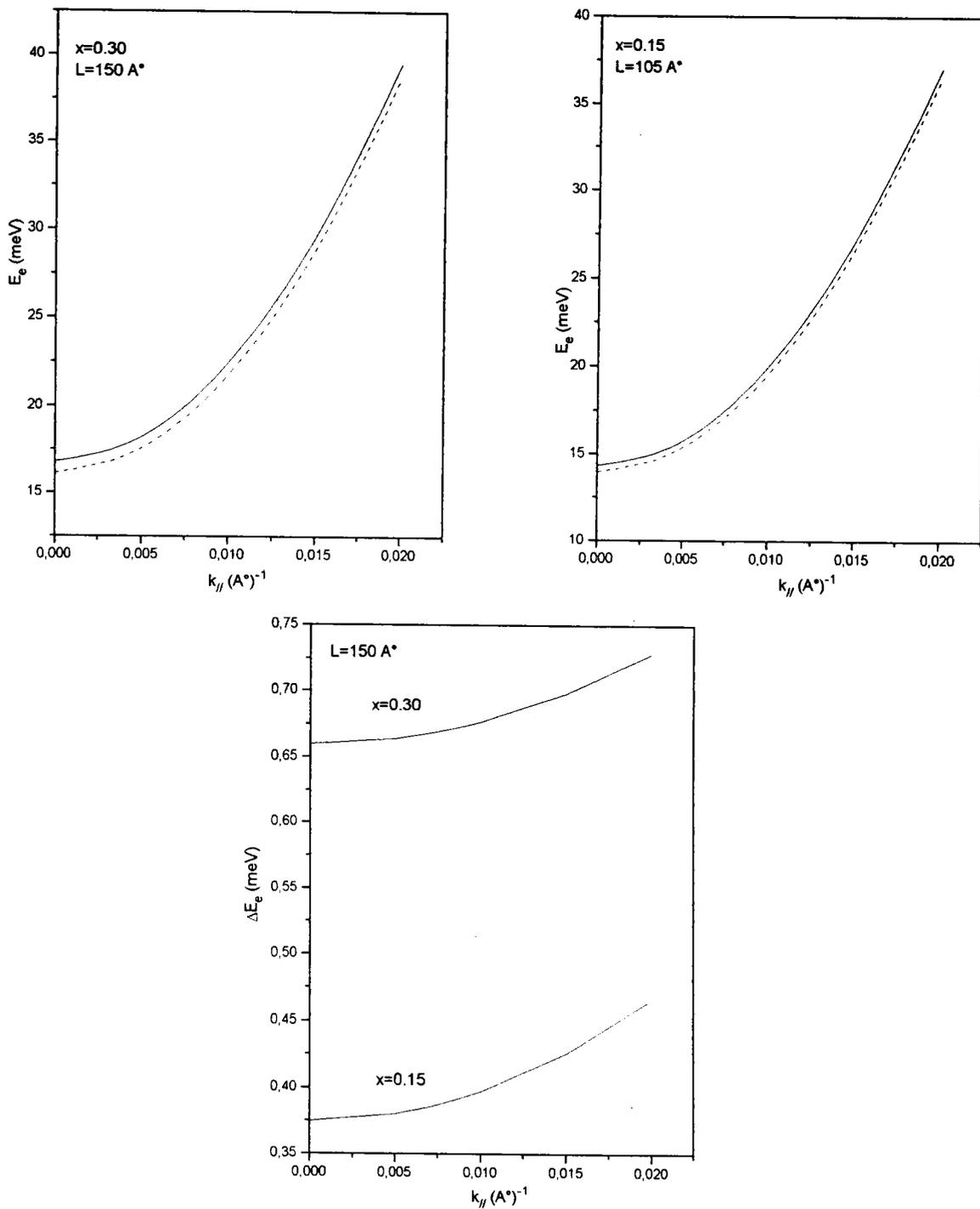


FIG. A.3: Comparaison de l'énergie de confinement de l'électron en fonction de $k_{||}$, sans saut de masse (trait plein), avec saut de masse (pointillés), pour deux concentrations $x = 0.30$ et $x = 0.15$, et pour une largeur de 150 \AA , et leurs différences (ΔE_e)

A.2.2 Cas d'un trou

La méthode exposée ici a été utilisée par de nombreux auteurs. On peut consulter en particulier les travaux de Chuang [72, 73] et de Sugawara [74]. Elle permet de déterminer les structures de bande pour les trous dans un puits quantique. On suppose qu'il s'agit d'un semiconducteur III-V de structure cubique ayant pour symétrie le groupe T_d . Pour un matériau tel que GaAs, la séparation des bandes Γ_7 et Γ_8 résultant du couplage spin orbite est de 340 meV. En négligeant un couplage éventuel entre ces deux bandes, nous nous intéresserons alors uniquement aux trous de la bande de valence Γ_8 . Pour cette bande, l'Hamiltonien peut être écrit dans la base des fonctions $|j, m\rangle$:

$$|u_1\rangle = \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle, |u_2\rangle = \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle, |u_3\rangle = \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle, |u_4\rangle = \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \quad (\text{A.27})$$

On obtient alors :

$$H_v = - \begin{vmatrix} P+Q & -S & R & 0 \\ -S^* & P-Q & 0 & R \\ R^* & 0 & P-Q & S \\ 0 & R^* & S^* & P+Q \end{vmatrix} \quad (\text{A.28})$$

où les différents termes se décomposent en deux parties, la première dépendant des composantes du vecteur d'onde et la seconde de la pression exercée ou des contraintes élastiques :

$$\begin{aligned} P &= P_k + P_\epsilon \\ Q &= Q_k + Q_\epsilon \\ R &= R_k + R_\epsilon \\ S &= S_k + S_\epsilon \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Les termes dépendant du vecteur d'onde sont donnés par des relations faisant intervenir les paramètres de Luttinger γ_i :

$$\begin{aligned} P_k &= \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ Q_k &= \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2) \\ R_k &= -\frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} \sqrt{3} (k_x^2 - k_y^2) + 2i \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} \sqrt{3} k_x k_y \\ S_k &= 2 \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} \sqrt{3} (k_x - ik_y) k_z \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Les autres termes dépendent du tenseur des contraintes ε_{ij} et des potentiels de déformation a_v , b et d donnés par Bir et Pikus [75]:

$$\begin{aligned}
 P_\varepsilon &= -a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \\
 Q_\varepsilon &= -\frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \\
 R_\varepsilon &= \frac{\sqrt{3}}{2} b (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - i d \varepsilon_{xy} \\
 S_\varepsilon &= -d (\varepsilon_{xz} - i \varepsilon_{yz})
 \end{aligned} \tag{A.31}$$

Dans le cas d'un puits quantique, ces derniers termes sont supposés nuls dans le matériau constituant la barrière. En revanche, le matériau constituant le puits subit éventuellement une contrainte élastique due au désaccord de maille avec le substrat; nous avons alors, pour une croissance suivant l'axe z :

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{xx} &= \varepsilon_{yy} = \frac{a(x) - a_0}{a_0} = \varepsilon \\
 \varepsilon_{zz} &= -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon \\
 \varepsilon_{xy} &= \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0
 \end{aligned} \tag{A.32}$$

où C_{11} et C_{12} sont les coefficients d'élasticité, a_0 et $a(x)$ sont respectivement les paramètres de maille dans le puits et dans les barrières (substrat). On obtient alors:

$$\begin{aligned}
 P_\varepsilon &= -2 a_v \left(1 - 2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \varepsilon \\
 Q_\varepsilon &= -b \left(1 + 2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \varepsilon \\
 R_\varepsilon &= S_\varepsilon = 0
 \end{aligned} \tag{A.33}$$

Les termes dépendant de k peuvent être réécrits en exprimant les composantes

A.2. Energie d'une particule dans un puits quantique avec saut de masse

k_x, k_y en coordonnées polaires k_ρ et ϕ :

$$\begin{aligned}
 P_k &= \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} (k_\rho^2 + k_z^2) \\
 Q_k &= \frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} (k_\rho^2 - 2k_z^2) \\
 R_k &= -\frac{\hbar^2 \gamma_2}{2m_0} \sqrt{3} k_\rho^2 \cos(2\phi) + i \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} \sqrt{3} k_\rho^2 \sin(2\phi) \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \left[\left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) e^{-2i\phi} + \left(\frac{\gamma_2 - \gamma_3}{2} \right) e^{2i\phi} \right] k_\rho^2 \\
 S_k &= 2 \frac{\hbar^2 \gamma_3}{2m_0} \sqrt{3} k_\rho k_z e^{-i\phi} = S_\rho e^{-i\phi}
 \end{aligned} \tag{A.34}$$

En toute rigueur, les surfaces iso-énergétiques ne possèdent pas la symétrie de révolution autour de l'axe z dans l'espace réciproque mais présentent une distorsion. Toutefois, dans la mesure où les paramètres γ_2 et γ_3 sont suffisamment proches, l'approximation radiale consiste alors à négliger le terme faisant intervenir leur différence dans l'expression en coordonnées polaires de R_k . Celle-ci devient alors :

$$R_k \simeq -\frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3} \left(\frac{\gamma_2 + \gamma_3}{2} \right) e^{-2i\phi} k_\rho^2 = R_\rho e^{-2i\phi} \tag{A.35}$$

L'Hamiltonien de la bande de valence peut alors être réécrit :

$$H_v = - \begin{vmatrix} P + Q & -S_\rho e^{-i\phi} & R_\rho e^{-2i\phi} & 0 \\ -S_\rho e^{+i\phi} & P - Q & 0 & R_\rho e^{-2i\phi} \\ R_\rho e^{+2i\phi} & 0 & P - Q & S_\rho e^{-i\phi} \\ 0 & R_\rho e^{+2i\phi} & S_\rho e^{+i\phi} & P + Q \end{vmatrix} \tag{A.36}$$

Un changement de repère dans la base $|j, m\rangle e^{-im\phi}$ permet d'obtenir :

$$H_v = - \begin{vmatrix} P + Q & -S_\rho & R_\rho & 0 \\ -S_\rho & P - Q & 0 & R_\rho \\ R_\rho & 0 & P - Q & S_\rho \\ 0 & R_\rho & S_\rho & P + Q \end{vmatrix} \tag{A.37}$$

ce qui montre que les éléments de matrice et donc les valeurs propres sont indépendantes de ϕ . Un deuxième changement de repère dans la base :

$$\begin{aligned} |v_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|u_1\rangle e^{-i\frac{3}{2}\phi} - i |u_4\rangle e^{+i\frac{3}{2}\phi} \right) \\ |v_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(i |u_2\rangle e^{-i\frac{1}{2}\phi} - |u_3\rangle e^{+i\frac{1}{2}\phi} \right) \\ |v_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|u_1\rangle e^{-i\frac{3}{2}\phi} + i |u_4\rangle e^{+i\frac{3}{2}\phi} \right) \\ |v_4\rangle &= \frac{-1}{\sqrt{2}} \left(i |u_2\rangle e^{-i\frac{1}{2}\phi} + |u_3\rangle e^{+i\frac{1}{2}\phi} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

conduit à une matrice bloc-diagonale :

$$H_v = - \begin{vmatrix} H_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & H_{2 \times 2}^* \end{vmatrix} \quad (\text{A.39})$$

avec :

$$H_{2 \times 2} = - \begin{vmatrix} P + Q & -R_\rho - iS_\rho \\ -R_\rho + iS_\rho & P - Q \end{vmatrix} \quad (\text{A.40})$$

Les deux blocs possèdent les mêmes valeurs propres. Il suffit donc de résoudre l'équation aux valeurs propres pour le bloc (A.40) :

$$- \begin{vmatrix} P + Q & -R_\rho - iS_\rho \\ -R_\rho + iS_\rho & P - Q \end{vmatrix} \begin{vmatrix} F_1 \\ F_2 \end{vmatrix} = E \begin{vmatrix} F_1 \\ F_2 \end{vmatrix} \quad (\text{A.41})$$

ce qui conduit aux coefficients F_1 et F_2 de la fonction enveloppe. Les solutions sont, pour le trou lourd :

$$E_{HH} = -P + [Q^2 + R_\rho^2 + S_\rho^2]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.42})$$

avec :

$$\begin{vmatrix} F_{1HH} \\ F_{2HH} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} P - Q + E_{HH} \\ R_\rho - iS_\rho \end{vmatrix}$$

et pour le trou léger :

$$E_{LH} = -P - [Q^2 + R_\rho^2 + S_\rho^2]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.43})$$

avec :

$$\begin{vmatrix} F_{1LH} \\ F_{2LH} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} R_\rho + iS_\rho \\ P + Q + E_{LH} \end{vmatrix} \quad (\text{A.44})$$

A.2. Energie d'une particule dans un puits quantique avec saut de masse

En fait il faut résoudre simultanément trois équations correspondant aux trois régions auxquelles on attribue un label $j = 1, 2, 3$ soit 1 pour la barrière gauche ($z < 0$), 2 pour le puits et 3 pour la barrière droite ($z > 0$). La fonction d'onde s'écrit alors sous une forme tout à fait générale :

$$\begin{aligned} \Psi^j(r) &= \begin{vmatrix} F_1(r) \\ F_2(r) \end{vmatrix} = F_1(r) |v_1\rangle + F_2(r) |v_2\rangle = \Psi_{HH}^j(r) + \Psi_{LH}^j(r) \\ &= A_{HHj} \begin{vmatrix} F_{1HH}^j \\ F_{2HH}^j \end{vmatrix} e^{ik_\rho \cdot \rho} e^{ik_{zHHj} \cdot z} + A_{LHj} \begin{vmatrix} F_{1LH}^j \\ F_{2LH}^j \end{vmatrix} e^{ik_\rho \cdot \rho} e^{ik_{zLHj} \cdot z} \quad (\text{A.45}) \\ &+ B_{HHj} \begin{vmatrix} F_{1HH}^{j-} \\ F_{2HH}^{j-} \end{vmatrix} e^{ik_\rho \cdot \rho} e^{-ik_{zHHj} \cdot z} + B_{LHj} \begin{vmatrix} F_{1LH}^{j-} \\ F_{2LH}^{j-} \end{vmatrix} e^{ik_\rho \cdot \rho} e^{-ik_{zLHj} \cdot z} \end{aligned}$$

Les coefficients A et B correspondent respectivement à une propagation vers les $z > 0$ ou < 0 . Si k_z est réel, la fonction correspond à une propagation, et si k_z est imaginaire, à un amortissement. Les relations de continuité entre deux régions sont définies par Andreani et al. [76]:

$$\begin{vmatrix} F_1(r) \\ F_2(r) \end{vmatrix} \text{ doit être continue ainsi que } \begin{vmatrix} u_j \frac{\partial}{\partial z} & v_j \\ -v_j & w_j \frac{\partial}{\partial z} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} F_1(r) \\ F_2(r) \end{vmatrix}$$

avec :

$$\begin{aligned} u_j &= \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - 2\gamma_2) \\ v_j &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{3}\gamma_3 k_\rho \\ w_j &= \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + 2\gamma_2) \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

Ces relations de continuité permettent d'écrire des équations matricielles entre les coefficients :

$$\begin{vmatrix} A_{HHj} \\ A_{LHj} \\ B_{HHj} \\ B_{LHj} \end{vmatrix} = U_j \begin{vmatrix} A_{HHj+1} \\ A_{LHj+1} \\ B_{HHj+1} \\ B_{LHj+1} \end{vmatrix} \quad (\text{A.47})$$

ce qui conduit à :

$$\begin{vmatrix} A_{HH1} \\ A_{LH1} \\ B_{HH1} \\ B_{LH1} \end{vmatrix} = U_1 U_2 \begin{vmatrix} A_{HH3} \\ A_{LH3} \\ B_{HH3} \\ B_{LH3} \end{vmatrix} = U \begin{vmatrix} A_{HH3} \\ A_{LH3} \\ B_{HH3} \\ B_{LH3} \end{vmatrix} \quad (\text{A.48})$$

Dans la région 1, les k_{z1} sont imaginaires et la fonction doit tendre vers 0 lorsque $z \rightarrow -\infty$, ce qui impose que A_{HH1} et A_{LH1} soient nuls. De même pour B_{HH3} et B_{LH3} dans la région 3. Ceci implique que les éléments de la matrice U vérifient la relation suivante :

$$U_{11}U_{22} - U_{12}U_{21} = 0 \quad (\text{A.49})$$

La méthode, connue sous le nom de TMT (Technique des Matrices de Transfert) consiste alors, pour une valeur de k_ρ donnée, à essayer une valeur de E , pour laquelle on détermine les coefficients F_α^j des fonctions enveloppes, ce qui permet de calculer la matrice U et de vérifier si la relation (A.49) est satisfaite ou non. En balayant les valeurs d'énergie à partir du fond du puits, on trouve successivement les valeurs propres correspondant au trou lourd et au trou léger, notées HH1, LH1, HH2 ...etc. En fait ces notations ne sont rigoureuses qu'en $k_\rho = 0$ puisque on obtient des mélanges d'états lorsque $k_\rho \neq 0$.

Résultats obtenus :

Les valeurs numériques utilisées sont regroupées dans le tableau suivant, elles proviennent de Landolt et Börnstein [77] et Debernardi et al. [71] .

Pour le composé $Al_xGa_{1-x}As$, les valeurs du paramètre de maille ainsi que les paramètres de Luttinger sont interpolés linéairement. Pour le gap, Debernardi donne la relation suivante :

$$E_g = 1.424 + 1.247 x \quad (\text{A.50})$$

mais, par souci de cohérence, nous utilisons celle de Lee et al. [60] déjà utilisée dans le calcul du trion :

$$E_g = 1.424 + 1.155 x + 0.37 x^2 \quad (\text{A.51})$$

A.2. Energie d'une particule dans un puits quantique avec saut de masse

| | GaAs | AlAs |
|---------------------------|--------|-------|
| $a_0(\text{Å})$ | 5.6533 | 5.660 |
| $E_g(\text{eV})$ | 1.424 | 3.018 |
| γ_1 | 6.85 | 3.45 |
| γ_2 | 2.10 | 0.68 |
| γ_3 | 2.90 | 1.29 |
| $a(\text{eV})$ | -9.77 | |
| $b(\text{eV})$ | -1.7 | |
| $C_{11}(\text{dyn/cm}^2)$ | 11.88 | |
| $C_{12}(\text{dyn/cm}^2)$ | 5.38 | |

Remarquons que pour x variant de 0 à 0.3, l'écart entre ces deux relations peut atteindre $\pm 5 \text{ meV}$. Pour la bande de valence, le band-offset est donné par $\Delta E_v = 0.43 \Delta E_g$ [12]. Pour le potentiel de déformation de la bande de valence, Chuang [72] donne $a_v = a/3$.

Les figures qui suivent montrent les résultats obtenus pour des concentrations d'Aluminium de 15% et 30% et pour des largeurs de puits allant de 50 à 150 Å. Nous présentons en traits pleins les énergies calculées par cette méthode et en traits pointillés les valeurs obtenues en traitant le trou comme une particule unique, de masse identique dans la barrière et le puits. Nous pouvons remarquer que l'effet de saut de masse effective est beaucoup plus grand pour les trous légers que pour les trous lourds,

Le tableau suivant regroupe les écarts, pour $k_p = 0$, entre les deux méthodes.

| $L(\text{Å})$ | HH1 | | LH1 | |
|---------------|------------|------------|------------|------------|
| | $x = 0.15$ | $x = 0.30$ | $x = 0.15$ | $x = 0.30$ |
| 50 | 0.21 | 0.43 | 2.85 | 5.13 |
| 100 | 0.09 | 0.18 | 1.55 | 3.30 |
| 150 | 0.07 | 0.14 | 1.37 | 2.78 |
| 300 | | -0.07 | | -0.07 |

Nous pouvons en déduire que pour les trous lourds, la méthode approchée donne des résultats assez proches de la méthode complète à partir de $L = 100 \text{ Å}$. D'une manière générale, lorsque la probabilité de présence de la particule dans le puits est très importante, les masses utilisées dans les barrières ont peu d'influence sur les valeurs d'énergie obtenues et ceci est vérifié pour les puits larges. Pour

$L = 300\text{\AA}$ et $x = 0.33$, l'écart entre les deux méthodes est négligeable. En conclusion, dans ce cas particulier, le fait d'avoir utilisé une méthode approchée pour la détermination des énergies de confinement de l'électron et du trou, ne permet pas d'expliquer la différence entre les résultats expérimentaux et les résultats calculés (voir p.52).

A.2. *Energie d'une particule dans un puits quantique avec saut de masse*

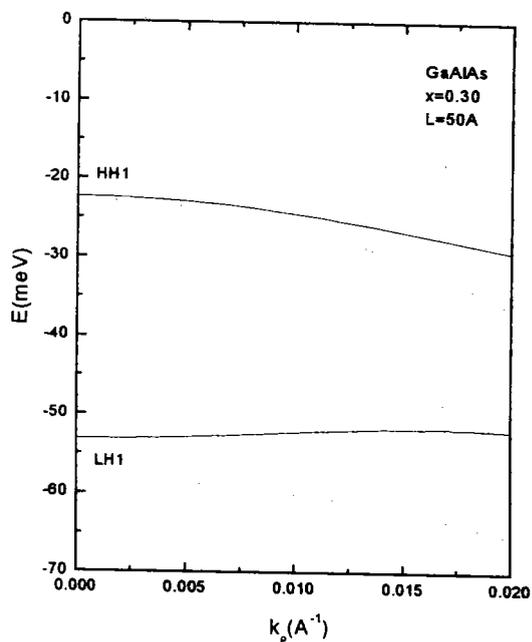
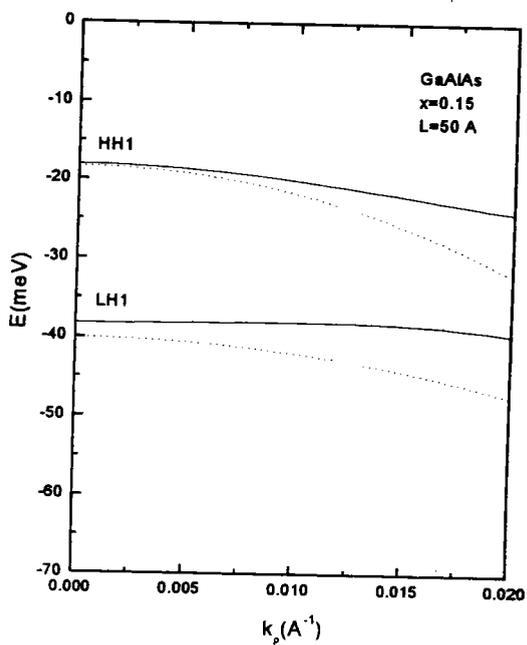


FIG. A.4: *Comparaison de l'énergie de confinement de trou en fonction de k_ρ , sans saut de masse (trait pointillés), avec saut de masse (trait plein), pour deux concentrations $x = 0.15$ et $x = 0.30$, et pour une largeur de 50 \AA .*

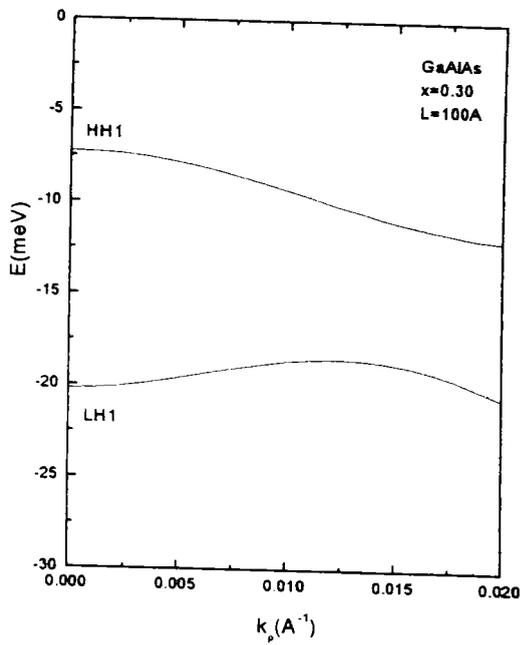
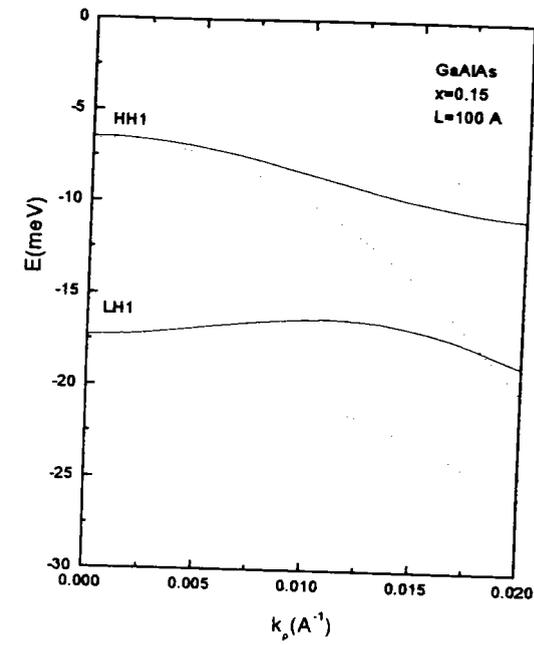


FIG. A.5: Comparaison de l'énergie de confinement de trou en fonction de k_ρ , sans saut de masse (trait pointillés), avec saut de masse (trait plein), pour deux concentrations $x = 0.15$ et $x = 0.30$, et pour une largeur de 100 \AA .

A.2. Energie d'une particule dans un puits quantique avec saut de masse

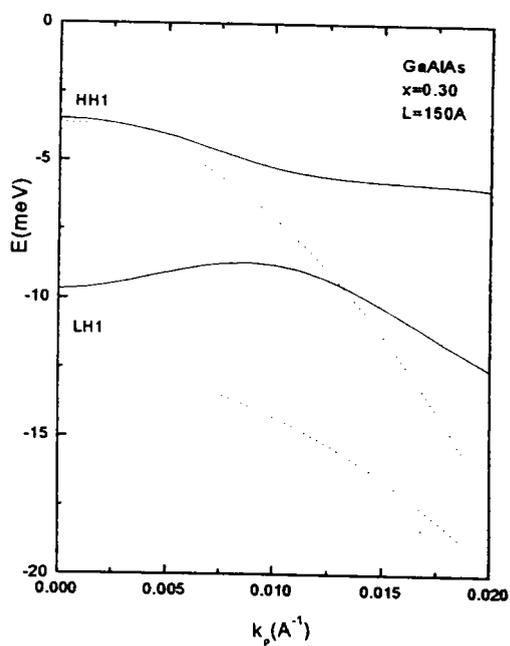
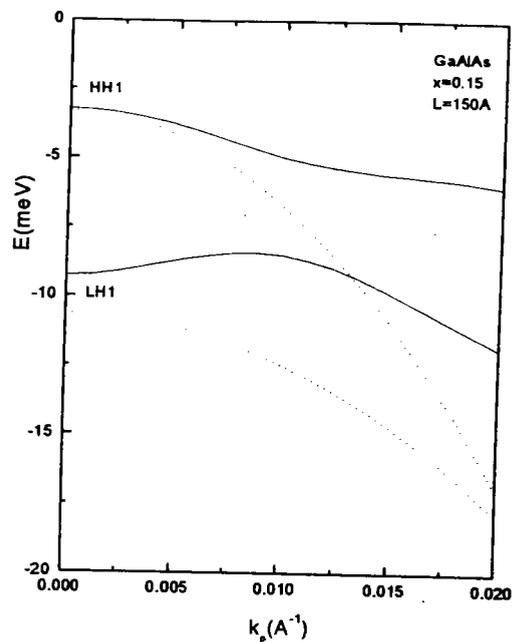


FIG. A.6: Comparaison de l'énergie de confinement de trou en fonction de k_p , sans saut de masse (trait pointillés), avec saut de masse (trait plein), pour deux concentrations $x = 0.15$ et $x = 0.30$, et pour une largeur de 150\AA .

A.3 Etat d'une particule dans un puits quantique en présence du champ électrique

Considérons une fine couche de semi-conducteurs d'Arséniure de Gallium $GaAs$ de largeur L , de faible énergie de bande interdite insérée entre deux couches de $Al_xGa_{1-x}As$, de plus haute énergie de bande interdite. La couche de $GaAs$ représente un puits de potentiel pour les électrons, la hauteur de la barrière de confinement est définie par la concentration x de l'Aluminium. Par souci de simplification nous supposons que les masses effectives sont identiques et isotropes dans les deux matériaux. Nous calculons l'énergie de confinement de l'électron dans le cas du puits soumis à un champ électrique longitudinal. La fonction enveloppe de l'électron obéit à l'équation suivante :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta + V_w^e(z) + eFz \right\} F(r) = E F(r) \quad (\text{A.52})$$

où $V_w(z)$ est le potentiel de confinement. Nous représentons dans la figure (A.7) le potentiel de confinement vu par un électron et un trou dans le puits en présence du champ électrique longitudinal.

$$V_w^e(z) = \begin{cases} V_e & |z| > L/2 \\ 0 & |z| \leq L/2. \end{cases} \quad (\text{A.53})$$

Le potentiel est indépendant de x et y . On cherche une fonction propre de la forme suivante :

$$F(r) = f(x, y) \chi_e(z) \quad (\text{A.54})$$

on obtient :

$$F(r) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i(k_x x + k_y y)) \chi_e(z) \quad (\text{A.55})$$

qui est solution de l'équation (A.52), si $\chi_e(z)$ est solution de l'équation suivante :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_w^e(z) + eFz \right\} \chi_e(z) = E_e \chi_e(z). \quad (\text{A.56})$$

A.3. Etat d'une particule dans un puits quantique en présence du champ électrique

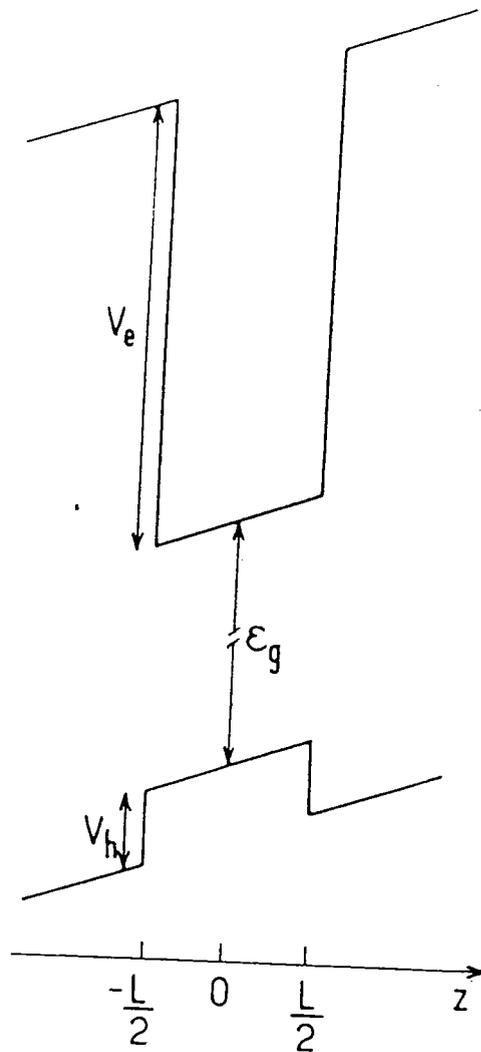


FIG. A.7: Le puits quantique $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ en présence d'un champ électrique longitudinal vu par un électron et un trou.

En toute rigueur, en présence d'un champ électrique longitudinal, le puits quantique avec des barrières de potentiel finies n'admet plus d'états liés, cependant ces états peuvent exister si l'intensité du champ électrique n'est pas trop fort. La durée de vie de ces états peut être assez longue, si la condition suivante est respectée (Bastard et al. [10]).

$$eFL\kappa_e^{-1} \ll V_e - E_{e0} \quad (\text{A.57})$$

avec :

$$\kappa_e = \sqrt{\frac{2m_e^*L^2}{\hbar^2} (V_e - E_{e0})} \quad (\text{A.58})$$

où E_{e0} représente l'énergie de l'état fondamental de l'électron à champ nul. L'équation (A.56) admet des solutions exactes. La fonction propre $\chi_e(z)$ de l'état fondamental d'un électron dans ce puits s'écrit comme combinaison linéaire de deux fonctions d'Airy, A_i et B_i dans chacune des trois régions [78, 79]. Toutefois ces solutions sont assez compliquées pour déterminer l'énergie de l'électron à l'état fondamental. Donc il est préférable de traiter le problème par une méthode approchée. Nous résolvons cette équation par la méthode variationnelle développé par Bastard et al. [10] et Brum et al. [14], où les fonctions propres sont exprimées à partir des fonctions propres d'un puits quantique à champ nul.

$$\chi_e(z) = \begin{cases} A_e \exp(-\beta_e z) \exp(-q_e |z|) & |z| > L/2 \\ B_e \exp(-\beta_e z) \cos(k_e z) & |z| \leq L/2 \end{cases} \quad (\text{A.59})$$

avec :

$$k_e = \sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2} E_{e0}}, \quad q_e = \sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2} (V_e - E_{e0})} \quad (\text{A.60})$$

où A_e et B_e sont des constantes déterminées par la continuité de la fonction $\chi_e(z)$ et de sa dérivée première à l'interface ($z = \pm L/2$). β_e est le paramètre variationnel. La fonction d'onde et l'énergie de l'état fondamental sont obtenues

A.3. Etat d'une particule dans un puits quantique en présence du champ électrique

par la minimisation de l'énergie moyenne par rapport au paramètre variationnel.

$$E_e = \frac{\langle \chi_e(z) | H | \chi_e(z) \rangle}{\langle \chi_e(z) | \chi_e(z) \rangle}. \quad (\text{A.61})$$

Nous rappelons l'expression de l'Hamiltonien H en unités atomiques :

$$H = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_w^e(z) + fz \quad (\text{A.62})$$

La norme de la fonction s'écrit :

$$\begin{aligned} S &= \langle \chi_e(z) | \chi_e(z) \rangle \\ &= \frac{C^2}{2} \left\{ \frac{1}{q_e - \beta_e} \exp(-(q_e - \beta_e)L) + \frac{1}{q_e + \beta_e} \exp(-(q_e + \beta_e)L) \right\} \\ &+ \frac{1}{2} \left\{ \frac{sh(\beta_e L)}{\beta_e} + \frac{\beta_e}{\beta_e^2 + k_e^2} \cos(k_e L) sh(\beta_e L) \right. \\ &+ \left. \frac{k_e}{\beta_e^2 + k_e^2} \sin(k_e L) ch(\beta_e L) \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.63})$$

avec :

$$C = \frac{A_e}{B_e} = \cos\left(\frac{k_e L}{2}\right) \exp\left(\frac{q_e L}{2}\right) \quad (\text{A.64})$$

L'élément de matrice de H_e est donné par :

$$\begin{aligned}
 H_e &= \langle \chi_e(z) | H | \chi_e(z) \rangle \\
 &= \left(E_{e0} - \beta_e^2/2 \right) \left\{ C^2/2 \left[1/(q_e - \beta_e) \exp(-(q_e - \beta_e)L) \right. \right. \\
 &+ \left. \left. 1/(q_e + \beta_e) \exp(-(q_e + \beta_e)L) \right] + \frac{1}{2} \left\{ \text{sh}(\beta_e L)/\beta_e + \beta_e/(\beta_e^2 + k_e^2) \right. \right. \\
 &\times \left. \left. \cos(k_e L) \text{sh}(\beta_e L) + k_e/(\beta_e^2 + k_e^2) \sin(k_e L) \text{ch}(\beta_e L) \right\} \right\} \\
 &+ (C^2/2) \beta_e k_e \left\{ 1/(q_e - \beta_e) \exp(-(q_e - \beta_e)L) - 1/(q_e + \beta_e) \right. \\
 &\times \left. \exp(-(q_e + \beta_e)L) \right\} - (1/2) \beta_e k_e \left\{ k_e/(k_e^2 + \beta_e^2) \cos(k_e L) \text{sh}(\beta_e L) \right. \\
 &- \left. \beta_e/(k_e^2 + \beta_e^2) \sin(k_e L) \text{ch}(\beta_e L) \right\} \\
 &+ f \left\{ (C^2/4) \left\{ -1/(q_e - \beta_e) \left[L + 1/(q_e - \beta_e) \right] \exp(-(q_e - \beta_e)L) \right. \right. \\
 &+ \left. \left. 1/(q_e + \beta_e) \left[L + 1/(q_e + \beta_e) \right] \exp(-(q_e + \beta_e)L) \right\} \right. \\
 &+ (1/4) \left\{ - (L/\beta_e) \text{ch}(\beta_e L) + (1/\beta_e^2) \text{sh}(\beta_e L) \right. \\
 &- \left. (k_e L)/(k_e^2 + \beta_e^2) \sin(k_e L) \text{sh}(\beta_e L) - (\beta_e L)/(k_e^2 + \beta_e^2) \right. \\
 &\times \left. \cos(k_e L) \text{ch}(\beta_e L) + (\beta_e^2 - k_e^2)/(\beta_e^2 + k_e^2)^2 \cos(k_e L) \text{sh}(\beta_e L) \right. \\
 &+ \left. \left. (2k_e \beta_e)/(\beta_e^2 + k_e^2)^2 \sin(k_e L) \text{ch}(\beta_e L) \right\} \right\}. \tag{A.65}
 \end{aligned}$$

Finalement on obtient l'énergie par :

$$E_e = \frac{H_e}{S}. \tag{A.66}$$

Une fonction d'onde semblable est obtenue pour le trou dans le puits quantique en présence du champ électrique longitudinal, il suffit pour cela de remplacer β_e par $-\beta_h$.

$$\chi_h(z) = \begin{cases} A_h \exp(\beta_h z) \exp(-q_h |z|) & |z| > L/2 \\ B_h \exp(\beta_h z) \cos(k_h z) & |z| \leq L/2 \end{cases} \tag{A.67}$$

A.3. Etat d'une particule dans un puits quantique en présence du champ électrique

avec :

$$k_h = \sqrt{\frac{2m_h^*}{\hbar^2} E_{h0}} \quad \text{et} \quad q_h = \sqrt{\frac{2m_h^*}{\hbar^2} (V_h - E_{h0})} \quad (\text{A.68})$$

où E_{h0} est l'énergie de l'état fondamental du trou dans le puits à champ nul, V_h est la hauteur de la barrière de confinement pour le trou.

La fonction d'onde et l'énergie de confinement du trou en champ électrique sont obtenues en minimisant l'énergie moyenne par rapport au paramètre variationnel.

$$E_h = \frac{\langle \chi_h(z) | H_h | \chi_h(z) \rangle}{\langle \chi_h(z) | \chi_h(z) \rangle} \quad (\text{A.69})$$

avec :

$$H_h = -\frac{\hbar^2}{2m_h^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_w^h(z) - eFz \quad (\text{A.70})$$

où :

$$V_w^h(z) = \begin{cases} V_h & |z| > L/2 \\ 0 & |z| \leq L/2. \end{cases} \quad (\text{A.71})$$

Nous présentons dans la figure (A.5) la variation de l'énergie de confinement de l'électron et du trou lourd ($m_h^* = 0.34$) en fonction du champ électrique pour une concentration ($x = 0.30$) et pour une largeur de puits de 2 unités atomiques. Nous remarquons que les deux énergies diminuent en fonction du champ électrique, c'est la conséquence de l'effet Stark de confinement Miller et al. [11].

Nous reportons dans la figure (A.6) la variation des paramètres variationnels β_e et β_h en fonction du champ électrique. Nous constatons que les deux paramètres augmentent avec le champ. C'est à cause du champ électrique qui repoussent l'électron et le trou de part et d'autre des cotés des barrières du puits quantique.

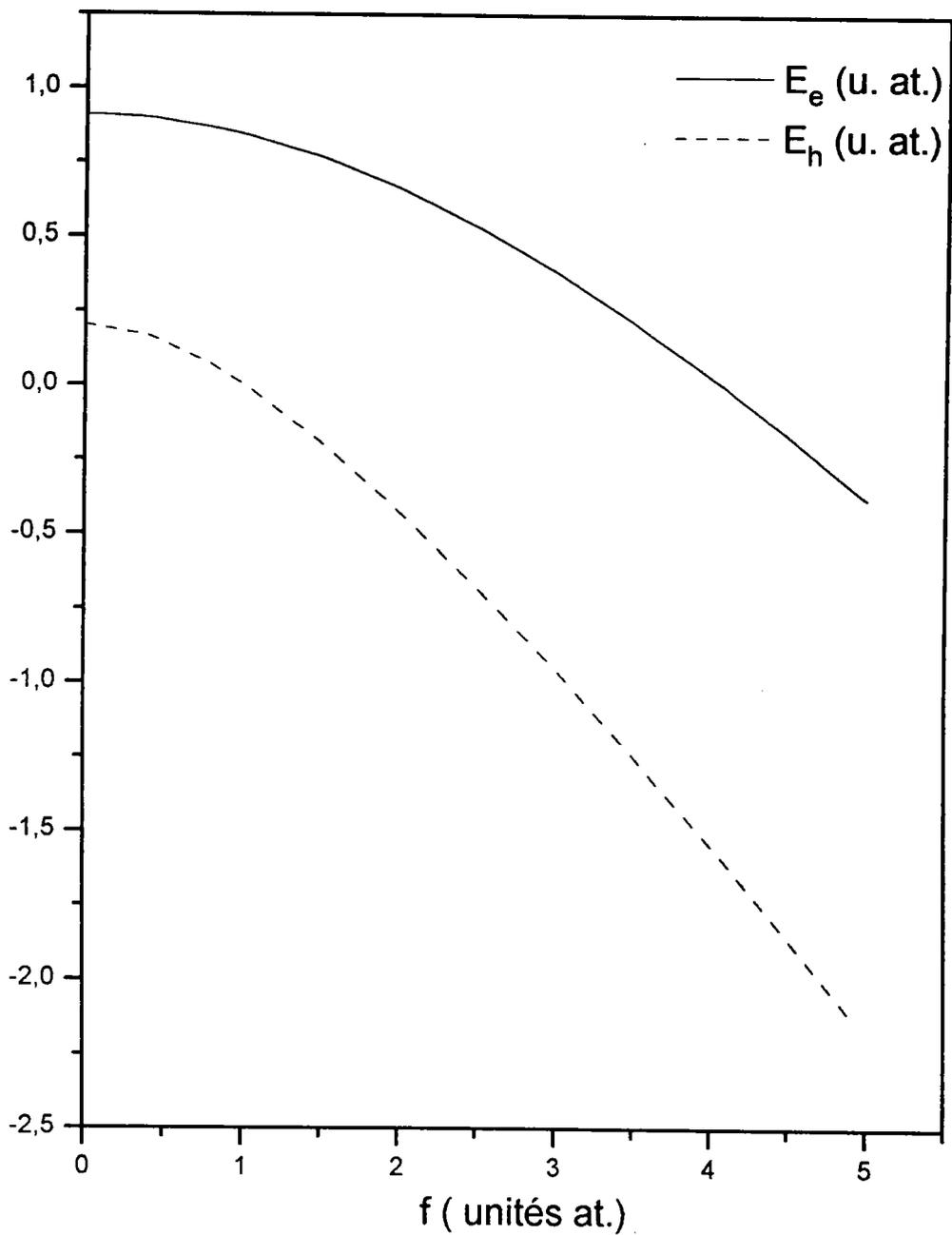


FIG. A.8: Variation de l'énergie de confinement de l'électron et du trou lourd en fonction du champ électrique pour une largeur $L = 2$ u. at. et pour une concentration $x=0.30$.

A.3. Etat d'une particule dans un puits quantique en présence du champ électrique

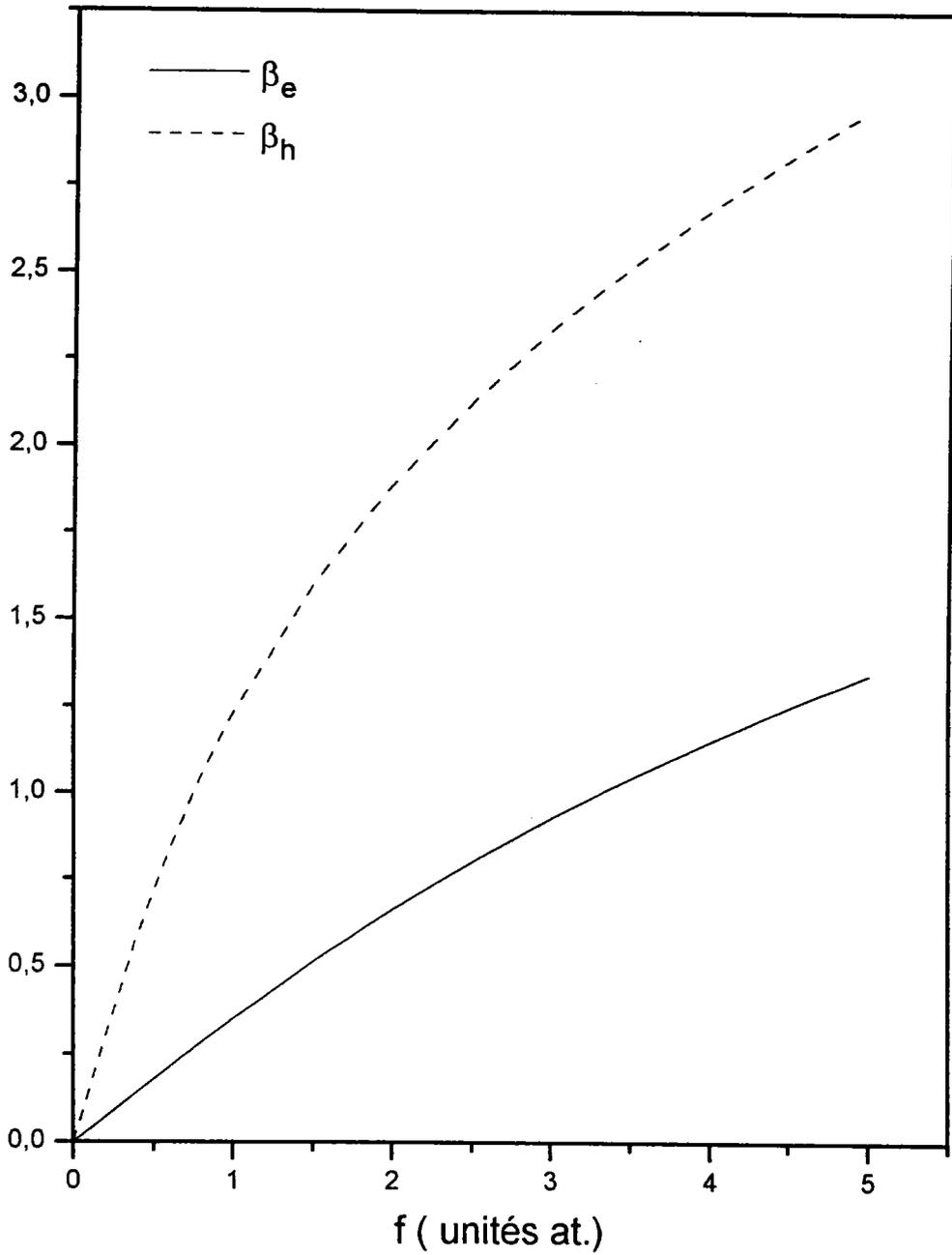


FIG. A.9: Variation des paramètres variationnels β_e et β_h en fonction du champ électrique pour une largeur $L = 2$ u. at. et pour une concentration $x=0.30$.

Annexe B

Calcul des éléments de matrice

Dans cette partie nous détaillons uniquement le calcul des éléments de matrice de H_{\perp} et de V_c , les autres ne posant aucun problème.

B.1 Evaluation de l'élément de matrice de H_{\perp}

L'opérateur Hamiltonien contient une partie agissant dans la direction perpendiculaire au plan, définie par :

$$H_{\perp} = T_{\perp}(z_1, z_2, z_h) + V_w(z_1, z_2, z_h) + (z_1 + z_2 - z_h)f \quad (\text{B.1})$$

soit :

$$\begin{aligned} H_{\perp} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} - \frac{\sigma}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + V_w(z_1) + V_w(z_2) + V_w(z_h) \\ &+ (z_1 + z_2 - z_h)f. \\ &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + V_w(z_1) + fz_1 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_2^2} + V_w(z_2) + fz_2 \\ &- \frac{\sigma}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + V_w(z_h) - fz_h \\ &= H_1 + H_2 + H_h \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Chaque élément de matrice peut être évalué en séparant la partie due au mouvement plan :

$$(H_{\perp})_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'} = (H_{\perp})_{pqr}^{p'q'r'} \times S_{lmn}^{l'm'n'} \quad (\text{B.3})$$

Evaluons l'élément de matrice $(H_{\perp})_{pqr}^{p'q'r'}$ qui se décompose en :

$$(H_{\perp})_{pqr}^{p'q'r'} = (H_1)_{pqr}^{p'q'r'} + (H_2)_{pqr}^{p'q'r'} + (H_h)_{pqr}^{p'q'r'} \quad (\text{B.4})$$

On a :

$$\begin{aligned} (H_1)_{pqr}^{p'q'r'} &= \langle a_{p'}(z_1)a_{q'}(z_2)b_{r'}(z_h)\chi_e(z_1)\chi_e(z_2)\chi_h(z_h) | H_1 | a_p(z_1)a_q(z_2)b_r(z_h) \\ &\times \chi_e(z_1)\chi_e(z_2)\chi_h(z_h) \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} H_1 | a_p(z_1)\chi_e(z_1) \rangle &= \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_1^2} + V_w(z_1) + fz_1 \right) | a_p(z_1)\chi_e(z_1) \rangle \\ &= -\frac{1}{2} | a_p(z_1)\chi_e''(z_1) \rangle - | a_p'(z_1)\chi_e'(z_1) \rangle - \frac{1}{2} | a_p''(z_1)\chi_e(z_1) \rangle \\ &+ V_w(z_1) | a_p(z_1)\chi_e(z_1) \rangle + fz_1 | a_p(z_1)\chi_e(z_1) \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Sachant que $\chi_e(z_1)$ est solution de l'équation de Schrödinger pour un électron dans un puits en présence du champ électrique, on a :

$$-\frac{1}{2}\chi_e''(z_1) + V_w(z_1)\chi_e(z_1) + fz_1\chi_e(z_1) = E_e\chi_e(z_1) \quad (\text{B.7})$$

L'égalité précédente devient :

$$H_1 | a_p(z_1)\chi_e(z_1) \rangle = E_e | a_p(z_1)\chi_e(z_1) \rangle - | a_p'(z_1)\chi_e'(z_1) \rangle - \frac{1}{2} | a_p''(z_1)\chi_e(z_1) \rangle \quad (\text{B.8})$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} H_1 | a_p(z_1)a_q(z_2)b_r(z_h)\chi_e(z_1)\chi_e(z_2)\chi_h(z_h) \rangle &= E_e | a_p(z_1)a_q(z_2)b_r(z_h)\chi_e(z_1)\chi_e(z_2)\chi_h(z_h) \rangle \\ &- | a_p'(z_1)a_q(z_2)b_r(z_h)\chi_e'(z_1)\chi_e(z_2)\chi_h(z_h) \rangle \\ &- \frac{1}{2} | a_p''(z_1)a_q(z_2)b_r(z_h)\chi_e(z_1)\chi_e(z_2)\chi_h(z_h) \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

on obtient alors :

$$\begin{aligned} (H_1)_{pqr}^{p'q'r'} &= \left\{ E_e \langle a_{p'}(z_1)\chi_e(z_1) | a_p(z_1)\chi_e(z_1) \rangle - \langle a_{p'}(z_1)\chi_e(z_1) | a_p'(z_1)\chi_e'(z_1) \rangle \right. \\ &- \left. \frac{1}{2} \langle a_{p'}(z_1)\chi_e(z_1) | a_p''(z_1)\chi_e(z_1) \rangle \right\} \\ &\times \langle a_{q'}(z_2)b_{r'}(z_h)\chi_e(z_2)\chi_h(z_h) | a_q(z_2)b_r(z_h)\chi_e(z_2)\chi_h(z_h) \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

Le calcul est similaire pour $(H_2)_{pqr}^{p'q'r'}$ et $(H_h)_{pqr}^{p'q'r'}$, on obtient finalement :

$$\begin{aligned}
 (H_{\perp})_{pqr}^{p'q'r'} &= \left\{ E_e \langle a_{p'}(z_1) \chi_e(z_1) \mid a_p(z_1) \chi_e(z_1) \rangle - \langle a_{p'}(z_1) \chi_e(z_1) \mid a'_p(z_1) \chi'_e(z_1) \rangle \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2} \langle a_{p'}(z_1) \chi_e(z_1) \mid a_p''(z_1) \chi_e(z_1) \rangle \right\} \\
 &\quad \times \langle a_{q'}(z_2) b_{r'}(z_h) \chi_e(z_2) \chi_h(z_h) \mid a_q(z_2) b_r(z_h) \chi_e(z_2) \chi_h(z_h) \rangle \\
 &\quad + \left\{ E_e \langle a_{q'}(z_2) \chi_e(z_2) \mid a_p(z_2) \chi_e(z_2) \rangle - \langle a_{q'}(z_2) \chi_e(z_2) \mid a'_q(z_2) \chi'_e(z_2) \rangle \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2} \langle a_{q'}(z_2) \chi_e(z_2) \mid a_q''(z_2) \chi_e(z_2) \rangle \right\} \\
 &\quad \times \langle a_{p'}(z_1) b_{r'}(z_h) \chi_e(z_1) \chi_h(z_h) \mid a_p(z_1) b_r(z_h) \chi_e(z_1) \chi_h(z_h) \rangle \\
 &\quad + \left\{ E_h \langle b_{r'}(z_h) \chi_h(z_h) \mid b_r(z_h) \chi_h(z_h) \rangle - \sigma \langle b_{r'}(z_h) \chi_h(z_h) \mid b'_r(z_h) \chi'_h(z_h) \rangle \right. \\
 &\quad \left. - \frac{\sigma}{2} \langle b_{r'}(z_h) \chi_h(z_h) \mid b_r''(z_h) \chi_h(z_h) \rangle \right\} \\
 &\quad \times \langle a_{p'}(z_1) a_{q'}(z_2) \chi_e(z_1) \chi_e(z_2) \mid a_p(z_1) a_q(z_2) \chi_e(z_1) \chi_e(z_2) \rangle \quad (B.11)
 \end{aligned}$$

En posant :

$$\begin{aligned}
 W_e^0(p', p) &= \langle \chi_e(z_1) a_{p'}(z_1) \mid \chi_e(z_1) a_p(z_1) \rangle \\
 W_e^1(p', p) &= \langle \chi_e(z_1) a_{p'}(z_1) \mid \chi'_e(z_1) a'_p(z_1) \rangle \\
 W_e^2(p', p) &= \langle \chi_e(z_1) a_{p'}(z_1) \mid \chi_e(z_1) a''_p(z_1) \rangle \quad (B.12)
 \end{aligned}$$

nous obtenons alors :

$$\begin{aligned}
 (H_{\perp})_{pqr}^{p'q'r'} &= \left\{ E_e W_e^0(p', p) - W_e^1(p', p) - \frac{1}{2} W_e^2(p', p) \right\} W_e^0(q', q) W_h^0(r', r) \\
 &\quad + \left\{ E_e W_e^0(q', q) - W_e^1(q', q) - \frac{1}{2} W_e^2(q', q) \right\} W_e^0(p', p) W_h^0(r', r) \\
 &\quad + \left\{ E_h W_h^0(r', r) - \sigma W_h^1(r', r) - \frac{\sigma}{2} W_h^2(r', r) \right\} W_e^0(p', p) W_e^0(q', q) \quad (B.13)
 \end{aligned}$$

En réalité la fonction d'essai contient deux termes correspondant à la permutation des électrons 1 et 2. Il faut donc évaluer $(H_{\perp})_{qpr}^{p'q'r'}$, obtenu en permutant p et q :

$$\begin{aligned}
 (H_{\perp})_{qpr}^{p'q'r'} &= \langle a_{p'}(z_1)a_{q'}(z_2)b_{r'}(z_h)\chi_e(z_1)\chi_e(z_2)\chi_h(z_h) | (H_{\perp}) | a_q(z_1)a_p(z_2) \\
 &\times b_r(z_h)\chi_e(z_1)\chi_e(z_2)\chi_h(z_h) \rangle \quad (\text{B.14}) \\
 &= \left\{ E_e W_e^0(p', q) - W_e^1(p', q) - \frac{1}{2} W_e^2(p', q) \right\} W_e^0(q', p) W_h^0(r', r) \\
 &+ \left\{ E_e W_e^0(q', p) - W_e^1(q', p) - \frac{1}{2} W_e^2(q', p) \right\} W_e^0(p', q) W_h^0(r', r) \\
 &+ \left\{ E_h W_h^0(r', r) - \sigma W_h^1(r', r) - \frac{\sigma}{2} W_h^2(r', r) \right\} W_e^0(p', q) W_e^0(q', p)
 \end{aligned}$$

L'élément de matrice final $(H_{\perp})_{pqr}^{p'q'r'}$ (2.35) est alors donné par deux fois la somme de (B.13) et (B.14).

B.2 Approximation dans le calcul de l'énergie potentielle

Dans cette partie nous présentons en détail le calcul de l'énergie potentielle coulombienne intervenant dans le calcul variationnel de l'énergie du trion négatif dans un puits quantique.

B.2.1 Ecriture de V_c

Il s'agit de calculer l'opérateur énergie potentielle coulombienne (V_c) entre les deux électrons et le trou. Les distances électron-électron et électron-trou sont décrites par les coordonnées latérales dans le plan et les coordonnées axiales dans la direction perpendiculaire. On a :

$$V_c = -\frac{1}{\sqrt{\rho_{1h}^2 + (z_1 - z_h)^2}} - \frac{1}{\sqrt{\rho_{2h}^2 + (z_2 - z_h)^2}} + \frac{1}{\sqrt{\rho_{12}^2 + (z_1 - z_2)^2}} \quad (\text{B.15})$$

on cherche à calculer les différents éléments de matrice $(V_c)_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'}$.

B.2.2 Calcul de V_{1h}

Soit V_{1h} est l'opérateur énergie potentielle coulombienne entre l'électron 1 et le trou h.

$$V_{1h} = -\frac{1}{\sqrt{\rho_{1h}^2 + (z_1 - z_h)^2}} \quad (\text{B.16})$$

on cherche à évaluer l'élément de matrice de V_{1h} :

$$\langle l'm'n'p'q'r' | V_{1h} | lmn pqr \rangle = \langle p'q'r' | (V_{1h})_{lmn}^{l'm'n'} | pqr \rangle \quad (\text{B.17})$$

avec:

$$| pqr \rangle = \chi_e(z_1)\chi_e(z_2)\chi_h(z_h) \left[a_p(z_1)a_q(z_2) + a_q(z_1)a_p(z_2) \right] b_r(z_h) \quad (\text{B.18})$$

en utilisant l'approximation suivante:

$$(V_{1h})_{lmn}^{l'm'n'} \simeq V'_{1h} = \frac{a_{1h}}{b_{1h} + |z_1 - z_h|} \quad (\text{B.19})$$

où les constantes a_{1h} et b_{1h} sont choisies de telle sorte que les valeurs correctes de V'_{1h} soient retrouvées dans les limites $|z_1 - z_h| \rightarrow 0$ et $|z_1 - z_h| \rightarrow \infty$.

Si $|z_1 - z_h|$ est grand:

$$\begin{aligned} \langle l'm'n' | V_{1h} | lmn \rangle &\simeq \langle l'm'n' | \frac{-1}{|z_1 - z_h|} | lmn \rangle \\ &\simeq \frac{a_{1h}}{|z_1 - z_h|} \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

ce qui détermine:

$$a_{1h} = -S_{lmn}^{l'm'n'} = -\langle l'm'n' | lmn \rangle \quad (\text{B.21})$$

avec $| lmn \rangle = \exp(-\kappa s/2) s^l u^m t^n$, d'autre part, pour les petites valeurs de $|z_1 - z_h|$,

$$\begin{aligned} \langle l'm'n' | V_{1h} | lmn \rangle &\simeq \langle l'm'n' | \frac{-1}{\rho_{1h}} | lmn \rangle \\ &\simeq \frac{a_{1h}}{b_{1h}} \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

ce qui donne :

$$b_{1h} = \frac{S_{lmn}^{l'm'n'}}{\langle l'm'n' | \frac{1}{\rho_{1h}} | lmn \rangle}. \quad (\text{B.23})$$

De la même façon nous obtenons les constantes pour les éléments V'_{2h} et V'_{12} .

$$\begin{aligned} a_{2h} &= -\langle l'm'n' | lmn \rangle; \quad b_{2h} = \frac{\langle l'm'n' | lmn \rangle}{\langle l'm'n' | \frac{1}{\rho_{2h}} | lmn \rangle} \\ a_{12} &= \langle l'm'n' | lmn \rangle; \quad b_{12} = \frac{\langle l'm'n' | lmn \rangle}{\langle l'm'n' | \frac{1}{\rho_{12}} | lmn \rangle}. \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

L'expression approchée de $(V_c)_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'}$ est donnée par :

$$(V_c)_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'} \simeq \left[(V'_{1h})_{pqr}^{p'q'r'} + (V'_{2h})_{pqr}^{p'q'r'} + (V'_{12})_{pqr}^{p'q'r'} \right] \quad (\text{B.25})$$

B.2.3 Evaluation de $(V'_{1h})_{pqr}^{p'q'r'}$

Pour évaluer cet élément de matrice, nous posons les notations suivantes :

$$\chi_1 = \chi_e(z_1), \chi_2 = \chi_e(z_2), \chi_h = \chi_h(z_h) \quad (\text{B.26})$$

On a :

$$\begin{aligned} (V'_{1h})_{pqr}^{p'q'r'} &= \langle \chi_1 \chi_2 \chi_h a_{p'}(1) a_{q'}(2) b_{r'}(h) | V'_{1h} | a_p(1) a_q(2) b_r(h) \chi_1 \chi_2 \chi_h \rangle \\ &+ \langle \chi_1 \chi_2 \chi_h a_{p'}(1) a_{q'}(2) b_{r'}(h) | V'_{1h} | a_q(1) a_p(2) b_r(h) \chi_1 \chi_2 \chi_h \rangle \\ &+ \langle \chi_1 \chi_2 \chi_h a_{q'}(1) a_{p'}(2) b_{r'}(h) | V'_{1h} | a_p(1) a_q(2) b_r(h) \chi_1 \chi_2 \chi_h \rangle \\ &+ \langle \chi_1 \chi_2 \chi_h a_{q'}(1) a_{p'}(2) b_{r'}(h) | V'_{1h} | a_q(1) a_p(2) b_r(h) \chi_1 \chi_2 \chi_h \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

Nous rappelons que :

$$\begin{aligned} a_p(1) &= z_1^p \exp(-\alpha_e z_1^2) \\ a_q(2) &= z_2^q \exp(-\alpha_e z_2^2) \\ b_r(h) &= z_h^r \exp(-\alpha_h z_h^2). \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

Ce qui donne pour $(V'_{1h})^{p'q'r'}$ l'expression suivante :

$$\begin{aligned} (V'_{1h})^{p'q'r'} &= 2\langle \chi_1 \chi_2 \chi_h a_{p'}(1) a_{q'}(2) b_{r'}(h) | V'_{1h} | a_p(1) a_q(2) b_r(h) \chi_1 \chi_2 \chi_h \rangle \\ &+ 2\langle \chi_1 \chi_2 \chi_h a_{p'}(1) a_{q'}(2) b_{r'}(h) | V'_{1h} | a_q(1) a_p(2) b_r(h) \chi_1 \chi_2 \chi_h \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

En utilisant les notations (2.43), pour simplifier l'écriture ci-dessus.

$$(V'_{1h})^{p'q'r'} = 2 \left\{ Z_{1h}(p', r', p, r) W_e^0(q', q) + Z_{1h}(p', r', q, r) W_e^0(q', p) \right\} \quad (\text{B.30})$$

avec :

$$Z_{1h}(p', r', p, r) = \langle \chi_1 \chi_h a_{p'}(1) b_{r'}(h) | V'_{1h} | a_p(1) b_r(h) \chi_1 \chi_h \rangle \quad (\text{B.31})$$

B.2.4 Calcul de a_{1h} et b_{1h}

Pour évaluer les intégrales intervenant dans les éléments de matrice (B.21) et (B.23), nous utilisons la fonction d'onde d'essai. On a :

$$\begin{aligned} a_{1h} &= -\langle l'm'n' | lmn \rangle \\ &= -\frac{\pi}{2} \int_0^\infty \exp(-\kappa s) s^{l'+l} ds \int_0^s \frac{u^{m'+m+1}}{\sqrt{s^2-u^2}} du \int_{-u}^{+u} \frac{(s^2-t^2) t^{n'+n}}{\sqrt{u^2-t^2}} dt \\ &= -\frac{\pi}{2} \int_0^\infty \exp(-\kappa s) s^{l'+l+2} ds \int_0^s \frac{u^{m'+m+1}}{\sqrt{s^2-u^2}} du \int_{-u}^{+u} \frac{t^{n'+n}}{\sqrt{u^2-t^2}} dt \\ &\quad + \frac{\pi}{2} \int_0^\infty \exp(-\kappa s) s^{l'+l} ds \int_0^s \frac{u^{m'+m+1}}{\sqrt{s^2-u^2}} du \int_{-u}^{+u} \frac{t^{n'+n+2}}{\sqrt{u^2-t^2}} dt. \end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

En utilisant l'équation (2.32), nous obtenons :

$$a_{1h} = -J_i^{l'}(2, 1, 0) + J_i^{l'}(0, 1, 2) \quad (\text{B.33})$$

Pour b_{1h} , on doit calculer l'élément de matrice suivant :

$$\langle l'm'n' | \frac{1}{\rho_{1h}} | lmn \rangle \quad (\text{B.34})$$

d'après (2.14) on a $\rho_{1h} = \frac{s+t}{2}$.

$$\begin{aligned}
 \langle l'm'n' | \frac{1}{\rho_{1h}} | lmn \rangle &= \frac{\pi}{2} \int_0^\infty \exp(-\kappa s) s^{l'+l} ds \int_0^s \frac{u^{m'+m+1}}{\sqrt{s^2-u^2}} du \\
 &\times \int_{-u}^{+u} \frac{(s^2-t^2) t^{n'+n}}{\sqrt{u^2-t^2}} \frac{2dt}{s+t} \\
 &= \pi \int_0^\infty \exp(-\kappa s) s^{l'+l+1} ds \int_0^s \frac{u^{m'+m+1}}{\sqrt{s^2-u^2}} du \int_{-u}^{+u} \frac{t^{n'+n}}{\sqrt{u^2-t^2}} dt \\
 &\quad - \pi \int_0^\infty \exp(-\kappa s) s^{l'+l} ds \int_0^s \frac{u^{m'+m+1}}{\sqrt{s^2-u^2}} du \int_{-u}^{+u} \frac{t^{n'+n+1}}{\sqrt{u^2-t^2}} dt \\
 &= 2J_i^{i'}(1, 1, 0) \tag{B.35}
 \end{aligned}$$

Finalement on obtient :

$$b_{1h} = \frac{J_i^{i'}(2, 1, 0) - J_i^{i'}(0, 1, 2)}{2J_i^{i'}(1, 1, 0)} \tag{B.36}$$

de la même manière, nous obtenons les éléments de matrices pour V'_{2h} et V'_{12} . L'expression finale obtenue pour $(V_c)_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'}$ est donnée par :

$$\begin{aligned}
 (V_c)_{lmnpqr}^{l'm'n'p'q'r'} &\simeq 2 S_{lmn}^{l'm'n'} \left\{ Z_{1h}(p', r', p, r) W_e^0(q', q) + Z_{1h}(p', r', q, r) W_e^0(q', p) \right. \\
 &\quad + Z_{2h}(q', r', q, r) W_e^0(p', p) + Z_{2h}(q', r', p, r) W_e^0(p', q) \\
 &\quad \left. + Z_{12}(p', q', p, q) W_h^0(r', r) + Z_{12}^1(p', q', q, p) W_h^0(r', r) \right\} \tag{B.37}
 \end{aligned}$$

Annexe C

Energie de liaison de l'exciton

L'exciton dans un puits quantique de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$, soumis à un champ électrique longitudinal, a été l'objet de nombreuses études expérimentales et théoriques. Parmi les études théoriques les plus récentes, citons le calcul variationnel de l'énergie de liaison, de l'intensité d'oscillateur et de la section efficace différentielle totale, dans un modèle de puits fini [80, 82].

C.1 Equation effective de l'exciton

Dans le cadre de l'approximation de la masse effective et dans un modèle à deux bandes simples non dégénérées, l'Hamiltonien de l'exciton dans un puits quantique $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ de potentiel fini en présence du champ électrique longitudinal s'écrit :

$$H = E_g - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \Delta_e - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \Delta_h + V_w^e + V_w^h - \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} + eF(z_e - z_h) \quad (C.1)$$

avec :

$$V_w^e = \begin{cases} V_e & \text{si } |z| > L/2 \\ 0 & \text{si } |z| \leq L/2 \end{cases}$$

et :

$$V_w^h = \begin{cases} V_h & \text{si } |z| > L/2 \\ 0 & \text{si } |z| \leq L/2 \end{cases} \quad (C.2)$$

où E_g correspond au gap entre les bandes de conduction et de valence du matériau constituant le puits, m_e^* et m_h^* sont les masses effectives respectives de l'électron et du trou supposées identiques dans le puits et dans les barrières, ϵ est la constante diélectrique, V_e et V_h sont les hauteurs des barrières de potentiel de confinement pour l'électron et le trou, \vec{F} est le champ électrique dirigé suivant l'axe \vec{z} et L représente la largeur du puits.

C.2 Séparation du mouvement du centre de masse et du mouvement relatif

L'Hamiltonien (C.1) peut s'écrire en fonction des vecteurs positions relatif $\vec{\rho}(x, y)$ et du centre de masse $\vec{R}_{||}(X, Y)$.

$$\begin{aligned}\vec{R}_{||} &= \frac{m_e^*}{m_e^* + m_h^*} \vec{\rho}_e + \frac{m_h^*}{m_e^* + m_h^*} \vec{\rho}_h \\ \vec{\rho} &= \vec{\rho}_e - \vec{\rho}_h\end{aligned}\quad (\text{C.3})$$

où $\vec{\rho}_e$ et $\vec{\rho}_h$ sont respectivement les projections dans le plan des vecteurs positions \vec{r}_e et \vec{r}_h de l'électron et du trou. L'Hamiltonien (C.1) s'écrit :

$$\begin{aligned}H &= E_g - \frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} \\ &\quad - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} + V_w^e + V_w^h + eF(z_e - z_h)\end{aligned}\quad (\text{C.4})$$

où μ et M représentent respectivement les masses réduite et totale et sont données par :

$$\begin{aligned}\frac{1}{\mu} &= \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \\ M &= m_e^* + m_h^*.\end{aligned}\quad (\text{C.5})$$

L'énergie E et la fonction d'onde enveloppe $\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$ sont obtenues par la résolution de l'équation de Schrödinger effective :

$$H\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = (\mathcal{E} - E_g) \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = E\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h).\quad (\text{C.6})$$

C.2. Séparation du mouvement du centre de masse et du mouvement relatif

Nous cherchons les solutions de l'équation de Schrödinger sous la forme suivante :

$$\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \Phi(\vec{R}_{\parallel}) \psi(\vec{r}) \quad (\text{C.7})$$

où $\Phi(\vec{R}_{\parallel})$ représente la fonction d'onde du mouvement de la projection du centre de masse et obéit à l'équation :

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{\vec{R}_{\parallel}}^2 \Phi(\vec{R}_{\parallel}) = E_{c.m} \Phi(\vec{R}_{\parallel}) \quad (\text{C.8})$$

avec :

$$E_{c.m} = \frac{\hbar^2 K_{\parallel}^2}{2M} \quad (\text{C.9})$$

où K_{\parallel} représente la composante parallèle du vecteur d'onde du centre de masse de l'exciton. $\psi(\vec{r})$ est la fonction d'onde du mouvement relatif, solution de l'équation suivante :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\vec{\rho}}^2 - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} + eF(z_e - z_h) + V_w^e + V_w^h - \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla_{z_e}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h^*} \nabla_{z_h}^2 \right\} \psi(\vec{r}) = E_X \psi(\vec{r}). \quad (\text{C.10})$$

En prenant comme unité de longueur $a^* = \epsilon \hbar^2 / m_e^* e^2$, comme unité d'énergie $2R^* = e^2 / \epsilon a^*$ et comme unité du champ électrique $F_0 = e / \epsilon a^{*2}$, l'équation (C.10) peut alors se réécrire en unités atomiques :

$$\left\{ -\frac{1}{2} (1 + \sigma) \nabla_{\vec{\rho}}^2 - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} + f(z_e - z_h) + V_w^e + V_w^h - \frac{1}{2} \nabla_{z_e}^2 - \frac{\sigma}{2} \nabla_{z_h}^2 \right\} \psi(\vec{r}) = E_X \psi(\vec{r}) \quad (\text{C.11})$$

où σ représente le rapport des masses effectives entre l'électron et le trou, E_X désigne l'énergie fondamentale de l'exciton. Du fait de la présence du potentiel

d'interaction coulombienne entre l'électron et le trou, l'équation (C.11) n'admet pas de solution analytique exacte. Seule une méthode approchée permet de résoudre cette équation, nous avons choisi comme pour le cas du trion négatif la méthode variationnelle de Ritz pour le calcul de l'énergie fondamentale.

C.3 Choix de la fonction d'essai

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

$$E_X = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (\text{C.12})$$

L'Hamiltonien effectif de l'exciton peut se décomposer sous la forme suivante :

$$H = H_{\parallel} + H_{\perp} + V_c \quad (\text{C.13})$$

où H_{\parallel} représente l'opérateur énergie cinétique dans le plan xy , et H_{\perp} représente à la fois l'opérateur énergie cinétique perpendiculaire au plan, l'énergie potentielle due au champ électrique et le potentiel de confinement. V_c est l'opérateur énergie potentielle. Nous choisissons une fonction d'onde d'essai de la forme suivante :

$$\psi = \sum_{p,q} C_{pq} | p, q \rangle, \quad (\text{C.14})$$

où :

$$| p, q \rangle = z_e^p z_h^q \chi_e(z_e) \chi_h(z_h) \exp(-\alpha_e z_e^2) \exp(-\alpha_h z_h^2) \rho \exp(-\alpha \rho) \quad (\text{C.15})$$

et :

$$p + q \leq 2. \quad (\text{C.16})$$

Le produit $\chi_e(z_e) \chi_h(z_h)$ représente l'état fondamental d'une paire électron-trou non corrélée dans un puits quantique en présence du champ électrique longitudinal. Les coefficients C_{pq} et les paramètres variationnels α_e , α_h et α sont déterminés par la minimisation de l'énergie moyenne. Nous rappelons que

l'Hamiltonien du système est invariant par rotation autour de l'axe \vec{z} , celà traduit que la fonction d'onde de l'état fondamental est indépendante de ϕ , où ϕ est la coordonnée angulaire. Dans le système des coordonnées (ρ, ϕ, z) l'opérateur énergie cinétique s'écrit :

$$H_{\parallel} = -\frac{1}{2}(1 + \sigma) \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} \quad (\text{C.17})$$

et H_{\perp} est donnée par :

$$H_{\perp} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} - \frac{\sigma}{2} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + V_w^e + V_w^h + f(z_e - z_h). \quad (\text{C.18})$$

L'opérateur énergie potentielle s'écrit :

$$V_c = -\frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad (\text{C.19})$$

C.4 Calcul des éléments de matrice

La valeur moyenne de l'Hamiltonien H dans l'état ψ est donnée par :

$$E_X = \frac{\sum_{p'q'} \sum_{p,q} C_{p'q'} C_{pq} H_{pq}^{p'q'}}{\sum_{p'q'} \sum_{p,q} C_{p'q'} C_{pq} S_{pq}^{p'q'}} \quad (\text{C.20})$$

avec :

$$H_{pq}^{p'q'} = (H_{\parallel})_{pq}^{p'q'} + (H_{\perp})_{pq}^{p'q'} + (V_c)_{pq}^{p'q'}. \quad (\text{C.21})$$

Les éléments de matrice $(H_{\parallel})_{pq}^{p'q'}$ sont donnés par :

$$(H_{\parallel})_{pq}^{p'q'} = \frac{\pi}{8\alpha^2} (1 + \sigma) W_e^0(p', p) W_h^0(q', q). \quad (\text{C.22})$$

où les intégrales W_α^0 sont déjà définies (B.12). Les éléments de matrice $(H_{\perp})_{pq}^{p'q'}$ s'écrivent :

$$\begin{aligned} (H_{\perp})_{pq}^{p'q'} = & \frac{\pi}{2\alpha^2} \left\{ (E_e + E_h) W_e^0(p', p) W_h^0(q', q) - W_e^1(p', p) W_h^0(q', q) \right. \\ & - \frac{1}{2} W_e^2(p', p) W_h^0(q', q) - \sigma W_h^1(q', q) W_e^0(p', p) \\ & \left. - \frac{\sigma}{2} W_h^2(q', q) W_e^0(p', p) \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.23})$$

où E_e et E_h désignent respectivement les énergies de confinement de l'électron et du trou dans un même puits quantique en présence du champ électrique longitudinal mais en l'absence d'interaction coulombienne. Les éléments de matrice $(V_c)_{pq}^{p'q'}$ sont exprimés par :

$$\begin{aligned} (V_c)_{pq}^{p'q'} = & -\frac{\pi}{\alpha^2} \langle \chi_e(z_e) \chi_h(z_h) a_{p'}(z_e) b_{q'}(z_h) | \\ & \frac{1}{b_{eh} + |z_e - z_h|} | \chi_e(z_e) \chi_h(z_h) a_p(z_e) b_q(z_h) \rangle. \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

En utilisant l'approximation détaillée à l'annexe B. Les éléments de matrice de $S_{pq}^{p'q'}$ s'écrivent :

$$S_{pq}^{p'q'} = \frac{\pi}{2\alpha^2} W_e^0(p', p) W_h^0(q', q) \quad (\text{C.25})$$

C.5 Résultats du calcul variationnel

Nous présentons dans les figures suivantes l'énergie de corrélation de l'exciton dans un puits quantique de type $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ en présence du champ électrique longitudinal, pour une concentration $x = 0.30$, et pour le cas du trou lourd ($\sigma = 0.196$). L'énergie de corrélation est donnée par :

$$E_X^c = E_X - E_e - E_h \quad (C.26)$$

Dans la figure (C.1) nous avons la variation de l'énergie de corrélation en fonction de la largeur du puits, pour quatre valeurs du champ électrique. Nous remarquons que la courbe présente un minimum qui varie légèrement avec le champ, et pour des valeurs de la largeur du puits supérieures au rayon de Bohr effectif, l'énergie de corrélation augmente avec le champ électrique, c'est à cause de la séparation des deux particules des cotés opposés du puits quantique.

Dans la figure (C.2) nous avons la variation de l'énergie de corrélation en fonction du champ électrique, pour trois valeurs de la largeur du puits. Nous constatons que pour la largeur de 1.2 unités atomiques l'énergie de corrélation croît plus rapidement que pour les deux autres valeurs.

Nous présentons dans la figure (C.3) la variation du paramètre variationnel α en fonction du champ électrique pour trois valeurs de la largeur. Nous constatons que le paramètre α décroît en fonction du champ électrique, et important pour des faibles valeurs de la largeur, en accord avec le fait que l'énergie de corrélation est importante pour des puits étroits. Ce qui traduit une diminution de la distance électron trou également dans le plan.

Dans les figures (C.4) et (C.5), nous comparons les énergies de corrélation du trion et de l'exciton en fonction de la largeur pour une valeur du champ électrique de 0.1 unités atomiques, et en fonction du champ électrique pour une valeur de la largeur de puits de 1.2 unités atomiques. Nous remarquons dans les deux figures, que les énergies de corrélation du trion sont inférieures à celle de l'exciton, c'est à cause de l'énergie de liaison du deuxième électron, ce qui est en accord avec les conclusions du chapitre 3.

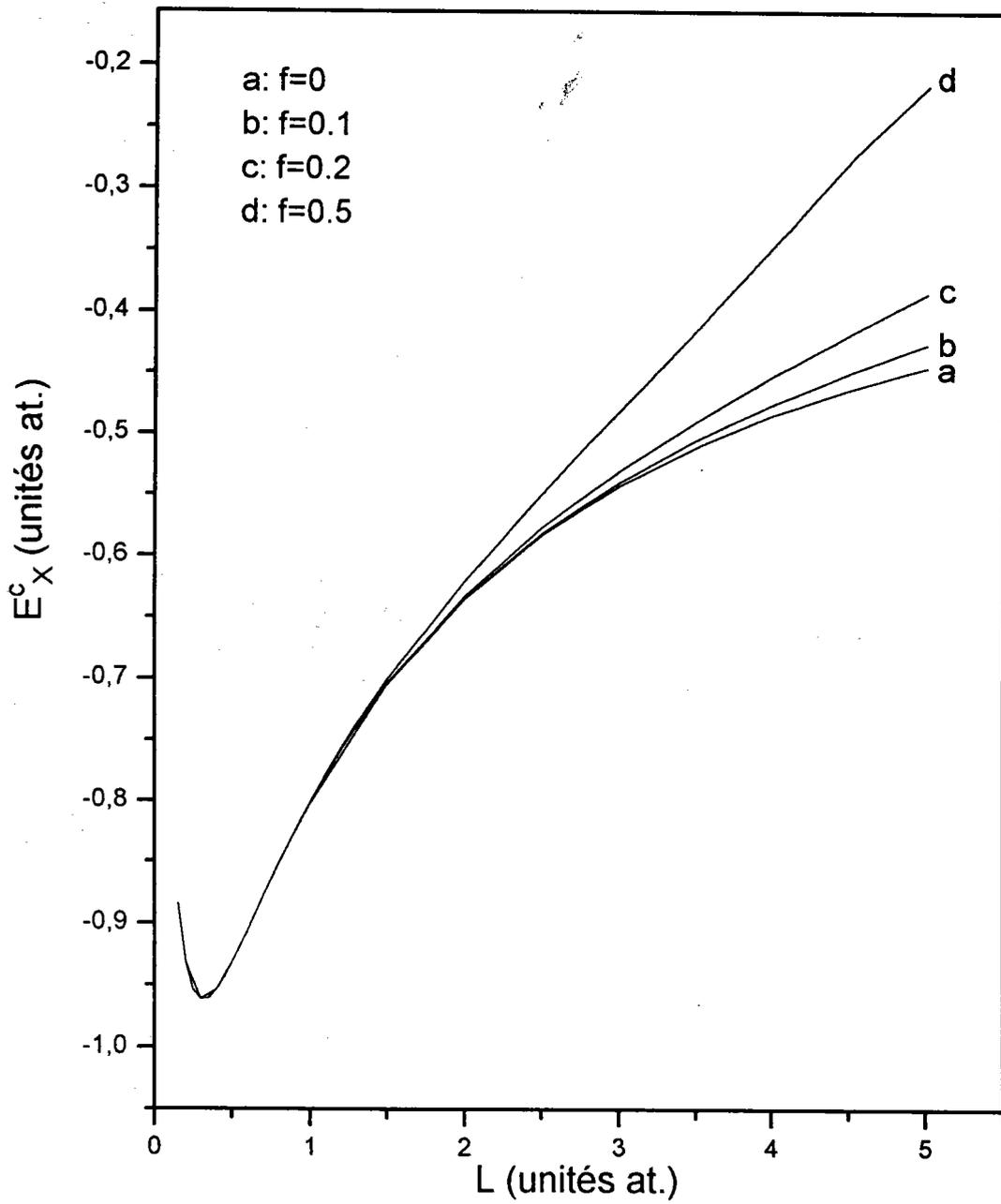


FIG. C.1: Variation de l'énergie de corrélation en fonction de la largeur pour quatre valeurs du champ, pour le trou lourd $\sigma = 0.196$ et pour une concentration $x=0.30$

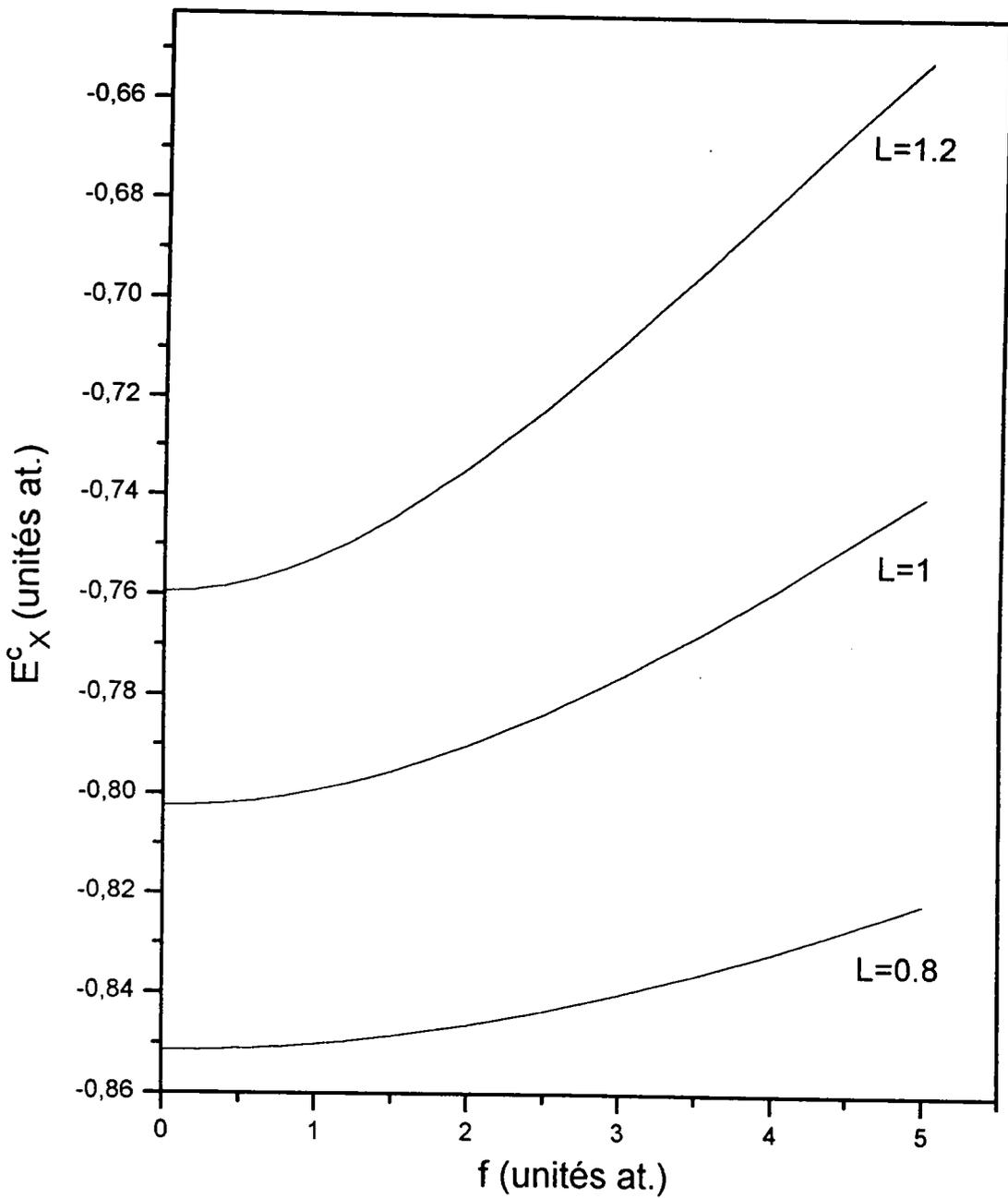


FIG. C.2: Variation de l'énergie de corrélation en fonction du champ électrique pour trois valeurs de la largeur, pour le trou lourd $\sigma = 0.196$ et pour une concentration $x=0.30$.

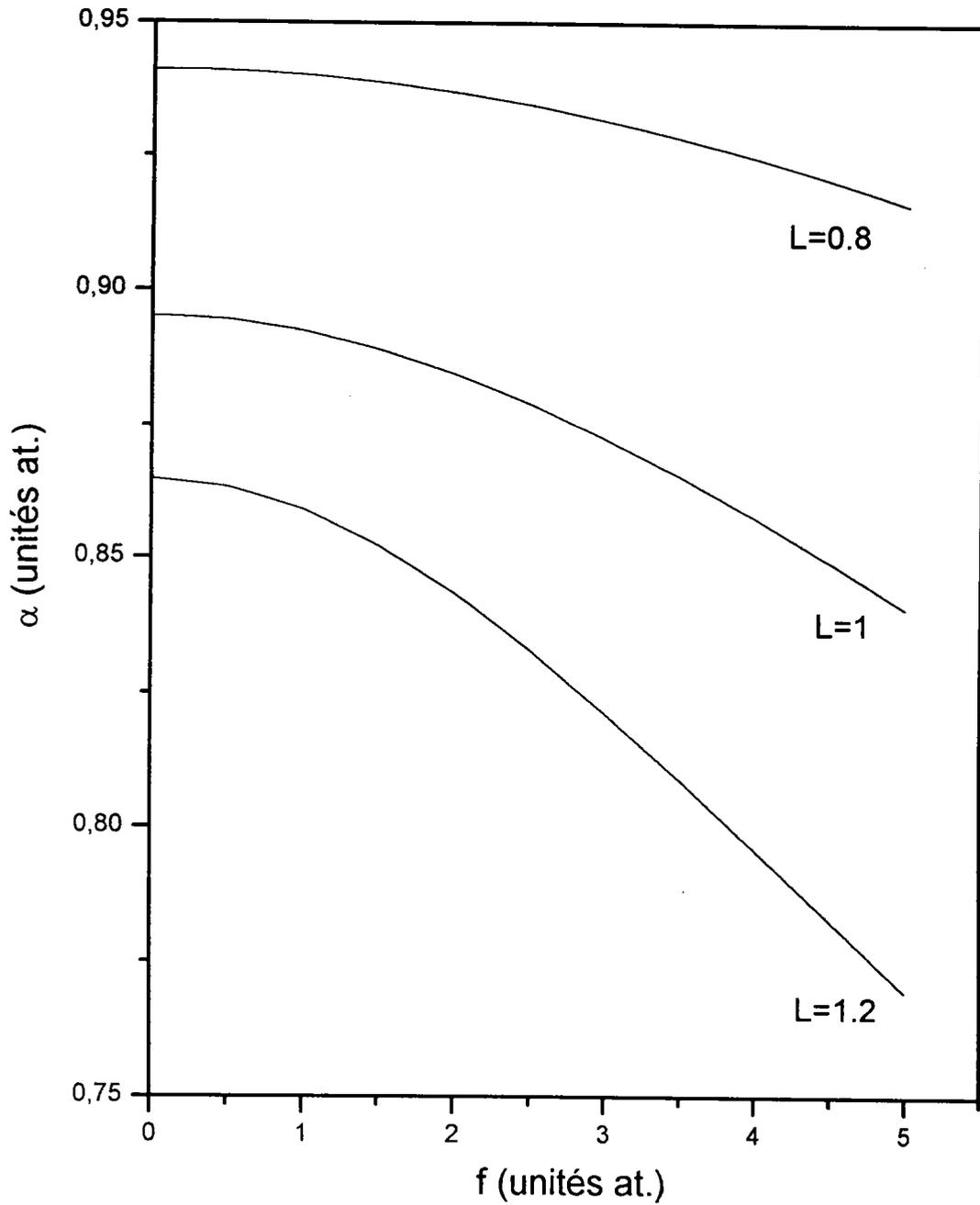


FIG. C.3: Variation du paramètre variationnel α en fonction du champ électrique pour trois valeurs de la largeur, pour le trou lourd $\sigma = 0.196$ et pour une concentration $x=0.30$.

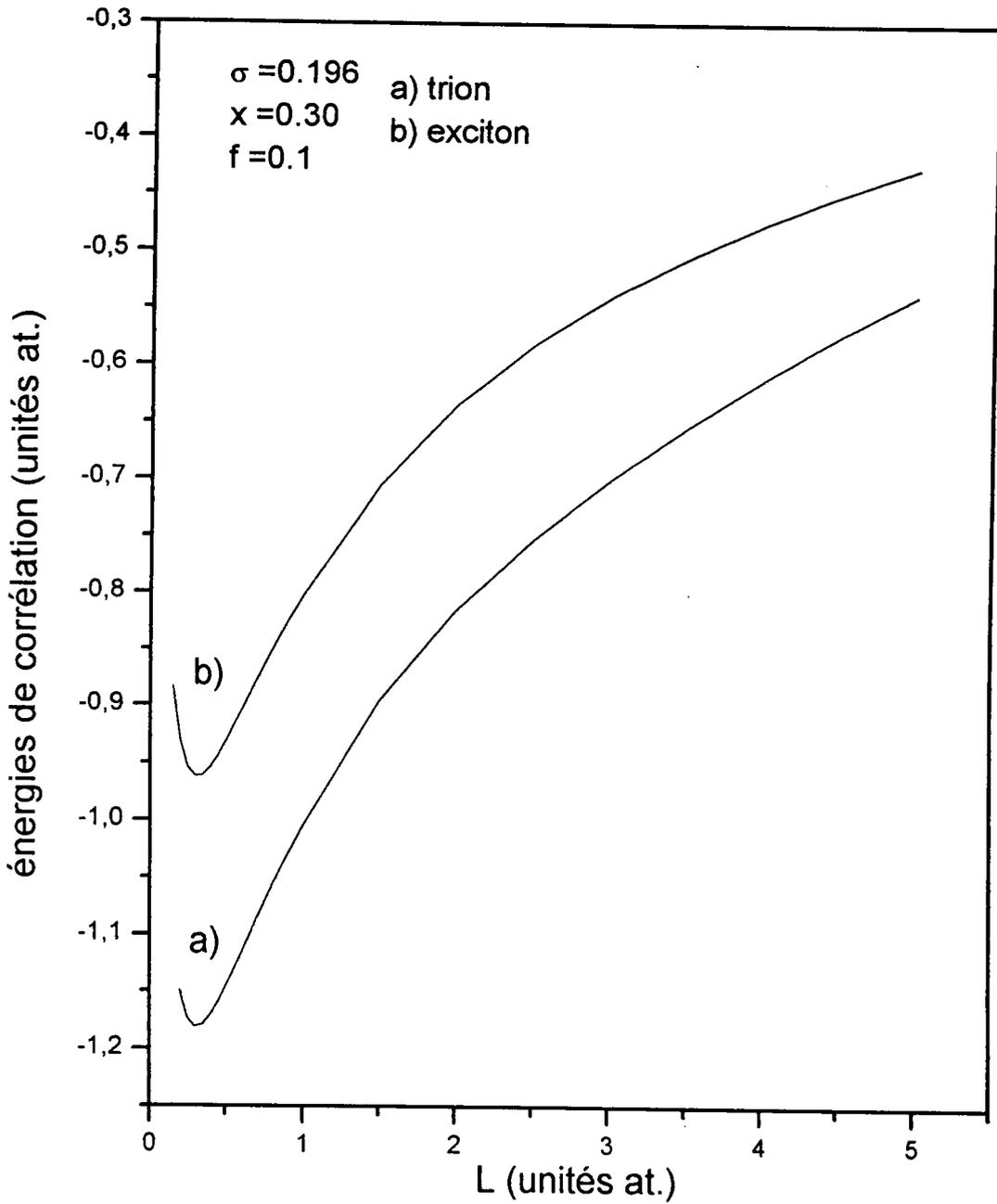


FIG. C.4: Variation de l'énergie de corrélation du trion (a) de l'exciton (b) en fonction de la largeur, pour $f = 0.1$ unité atomique, pour le trou lourd et pour une concentration $x=0.30$.

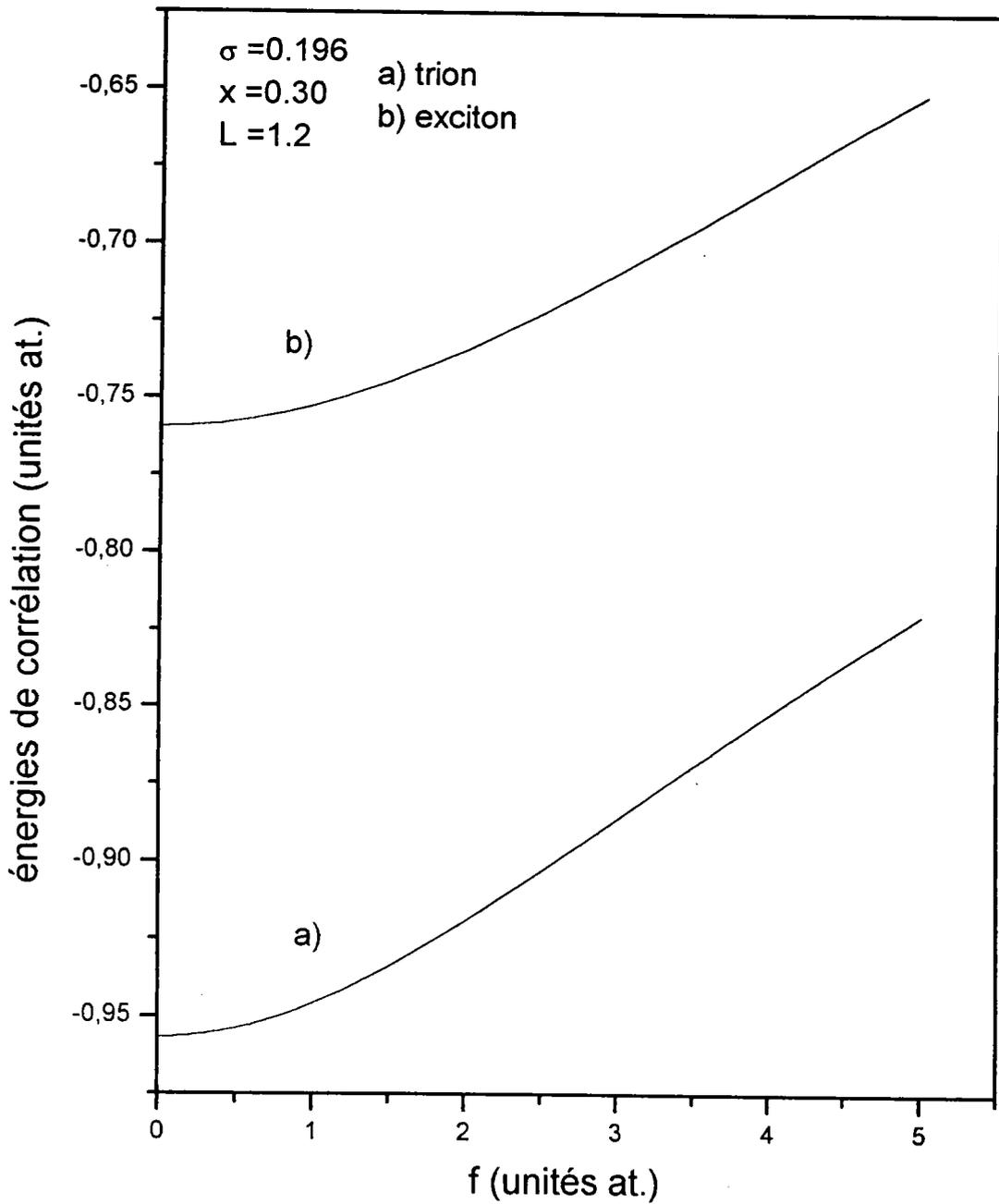


FIG. C.5: Variation de l'énergie de corrélation du trion (a) de l'exciton (b) en fonction du champ électrique, pour $L = 1.2$ unité atomique, pour le trou lourd et pour une concentration $x=0.30$.

Bibliographie

- [1] L. Esaki et R. Tsu, IBM J. Res. Develop. 14, 61 (1970).
- [2] L. Esaki et L.L. Chang, Phys. Rev. Lett. 33, 495 (1974).
- [3] R. Dingle, W. Wiegmann et C.H. Henry, Phys. Rev. Lett. 33, 827 (1974).
- [4] E.E. Mendez, G. Bastard, L.L. Chang, L. Esaki, H. Morkov et R. Fischer, Phys. Rev. B26, 7101 (1982).
- [5] R.C. Miller, D.A. Kleinman, W.T. Tsang et A.C. Gossard, Phys. Rev. B24, 1134 (1981).
- [6] R.C. Miller et A.C. Gossard, Appl. Phys. Lett. 43, 954 (1983).
- [7] T.H. Wood, C.A. Burrus, D.A.B. Miller, A.C. Gossard et W. Wiegmann, Appl. Phys. Lett. 44, 16 (1984).
- [8] W. Franz, Z. Naturforsch. 13 a, 484 (1958).
- [9] J.D. Dow et D. Redfield, Phys. Rev. B1, 3358 (1958).
- [10] G. Bastard, E.E. Mendez, L.L. Chang et L. Esaki, Phys. Rev. B28, 3241 (1983).
- [11] D.A.B. Miller, D.S. Chemla, T.C. Damen, A.C. Gossard, W. Wiegmann, T.H. Wood et C.A. Burrus, Phys. Rev. Lett. 53, 2173 (1984).
- [12] D.A.B. Miller, D.S. Chemla, T.C. Damen, A.C. Gossard, W. Wiegmann, T.H. Wood et C.A. Burrus, Phys. Rev. B32, 1023 (1985).

Bibliographie

- [13] D.S. Chemla, *J. Lumin.* 30, 502 (1985).
- [14] J.A. Brum et G. Bastard, *Phys. Rev.* B31, 3893 (1985).
- [15] D.S. Chuu et Y.T. Shih, *Phys. Rev.* B44, 8054 (1991).
- [16] G.D. Sanders et Y.C. Chang, *Phys. Rev.* B35, 1300 (1987).
- [17] C.C. Phillips, R. Eccleston et S.R. Andrews, *Phys. Rev.* B40, 9760 (1989).
- [18] C. Hsiang Lin, J.M. Meese et Y.C. Chang, *J. Appl. Phys.* 75, 2618 (1994).
- [19] C.P. Chang et Y.T. Lu, *Solide State Commun.* 99, 949 (1994).
- [20] M. Matsuura et T. Kamizato, *Phys. Rev.* B33, 8385 (1986).
- [21] Z. Ikonic, V. Milanovic et D. Tjapkin, *Solid State Phys.* 20, 1147 (1987).
- [22] P.W. Yu, D.C. Reynolds, G.D. Sanders, K.K. Bajaj, C.E. Stuz et K.R. Evans, *Phys. Rev.* B43, 4344 (1991).
- [23] S. Shim et E. Lee, *Appl. Phys. Lett.* 63, 2387 (1993).
- [24] A.V. Kavokin et A.I. Nesvizhskii, *Phys. Rev.* B49, 17055 (1994).
- [25] T.H. Wood, C.A. Burrus, A.H. Gnauck, J.M. Wiesenfeld, D.A.B. Miller, D.S. Chemla et T.C. Damen, *Appl. Phys. Lett.* 47, 190 (1985).
- [26] J.S. Weiner, D.A.B. Miller, D.S. Chemla, T.C. Damen, C.A. Burrus, T.H. Wood, A.C. Gossard et W. Wiegmann, *Appl. Phys. Lett.* 47, 1148 (1986).
- [27] D.A.B. Miller, J.E. Henry, A.C. Gossard et J.H. English, *Appl. Phys. Lett.* 49, 821 (1986).
- [28] D.A.B. Miller, J.E. Henry, A.C. Gossard et J.H. English, *Appl. Phys. Lett.* 49, 821 (1986).
- [29] M.A. Lampert, *Phys. Rev. Lett.* 4, 450 (1958).

-
- [30] G.H. Wannier, Phys. Rev. 52, 191 (1937)
- [31] J.R. Haynes, Phys. Rev. Lett. 4, 361 (1960).
- [32] D.G. Thomas et J.J. Hopfield, Phys. Rev. 128, 2135 (1962).
- [33] D.C. Reynolds, C.W. Litton et T.C. Collins, Phys. Rev. 156, 881 (1965).
- [34] P.J. Dean et D.C. Herbert, dans Excitons, Vol. 14 de topics in current physics, édité par K. Cho (Springer-Verlag, Berlin, 1979).
- [35] J.R. Haynes, Phys. Rev. Lett. 4, 866 (1966).
- [36] C.B. Benoit à la Guillaume, J. Debever et F. Salvan, Phys. Rev. 177, 567 (1969).
- [37] S. Nikitine, Optical Properties of Solids, Nudelman et Mitra, Edition Plenum press, New York (1969).
- [38] J.B. Grun, S. Nikitine, A. Bivas et R. Levy, J. Lumin. 1,2, 241 (1970).
- [39] R.C. Miller, D.A. Kleinman, A.C. Gossard et O. Munteanu, Phys. Rev. B25, 6545 (1982).
- [40] G. Munchy et B. Stébé, Phys. Stat. Soli. (b) 64, 213 (1974).
- [41] Z.A. Insepov et G.E. Norman, Sov. Phys. JETP. 42, 674 (1975).
- [42] B. Stébé et A. Ainane, Superlattices and Microstructures. 5, 545 (1989).
- [43] A. Thilagam, Phys. Rev. B55, 7804 (1997).
- [44] G.A. Thomas et T.M. Rice, Solide State Commun. 23, 359 (1977).
- [45] B. Stébé, Thèse d'Etat, Metz (1977).
- [46] K. Kheng, R.T. Cox, Y. Merle d'Aubigné, F. Bassani, K. Saminadayar et S. Tatarenko, Phys. Rev. Lett. 71, 1752 (1993).

- [47] K. Kheng, R.T. Cox, K. Saminadayar et S. Tatarenko, *J. Phys IV.* 5, 95 (1993).
- [48] H. Buhman, L. Mansouri, J. Wang, P.H. Beton, N. Mori, L. Eaves, M. Henini et M. Potemski, *Phys. Rev.* B51, 7969 (1995).
- [49] A.J. Shields, M. Pepper, M.Y. Simmons et D.A. Ritchie, *Phys. Rev.* B52, 7841 (1995).
- [50] A.J. Shields, J.L. Osborne, D.M. Whittaker, M.Y. Simmons, M. Pepper et D.A. Ritchie, *Phys. Rev.* B35 (1997).
- [51] A.J. Shields, J.L. Osborne, M.Y. Simmons, M. Pepper et D.A. Ritchie, *Phys. Rev.* B52, R5523 (1995).
- [52] G. Finkelstein, H. Shtrikman et I.B. Joseph, *Phys. Rev.* B53, R1709 (1996).
- [53] M. Katih, J. Diouri et E. Feddi, *Phys. Stat. Soli. (b)* 175, 349 (1993).
- [54] A. El-Hassani, Thèse de l'université de Metz, (1997).
- [55] A.J. Shields, F.M. Bolton, M.Y. Simmons, M. Pepper et D.A. Ritchie, *Phys. Rev.* B55, R1970 (1997).
- [56] A. Wojs et P. Hawrylak, *Phys. Rev.* B51, 10880 (1995).
- [57] E.A. Hylleraas, *Z. Physik.* 54, 347 (1929).
- [58] B. Stébé, G. Munchy, D. Fristot, L. Stauffer, 22nd Int. Conf. Phys. Semicond. Vol2 (Edited by D.J. Lockwood), B. Stébé, G. Munchy, L. Stauffer, F. Dujardin et J. Murat, *Phys. Rev.* B56, 12454 (1997).
- [59] F. Dujardin, B. Stébé et G. Munchy, *Phys. Stat. Sol. (b)* 141, 559 (1987).
- [60] H.J. Lee, L.Y. Juravel, J.C. Wolley et A.C. Springthore, *Phys. Rev.* B21, 659 (1980).

-
- [61] R.L. Greene, K.K. Bajaj, *Solide State Commun.* 45, 825 (1983).
- [62] F. Dujardin, M. Azaitouni, B. Stébé, *Solide State Commun.* 102, 579 (1997).
- [63] H. Haken, *Quantum Field Theory of Solids*, North Holland (1976).
- [64] C. Weisbuch et B. Vinter, *Quantum Semiconductor Structures, Fundamentals et Applications*, Academic press, (1991).
- [65] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied To Semiconductor Heterostructures*, Les Editions de Physique (1990).
- [66] A. Ainane, Thèse de l'université de Metz, (1989).
- [67] I.S. Gradshteyn et I.M. Ryzik, *Table of Integrals, Series and Results*, Academic Press (1990).
- [68] F. Bassani et C.P. Parravicini, *Electronic States and Optical transitions in Solids*, Pergamon, New York (1975).
- [69] J.M. Luttinger et W. Kohn, *Phys. Rev.* 97, 869 (1955).
- [70] W.W. Chow, S.W. Koch, M. Sargent (3), *Semiconductor-Laser Physics*, (Springer-Verlag, Berlin 1994).
- [71] P. Debernardi et P. Fasano, *IEEE J. Quantum Electron*, Vol 29. No 11, 2741 (1993).
- [72] S.L. Chuang, *Phys. Rev* **B43**, 9649, (1991).
- [73] C. Y. Chao, S.L. Chuang, *Phys. Rev.* B46, 4110, (1992).
- [74] M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii, S. Yamazaki, *Phys. Rev.* B48, 8102, (1993).
- [75] G.L. Bir et G.E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (Wiley, New York, 1974).

Bibliographie

- [76] L.C. Andreani, A. Pasquarello, F. Bassani, *Phys. Rev.* B36, 5887, (1987).
- [77] Landolt-Börnstein, New Series, Group III, Vol. 17a (Springer, Berlin, 1982);
Groups III-V, Vol. 22a (Springer, Berlin, 1986).
- [78] E.A. Austin et M. Jaros, *Phys. Rev.* B31, 5569 (1985).
- [79] S. Panda, K. Panda, S. Fung et C.D. Beling, *Phys. Stat. Sol. (b)* 194, 547
(1996).
- [80] Y.P. Feng et H.N. Spector, *Phys. Rev.* B48, 1963 (1993).
- [81] Y.P. Feng et H.N. Spector, *Phys. Stat. Sol. (b)* 190, 211 (1995).
- [82] T.S. Koh, Y.P. Feng et H.N. Spector, *J. Appl. Phys.*, 81, 2704 (1997).

Résumé

Le présent travail a été consacré à l'étude des trions excitoniques (X^-) résultant de la liaison d'un exciton (paire électron-trou liée) avec un électron, dans les semi-conducteurs à puits quantique de type I, $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$, en présence d'un champ électrique longitudinal. Dans le cadre de l'approximation de la masse effective et dans un modèle à deux bandes paraboliques simples non dégénérées, nous avons déterminé par une approche variationnelle l'énergie de corrélation du trion en fonction de la largeur du puits et de l'intensité du champ électrique, pour deux valeurs du rapport des masses effectives électron/trou. Il s'avère que pour les puits étroits, le champ électrique a peu d'influence sur l'énergie de corrélation des trions et que l'effet du champ est plus prononcé pour les puits larges. Ensuite, nous avons étudié la stabilité du trion négatif X^- par rapport au mécanisme de dissociation en un exciton et un électron; nous avons constaté que l'énergie de liaison diminue en valeur absolue quand le champ augmente, ce qui traduit une diminution de la stabilité, et aussi que l'énergie de liaison augmente quand la largeur du puits diminue. De plus, nous avons étudié l'absorption linéaire d'un photon entre les états d'électrons et du trion négatif dans un puits quantique, en présence du champ électrique longitudinal. Nous avons calculé le coefficient d'absorption et étudié la variation de l'intensité d'oscillateur du trion négatif en fonction de l'écart de fréquence par rapport au bord d'absorption, pour diverses valeurs de la largeur du puits et du champ électrique; nous avons constaté que l'intensité d'oscillateur diminue lorsque le champ électrique augmente, c'est la conséquence de l'effet Stark de confinement quantique.