

Université de Montréal

Interaction de Fröhlich dans les structures de semiconducteurs à  
dimension réduite

par  
Gwendoline Bruneau  
Département de physique  
Faculté des arts et des sciences

Thèse présentée à la Faculté des études supérieures  
en vue de l'obtention du grade de  
Philosophiæ Doctor (Ph.D.)  
en physique

Mai, 2000

© Gwendoline Bruneau, 2000



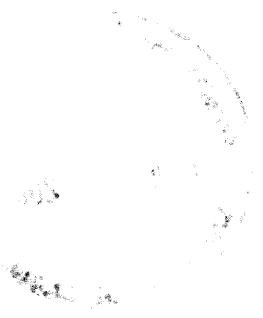
QC

3

154

2001

1,008



Université de Montréal  
Faculté des études supérieures

Cette thèse intitulée:

Interaction de Fröhlich dans les structures de semiconducteurs à  
dimension réduite

présentée par:

Gwendoline Bruneau

a été évaluée par un jury composé des personnes suivantes:

Laurent Lewis,	président-rapporteur
Yves Lépine,	directeur de recherche
Richard Leonelli,	membre du jury
René Coté,	examineur externe

Thèse acceptée le: .....

## RÉSUMÉ

Dans les cristaux ioniques et les semi-conducteurs polaires, un électron supplémentaire déforme le réseau avoisinant et se couple au champ de polarisation induit par ces déformations, c'est à dire avec les modes de phonons optiques du réseau. La quasi-particule ainsi formée est appelée **polaron**. L'interaction électron-phonons modifie les propriétés physiques (transport, diffusion électronique inélastique) des matériaux cristallins, et les propriétés optiques, linéaires et non-linéaires, des semi-conducteurs, selon la force du couplage.

Nous nous intéressons dans cette étude à l'interaction électron-phonons polaire de Fröhlich dans les structures de semi-conducteurs à dimensionalité réduite. Du fait des progrès technologiques importants dans la fabrication des structures confinées artificiellement, il est devenu possible de produire des puits, des fils et des points quantiques. Ces nouveaux systèmes font l'objet actuellement d'un grand effort de recherche, tant au niveau de la fabrication que de leur caractérisation, en vue d'applications en opto-électronique notamment.

Il est intéressant de s'attarder à l'étude théorique du spectre d'excitation de tels systèmes en fonction des paramètres ajustables (force des potentiels de confinement). Notre objectif premier est l'analyse de l'effet d'un confinement anisotrope sur l'énergie propre de l'état fondamental et du premier état excité du polaron, quand il existe : dans la limite de confinement selon une direction, nous parlons de l'effet de la largeur du puits, du confinement dans deux et trois directions de l'effet du rayon du fil et du point quantiques respectivement. Il convient d'étudier de façon adéquate les effets du potentiel de confinement, du couplage électron-phonons, du potentiel coulombien dans le cas du polaron lié, et du champ magnétique dans le cas du magnétopolaron.

Nous appliquons la méthode de Fock de Matz et Burkey, utilisée précédemment pour étudier les propriétés du polaron et du magnétopolaron de volume pour tout couplage polaire, à l'étude de l'effet de l'anisotropie du confinement sur l'état fondamental et le premier état excité du polaron. Cette approche utilise des hamiltoniens modèles et les spectres complets correspondants pour simuler de façon variationnelle la dynamique du polaron, dans toute la gamme de couplage électron-phonons.

Le spectre d'énergie du polaron dans un potentiel de confinement harmonique anisotrope est simple. Nous obtenons les expressions variationnelles des énergies de l'état



fondamental et du premier état excité de façon analytique et mettons en évidence le fait que le confinement accentue le couplage polaire d'autant plus qu'il est anisotrope. Les états excités sont étudiés par analogie avec l'état fondamental. Leur existence dépend de la force des couplages polaronique et coulombien, du confinement et/ou du champ magnétique. Suivant les cas, nous obtenons des états excités d'oscillateur harmonique (c'est-à-dire du potentiel de confinement) ou des états excités du polaron. Les états excités du polaron sont de type masse effective ou de type localisé. Dans le cadre des hypothèses de Fröhlich, nos expressions variationnelles analytiques de l'énergie de l'état fondamental et de l'état excité d'un polaron de Fröhlich confiné dans un puits de potentiel parabolique anisotrope sont valides dans toute la gamme de couplage et pour tout degré de confinement quantique. Les différentes limites asymptotiques reproduisent les expressions obtenues antérieurement dans les limites de couplage faible et fort, pour différents confinements. Notre approche fournit une description de ces résultats ainsi que des cas de couplage intermédiaire, et permet d'étudier l'effet de l'anisotropie du confinement. Dans le cas limite du puits, le confinement dans la direction  $z$  a un effet de confinement dans le plan  $(x, y)$ . Dans la limite du fil, le confinement effectif en  $z$  est accru par la force du potentiel en  $(x, y)$ . Les effets polaroniques sont renforcés quand le rayon du point décroît, aussi bien en  $2D$  qu'en  $3D$ . Il ressort que l'énergie propre du polaron est accrue par le confinement, davantage encore si celui-ci est anisotrope.

Avec un modèle de l'impureté fixée au centre, nous estimons la correction polaronique maximale à l'énergie de liaison du polaron lié. La correction polaronique à l'énergie de liaison est une fonction décroissante de la taille du point.

Le spectre d'énergie du magnétopolaron dans le même type de potentiel de confinement est beaucoup plus complexe. Nous obtenons une borne supérieure pour les énergies de l'état fondamental et du premier état excité pour tout couplage polaire et tout champ magnétique. De ce point de vue variationnel, nous retrouvons les théories antérieures comme cas limites. Dans l'état fondamental, sous champ magnétique élevé, un polaron  $3D$  prend un caractère  $1D$ , tandis que le caractère  $1D$  d'un polaron  $1D$  est accru. Par contre, un champ magnétique faible n'entraîne pas une modification de comportement dimensionnel.

## TABLE DES MATIÈRES

<b>RÉSUMÉ</b>	<b>iii</b>
CHAPITRE 1: Introduction . . . . .	1
CHAPITRE 2: Méthode . . . . .	10
<b>2.1 Introduction</b>	<b>10</b>
<b>2.2 Formalisme de Fock de Matz et Burkey</b>	<b>11</b>
<b>2.3 Notre approche</b>	<b>14</b>
2.3.1 Choix du spectre modèle . . . . .	15
2.3.2 Méthode . . . . .	16
<b>2.4 Conclusion</b>	<b>18</b>
CHAPITRE 3: Effet du confinement sur le polaron dans un point quantique	20
<b>3.1 Formalisme</b>	<b>20</b>
<b>3.2 Résultats asymptotiques</b>	<b>24</b>
3.2.1 Etat fondamental . . . . .	25
3.2.2 Premier état excité . . . . .	29
<b>3.3 Résultats numériques</b>	<b>32</b>
<b>3.4 Conclusion</b>	<b>41</b>
CHAPITRE 4: Polaron lié dans un point quantique . . . . .	52

<b>4.1 Point parabolique, approximation des phonons de volume</b>	<b>54</b>
<b>4.2 Etat fondamental</b>	<b>56</b>
4.2.1 Etat fondamental : Limite isotrope . . . . .	57
4.2.2 Etat fondamental : Limite 1D ( $\Omega \gg K$ ) . . . . .	60
4.2.3 Etat fondamental : limite 2D ( $K \gg \Omega$ ) . . . . .	62
<b>4.3 Premier état excité</b>	<b>64</b>
4.3.1 Limite isotrope . . . . .	64
4.3.2 Limite 1D ( $\Omega \gg K$ ) . . . . .	67
4.3.3 Limite 2D ( $K \gg \Omega$ ) . . . . .	68
<b>4.4 Effet de la polarisation et du confinement sur l'énergie de liaison</b>	<b>70</b>
<b>4.5 Résultats numériques</b>	<b>73</b>
<b>4.6 Conclusion</b>	<b>76</b>
CHAPITRE 5: Magnétopolaron dans un point quantique . . . . .	91
<b>5.1 Généralités</b>	<b>91</b>
<b>5.2 Notre étude</b>	<b>92</b>
<b>5.3 Choix du spectre modèle.</b>	<b>93</b>
<b>5.4 Résultats asymptotiques</b>	<b>97</b>
5.4.1 Couplage faible - Champ fort . . . . .	97
5.4.2 Couplage fort - Champ faible . . . . .	98

5.4.3 Couplage faible - Champ faible . . . . .	100
<b>5.5 Résultats numériques</b>	<b>108</b>
<b>5.6 Couplage coulombien</b>	<b>110</b>
5.6.1 Introduction . . . . .	110
5.6.2 Notre étude . . . . .	110
5.6.3 Résultats asymptotiques . . . . .	111
5.6.4 Résultats numériques . . . . .	121
<b>5.7 Cas 2D</b>	<b>127</b>
5.7.1 Couplage faible - Champ fort . . . . .	130
5.7.2 Couplage faible - champ faible - confinement faible . . . . .	131
5.7.3 Couplage fort . . . . .	133
<b>5.8 Conclusion</b>	<b>134</b>
CONCLUSION . . . . .	135
REMERCIEMENTS . . . . .	139
<b>BIBLIOGRAPHIE . . . . .</b>	<b>141</b>

## FIGURES

1	Energie propre du polaron dans son état fondamental en fonction de $L_z$ pour $L_\rho = 2$ ( $\Omega = 0.5$ ) et $\alpha = 0.5, 1, 2$ . . . . .	34
2	Energie propre du polaron en fonction de $L_z$ pour $L_\rho = 1.4$ , dans son état fondamental ( $\Omega = 0.7$ ), et dans son premier état excité ( $\Omega = 1$ ), pour $\alpha = 0.5, 1, 2$ . . . . .	35
3	Energie propre du polaron dans son état fondamental en fonction de $L_\rho$ pour $L_z = 2$ ( $K = 0.35$ ) et $\alpha = 0.5, 1, 2$ . . . . .	36
4	Rapport $E_p/\alpha$ à l'état fondamental en fonction de $L_\rho$ pour $K = 0$ ( $L_z \rightarrow \infty$ ) et $\alpha = 0.5, 1, 2$ . . . . .	37
5	Energie propre du polaron en fonction de $L_\rho$ pour $L_z = 1.22$ , dans son état fondamental ( $K = 0.57$ ), et dans son premier état excité ( $K = 1.0$ ), pour $\alpha = 0.5, 1, 2$ . . . . .	38
6	RPE à l'état fondamental en fonction de $L_\rho$ pour $L_z = 2$ ( $K = 0.35$ ) et $\alpha = 0.5, 1, 2$ . . . . .	42
7	RPE à l'état fondamental en fonction de $\alpha$ . (a) : $L_z = 2$ et $L_\rho = 0.05, 0.5, 1$ ( $\Omega = 20, 2, 1$ ). (b) : $L_\rho = 2$ et $L_z = 1, 0.5, 0.05$ . . . . .	43
8	RPE à l'état fondamental en fonction de $L_z$ avec $L_\rho = 2$ ( $\Omega = 0.5$ ) et $\alpha = 0.5, 1, 2$ . . . . .	44
9	RPE à l'état fondamental en fonction de $L_\rho$ avec $\alpha = 1$ et $\alpha = 7$ . . . . .	45
10	RPE à l'état fondamental en fonction de $L_\rho$ pour $\alpha = 1$ et $\alpha = 7$ . . . . .	46
11	Etat fondamental. (a) : Energie propre. (b) : $L_\rho$ effective. (c) : $L_z$ effective, en fonction de la constante de couplage $\alpha$ , pour $L_z = 0.7 =$ constante ( $K = 1$ ), et $\Omega = 1, 5, 10$ ( $L_\rho = 1, 0.2, 0.1$ respectivement). . . . .	47
12	(a) : RPE dans l'état fondamental. (b) : RPE dans le premier état excité, en fonction de $L_\rho$ pour $L_z = 1.2$ et $\alpha = 0.5, 1, 2$ . . . . .	48
13	(a) : RPE dans l'état fondamental. (b) : RPE dans le premier état excité en fonction de $L_z$ pour $L_\rho = 1.4$ et $\alpha = 0.5, 1, 2$ . . . . .	49

- 14  $L_z$  et  $L_\rho$  effectives à l'état fondamental. (a) : limite du fil (1D). (b) : limite du puits (2D). . . . . 50
- 15 Premier état excité,  $\alpha = 0.1, 3, 5, 8$ . (a):  $L_\rho$  effective en fonction de  $L_z$  pour une longueur de confinement nominale dans le plan  $(x, y)$  de  $L_\rho = 1.76$ . (b):  $L_z$  effective en fonction de  $L_\rho$  pour une longueur de confinement nominale dans la direction  $z$  de  $L_z = 1.53$ . . . . . 51
- 16 Polaron lié à l'état fondamental en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 2.0$ ,  $R = 1, 4$  et  $\alpha = 0.5, 1, 2, 5$ . (a) : Energie propre. (b) : Energie de liaison. 78
- 17 Polaron lié dans son état fondamental en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 2.0$ ,  $R = 1, 4$  et  $\alpha = 0.5, 1, 2, 5$ . (a) : Energie propre. (b) : Energie de liaison . . . . . 79
- 18 Polaron lié dans son état fondamental pour  $R = 1, 4$  et  $\alpha = 0.5, 1, 2, 5$ . (a) :  $L_{\rho_{eff}}$  en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 2$  ( $\Omega = 0.5$ ). (b) :  $L_{z_{eff}}$  en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 2$  ( $K = 0.35$ ). . . . . 80
- 19 Polaron lié dans son premier état excité en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 1.41$ . (a) : Energie propre. (b) : Energie de liaison. . . . . 81
- 20 Polaron lié dans son premier état excité : longueur de confinement effective radiale  $L_{\rho_{eff}}$  en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 1.41$ ,  $R = 1, 4$  et  $\alpha = 0.5, 1, 2, 5$  . . . . . 82
- 21 Energie propre du polaron lié dans l'état fondamental dans la limite 2D (puits) :  $L_\rho = 2$  ( $\Omega = 0.5$ ), avec  $L_z = 1$  et  $L_z = 0.5$ . (a) : avec  $R = 1/2$  en fonction de  $\alpha$ . (b) : avec  $\alpha = 1/2$  en fonction de  $R$ . . . . . 83
- 22 Longueurs de confinement effectives dans l'état fondamental du polaron lié dans la limite 2D (puits) :  $L_\rho = 2$  ( $\Omega = 0.5$ ), avec  $L_z = 1$  et  $L_z = 0.5$ . (a) : pour  $R = 1/2$ , en fonction de  $\alpha$ . (b) : pour  $\alpha = 1/2$ , en fonction de  $R$ . . . . . 84
- 23 Energie propre du polaron lié dans la limite 1D (fil) :  $L_z = 2$  ( $K = 0.35$ ), avec  $L_\rho = 1$  et  $L_\rho = 0.5$ . (a) : pour  $R = 1/2$  en fonction de  $\alpha$ . (b) : pour  $\alpha = 1/2$  en fonction de  $R$ . . . . . 85
- 24 Longueurs de confinement effectives dans l'état fondamental du polaron lié dans la limite 1D (fil) :  $L_z = 2$  ( $K = 0.35$ ). (a) : pour  $R = 1/2$ , en fonction de  $\alpha$ . (b) : pour  $\alpha = 1/2$ , en fonction de  $R$ . . . . . 86

- 25 Energie propre du polaron lié à l'état fondamental dans CdS, CdSe, CdTe, GaAs, InSb. (a) : en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 2$ . (b) : en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 2$ . . . . . 87
- 26 Longueurs de confinement effectives dans l'état fondamental du polaron lié dans CdS, CdSe, CdTe, GaAs, InSb. (a) :  $L_{\rho_{eff}}$  en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 2$ . (b) :  $L_{z_{eff}}$  en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 2$ . . . . . 88
- 27 Energie propre du polaron lié dans le 1<sup>er</sup> état excité dans CdS, CdSe, CdTe, GaAs, InSb. (a) : en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 1.41$ . (b) : en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 1.22$ . . . . . 89
- 28 Longueurs de confinement effectives dans le 1<sup>er</sup> état excité du polaron lié dans CdS, CdSe, CdTe, GaAs, InSb. (a) :  $L_{\rho_{eff}}$  en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 1.41$ . (b) :  $L_{z_{eff}}$  en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 1.22$ . . . . . 90
- 29 Magnétopolaron dans son état fondamental en fonction de  $L_z$  pour  $\Omega = 0.5$  et  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , avec  $\Lambda = 0 (\rightarrow L_\rho = 2.0)$  et  $\Lambda = 1 (\rightarrow L_\rho = 1.68)$ . (a): Energie. (b): Energie propre. . . . . 102
- 30 Magnétopolaron dans son état fondamental en fonction de  $L_z$  pour  $\Omega = 0.5$  ( $L_\rho = 1.68$ ) et  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , avec  $\Lambda = 0$  et  $\Lambda = 1$ . (a):  $L_{z_{eff}}$ . (b):  $L_{\rho_{eff}}$ . . . . . 103
- 31 Magnétopolaron dans son état fondamental en fonction de  $L_\Omega$  pour  $L_z = 2$  ( $K = 0.35$ ) et  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , avec  $\Lambda = 0$  et  $\Lambda = 1$ . (a): Energie propre. (b):  $L_{\rho_{eff}}$ . . . . . 104
- 32 Magnétopolaron dans son état fondamental et l'état  $(0, -1, 0)$  fonction de  $L_\Omega$ , avec  $L_z = 0.01$  et  $\Lambda = 1$ , pour  $\alpha = 0.5, 1, 2$ . (a): Energie propre. (b):  $L_{\rho_{eff}}$ . . . . . 105
- 33 Magnétopolaron dans l'état fondamental et l'état  $(0, -1, 0)$  en fonction de  $\Lambda^2$  pour  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , avec  $L_z = 0.7$ ,  $\Omega = 1$ . (a): Energie. (b): Energie propre. . . . . 106
- 34 Magnétopolaron dans l'état fondamental et l'état  $(0, -1, 0)$  en fonction de  $\Lambda^2$  pour  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , avec  $L_z = 0.7$ ,  $\Omega = 1.0$ . (a):  $L_{z_{eff}}$ . (b):  $L_{\rho_{eff}}$ . . . . . 107
- 35 Energie propre du magnétopolaron libre ( $R = 0$ ) et lié ( $R = 1$ ) dans son état fondamental en fonction de  $L_z$  pour  $\Omega = 0.5$ ,  $\Lambda = 1$  ( $L_\rho = 1.68$ ) avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ . . . . . 118

- 36 Magnétopolaron libre ( $R = 0$ ) et lié ( $R = 1$ ) dans l'état fondamental, en fonction de  $L_z$ , pour  $\Omega = 0.5$  et  $\Lambda = 1$  ( $L_\rho = 1.68$ ), pour  $\alpha = 0.5, 1, 2$ . (a):  $L_{zeff}$ . (b):  $L_{\rho eff}$ . . . . . 119
- 37 Energie propre du magnétopolaron libre ( $R = 0$ ) et lié ( $R = 1$ ) dans son état fondamental en fonction de  $L_\Omega$  pour  $\Lambda = 1$ ,  $L_z = 2.0$ , avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ . . . . . 120
- 38 Magnétopolaron libre ( $R = 0$ ) et lié ( $R = 1$ ) dans l'état fondamental, en fonction de  $L_\Omega$  pour  $\Lambda = 1$ ,  $L_z = 2.0$ , avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ . (a):  $L_{zeff}$ . (b):  $L_{\rho eff}$ . . . . . 122
- 39 Magnétopolaron lié ( $R = 1$ ), en fonction de  $\Lambda^2$ , pour  $\Omega = 1.0$ ,  $L_z = 0.71$ , avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , dans les états  $(0, 0, 0)$  et  $(0, -1, 0)$ . (a): Energie. (b): Energie propre. . . . . 123
- 40 Magnétopolaron lié ( $R = 1$ ), en fonction de  $\Lambda^2$ , pour  $\Omega = 1.0$ ,  $L_z = 0.71$ , avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , dans les états  $(0, 0, 0)$  et  $(0, -1, 0)$ . (a):  $L_{zeff}$ . (b):  $L_{\rho eff}$ . . . . . 124
- 41 Magnétopolaron libre ( $R = 0$ ) et lié ( $R = 1$ ) dans l'état  $(0, -1, 0)$ : énergie propre en fonction de  $\Lambda^2$ , pour  $L_\Omega = 1.41$ ,  $L_z = 0.71$ , avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ . . . . . 125
- 42 Magnétopolaron libre ( $R = 0$ ) et lié ( $R = 1$ ) dans l'état  $(0, -1, 0)$ , en fonction de  $\Lambda^2$ , pour  $L_\Omega = 1.41$ ,  $L_z = 0.71$ , avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ . (a):  $L_{zeff}$ . (b):  $L_{\rho eff}$ . . . . . 126



# CHAPITRE 1

## Introduction

Un électron supplémentaire dans le bas de la bande de conduction d'un cristal ionique ou d'un semi-conducteur polaire interagit fortement avec les modes, ou phonons, optiques longitudinaux des vibrations du réseau. De fait, sur son passage, le champ coulombien de l'électron déplace les ions positifs et négatifs de leurs positions d'équilibre. La polarisation du réseau ainsi induite agit sur l'électron à son tour. L'entité formée par l'électron et cette perturbation, ou "nuage" de phonons, est appelé un polaron [1]. Quand elle s'étend sur une distance grande devant le paramètre du réseau, il s'agit d'un gros polaron, ou polaron de Fröhlich. La force de l'interaction entre l'électron et les phonons est décrite par un paramètre sans dimension, noté  $\alpha$ . Ce paramètre joue le rôle de la constante de couplage entre l'électron et les phonons. Cette force de couplage peut être élevée, comme dans les halogénures alcalins tels KCl, KBr, KI, RbCl ( $\alpha \approx 5$  à  $6$ ), ou intermédiaire dans les halogénures d'argent par exemple (AgCl :  $\alpha = 1.91$ , AgBr :  $\alpha = 1.60$ ), ou faible dans les composés semi-conducteurs II-VI et III-V (InSb :  $\alpha = 0.015$ ) [1]. L'interaction électron-phonons modifie les propriétés physiques (transport, diffusion électronique inélastique, etc ...) des matériaux cristallins, et les propriétés optiques, linéaires et non-linéaires, des semi-conducteurs, selon la force du couplage mesurée par  $\alpha$  [2].

### Polaron de Fröhlich

Fröhlich s'est appliqué à décrire le polaron afin de déterminer comment les propriétés électroniques sont modifiées du fait de l'interaction de l'électron avec le champ de polarisation induit. Il introduit plusieurs hypothèses permettant un traitement simplifié [2] :

- la structure discrète du cristal est ignorée car l'étendue du polaron, mesurée par son rayon, est grande devant le paramètre du réseau cristallin. Le cristal est considéré comme un milieu diélectrique continu isotrope;
- les états électroniques de la bande de conduction sont décrits dans l'approximation de la masse effective. L'hamiltonien de Fröhlich décrit des états caractérisés

par une faible impulsion électronique dans le milieu (électron lent);

- le champ de polarisation induit est supposé irrotationnel, ce qui supprime les effets magnétiques. Du fait des faibles vitesses impliquées, les effets relativistes ne sont évidemment pas en cause;
- le champ de polarisation est décrit au moyen des phonons optiques longitudinaux du réseau. Ces modes, dans lesquels les ions vibrent en opposition de phase, sont la source principale de la polarisation. La dispersion des modes optiques longitudinaux, faible au voisinage de  $\vec{k} = 0$  (aux grandes longueurs d'onde), est ignorée; l'énergie des phonons optiques longitudinaux notée  $\hbar\omega_{LO}$  est considérée indépendante de la longueur d'onde. De plus, les effets anharmoniques ne sont pas considérés. Ainsi deux phonons n'interagissent pas directement entre eux.

L'approximation de Fröhlich selon laquelle la taille du polaron est grande devant le paramètre du réseau est valide pour les électrons de conduction des cristaux faiblement polaires, tels les composés semi-conducteurs II-VI et III-V. Elle reste une assez bonne approximation dans la plupart des cristaux ioniques. Cependant, cette approximation du continuum est d'autant moins bonne que la force du couplage électron-phonons, mesurée par  $\alpha$ , croît car alors la déformation accompagnant l'électron se localise et le rayon du polaron diminue. Dans les états excités, plus étalés que l'état fondamental, cette approximation du continuum reste valide pour des forces de couplage plus élevées. Dans les semi-conducteurs, les valeurs de  $\alpha$  sont en général assez faibles et l'approximation du continuum est valide.

Dans un cristal, le potentiel d'une charge ponctuelle  $e$  est modifié pour prendre en compte l'écrantage du réseau en  $\frac{e}{\epsilon_0 r}$  et l'écrantage électronique en  $\frac{e}{\epsilon_\infty r}$ . Ainsi, le paramètre  $\alpha$  de force de l'interaction polaire électron-phonons introduit par Fröhlich dépend de la polarisabilité ionique en  $\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0}$ . La constante diélectrique haute fréquence  $\epsilon_\infty$  est connue précisément à partir de mesures de l'indice de réfraction. Elle est pratiquement indépendante de la température, contrairement à la constante diélectrique statique  $\epsilon_0$ . La fréquence  $\omega_{LO}$  des modes de phonons optiques longitudinaux (LO) du centre de la zone de Brillouin est obtenue à partir de la fréquence des modes optiques transversaux  $\omega_{TO}$  déterminée expérimentalement ( $\omega_{LO}^2 = \omega_{TO}^2(\epsilon_0/\epsilon_\infty)$ ). L'hamiltonien du système s'écrit, en négligeant l'énergie constante de point zéro des phonons en  $\sum_k \hbar\omega_{LO}/2$ , qui n'intervient pas dans la dynamique du polaron :

$$H_{Fröhlich} = H_e + H_{ph} + H_{int} \quad (1.1)$$

$H_e$  est l'énergie cinétique de l'électron libre de masse effective  $m$  dans le bas de la bande de conduction en l'absence d'interaction avec les vibrations du réseau.  $H_{ph}$  est l'énergie des phonons optiques longitudinaux de vecteurs d'onde  $\vec{k}$ , d'opérateurs

de création et d'annihilation  $a_k^\dagger$  et  $a_k$  respectivement en seconde quantification et de fréquence  $\omega_{LO}$ .  $H_{int}$  représente l'énergie d'interaction entre une charge  $-e$ , à la position  $\vec{r}$ , et le réseau, via la polarisation produite par le déplacement des ions. Si  $H_{int} = 0$ , l'électron ne perturbe pas le cristal. L'importance du terme d'interaction est caractérisée par un coefficient  $V_k$ , transformée de Fourier du potentiel d'interaction. De fait, le potentiel qui localise l'électron est de type coulombien à grande distance. Au voisinage de l'électron, ce potentiel est tronqué de façon à permettre au réseau de suivre le mouvement de l'électron à une distance déterminant le degré de localisation de l'électron : on parle du rayon du polaron, noté  $r_0$ . A cette distance minimum correspond un moment maximum du polaron par la relation d'incertitude d'Heisenberg. Ainsi, dans le cas du gros polaron,  $r_0$  est de l'ordre de quelques dizaines d'Ångströms et l'électron interagit principalement avec les phonons du réseau de grandes longueurs d'onde, situés au milieu de la zone de Brillouin autour de  $\vec{k} = \vec{0}$ . Dans cette région les modes optiques se caractérisent par une très faible dispersion. Avec des conditions aux limites périodiques sur un volume  $V$  :

$$V_k = -\frac{i}{k} \left( \frac{4\pi\alpha r_0^3}{V} \right)^{1/2}$$

$$H_{int} = \sum_k \left( V_k a_k e^{ik \cdot r} + V_k^* a_k^\dagger e^{-ik \cdot r} \right)$$

avec :

$$\alpha = \left( \frac{e^2}{2r_0 \hbar \omega_{LO}} \right) (\epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1})$$

$$r_0 = \left( \frac{\hbar}{2m\omega_{LO}} \right)^{1/2}$$

La constante adimensionnelle  $\alpha$  détermine directement l'importance du couplage électron-phonons. La nouvelle unité de longueur dans le système que nous utiliserons par la suite est le rayon du polaron  $r_0$ . L'unité d'énergie est l'énergie des phonons  $\hbar\omega_{LO}$ . Nous prenons :  $\hbar = 1, 2m = 1, \hbar\omega_{LO} = 1$ .

### Méthodes d'étude théorique du polaron de Fröhlich

A cause de la déformation qui "habille" l'électron, sa masse effective est augmentée et son énergie est plus basse. Lorsque l'interaction électron-phonons est faible, la fréquence des phonons est très grande devant celle de l'électron. De fait, la constante de couplage est inversement proportionnelle à la fréquence des phonons. Le champ de polarisation "suit" alors de façon adiabatique l'électron en mouvement dans la bande de conduction. Les théories perturbatives du second ordre

s'appliquent, entre l'état initial à un électron sans phonon et les états intermédiaires à un phonon. Ainsi, pour un électron lent en couplage faible, le développement en série de puissance de  $\alpha$  met en évidence un comportement de masse effective [2] :

$$E^{(2)} = -\alpha + \frac{p^2}{m^*} \quad (1.2)$$

Le premier terme est l'énergie propre du polaron (en unité d'énergie de  $\hbar\omega_{LO}$ ). Elle diminue l'énergie de l'électron. De plus, la masse du polaron, notée  $m^*$  est plus grande que la masse effective de l'électron  $m$  car le facteur  $(1 - \frac{\alpha}{6})^{-1} > 1$  :

$$\frac{m^*}{m} = \frac{1}{1 - \frac{\alpha}{6}} \quad (1.3)$$

En couplage faible ( $\alpha < 1$ ), ces variations d'énergie et de masse effective sont faibles. La région de couplage électron-phonons intermédiaire est traitée par la théorie variationnelle de Lee-Low-Pines. Des transformations unitaires tirent profit de l'invariance de la quantité de mouvement totale de l'hamiltonien de Fröhlich (voir chapitre suivant) [3]. Une première transformation positionne l'électron au centre des coordonnées. La seconde déplace les opérateurs de phonons [2]. Cette approche suppose l'absence d'interaction entre les divers phonons constituant le nuage autour de l'électron (théorie des phonons indépendants). Elle donne l'énergie et la masse effective suivantes :

$$\begin{aligned} E &= -\alpha + \frac{p^2}{m^*} \\ \frac{m^*}{m} &= 1 + \frac{\alpha}{6} \end{aligned}$$

Dans la limite de couplage faible ( $\alpha \ll 1$ ), cette méthode redonne la masse effective obtenue par la théorie des perturbations du second ordre.

Lorsque le couplage électron-phonons est suffisamment fort, le polaron peut développer une structure interne caractérisée par des niveaux d'énergie discrets. Certaines mesures expérimentales telles que des mesures d'absorption optique sont reliées à l'énergie de ces états. Un nombre grandissant de phonons prend part à l'interaction (le nombre de phonons est de l'ordre de  $\alpha/2$ ), et il n'est plus possible d'ignorer les corrélations entre phonons. De plus, la fréquence des phonons étant faible devant celle de l'électron, c'est maintenant l'électron qui "suit" de façon adiabatique les fluctuations de la polarisation. L'approximation adiabatique de Landau-Pekar repose sur l'approximation de Hartree selon laquelle l'électron subit l'influence du champ moyen des ions (au repos mais hors de leurs positions d'équilibre). Cette théorie est variationnelle et le meilleur résultat est obtenu à l'aide d'une fonction d'essai

gaussienne à un seul paramètre variationnel [2]. L'énergie propre du polaron est en  $\alpha^2$  et sa masse en  $\alpha^4$  :

$$E = -\frac{\alpha^2}{3\pi} \approx -0.106\alpha^2$$

$$\frac{m^*}{m} = \frac{16}{81\pi^2}\alpha^4$$

### Propriétés du polaron de Fröhlich

En général, le spectre d'énergie d'un polaron dans la bande de conduction d'un cristal polaire est continu. Cependant, si l'électron est lié à un défaut ou soumis à un champ magnétique, le spectre d'excitation du polaron peut devenir discret. Lorsque l'énergie de l'excitation d'une transition électronique est de l'ordre de l'énergie des phonons, l'interaction électron-phonons est dite résonante. D'un point de vue expérimental, la région d'interaction avec les phonons optiques longitudinaux du centre de la zone de Brillouin est difficile à étudier dans les cristaux ioniques à la résonance : il s'agit précisément de la région de forte absorption reststrahl. Les matériaux polaires se caractérisent par une quasi-opacité dans cette région de fréquences entre  $\omega_{LO}$  et  $\omega_{TO}$ . Cette région du spectre doit donc être étudiée par des techniques indirectes.

Certaines expériences dépendent explicitement des effets polaroniques, entre autres l'observation de la résonance cyclotron en fonction du champ magnétique. Ainsi, les masses polaroniques sont déterminées par résonance cyclotron. Aux fréquences cyclotron qui tendent vers les fréquences des modes optiques longitudinaux, il y a un effet de résonance. La principale évidence de l'existence de polarons comme porteurs dans les matériaux polaires est la non-parabolicité de la relation énergie-champ magnétique ( $E = f(B)$ ) observée sous champs magnétique élevé, beaucoup plus importante que la non-parabolicité caractéristique de la bande de conduction.

Dans la limite du couplage faible, un électron dans un champ magnétique, couplé aux modes de phonons du réseau, peut être traité de façon perturbative. Le système constitué d'un électron dans un champ magnétique est caractérisé par des états de Landau d'indices  $(n, m, k_z)$ . Les effets de la perturbation polaronique sont décrits dans la littérature [4] : les niveaux de Landau de l'électron sont décalés d'une quantité correspondant à l'énergie propre en  $-\alpha$  et la masse du polaron  $m_c^*$  remplace la masse effective de l'électron  $m$  dans la fréquence cyclotron :  $\omega_c = \frac{eH}{m_c^*}$ . Le premier niveau de Landau ( $n = 1$ ) s'incurve quand la fréquence cyclotron  $\omega_c$  augmente pour

tendre de façon asymptotique vers le niveau ( $\frac{\hbar\omega_c}{2} + \hbar\omega_{LO}$ ). Le niveau  $n = 1$  se trouve “accroché” par cet état de diffusion (phénomène de pinning).

### Systemes à dimensions réduites

Le développement des techniques de nanolithographie et d'épitaxie permet la fabrication d'hétérostructures de semi-conducteurs qui confinent les porteurs de charges dans une (puits quantique), deux (fil quantique) ou trois (point quantique) dimensions. Les points quantiques peuvent être aussi petits que quelques nanomètres. Les propriétés optiques de tels systèmes se trouvent modifiées [5, 6].

Il est possible de négliger le confinement quantique des modes de phonons lors du calcul des énergies propres, du fait des masses ioniques élevées [7, 8]. L'utilisation de l'hamiltonien de Fröhlich usuel  $3D$  pour décrire le couplage électron-phonons reste valide dans le cas d'un bon accord des propriétés élastiques des matériaux constitutifs aux interfaces, comme c'est le cas des hétérostructures  $GaAs/AlGaAs$ , en considérant des propriétés diélectriques presque égales [9]. Cependant, les énergies propres dues à l'interaction électron-phonons dans des systèmes  $2D$  calculées au moyen de l'hamiltonien de Fröhlich  $3D$  sont divergentes. Cette divergence peut être surmontée par l'introduction de l'effet d'écrantage, ou en considérant un modèle plus réaliste pour les phonons optiques longitudinaux dans ces structures.

Les méthodes d'investigation des propriétés polaroniques décrites plus haut souffrent de leur étroit domaine de validité respectif : chacune s'applique dans l'un ou l'autre des régimes de couplage extrêmes, faible (méthode perturbative) ou fort (approche adiabatique), voire intermédiaire (traitement de type Lee-Low-Pines).

Or, de nombreuses études expérimentales mettent en évidence des effets du confinement sur l'interaction électron-phonons. Ainsi, par exemple, une étude systématique de la transition hydrogénoïde de donneurs peu profonds dans  $GaAs$  en volume, ainsi que dans des multi-puits quantiques  $GaAs/AlGaAs$  et des super-réseaux, à la résonance avec les phonons optiques de  $GaAs$ , conclue au renforcement de l'interaction électron-phonons quand le confinement est accentué [10]. Les bandes d'énergie d'interaction observées sont très larges et asymétriques, dans le cas de multi-puits de largeur de puits faible ( $125\text{\AA}$ ), et diminuent quand la largeur des puits augmente. La largeur des bandes tend vers la valeur  $3D$  pour des puits de largeurs de l'ordre de  $450\text{\AA}$ . Dans les super-réseaux, dont les puits ont une largeur de  $80\text{\AA}$  et les barrières une largeur de  $9\text{\AA}$ , l'interaction électron-phonons est plus forte qu'en volume, mais beaucoup plus faible que dans les multi-puits quantiques de même largeur de puits. Il semble que la force d'interaction dépend de l'étendue de

la fonction d'onde électronique.

L'étude des énergies de résonance cyclotron dans des systèmes  $2D$  met en évidence des discontinuités au voisinage de l'énergie des modes de phonons LO de volume, attribuées à l'interaction électron-phonons résonante, accrue par rapport à l'interaction  $3D$  [11, 12].

Récemment, l'interaction polaronique est étudiée dans les points quantiques. Les spectres de photoluminescence de points quantiques isolés InP/GaInP, constitués de raies équidistantes et larges, sont expliqués en termes d'interaction électron-phonons [13]. Les spectres d'absorption de points CdTe présentent une largeur homogène des raies qui croît quand la taille des points diminue, ce qui suggère une interaction électron-phonons renforcée dans les petits points [14]. Des points InAs formés sur un substrat GaAs par épitaxie à jet moléculaire selon le mode de croissance Stranski-Krastanov, sont étudiés par magnétospectroscopie dans l'infrarouge lointain [15]. Ces points, en forme de lentilles d'environ 2 nm de hauteur et 20 nm de diamètre, présentent une symétrie quasi-cylindrique. Les mesures indiquent que le couplage électron-phonons dans un point quantique est toujours de type couplage fort. La photoluminescence (PL et PLE) permet l'étude de l'effet de l'anisotropie du confinement dans des points quantiques III-V et II-VI; ainsi, [15] observent une interaction polaire exciton-phonons accrue dans les points fortement anisotropes.

Le renforcement du couplage polaire électron-phonons par confinement est donc fortement suggéré aussi bien par des études théoriques que par des observations expérimentales. Par exemple, pour des longueurs de confinement  $L$  inférieures au rayon du polaron  $r_0$ , il est estimé que la constante de couplage  $\alpha$  ("nominale") se trouve renormalisée en  $\frac{\alpha}{L}$  (couplage "effectif") [16].

Dans ces conditions, la théorie purement perturbative n'est plus applicable aux structures confinées, même dans des matériaux de faible constante de couplage "nominale"  $\alpha$ . En effet, ces structures peuvent présenter des caractéristiques de couplage intermédiaire, voire fort, quand le potentiel de confinement augmente et que la dimensionalité diminue. Des traitements valides pour tout couplage sont donc nécessaires pour décrire les propriétés du polaron dans des structures à dimensions réduites.

La formulation de l'intégrale de chemin de Feynman, basée sur un principe variationnel, s'applique pour toute valeur du couplage électron-phonons. A partir du lagrangien classique, Feynman décompose le champ de polarisation en ondes stationnaires et introduit ainsi les modes normaux. Il définit ensuite l'action classique et exprime le propagateur électronique en fonction d'une intégrale de chemin sur

l'exponentielle de l'action. Des difficultés mathématiques l'obligent à introduire une action modèle et à approximer l'énergie de l'état fondamental de façon variationnelle. Ainsi, le polaron de Feynman est un système constitué d'un électron de masse  $m$  et d'une particule fictive de masse  $M$  représentant l'effet du réseau, reliés par un oscillateur harmonique de raideur  $K$ . Ce modèle s'accorde bien avec l'image de la limite de couplage fort où l'électron est violemment rappelé par le réseau.  $M$  et  $K$  sont deux paramètres variationnels. L'hamiltonien du modèle de Feynman s'écrit [2, 17] :

$$H_{Feynman} = H_e + H_{ph} + H_{oscillateur\ harmonique}$$

L'hamiltonien d'interaction de Fröhlich se trouve donc remplacé par une particule fictive reliée à l'électron par un ressort  $K$ . La charge de polarisation disparaît et toute les coordonnées de phonons sont éliminées.

Le formalisme de Feynman ne peut prendre en compte l'invariance de translation du système polaronique. Il fournit d'ailleurs les meilleures évaluations de l'énergie de l'état fondamental pour tout couplage, mais ne donne pas accès à la masse polaronique.

### Notre étude

Les systèmes qui nous intéressent sont caractérisés par différents paramètres de matériaux : l'énergie du mode de phonons optiques longitudinaux  $\hbar\omega_{LO}$ , la masse effective de l'électron  $m$ , les constantes diélectriques statique et haute fréquence,  $\epsilon_0$  et  $\epsilon_\infty$  respectivement. En combinaison avec des constantes naturelles, ces paramètres introduisent différentes échelles d'énergie (à la deuxième ligne du tableau ci-dessous) et de longueur (à la troisième ligne du tableau ci-dessous) :

- le rayon du polaron  $r_0$  et l'énergie des modes de phonons optiques longitudinaux  $\hbar\omega_{LO}$  caractérisent l'interaction polaire;
- le rayon de Bohr hydrogénoïde  $a_0$  et l'énergie Rydberg  $Ry$  définissent le couplage de type coulombien;
- les longueurs de confinement  $L_\Omega$  et  $L_z$  et les énergies dues aux potentiels de confinement appliqués dans le plan  $(x, y)$  et selon la direction  $z$  respectivement;
- la longueur magnétique  $r_L$  et l'énergie magnétique  $\hbar\omega_c$  apparaissent en présence d'un champ magnétique.

couplage polaire	couplage coulombien	confinement	champ magnétique
$\hbar\omega_{LO}$	$Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2\epsilon_0^2}$	$\hbar\Omega^4$ et $\hbar K^4$	$\hbar\omega_c$
$r_0$	$a_0$	$L_\Omega$ et $L_z$	$r_L$



Les études antérieures démontrent la difficulté de décrire les différents régimes de couplage polaire, de couplage coulombien, de confinement, et de champ magnétique. Divers cas limites sont étudiés de façon séparée. L'étude des cas intermédiaires ou mixtes (dans un système confiné, le couplage électron-phonons de volume peut être faible alors que le couplage électron-phonons de surface est déjà fort [18, 19]) est peu abordée.

Nous nous proposons d'appliquer le formalisme de Fock de Matz et Burkey, présenté au **second chapitre**, valide pour tout couplage et tout champ magnétique. Il nécessite l'utilisation d'un spectre modèle dont tous les états sont connus. La somme sur tous ces états est analytiquement possible dans le cas du spectre gaussien et du spectre magnétique.

Le **troisième chapitre** présente l'application de la méthode à l'étude des effets du confinement sur le polaron dans un point quantique. Nous nous intéressons principalement à l'état fondamental et au premier état excité. Nous obtenons les limites asymptotiques de façon analytique et explorons les situations intermédiaires de façon numérique.

Dans le **quatrième chapitre**, nous abordons le problème du polaron lié dans un point quantique. Le polaron lié est formé par un électron en interaction coulombienne avec un défaut hydrogénéoïde dans un matériau polaire. Dans ce cas, le potentiel du défaut est écranté par la polarisabilité du réseau, d'où une renormalisation des niveaux d'énergie du défaut. Comme souligné dans [20], d'autres effets apparaissent, telle l'existence d'états polaroniques excités et d'un nouvel état impliquant un électron piégé dans un potentiel créé par le défaut et par la polarisabilité du réseau. D'autre part, la masse effective de l'électron se trouve renormalisée.

L'étude théorique du gros polaron diélectrique dans un champ magnétique uniforme et constant fournit des éléments d'interprétation d'expériences visant à valider l'hamiltonien du continuum de Fröhlich. De fait, des expériences de résonance cyclotron et des expériences magnéto-optiques sont nécessaires pour caractériser les propriétés du polaron libre. C'est pourquoi, dans le **cinquième chapitre** nous nous intéressons à l'effet d'un champ magnétique uniforme et constant sur le polaron confiné dans un point quantique. Nous aborderons le problème du polaron lié à un défaut coulombien dans un champ magnétique. Une telle situation apparaît si le cristal contient des défauts, particulièrement dans les halogénures alcalins où le temps de vie des électrons dans la bande de conduction est faible et où des impuretés sont introduites de façon à peupler la bande de conduction.

Enfin, nous établissons le bilan de ce travail dans la **Conclusion**.

## CHAPITRE 2

### Méthode

#### 2.1 Introduction

L'approximation de Fock de Matz et Burkey a été développée afin de permettre un traitement unifié du problème du polaron libre de volume dans toute la gamme de couplage polaire [21, 22, 23] : l'énergie de l'état fondamental est évaluée à partir d'un hamiltonien modèle impliquant un électron dans un potentiel harmonique de symétrie cylindrique; un champ magnétique interne sans signification physique introduit des brisures de symétrie [24].

Cette approximation a permis également l'étude du premier état excité du polaron de volume. Il est montré que le premier état excité a une symétrie cylindrique et subit une localisation  $2D$  en couplage faible, alors qu'il présente une symétrie sphérique et est complètement localisé en couplage fort [25].

Le formalisme de Fock de Matz et Burkey est appliqué aussi au polaron de surface ou d'interface [26, 27], et au polaron de surface  $2D$  lié à un défaut [19]. Il s'avère que, pour le polaron libre de surface ( $2D$ ), à couplage électron-phonons égal, les énergies sont plus basses qu'en volume ( $3D$ ). De plus, la structure interne est plus stable. Quant au polaron lié de surface, les énergies de liaison sont plus élevées que dans le cas équivalent  $3D$ . Comme dans le cas de volume, il existe deux types d'états de surface : de type masse effective et de type polaronique. Ce dernier est plus stable dans le cas de surface. Les forces de couplage électron-phonons et électron-défaut sont beaucoup plus fortes dans le cas de surface. Il est vrai que, à défaut de connaître la masse effective de surface, la masse effective de l'électron en volume est attribuée au polaron de surface extérieur. En réalité un électron proche de la surface subit un effet réduit et perturbé du potentiel périodique du réseau. Par ailleurs, l'énergie de liaison d'un polaron lié à un état hydrogénoïde de surface peut être très forte par rapport aux états de volume.

En outre, cette méthode est utilisée pour l'étude des états électroniques à la surface d'un cristal polaire parfait semi-infini dans le vide [26, 27]. Les interactions

avec toutes les sources possibles de moments dipolaires sont traitées sur un même niveau, de façon dynamique. Le meilleur spectre modèle proposé est celui d'un oscillateur harmonique anisotrope dont la position d'équilibre dans la direction  $z$  est fixée. Les résultats sont obtenus grâce à des calculs numériques à l'exception de quelques cas limites accessibles analytiquement. Il ressort que le polaron extérieur forme toujours un état lié. Par contre, le polaron intérieur ne forme un état lié que lorsque les couplages électron-phonons et électron-exciton sont forts.

## 2.2 Formalisme de Fock de Matz et Burkey

L'hamiltonien de Fröhlich décrit le système constitué d'un porteur de charge en interaction avec les phonons polaires optiques longitudinaux d'un solide représenté par un continuum diélectrique. Le polaron présente des complications caractéristiques du problème de champs fermions-bosons en interaction : effet de recul de l'électron du fait de son interaction avec les phonons, et invariance de translation globale (conservation du moment total du cristal).

La fonction de Green non diagonale retardée de l'électron à température de 0 K est, dans la représentation de l'espace du momentum :

$$G(\vec{p}, \vec{p}', t - t') = \begin{cases} -i \langle 00 | C_{\vec{p}}(t) C_{\vec{p}'}^\dagger(t') | 00 \rangle & t > t' \\ 0 & t < t' \end{cases}$$

$|00\rangle$  est l'état vide de phonon et d'électron.  $G(\vec{p}, \vec{p}', t - t')$  est la probabilité qu'un électron de momentum  $\vec{p}$  au temps  $t$  se retrouve au temps  $t'$  avec un momentum  $\vec{p}'$ . Dans l'espace des fréquences, on trouve :

$$G(\vec{p}, \vec{p}', Z) = \langle 00 | C_{\vec{p}} \frac{1}{Z - H} C_{\vec{p}'}^\dagger | 00 \rangle$$

où  $\frac{1}{Z - H}$  est le résolvant de Schrödinger et  $Z$  est une fréquence complexe. A partir d'une approche d'équation de mouvement, on trouve l'approximation de Fock :

$$G_0^{-1}(\vec{p}, Z) G(\vec{p}, \vec{p}', Z) = \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} + \sum_{\vec{p}_1} \sum_{\vec{k}} |V_{\vec{k}}|^2 G(\vec{p} - \vec{k}, \vec{p}_1 - \vec{k}; Z - 1) G(\vec{p}_1, \vec{p}'; Z)$$

où  $G_0(\vec{p}, Z)$  est le propagateur de l'électron libre. On utilise une représentation dans laquelle  $G$  est développé à l'aide d'un spectre complet :

$$G(\vec{p}, \vec{p}'; Z) = \sum_n \frac{\Psi_n^*(\vec{p}) \Psi_n(\vec{p}')}{Z - \epsilon_n} \quad (2.1)$$

Les  $\Psi_n$  sont des fonctions orthonormales :

$$\begin{aligned}\sum_n \Psi_n^*(\vec{p}) \Psi_n(\vec{p}') &= \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} \\ \sum_p \Psi_n^*(\vec{p}) \Psi_{n'}(\vec{p}) &= \delta_{n, n'}\end{aligned}$$

$\delta_{ij}$  est le symbole de Kronecker. Les  $\epsilon_n$  sont les pôles de  $G$ . L'énergie la plus basse est obtenue en posant  $Z = \epsilon_0 + i\delta$  avec  $\delta \rightarrow 0$  telle que :

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} i\delta G(\vec{p}, \vec{p}'; Z = \epsilon_0 + i\delta) = \Psi_0^*(\vec{p}) \Psi_0(\vec{p}')$$

Les détails du développement sont donnés dans [21, 22, 23]. On obtient alors une équation de Schrödinger effective pour  $\Psi_0$  et  $E_0$  :

$$(E_0 - p^2)\Psi_0(p) = - \sum_n \sum_{\vec{k}, \vec{p}_1} |V_k|^2 \frac{\Psi_n(\vec{p} - \vec{k}) \Psi_n^*(\vec{p}_1 - \vec{k}) \Psi_0(\vec{p}_1)}{\epsilon_n - \epsilon_0 + 1} \quad (2.2)$$

Cette équation est résolue de façon variationnelle à l'aide d'un spectre modèle  $\Psi_n(\vec{r})$ . Elle est écrite ici dans l'espace des positions :

$$\begin{aligned}E_0 &= \int \Psi_0^*(\vec{r}) H_0 \Psi_0(\vec{r}) d\vec{r} \\ &+ \sum_n \sum_{\vec{k}} |V_k|^2 \int \int e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} \frac{\Psi_n(\vec{r}) \Psi_n^*(\vec{r}')}{\epsilon_0 - \epsilon_n - 1} \Psi_0(\vec{r}') \Psi_0^*(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{r}'\end{aligned} \quad (2.3)$$

$\Psi_0$  est l'état fondamental du modèle.  $\vec{k}$  est le vecteur d'onde des modes de phonons optiques longitudinaux.  $\vec{r}$  est le vecteur position de l'électron.

Lorsque le couplage électron-phonons est suffisamment fort, le polaron peut développer une structure interne. Celle-ci est beaucoup plus difficile à étudier; seules des limites asymptotiques ont été obtenues. Pourtant, la connaissance des états excités du polaron est nécessaire pour comprendre l'absorption optique du polaron libre, ainsi que ses propriétés de transport.

Deux types d'états excités sont considérés. Lors d'une transition optique IR, le polaron peut absorber un photon et passer de son état fondamental à un état excité. Une telle transition s'effectue très rapidement et le réseau n'a pas le temps de s'adapter à la nouvelle configuration électronique. Le porteur est donc dans un état excité dans ayant la configuration de l'état fondamental : ce sont des états de type Franck-Condon. Ainsi la fonction d'onde  $\Psi_\nu^\gamma$  décrit l'état Franck-Condon  $\nu$  dans la configuration  $\gamma$ . Cette situation est instable et le réseau se relâche pour s'adapter à l'état électronique. Cette relaxation par émission de phonons produit les états

excités relâchés (RES), notés  $\Psi_\gamma$ .

Nous pouvons écrire une équation de Schrödinger effective pour la fonction d'onde  $\Psi_\nu^\gamma$ , obtenue à partir de l'équation du mouvement de Fock de la fonction de Green, comme décrit précédemment pour l'état fondamental. L'énergie est obtenue en en prenant la valeur moyenne [25, 28] :

$$E_\nu^\gamma = \int \Psi_\nu^{\gamma*}(\vec{r}) H_0 \Psi_\nu^\gamma d\vec{r} + \sum_n \sum_{\vec{k}} |V_k|^2 \int \int e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}')} \frac{\Psi_n^\gamma(\vec{r}) \Psi_n^{\gamma*}(\vec{r}')}{\epsilon_\nu^\gamma - \epsilon_n^\gamma - 1} \Psi_\nu^\gamma(\vec{r}') \Psi_\nu^{\gamma*}(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{r}' \quad (2.4)$$

$E_\nu^\gamma$  représente l'énergie d'un état de Franck-Condon du polaron.  $\epsilon_\nu^\gamma$  est l'énergie d'un état de Franck-Condon du modèle variationnel.  $E_\gamma^\gamma$  est alors l'énergie d'un état excité relâché du polaron. Comme dans le cas de l'état fondamental, nous l'évaluons de façon variationnelle.

Le dénominateur du second terme, dit terme de Fock, du second membre diverge quand  $\epsilon_1 = \epsilon_0 + 1$ , c'est à dire lorsque l'énergie du premier niveau excité devient égale à celle de l'état fondamental plus un phonon [25]. Cette singularité dans l'espace des paramètres variationnels sépare l'état fondamental du premier état excité relâché. L'énergie d'un état excité est au moins égale à celle de l'état fondamental augmentée de l'énergie d'un phonon :  $E_1 \geq E_0 + 1$ , où  $E_1$  est l'énergie du premier état excité relâché. La première singularité agit comme séparateur entre les états excités ( $E_1 \geq E_0 + 1$ ) et l'état fondamental. D'autres singularités apparaissent chaque fois que  $\epsilon_\nu^\gamma - \epsilon_0^\gamma - 1 = 0$ . Elles sont reliées à l'instabilité du polaron excité par rapport à l'émission d'un phonon.

Ainsi, l'espace des paramètres variationnels est séparé en différentes régions par les singularités. Les valeurs les plus fortes des paramètres définissent la région dite à droite de la singularité. La fonction d'onde du polaron est alors hautement localisée. Le minimum de  $E_\nu^\gamma$ , s'il existe, est une évaluation du RES du polaron. Par contre, à gauche de la singularité  $E_\nu^\gamma \leq E_0 + 1$ , si un minimum existe, il est une borne supérieure à l'énergie de l'état fondamental  $E_0$ . La limite perturbative (couplage faible) et la limite adiabatique (couplage fort) se situent de part et d'autre de cette singularité et les temps de vie sont suffisamment longs pour ne pas en faire cas. Par contre, pour des couplages intermédiaires, il est nécessaire de traiter adéquatement la (ou les) singularité(s).

Ces équations pour l'énergie sont valables pour tout couplage électron-phonons. Non-linéaires, elles peuvent être résolues de façon variationnelle à l'aide d'un hamiltonien modèle. A la différence des problèmes variationnels linéaires habituels en mécanique

quantique, il faut utiliser non pas une unique fonction d'essai comportant des paramètres variationnels, mais un ensemble complet de fonctions d'essai sur lequel la fonction de Green de l'électron est développée (équation (2.1)). C'est uniquement dans la limite de couplage fort que l'équation pour l'énergie peut être résolue au moyen d'une seule fonction d'essai : le premier terme de la somme sur  $n$  est largement dominant dans (2.2). Les termes suivants de la somme sont d'ordre  $\alpha^2$  plus petits. A l'aide d'un spectre gaussien (symétrie sphérique) et d'un spectre incluant un champ magnétique interne (symétrie cylindrique), pour une constante de couplage électron-phonons  $\alpha$  inférieure à 1.2, aucun état excité n'est trouvé. Entre  $\alpha = 1.2$  et  $\alpha = 4.2$ , apparaît un état excité bidimensionnel, et au delà de  $\alpha = 4.2$ , un état excité gaussien. En présence d'un champ magnétique constant et uniforme, l'approximation de Fock permet de décrire, comme en l'absence de champ magnétique, d'une façon unifiée, à la fois le régime de couplage faible et celui de couplage fort, mais seulement au prix de briser les symétries de l'hamiltonien de Fröhlich [28].

### 2.3 Notre approche

En général, les effets polaroniques dans les fils et les points quantiques sont étudiés en régime de couplage faible. Les théories perturbatives telles que la théorie de Raleigh-Shrödinger du second ordre s'appliquent dans cette région. Elles fournissent une forme simple de l'interaction électron-phonons et des expressions analytiques compactes de la correction polaronique [29, 30]. Pour tout couplage, elles semblent encore efficaces quand les longueurs de confinement dans les structures confinées augmentent car alors la constante de couplage diminue [31]. Néanmoins, la correction polaronique à l'état fondamental est considérablement plus forte quand le potentiel de confinement appliqué est accru : il renforce le couplage électron-phonons. Ainsi, même dans des matériaux faiblement polaires tels que *GaAs* ( $\alpha = 0.07$ ), le polaron doit être traité par une théorie de couplage intermédiaire ou fort. Cet effet est encore plus prononcé dans les composés *II-VI* tel *CdS* ( $\alpha = 0.53$ ) dans lesquels le couplage électron-phonons est presque d'un ordre de grandeur supérieur à celui rencontré dans les composés *III-V*. C'est pourquoi, la théorie perturbative ne peut plus être appliquée, même pour ces systèmes à couplage faible, ni la théorie de type Landau-Pekar propre à la limite de couplage fort.

Notre but est de développer une méthode qui dépasse les limites inhérentes à ces différentes approches. Forts des succès de l'approximation de Fock telle que développée par Matz et Burkey, nous nous proposons de l'appliquer à l'étude des propriétés du polaron de Fröhlich dans un point quantique (chapitre 3), puis dans un point quantique en présence d'une impureté coulombienne (chapitre 4), et enfin

dans un point quantique sous un champ magnétique (chapitre 5).

### 2.3.1 Choix du spectre modèle

Il nous faut choisir un hamiltonien modèle qui approche la fonction d'onde de l'état fondamental du mieux possible. Puis nous étudions le premier état excité relâché en utilisant un état excité du spectre modèle orthogonal à la fonction d'onde de l'état fondamental. Les fonctions d'onde doivent posséder diverses symétries dépendamment des valeurs des paramètres variationnels par rapport auxquels on minimise. De plus, nous devons pouvoir déterminer les vecteurs et valeurs propres de l'Hamiltonien et effectuer la somme sur tous les états du spectre. Cet hamiltonien modèle ne doit comporter que trois degrés de liberté puisqu'il n'y en a que trois dans l'approximation de Fock. Pour l'étude du polaron libre dans un champ magnétique, par exemple, divers spectres modèles ont été considérés, dont [28] :

- dans la limite perturbative, le plus simple est celui d'un électron dans un champ magnétique :

$$H_m = \hat{p}^2 + \gamma^4 \rho^2 + 2\gamma^2 \hat{l}_z$$

- celui d'un électron dans un potentiel harmonique isotrope 3D de constante de ressort  $\beta$ , et plongé dans un potentiel dépendant de la vitesse simulant un champ magnétique uniforme et constant selon  $z$ , décrit dans la jauge symétrique, fournit de meilleurs résultats :

$$H_m = \hat{p}^2 + \beta^4 r^2 + 2\gamma^2 \hat{l}_z + \gamma^4 \rho^2$$

Parmi les différents types de potentiels de confinement étudiés dans la littérature, le potentiel de confinement parabolique anisotrope est particulièrement intéressant [32, 33, 34, 35, 30, 36]. Des potentiels plus réalistes sont bornés par une valeur finie de l'ordre de quelques centaines de meV. Cependant, tant que les énergies polaroniques sont bien inférieures à cette valeur, l'utilisation du potentiel harmonique semble raisonnable pour décrire de nombreux cas. De fait, le potentiel observé dans les fils apparaît de type parabolique, produit par les gradients de contraintes [37, 38]. Dans un point quantique également, il est rapporté que le potentiel de confinement ressenti par les électrons a une symétrie presque circulaire et que l'évolution des niveaux d'énergie en présence d'un champ magnétique croissant est identique à celle observée dans un potentiel parabolique [39]. En outre, ce potentiel n'introduit pas d'interface abrupte et permet l'utilisation de l'approximation des modes de phonons de volume, pour des points assez gros ou des points dont les propriétés diélectriques sont proches de celles du matériau de la matrice.

L'utilisation d'un spectre gaussien équivaut à supposer que l'électron est lié dans un puits de potentiel harmonique caractérisé par les constantes de ressort, problème semblable à celui du potentiel d'oscillateur harmonique de Feynman. La somme sur  $n$  dans l'équation 2.2 est effectuée à l'aide de la règle de somme de Slater [40].

Le potentiel de confinement parabolique anisotrope type est de la forme :

$$V(r) = \Omega^4 x^2 + \Lambda^4 y^2 + K^4 z^2 \quad (2.5)$$

Dans la limite de couplage faible, la théorie de perturbation du second ordre de Rayleigh–Schrödinger donne une borne supérieure exacte à l'énergie du fondamental du polaron dans un tel potentiel. De façon variationnelle, il est possible d'obtenir de meilleurs résultats en sélectionnant un potentiel modèle du type :

$$V_{\text{modèle}}(\vec{r}) = \beta^4 x^2 + \delta^4 y^2 + \gamma^4 z^2$$

$\beta$ ,  $\delta$  et  $\gamma$  sont des paramètres variationnels. Ainsi, le potentiel réel  $V(r)$  est un cas particulier de  $V_{\text{modèle}}(r)$ . Le choix de paramètres à la puissance quatrième permet simplement de manipuler des valeurs de minimisation plus pratiques. La méthode variationnelle reproduit le résultat de la théorie de perturbation du second ordre en couplage faible. Dans la limite de couplage fort, notre méthode avec ce modèle redonne les résultats de la théorie adiabatique de Landau-Pekar. Pour un couplage électron-phonons et un potentiel de confinement arbitraires, l'énergie de l'état fondamental est calculée de façon numérique.

### 2.3.2 Méthode

Nous dérivons les expressions variationnelles de Matz et Burkey pour quelques états du spectre modèle. Il nous est possible d'en étudier de façon analytique les limites asymptotiques, dans les cas de régimes de couplage fort ( $\alpha \gg 1$ ) et de couplage faible ( $\alpha \ll 1$ ), de régimes de confinement nul (limite  $3D$ ), selon une direction (limite  $2D$ ), selon deux directions (limite  $1D$ ) ou trois directions (limite du point  $0D$ ).

Plusieurs paramètres nous permettent de caractériser le polaron dans les diverses situations :

- La correction polaronique due au couplage électron-phonons est définie par :

$$\Delta E_p = E(\alpha = 0) - E(\alpha \neq 0) \quad (2.6)$$

Nous définissons l'énergie propre du polaron  $E_p = -\Delta E_p$  comme la différence entre l'énergie totale et l'énergie élastique de l'électron dans le potentiel harmonique anisotrope.



- Les forces de confinement définissent des longueurs nominales de confinement dans la direction  $z$ , soit  $L_z = \langle \psi_m | z^2 | \psi_m \rangle^{1/2}$ , et dans le plan  $(x, y)$ , soit  $L_\rho = \langle \psi_m | \rho^2 | \psi_m \rangle^{1/2}$ , comme la valeur moyenne de  $z^2$  et comme la valeur moyenne de  $\rho^2$  respectivement, pour la fonction d'onde du potentiel de confinement. Dans le système d'unités utilisé, le polaron a un rayon unitaire. Ainsi, les effets du confinement quantique doivent apparaître quand  $L_z$  et  $L_\rho$  deviennent petites devant l'unité.

Les longueurs effectives de confinement sont définies à partir des paramètres variationnels : dans la direction  $z$ ,  $L_{z_{eff}} = \langle \psi_{\beta,\gamma} | z^2 | \psi_{\beta,\gamma} \rangle^{1/2}$ , et dans le plan  $(x, y)$ ,  $L_{\rho_{eff}} = \langle \psi_{\beta,\gamma} | \rho^2 | \psi_{\beta,\gamma} \rangle^{1/2}$ , les valeurs moyennes de  $z^2$  et de  $\rho^2$  respectivement, pour la fonction d'onde obtenue après minimisation par rapport aux paramètres variationnels. Elles représentent une mesure de l'effet de confinement total résultant du confinement géométrique imposé par le potentiel anisotrope et du confinement induit par l'interaction électron-phonons.

- En présence d'une impureté coulombienne, nous surveillons l'énergie de liaison  $E_l$  du défaut coulombien, définie comme la différence entre l'énergie de l'état en l'absence de défaut et l'énergie de l'état en présence du défaut [41, 42] :

$$E_l = E(R = 0) - E(R \neq 0) \quad (2.7)$$

Nous évaluons l'effet du couplage polaire sur l'énergie de liaison par la correction polaronique à l'énergie de liaison, définie telle que :

$$\Delta_p = E_l(\alpha \neq 0) - E_l(\alpha = 0) \quad (2.8)$$

Nous prenons soin, dans la cas des états excités, de prendre en compte la singularité issue du terme  $n = 0$  dans la somme sur  $n$  de l'équation 2.4. Ce terme est traité séparément.

Nous étudions de façon numérique le comportement du polaron dans les cas intermédiaires non accessibles de manière analytique. A cette fin, nous élaborons un programme de résolution numérique des expressions de type Matz et Burkey obtenues, à l'aide de la librairie IMSL. La minimisation est confiée à une routine d'optimisation à plusieurs variables. Elle calcule le minimum d'une fonction de  $R^n$  dans  $R$  par la méthode du gradient évalué selon une technique de différence finie quasi Newton. Cette routine ne trouve qu'un minimum local. Or notre fonction peut posséder plusieurs minima locaux. Le choix de la valeur des paramètres initiaux et des intervalles de recherche est donc important. La procédure appliquée se résume à entrer la fonction à minimiser et à donner une valeur de départ aux paramètres variationnels. La routine recherche les valeurs optimales des paramètres de façon

itérative jusqu'à ce que les critères d'arrêt soient atteints : soit la norme du gradient est inférieure à la tolérance permise, soit la distance minimale entre les deux dernières étapes d'itération est inférieure à la tolérance permise sur le pas.

L'intégration est assurée par une routine d'intégration numérique à plusieurs variables. Il faut fournir les bornes d'intégration ( $a$  et  $b$ ) ainsi que les erreurs absolue ( $\epsilon$ ) et relative ( $\rho$ ) permises. La routine subdivise l'intervalle d'intégration  $[a, b]$  et utilise une règle à 21 points de Gauss-Kronrod pour évaluer l'intégrale sur chaque sous-intervalle. L'erreur pour chaque sous-intervalle est calculée par comparaison avec la loi de quadrature de Gauss à 10 points. La routine retourne un résultat approché  $R$  et l'erreur estimée sur sa valeur  $E$ , tels que :

$$|\int_a^b f(x)dx - R| \leq E \leq \max(\epsilon, \rho) |\int_a^b f(x)dx|$$

Tous les calculs sont effectués en double précision.

## 2.4 Conclusion

L'approximation de Fock est déduite à partir d'équations du mouvement dans un formalisme de fonctions de Green [21, 22]. Elle est valide à température nulle, et n'étant pas de nature perturbative, pour toute constante de couplage. En champ magnétique nul, elle a la propriété que sa solution d'énergie minimum est aussi une borne supérieure variationnelle de l'énergie exacte de l'état considéré de l'hamiltonien de Fröhlich [23]. Cette approche utilise des hamiltoniens modèles et les spectres complets correspondants pour simuler de façon variationnelle la dynamique du polaron, dans toute la gamme de couplage électron-phonons, contrairement à des théories qui utilisent des fonctions d'onde d'essai pour étudier la limite adiabatique du polaron (couplage fort). Les différentes symétries endossées par le spectre modèle permettent de traiter toute la gamme de couplage [21, 22, 23].

Pour l'étude de la structure interne du polaron, nous suivons la procédure suivante :

- Nous choisissons un spectre modèle.
- Nous utilisons un état excité du spectre modèle orthogonal à l'état fondamental. Sa fonction d'onde est introduite dans l'expression de Matz et Burkey et l'énergie  $E_\gamma^\gamma$  est minimisée par rapport aux paramètres variationnels dans la région de l'espace des paramètres à droite de la première singularité, où  $\epsilon_\gamma^\gamma > \epsilon_0 + 1$ .
- Nous envisageons différentes symétries pour le premier état excité. Celle qui donne la plus faible énergie est retenue.

- Si aucun minimum n'est obtenu, nous en déduisons l'absence de RES.
- S'il existe un minimum d'énergie négative, c'est un premier RES.

Dans les limites de couplages faible et intermédiaire, l'approximation de Fock donne les mêmes résultats que les méthodes perturbatives et variationnelles. Dans la limite de couplage fort, elle donne des résultats semblables à ceux obtenus par la méthode de Pekar. Elle présente l'avantage de traiter l'interaction électronique de façon dynamique, et de faciliter l'analyse des différentes contributions à l'énergie du polaron. De plus, elle nous permet de faire la distinction entre les états excités internes du polaron et les états excités d'une particule dans un champ (coulombien ou magnétique). Par contre, la méthode requiert de disposer d'un spectre modèle complet tel que la somme sur ses états soit faisable.

## CHAPITRE 3

### Effet du confinement sur le polaron dans un point quantique

Les progrès récents dans la technologie de microfabrication par épitaxie à jet moléculaire et nanolithographie permettent de fabriquer des structures de semi-conducteurs polaires à dimensionalité réduite, tels que les couches diélectriques, les hétérojonctions, les puits, les fils et points quantiques. Les fils et points quantiques fabriqués actuellement peuvent avoir des tailles de quelques nanomètres. Les polarons dans ces structures sont différents de ceux rencontrés dans les systèmes massifs : les potentiels de confinement agissent sur l'électron d'une part, et font apparaître des modes de phonons confinés et d'interface d'autre part. Les différents potentiels envisagés, finis, infinis, symétriques ou antisymétriques, sont variés : rectangulaire ou boîte [43], cylindrique ou sphérique [33, 44] et parabolique [34, 35, 45, 30, 46, 47, 31]. Le potentiel de confinement parabolique anisotrope est particulièrement intéressant, car il permet l'étude du confinement selon aucune dimension (limite de volume quand toutes les constantes de ressort tendent vers zéro), une dimension (limite  $2D$  quand une des constantes de ressort est élevée), deux dimensions (limite  $1D$  caractérisée par deux constantes de ressort élevées) ou trois dimensions (limite du point, quand les constantes de ressort selon les trois directions sont élevées.).

#### 3.1 Formalisme

Nous considérons un électron confiné dans un potentiel parabolique anisotrope, en interaction avec les modes de phonons de type volumique, dans le formalisme de l'approximation de Fock de Matz et Burkey. Le polaron dans le puits de potentiel parabolique est décrit dans l'approximation de la masse effective pour l'électron. Le réseau considéré comme un continuum est décrit dans le cadre de l'approximation harmonique. Dans l'hamiltonien de Fröhlich  $H_{Fröhlich} = H_e + H_{ph} + H_{int}$  (équation 1.2), nous introduisons le potentiel de confinement  $V(r)$  :

$$\begin{aligned} H_e &= \hat{p}^2 + V(r) \\ H_{ph} &= \sum_k a_k^\dagger a_k \end{aligned}$$

$$H_{int} = \sum_k (V_k a_k e^{ik \cdot r} + V_k^* a_k^\dagger e^{-ik \cdot r})$$

$$V_k = -\frac{i}{k} \left( \frac{4\pi\alpha r_0^3}{V} \right)^{1/2}$$

Nous choisissons un potentiel de type oscillateur harmonique, isotrope dans le plan  $(x, y)$ , avec des constantes de ressort  $\Omega$  dans le plan  $(x, y)$  et  $K$  selon la direction  $z$  respectivement.  $\Omega$  et  $K$  sont les mesures des forces de confinement du potentiel harmonique anisotrope dans le plan  $(x, y)$  et dans la direction  $z$  :

$$V(r) = \Omega^4 \rho^2 + K^4 z^2$$

$$\rho^2 = x^2 + y^2$$

Ainsi, nous pouvons décrire un polaron  $3D$  quand  $\Omega = K = 0$ , un polaron  $2D$  quand  $\Omega = 0$  et  $K \neq 0$ , un polaron  $1D$  quand  $\Omega \neq 0$  et  $K = 0$ , et un polaron dans un point quantique avec valeurs finies de  $\Omega$  et  $K$ .

Nous appliquons le formalisme de Fock de Matz et Burkey décrit au chapitre précédent [48, 21, 22, 23]. Comme spectre modèle, nous choisissons le spectre d'oscillateur harmonique anisotrope de constantes de ressort variationnelles  $\beta$  et  $\gamma$ . Ses valeurs et fonctions propres sont bien connues :

$$H_m = \hat{p}^2 + \beta^4 \rho^2 + \gamma^4 z^2$$

$$\Psi_n(x, y, z) = \frac{\beta\gamma^{1/2}}{\pi^{3/4}} \frac{H_\lambda(\beta x) H_\mu(\beta y) H_\xi(\gamma z)}{(2^\lambda \lambda! 2^\mu \mu! 2^\xi \xi!)^{1/2}} \exp\left(-\frac{\beta^2 \rho^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{\gamma^2 z^2}{2}\right)$$

$$\epsilon_n = \epsilon_\lambda + \epsilon_\mu + \epsilon_\xi = (1 + \lambda + \mu) 2\beta^2 + (\xi + 1/2) 2\gamma^2$$

L'état fondamental  $(0, 0, 0)$  a pour énergie  $\epsilon_{000} = 2\beta^2 + \gamma^2$ . Les états  $(1, 0, 0)$  et  $(0, 1, 0)$  sont dégénérés d'énergie  $\epsilon_{100} = \epsilon_{010} = 4\beta^2 + \gamma^2$ . L'état  $(0, 0, 1)$  a pour énergie  $\epsilon_{001} = 2\beta^2 + 3\gamma^2$ . Le premier état excité de ce spectre modèle est l'état  $(1, 0, 0)$  quand  $\beta < \gamma$  car alors  $\epsilon_{000} < \epsilon_{100} < \epsilon_{010}$ . Par contre, si  $\beta > \gamma$ , c'est l'état  $(0, 0, 1)$  car dans ce cas  $\epsilon_{000} < \epsilon_{010} < \epsilon_{100}$ .

Pour chacun de ces trois états, nous définissons la longueur de confinement dans la direction  $z$ , soit  $L_z = \langle \psi_m | z^2 | \psi_m \rangle^{1/2}$ , et la longueur de confinement dans le plan  $(x, y)$ , soit  $L_\rho = \langle \psi_m | \rho^2 | \psi_m \rangle^{1/2}$ , comme la valeur moyenne de  $z^2$  et comme la valeur moyenne de  $\rho^2$  respectivement, pour la fonction d'onde du potentiel de confinement. Nous définissons la longueur de confinement effective dans la direction  $z$ , soit  $L_{z_{eff}} = \langle \psi_{\beta,\gamma} | z^2 | \psi_{\beta,\gamma} \rangle^{1/2}$ , et la longueur de confinement effective dans le plan  $(x, y)$ , soit  $L_{\rho_{eff}} = \langle \psi_{\beta,\gamma} | \rho^2 | \psi_{\beta,\gamma} \rangle^{1/2}$ , comme la valeur moyenne de  $z^2$  et comme la valeur moyenne de  $\rho^2$  respectivement, pour la fonction d'onde obtenue

après minimisation par rapport aux paramètres variationnels. Nous rappelons les expressions des fonctions d'onde, des longueurs de confinement, ainsi que des longueurs effectives de confinement dans la direction  $z$  et dans le plan  $(x, y)$  :

- Dans l'état fondamental :

$$\psi_{000}(\vec{r}) = \frac{\beta\gamma^{1/2}}{\pi^{3/4}} \exp\left(-\frac{\beta^2\rho^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{\gamma^2 z^2}{2}\right)$$

$$L_z = \frac{1}{\sqrt{2}K} \quad L_\rho = \frac{1}{\Omega}$$

$$L_{zeff} = \frac{1}{\sqrt{2}\gamma} \quad L_{\rho eff} = \frac{1}{\beta}$$

- Dans l'état  $(1, 0, 0)$  :

$$\psi_{100}(\vec{r}) = \frac{\sqrt{2}\beta^2\gamma^{1/2}}{\pi^{3/4}} x \exp\left(-\frac{\beta^2\rho^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{\gamma^2 z^2}{2}\right)$$

$$L_z = \frac{1}{\sqrt{2}K} \quad L_\rho = \frac{\sqrt{2}}{\Omega}$$

$$L_{zeff} = \frac{1}{\sqrt{2}\gamma} \quad L_{\rho eff} = \frac{\sqrt{2}}{\beta}$$

- Dans l'état  $(0, 0, 1)$  :

$$\psi_{001}(\vec{r}) = \frac{\sqrt{2}\beta\gamma^{3/2}}{\pi^{3/4}} z \exp\left(-\frac{\beta^2\rho^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{\gamma^2 z^2}{2}\right)$$

$$L_z = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{K} \quad L_\rho = \frac{1}{\Omega}$$

$$L_{zeff} = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{1}{\gamma} \quad L_{\rho eff} = \frac{1}{\beta}$$

En considérant les expressions des longueurs de confinement  $L_z$  et  $L_\rho$  dans chacun des états pour des forces de potentiels de confinement identiques telles que déterminées par les valeurs de  $K$  et  $\Omega$ , il est vérifié que les fonctions d'onde sont plus étalées dans les états excités que dans l'état fondamental.

A partir de ces trois états, nous générons les expressions variationnelles de type

Matz et Burkey selon la procédure décrite au chapitre précédent. Les quantités suivantes apparaissent lors des calculs :

$$\nu = \frac{\gamma^2(1 - e^{-2\beta^2 t})}{\beta^2(1 - e^{-2\gamma^2 t})} - 1 \quad \nu_0 = \frac{\gamma^2}{\beta^2} - 1$$

- A partir de l'état fondamental  $(0, 0, 0)$  du spectre modèle, nous obtenons :

$$E_{000} = \beta^2 + \frac{\gamma^2}{2} + \frac{\Omega^4}{\beta^2} + \frac{K^4}{2\gamma^2} + F_{000}(\beta, \gamma)$$

Le terme de Fock  $F_{000}(\beta, \gamma)$  est défini en fonction des valeurs des paramètres variationnels par :

$$F_{000}(\beta, \gamma) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\alpha \begin{cases} \gamma \int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{\sqrt{1-e^{-2\gamma^2 t}}} \frac{\tan^{-1}\sqrt{\nu}}{\sqrt{\nu}} & \gamma > \beta \\ \gamma \int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{\sqrt{1-e^{-2\gamma^2 t}}} \frac{\tanh^{-1}\sqrt{-\nu}}{\sqrt{-\nu}} & \gamma < \beta \end{cases}$$

$\beta$  et  $\gamma$  sont déterminés par minimisation de  $E_{000}$ . Quand  $\beta = \gamma$ , nous retrouvons l'expression de  $E_{000}$  obtenue dans les limites de couplages faible [35] et fort [34]. Notre résultat est cependant valide pour tout couplage électron-phonons.

- L'énergie du premier état excité quand  $\beta < \gamma$  est évaluée à partir de l'état  $(1, 0, 0)$  de notre spectre variationnel. Nous la notons  $E_{100}$  pour mémoire :

$$E_{100} = 2\beta^2 + \frac{\gamma^2}{2} + \frac{2\Omega^4}{\beta^2} + \frac{K^4}{2\gamma^2} + F_{100}(\beta, \gamma)$$

Le terme de Fock  $F_{100}(\beta, \gamma)$  présente une singularité en  $\beta^2 = 1/2$  :

$$\begin{aligned} F_{100}(\beta, \gamma) = & -\alpha\sqrt{\frac{2}{\pi}}\gamma \int_0^\infty dt e^{-t} \\ & \left\{ \frac{1}{\sqrt{1-e^{-2\gamma^2 t}}} \left( \frac{\tan^{-1}\sqrt{\nu}}{\sqrt{\nu}} - \frac{1}{4} \frac{\nu+1}{\nu} \left( \frac{\tan^{-1}\sqrt{\nu}}{\sqrt{\nu}} - \frac{1}{\nu+1} \right) \right) \right. \\ & + \frac{e^{2\beta^2 t}}{4} \left( \frac{1}{\sqrt{1-e^{-2\gamma^2 t}}} \frac{\nu+1}{\nu} \left( \frac{\tan^{-1}\sqrt{\nu}}{\sqrt{\nu}} - \frac{1}{\nu+1} \right) \right. \\ & \left. \left. - \frac{\nu_0+1}{\nu_0} \left( \frac{\tan^{-1}\sqrt{\nu_0}}{\sqrt{\nu_0}} - \frac{1}{\nu_0+1} \right) \right) \right\} \\ & - \frac{\alpha}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \gamma \frac{1}{1-2\beta^2} \frac{1}{\nu_0} \left( \frac{\tan^{-1}\sqrt{\nu_0}}{\sqrt{\nu_0}} (1+\nu_0) - 1 \right) \end{aligned}$$

- L'énergie du premier état excité quand  $\beta > \gamma$  est notée  $E_{001}$  car elle est calculée à partir de l'état  $(0, 0, 1)$  du spectre modèle. Le terme de Fock  $F_{001}(\beta, \gamma)$  présente une singularité en  $\gamma^2 = 1/2$  :

$$E_{001} = \beta^2 + \frac{3}{2}\gamma^2 + \frac{\Omega^4}{\beta^2} + \frac{3K^4}{2\gamma^2} + F_{001}(\beta, \gamma)$$

$$\begin{aligned} F_{001}(\beta, \gamma) = & -\alpha\sqrt{\frac{2}{\pi}}\gamma \int_0^\infty dt e^{-t} \\ & \left\{ \frac{1}{\sqrt{1-e^{-2\gamma^2 t}}} \left( \frac{\tanh^{-1}\sqrt{-\nu}}{\sqrt{-\nu}} - \frac{1}{2\nu} \left( 1 - \frac{\tanh^{-1}\sqrt{-\nu}}{\sqrt{-\nu}} \right) \right) \right. \\ & + \frac{e^{2\gamma^2 t}}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{1-e^{-2\gamma^2 t}}} \frac{1}{\nu} \left( 1 - \frac{\tanh^{-1}\sqrt{-\nu}}{\sqrt{-\nu}} \right) \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{\nu_0} \left( 1 - \frac{\tanh^{-1}\sqrt{-\nu_0}}{\sqrt{-\nu_0}} \right) \right) \right\} \\ & + \frac{\alpha}{2}\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\gamma}{1-2\gamma^2} \frac{1}{\nu_0} \left( \frac{\tanh^{-1}\sqrt{-\nu_0}}{\sqrt{-\nu_0}} - 1 \right) \end{aligned}$$

### 3.2 Résultats asymptotiques

Il est intéressant d'étudier les limites asymptotiques de nos expressions, dans les cas de régimes de couplage fort ( $\alpha \gg 1$ ), faible ( $\alpha \ll 1$ ), aussi bien pour un potentiel de confinement isotrope que anisotrope.

Ici, la correction polaronique  $\Delta E_p = E(\alpha = 0) - E(\alpha \neq 0)$  due au couplage électron-phonons est définie à partir de la valeur de l'énergie en absence d'interaction électron-phonons (énergie élastique de l'électron dans le potentiel harmonique anisotrope) :

État	$E_{000}$	$E_{100}$	$E_{001}$
$E_{\text{état}}(\alpha = 0)$	$2\Omega^2 + K^2$	$4\Omega^2 + K^2$	$2\Omega^2 + 3K^2$

L'énergie propre du polaron  $E_p$  ( $E_p = -\Delta E_p$ ) est alors :

$$\begin{aligned} E(000)_p &= E_{000} - K^2 - 2\Omega^2 \\ E(100)_p &= E_{100} - 4\Omega^2 - K^2 \\ E(001)_p &= E_{001} - 2\Omega^2 - 3K^2 \end{aligned}$$



### 3.2.1 Etat fondamental

#### 3.2.1.1 Effet du couplage

- En couplage faible, le potentiel de confinement est rapidement plus fort que l'interaction électron-phonons. Les paramètres variationnels  $\beta$  et  $\gamma$  sont alors déterminés par minimisation du terme cinétique  $\beta^2 + \frac{\gamma^2}{2} + \frac{\Omega^4}{\beta^2} + \frac{K^4}{2\gamma^2}$  de la relation 3.4 :

$$\beta \rightarrow \Omega \quad \gamma \rightarrow K$$

Les résultats coïncident alors exactement avec ceux fournis par la théorie de perturbation du second ordre de type Rayleigh-Schrödinger. Dans la limite de volume ( $\Omega = K \rightarrow 0$ ), nous retrouvons l'énergie du fondamental du polaron libre en  $-\alpha$ .

- En couplage fort, dans la limite  $\alpha \rightarrow \infty$ , le terme de Fock est dominant.

#### 3.2.1.2 Effet du confinement

- Le cas du confinement harmonique isotrope est décrit par la condition  $\Omega = K$ ; la minimisation de l'énergie donne les valeurs correspondantes des paramètres variationnels  $\beta = \gamma$ .

Dans la limite de couplage fort, la fonction d'onde électronique se trouve fortement localisée et  $\beta = \gamma \gg 1$ . L'énergie de l'état fondamental devient :

$$\alpha \gg 1 \text{ ou } K = \Omega \gg 1$$

$$E_{000} = \frac{3\beta^2}{2} + \frac{3K^4}{2\beta^2} - \sqrt{\frac{2}{\pi}}\alpha\beta$$

Il reste à minimiser par rapport à  $\beta \gg 1$ . Si l'effet du confinement est prépondérant sur l'effet de la polarisation ( $\Omega = K \gg \alpha$ ), nous retrouvons l'énergie d'un oscillateur harmonique 3D de constante de ressort  $\Omega = K$  diminuée d'une correction linéaire en  $\alpha$  due à une polarisation statique du réseau autour de la position moyenne de l'électron :

$$\Omega = K \gg \alpha \gg 1$$

$$E_{000} \rightarrow 3K^2 - \sqrt{\frac{2}{\pi}}\alpha K$$

Par contre, si les effets de la polarisation dominent les effets du confinement dû au potentiel harmonique isotrope appliqué ( $\Omega = K \ll \alpha$ ), l'énergie de l'état fondamental tend vers l'énergie du polaron 3D dans la limite de couplage fort

[49, 21], corrigée par l'énergie potentielle harmonique associée avec un électron situé à une distance moyenne déterminée par le rayon de localisation :

$$\alpha \gg \Omega = K \gg 1$$

$$E_{000} \rightarrow -\frac{\alpha^2}{3\pi} + 27\pi \frac{K^4}{4\alpha^2}$$

Dans le cas de couplage électron-phonons faible ( $\alpha \ll 1$ ), si les potentiels de confinement sont forts ( $\Omega = K \gg 1$ ), l'énergie de l'état fondamental du système correspond à celle d'un oscillateur harmonique. La faible correction polaronique est identique au cas du couplage fort avec un potentiel faible :

$$\Omega = K \gg 1 \gg \alpha$$

$$E_{000} \rightarrow 3K^2 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha K$$

Dans la limite de faible confinement ( $\alpha \ll 1$  et  $\Omega = K \ll 1$ ), l'état fondamental est le polaron 3D usuel en régime de couplage faible étudié par les méthodes perturbatives du second ordre [17, 35]. Deux corrections apparaissent : le décalage d'énergie dû à l'énergie propre du polaron en  $-\alpha$  et une correction de masse effective :

$$1 \gg \alpha \Omega = K$$

$$E_{000} \rightarrow -\alpha + \frac{3K^2}{\sqrt{m^*}}$$

$$m^* = \frac{1}{1 - \alpha/6} \approx (1 + \alpha/6)$$

Nous rassemblons les résultats obtenus pour l'énergie de l'état fondamental  $E_{000}$  et pour l'énergie propre dans le cas du potentiel de confinement harmonique isotrope dans le tableau suivant :

Cas	Confinement isotrope	$E_{000}$	$E_p$
	en 3D		
1	$\Omega = K \gg \alpha \gg 1$	$3K^2 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha K$	$-\sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha K$
2	$\alpha \ll 1$ et $\Omega = K \rightarrow \infty$	$3K^2 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha K$	$-\sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha K$
3	$\Omega = K \ll \alpha$	$-\frac{\alpha^2}{3\pi} + 27\pi \frac{K^4}{4\alpha^2}$	$-\frac{\alpha^2}{3\pi}$
	en absence de confinement		
4	$\alpha \ll 1$ et $\Omega = K \rightarrow 0$	$-\alpha + \frac{3K^2}{\sqrt{m^*}}$	$-\alpha$

Dans toutes ces limites isotropes, l'effet de forts potentiels de confinement est d'accroître l'énergie propre du polaron définie comme la différence entre

l'énergie de l'état fondamental et l'énergie élastique. Un confinement isotrope élevé dominant comme dans les cas 1 et 2 fait apparaître l'état fondamental de l'oscillateur harmonique isotrope  $3D$  d'énergie  $3K^2$ . Dans cette limite de confinement selon les trois dimensions, quelle que soit la force du couplage polaire, l'énergie propre  $E_p(0D) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\alpha K$  est supérieure à celle observée en volume  $E_p(3D) = -\alpha$  :  $E_p(0D) > E_p(3D)$ . Par contre, en présence d'un couplage polaire dominant, nous retrouvons l'état fondamental du polaron de volume de couplage fort d'énergie propre en  $\frac{\alpha^2}{3\pi}$ .

- Pour un potentiel de confinement anisotrope ( $\Omega \neq K$ ), la minimisation donne des valeurs  $\beta \neq \gamma$ . En couplage polaire fort ( $\alpha \gg 1$ ), si le potentiel de confinement selon la direction  $z$  est négligeable par rapport au potentiel de confinement dans le plan  $(x, y)$  et par rapport à la force de la polarisation, nous retrouvons l'énergie de l'oscillateur  $2D$  dans le plan  $(x, y)$ . L'effet polaronique en  $\alpha^2$  reflète la polarisation du réseau induite par les oscillations de l'électron. Cette énergie diverge de façon logarithmique avec  $\Omega$ . Le confinement faible dans la direction  $z$  introduit une faible contribution perturbative :

$$\Omega \gg \alpha \gg K \gg 1$$

$$E_{000} \rightarrow 2\Omega^2 - \frac{\alpha^2 \ln^2(2\Omega)}{\pi} + \frac{\pi K^4}{4\alpha^2 \ln^2(2\Omega)}$$

Quand la force de la polarisation est la plus faible, nous obtenons l'énergie d'un oscillateur harmonique anisotrope corrigée par un terme perturbatif divergent dû à la polarisation :

$$\Omega \gg K \gg \alpha, 1$$

$$E_{000} \rightarrow 2\Omega^2 + K^2 - \alpha K \sqrt{\frac{2}{\pi}} \ln \frac{2\Omega}{K}$$

En couplage polaire faible ( $\alpha \ll 1$  et  $K \ll 1$  et  $\Omega \gg 1$ ), la correction due à la polarisation est linéaire en  $\alpha$  et diverge dans la limite  $1D$  ( $\Omega \gg K$ ) :

$$\Omega \gg 1 \gg K, \alpha$$

$$E_{000} \rightarrow 2\Omega^2 + K^2 - \frac{\alpha}{2} \ln 2 - \alpha \ln \Omega + \frac{\alpha}{2} \gamma_{euler}$$

Dans la limite de confinement selon deux directions identifiée par  $\Omega \gg K \gg 1$ , le polaron a un comportement  $1D$ . Il est connu que l'énergie de l'état fondamental de Fröhlich diverge en  $1D$  en l'absence de coupure de phonon de Debye. De fait, nous obtenons une correction due à la polarisation en  $c = \ln(2\Omega/K)$  quand le potentiel de confinement dans le plan  $(x, y)$  croît. Il en résulte que l'énergie propre du polaron augmente rapidement avec la force du confinement  $2D$ .

- Lorsque le potentiel de confinement est si fort dans la direction  $z$  que le mouvement de l'électron dans cette direction est pratiquement impossible, le polaron a un caractère  $2D$ , isotrope dans le plan  $(x, y)$  [30, 50].

En couplage fort ( $\alpha \gg 1$ ), nous obtenons l'énergie harmonique. Un terme dû à la polarisation ajustée à la position moyenne de l'électron vient la diminuer :

$$K \gg \Omega \gg \alpha \gg 1$$

$$E_{000} \rightarrow K^2 + 2\Omega^2 - \alpha\Omega\sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

Pour  $K \gg \alpha \gg \Omega \gg 1$ , nous obtenons l'énergie harmonique  $1D$  diminuée d'un terme quadratique en  $\alpha$  qui représente l'énergie propre du polaron de Fröhlich  $2D$  en couplage fort :

$$K \gg \alpha \gg \Omega \gg 1$$

$$E_{000} \rightarrow K^2 - \frac{\alpha^2\pi}{8} + \frac{8\Omega^4}{\pi\alpha^2}$$

Il s'agit du résultat de type Landau-Pekar pour le polaron  $2D$  en couplage fort [34, 44]. Le dernier terme est une correction introduite par le faible couplage harmonique dans le plan  $(x, y)$ .

En couplage faible ( $\alpha \ll 1$ ), l'énergie élastique de l'électron dans un potentiel harmonique  $1D$  en  $z$  est diminuée par l'énergie propre du polaron  $2D$  et le terme de masse effective [49, 44] :

$$K \gg 1 \gg \alpha, \Omega$$

$$E_{000} \rightarrow K^2 - \frac{\pi}{2}\alpha + 2\Omega^2 \left(1 - \frac{\pi}{16}\alpha\right)$$

$$m^* = \frac{1}{(1 - \pi\alpha/8)}$$

C'est le résultat bien connu du polaron  $2D$  en couplage faible dans l'approximation des phonons de volume, c'est à dire en ignorant la contribution des modes de phonons de surface. Le même résultat est obtenu dans le modèle  $2D$  idéal du potentiel du puits infini, par une méthode variationnelle [51], ainsi que par la théorie des perturbations [35] (équations 20 – 21).

### 3.2.2 Premier état excité

La méthode présentée nous permet d'étudier le premier état excité du polaron. Dans la région des paramètres variationnels où  $\beta > \gamma$ , nous calculons une expression variationnelle en utilisant l'état modèle  $(0, 0, 1)$ . Une première singularité a lieu dans ce cas en  $\gamma^2 = 1/2$ . Dans la région des paramètres variationnels où  $\beta < \gamma$ , le terme de Fock de l'expression variationnelle obtenue à partir de l'état modèle  $(1, 0, 0)$  présente une première singularité en  $\beta^2 = 1/2$ .

#### 3.2.2.1 Etats excités : limite isotrope

Dans la limite de potentiel de confinement isotrope, les trois directions sont équivalentes et  $\beta = \gamma$ . Les trois premiers états de notre spectre modèle sont dégénérés, avec  $\epsilon_{100} = \epsilon_{010} = \epsilon_{001} = 5\beta^2$ . L'expression variationnelle de l'état excité du polaron, s'il existe, se réduit à [20] :

$$E_{exc} = \frac{5}{2}\beta^2 + \frac{5}{2}\frac{\Omega^4}{\beta^2} - \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\beta}{6}\alpha \int_0^\infty dt e^{-t(1-2\beta^2)} \left\{ \left( \frac{5e^{-2\beta^2 t} + 1}{\sqrt{1 - e^{-2\beta^2 t}}} \right) - 1 \right\} + \frac{\beta}{6} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\alpha}{2\beta^2 - 1}$$

La singularité en  $\gamma^2 = \beta^2 = 1/2$  est isolée dans la seconde partie du terme de Fock, en dehors de l'intégrale.

- Dans la limite de couplage fort, la fonction d'onde électronique est fortement localisée, si bien que  $\beta = \gamma \gg 1$ . Si le confinement est supérieur à la polarisation, nous obtenons l'énergie de l'état excité de l'oscillateur harmonique isotrope corrigée par l'effet de la polarisation. C'est le résultat de la théorie perturbative du second ordre en confinement fort [52] :

$$\Omega = K \gg \alpha \gg 1$$

$$E_{exc} \rightarrow 5\Omega^2 - \frac{11}{12} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha \Omega$$

Quand l'effet de la polarisation est prédominant, nous obtenons le premier état excité du polaron. Son énergie propre est inférieure à celle obtenue dans son état fondamental [52]:

$$\alpha \gg \Omega = K \gg 1$$

$$E_{exc} \rightarrow -\frac{121\alpha^2}{720\pi} + \frac{4500\pi\Omega^4}{121\alpha^2}$$

- Dans la limite de couplage polaire faible, pour un confinement faible, nous obtenons un comportement de masse effective. Dans cette région à gauche de la singularité, nous obtenons une borne supérieure à l'énergie de l'état fondamental, d'où la même masse effective :

$$\begin{aligned}
 1 &\gg \alpha, K = \Omega \\
 E_{exc} &\rightarrow -\alpha + 5\Omega^2 \left(1 - \frac{\alpha}{12}\right) \\
 E_p &= -\alpha \\
 m^* &= 1 + \frac{\alpha}{6}
 \end{aligned}$$

Pour un confinement fort, l'énergie du premier état excité de l'oscillateur harmonique isotrope est corrigée par une faible contribution de la polarisation, comme dans le cas du couplage polaire faible ( $K = \Omega \gg 1 \gg \alpha$ ).

En résumé, dans la limite de confinement isotrope, lorsque la force du confinement domine, nous obtenons l'énergie du premier état excité de l'oscillateur harmonique corrigée par l'effet de la polarisation du réseau en  $\alpha\Omega$ . Si la force de l'interaction électron-phonons domine, nous retrouvons les énergies du polaron en régime de couplage fort, à l'état fondamental et dans son premier état excité. En régime de couplage faible et de confinement faible, nous obtenons un comportement de masse effective. La masse effective du polaron est supérieure à celle de l'électron dans la bande de conduction. Dans tous les cas, la correction polaronique diminue dans le premier état excité, du fait de l'étalement de la fonction d'onde.

### 3.2.2.2 Premier état excité : limite 1D ( $\Omega \gg K$ )

Dans cette limite,  $\beta \gg \gamma$ .

- Dans la limite de couplage fort caractérisé par  $\Omega \gg K \gg \alpha, 1$ , nous obtenons l'énergie du premier état excité de l'oscillateur harmonique anisotrope corrigée par l'effet du couplage électron-phonons :

$$\begin{aligned}
 \Omega &\gg K \gg \alpha, 1 \\
 E_{001} &\rightarrow 2\Omega^2 + 3K^2 - \frac{3}{4}\alpha K \sqrt{\frac{2}{\pi}} \ln\left(\frac{2\Omega}{K}\right)
 \end{aligned}$$

L'effet du confinement étant prédominant, la correction polaronique est diminuée par rapport à celle de l'état fondamental, quelle que soit la force de

couplage électron-phonons.

Pour  $\Omega \gg \alpha \gg K \gg 1$ , nous obtenons un état excité d'oscillateur harmonique 2D dans le plan  $(x, y)$  :

$$\Omega \gg \alpha \gg K \gg 1$$

$$E_{001} \rightarrow 2\Omega^2 - \frac{3}{16} \frac{\alpha^2}{\pi} \ln^2(2\Omega) + \frac{12\pi K^4}{\alpha^2 \ln^2(2\Omega)}$$

- Dans la limite de couplage faible :

$$\Omega \gg 1 \gg \alpha, K$$

$$E_{001} \rightarrow 2\Omega^2 - \frac{\alpha}{2} \ln 2 - \alpha \ln \Omega + \frac{\alpha \gamma_{euler}}{2} + 3K^2$$

Il s'agit de l'état excité de l'oscillateur harmonique 1D en  $z$ .

### 3.2.2.3 Premier état excité : limite 2D ( $K \gg \Omega$ )

- $K \gg \Omega \gg \alpha, 1$  :

$$E_{100} \rightarrow K^2 + 4\Omega^2 - \frac{3}{4} \alpha \sqrt{\frac{\pi}{2}} \Omega$$

- $\alpha \gg K \gg \Omega \gg 1$  ou  $K \gg \alpha \gg \Omega \gg 1$  :

$$E_{100} \rightarrow -\frac{9\pi}{16^2} \alpha^2 + K^2 + \frac{4 \cdot 16^2 \Omega^4}{9\pi \alpha^2}$$

- A gauche de la singularité, on obtient un état excité d'oscillateur 2D dans le plan  $(x, y)$  :

$$K \gg 1 \gg \alpha, \Omega$$

$$E_{100} \rightarrow K^2 - \frac{\alpha\pi}{2} + 4\Omega^2 \left(1 - \frac{\pi\alpha}{16}\right)$$

$$m^* \approx 1 + \frac{\pi\alpha}{8}$$

La masse effective est la même qu'à l'état fondamental.

Nous avons montré que la méthode proposée reproduit les résultats des limites de couplages faible et fort obtenus par la théorie de perturbation standard et la théorie de couplage fort respectivement. En outre, nous avons pu étudier l'effet de l'anisotropie du confinement dans les cas limites, de volume, du puits, du fil et du point. Ces résultats asymptotiques nous encouragent à appliquer la méthode, de façon numérique, pour tout couplage et tout confinement.

### 3.3 Résultats numériques

Nous calculons l'énergie de l'état fondamental et du premier état excité pour tout potentiel de confinement, et tout couplage.

Pour étudier l'effet d'un confinement anisotrope sur l'énergie du polaron, nous présentons l'énergie propre du polaron libre en fonction de la longueur de confinement  $L_z$  dans la direction  $z$  aux **figures 1 et 2**, puis en fonction de la longueur de confinement  $L_\rho$  dans le plan  $(x, y)$  aux **figures 3 et 5**.

Dans le cas du confinement  $1D$  selon la direction  $z$ , nous nous plaçons en situation de confinement faible dans le plan  $(x, y)$ , tel que la longueur de confinement  $L_\rho$  soit grande devant le rayon polaronique. Ainsi,  $L_\rho = 2$  à la **figure 1** et  $L_\rho = 1.4$  à la **figure 2**. Quand le confinement est faible selon  $z$ , nous retrouvons un polaron tridimensionnel d'énergie propre  $-\alpha$ . Il se localise selon  $z$  quand  $L_z$  diminue, jusqu'à la limite asymptotique du polaron  $2D$  d'énergie propre  $-\frac{\alpha\pi}{2}$ . La valeur absolue de l'énergie propre croît de façon abrupte avec le degré d'anisotropie par l'intermédiaire de l'augmentation des potentiels de confinement, jusqu'à sa valeur asymptotique  $2D$  quand  $L_z$  tend vers zéro. Cet effet n'est important que lorsque la longueur de confinement  $L_z$  devient inférieure au rayon du polaron, c'est à dire quand  $L_z < 1$ . Nous observons le même type de comportement à différentes forces de couplage  $\alpha$ . Ainsi, le confinement  $1D$  accroît l'effet de l'interaction électron-phonons.

Dans la région à gauche de la singularité, l'énergie obtenue à partir de l'état  $(1, 0, 0)$  est une borne supérieure de l'état fondamental. Nous ne trouvons pas d'état excité. A droite de la singularité située en  $\beta^2 = 1/2$ , l'énergie propre du polaron est moins élevée que dans l'état fondamental, mais présente le même comportement (**figure 2**). Le polaron se localise selon  $z$  quand  $L_z$  diminue, jusqu'à la limite de l'énergie de l'état excité du polaron  $2D$ . Ce comportement est observé à différentes valeurs de la constante de couplage électron-phonons. Il semble donc que le confinement  $1D$  a pour effet de renforcer l'interaction polaire, aussi bien dans l'état fondamental que dans l'état excité.

L'effet du confinement dans le plan  $(x, y)$  est étudié en prenant une force de confinement faible dans la direction  $z$  de sorte que  $L_z$  soit supérieure au rayon du polaron. Ainsi,  $L_z = 2$  à la **figure 3**,  $L_z \rightarrow \infty$  à la **figure 4** et  $L_z = 1.22$  à la **figure 5**. Dans l'état fondamental considéré à la **figure 3**, pour des valeurs élevées de  $L_\rho$ , nous retrouvons le polaron  $3D$  d'énergie propre  $-\alpha$ . Quand  $L_\rho$  décroît, le polaron devient asymptotiquement  $1D$  en deçà du rayon polaronique ( $L_\rho < 1$ ). Quand la force du confinement dans le plan  $(x, y)$  augmente, la valeur absolue de l'énergie propre polaronique croît rapidement à mesure que  $L_\rho$  décroît, selon une divergence logarithmique, tel que prévu lors de notre étude analytique préalable. Ce comportement est d'autant plus marqué que la constante de couplage polaire



$\alpha$  est plus élevée. Ainsi, le confinement  $2D$  renforce de façon dramatique l'effet de l'interaction électron-phonons.

A la **figure 4**, nous portons la variation du rapport  $\frac{E_2}{\alpha}$  en fonction de  $L_\rho$  à l'état fondamental, pour  $L_z = \text{constante} = 0.7$ . Dans la limite  $3D$ , il est égal à 1. Il reste indépendant de  $\alpha$  jusqu'à un certain degré de confinement dans le plan, comme le prédisent les théories perturbatives, avec  $E_p \rightarrow \alpha$ . Le comportement se différencie d'abord lentement de cette limite perturbative quand le confinement s'accroît, puis de façon très rapide dès que  $L_\rho$  devient faible devant le rayon du polaron. Cette valeur de  $L_\rho$  est d'autant plus élevée que le couplage polaire est fort. Le confinement a un effet d'augmentation du couplage polaire effectif.

A droite de la singularité en  $\gamma^2 = 1/2$ , l'énergie calculée à partir de l'état modèle  $(0, 0, 1)$  représente le premier état excité du potentiel harmonique à la **figure 5**. L'énergie propre est moins élevée que dans l'état fondamental, mais présente le même comportement qualitatif. Lorsque le confinement s'accroît la valeur absolue de l'énergie propre polaronique croît rapidement à mesure que  $L_\rho$  décroît, selon une divergence logarithmique. Elle tend asymptotiquement vers la valeur  $1D$ . Ainsi, le confinement selon deux directions a pour effet d'accroître fortement l'interaction électron-phonons.

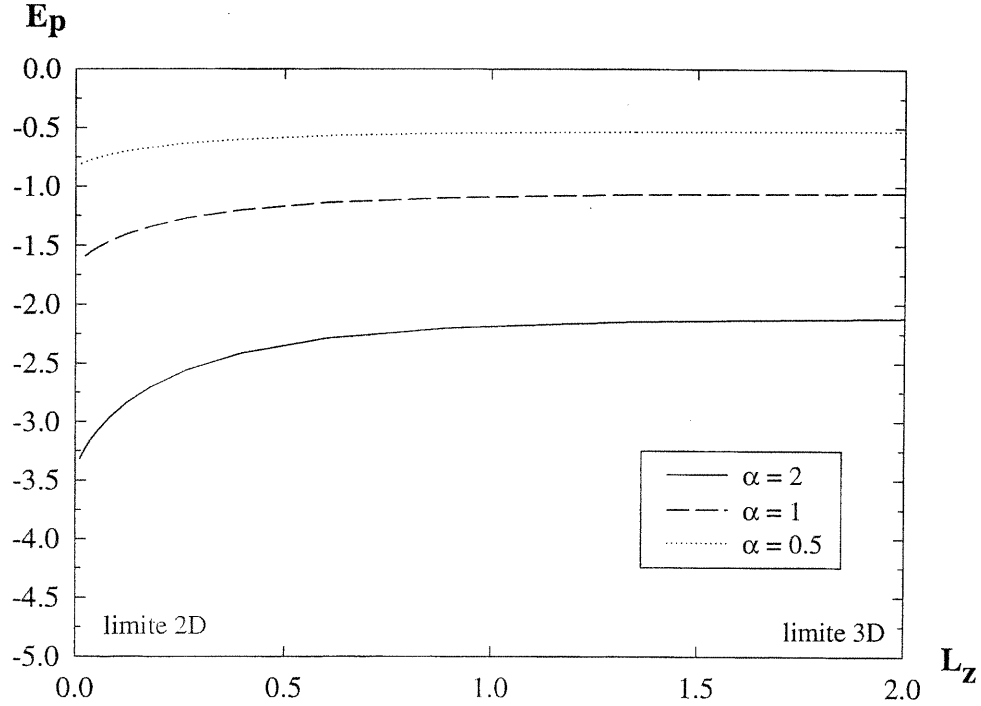


Figure 1. Energie propre du polaron dans son état fondamental en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 2$  ( $\Omega = 0.5$ ) et  $\alpha = 0.5, 1, 2$ .

Afin de comparer l'effet polaronique dans les systèmes à dimensions réduites à l'effet en volume, nous utilisons l'effet polaronique relatif (Relative Polaronic Enhancement). Il s'agit du rapport entre l'énergie propre en présence de confinement et l'énergie propre en volume [32] :

$$RPE = \frac{E_p(\text{confinement})}{E_p(\text{volume})} \quad (3.1)$$

Par définition, un rapport  $RPE$  unitaire caractérise la limite  $3D$ . Il ressort qu'à l'état fondamental, l'effet polaronique augmente fortement dès qu'une des longueurs de confinement devient inférieure au rayon polaronique. En outre, il est plus important dans la limite du polaron  $1D$  obtenue par un confinement selon deux directions (**figures 6 et 7. (a)**) que dans la limite  $2D$  pour un confinement selon une direction unique (**figures 7.(b), 8**). La **figure 6** donne l'évolution du renforcement polaronique en fonction du confinement dans le plan  $(x, y)$ . Il est indépendant de la valeur

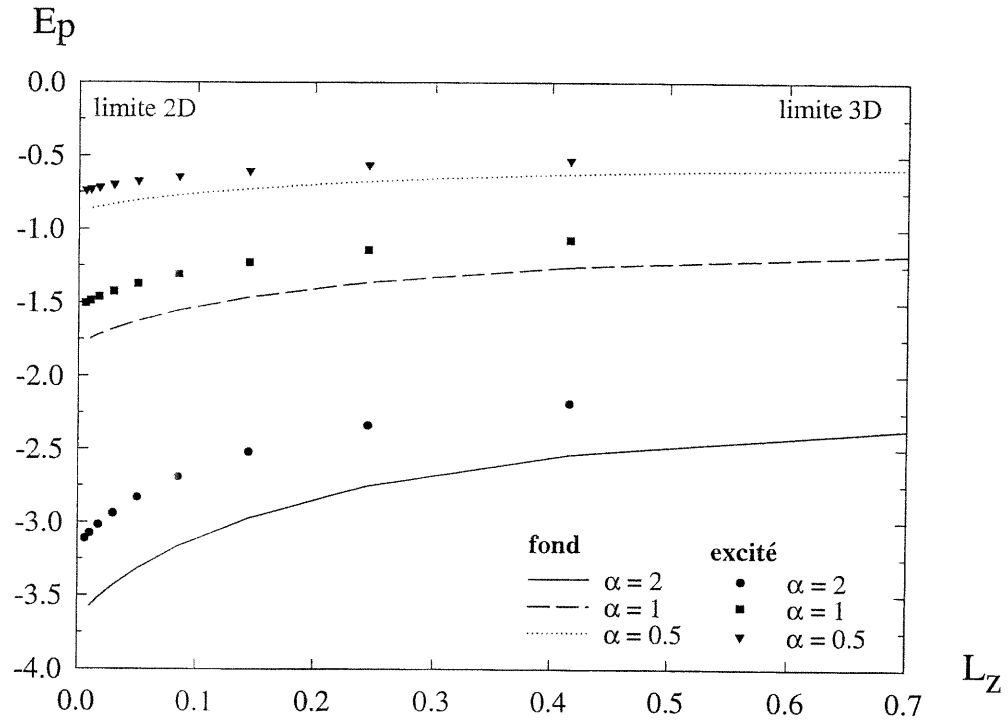


Figure 2. Energie propre du polaron en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 1.4$ , dans son état fondamental ( $\Omega = 0.7$ ), et dans son premier état excité ( $\Omega = 1$ ), pour  $\alpha = 0.5, 1, 2$ .

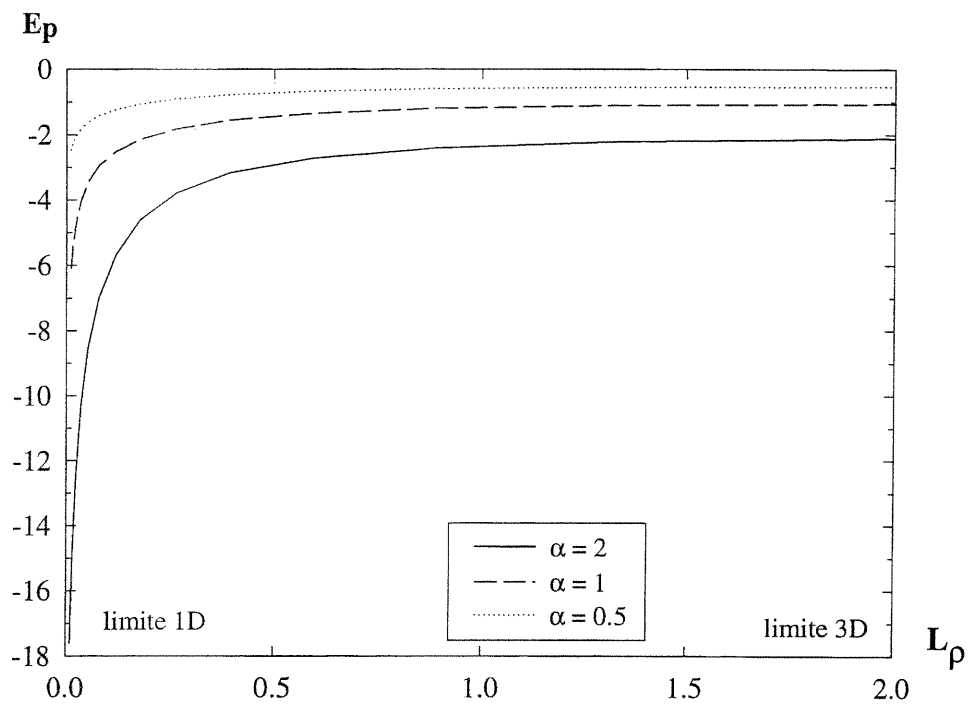


Figure 3. Energie propre du polaron dans son état fondamental en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 2$  ( $K = 0.35$ ) et  $\alpha = 0.5, 1, 2$ .

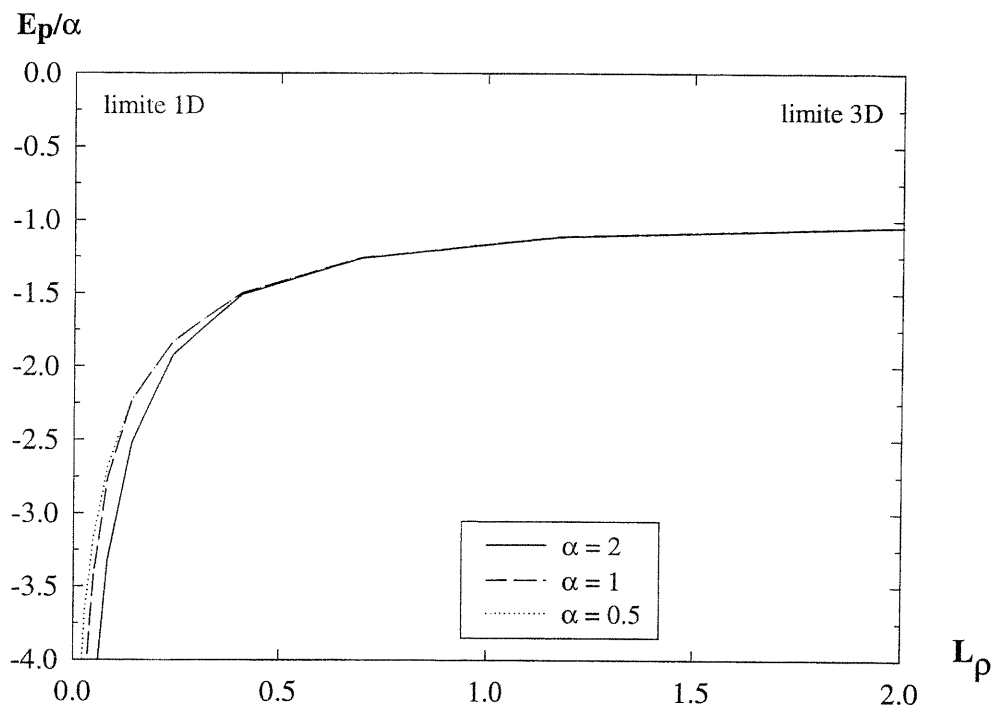


Figure 4. Rapport  $E_p/\alpha$  à l'état fondamental en fonction de  $L_\rho$  pour  $K = 0$  ( $L_z \rightarrow \infty$ ) et  $\alpha = 0.5, 1, 2$ .

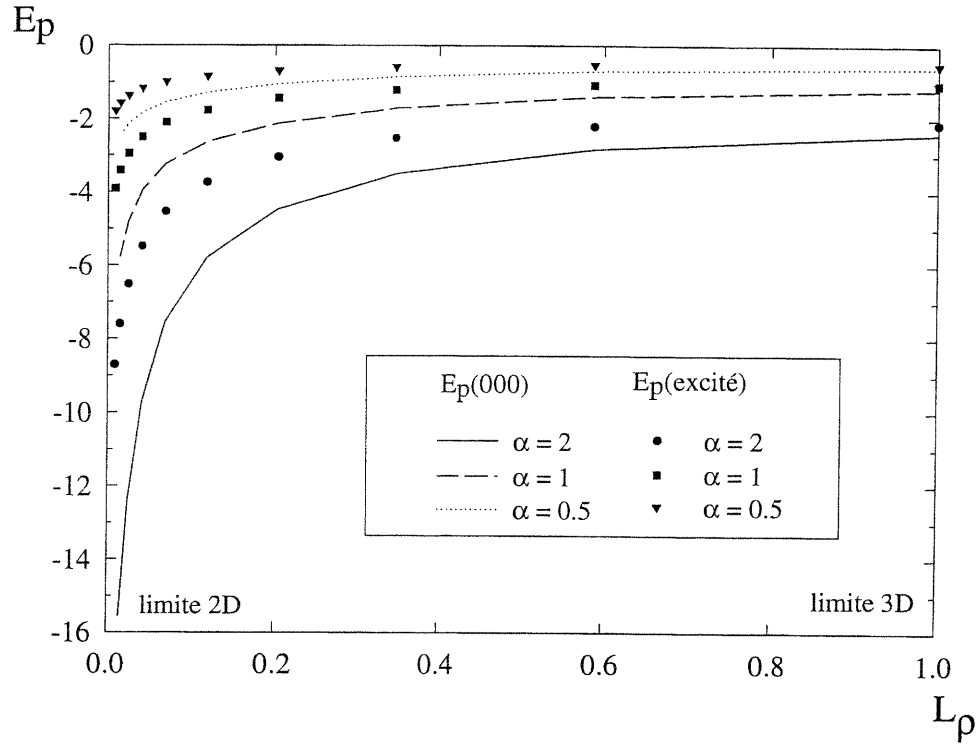


Figure 5. Energie propre du polaron en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 1.22$ , dans son état fondamental ( $K = 0.57$ ), et dans son premier état excité ( $K = 1.0$ ), pour  $\alpha = 0.5, 1, 2$ .

de la constante de couplage  $\alpha$  jusqu'à une longueur de confinement de l'ordre de la moitié du rayon du polaron. Pour des longueurs de confinement plus faibles, il est d'autant plus important dans les matériaux nominalemeent moins polaires ( $\alpha$  faible), comme en témoigne la **figure 7. (a)**. La **figure 8** présente l'évolution du renforcement polaronique en fonction du confinement dans la direction  $z$ . Le renforcement polaronique est évident dès que la longueur de confinement dans la direction  $z$  devient inférieure au rayon du polaron. L'effet de la force du couplage polaire est faible dans la limite  $2D$ , par rapport à l'effet du confinement. En effet, la contribution du couplage polaire ne devient dominante que pour des valeurs de  $\alpha$  supérieures à 3 (**figure 7.(b)**).

Dans la limite du point, caractérisée par des potentiels de confinement élevés dans les trois directions, la **figure 9** montre qu'en couplage faible ( $\alpha = 1$ ), la variation du rapport RPE avec la longueur de confinement  $L_\rho$  est indépendante de la dimensionnalité du point, comme prévu par la théorie de perturbation appliquée au régime de couplage faible. Par contre, en couplage fort, la variation du coefficient RPE avec  $L_\rho$  devient sensible à la dimensionnalité quand la taille du point décroît (**figure 10**).

L'effet est d'autant plus marqué que la constante de couplage  $\alpha$  est élevée, en particulier dans la limite  $1D$  (**figures 6 et 7. (a)**). A la **figure 11.(a)**, nous représentons l'énergie propre à l'état fondamental en fonction du paramètre de couplage  $\alpha$ , pour différentes valeurs du potentiel de confinement  $2D$  :  $\Omega = 1.0$  donne  $L_\rho = 1.0$ ,  $\Omega = 5.0$  donne  $L_\rho = 0.2$  et  $\Omega = 10.0$  donne  $L_\rho = 0.1$ . Le potentiel de confinement  $K$  dans la direction  $z$  est fixé à 1.0, de sorte que  $L_z = 0.7$ . Nous observons qu'en couplage faible, l'énergie propre tend vers  $-\alpha$ , comme prévu dans la théorie des perturbations. Quand le couplage s'accroît, l'énergie propre présente une augmentation rapide, proportionnellement plus importante que le confinement est plus fort et amène le système vers la limite  $1D$ . Ceci confirme encore que le confinement fait accroître l'énergie propre du polaron et que cet effet est d'autant plus marqué que l'anisotropie du système est élevée.

Dans le premier état excité, pour un confinement fixe selon  $z$  tel que  $L_z = 1.2$ , la **figure 12** montre que le rapport RPE augmente avec la force du couplage polaronique et avec le degré de confinement dans le plan  $(x, y)$ . Dans la limite  $1D$ , l'effet polaronique présente une augmentation logarithmique. Le RPE est plus faible dans le premier état excité que dans l'état fondamental dans la limite  $1D$ .

Pour un confinement fixé dans le plan  $(x, y)$ , avec  $L_\rho = 1.4$ , à la **figure 13**, le RPE augmente avec  $\alpha$  et avec le confinement selon  $z$ . Dans la limite  $3D$ , il devient indépendant de  $\alpha$  dès que la longueur de confinement  $L_z$  devient suffisamment faible. Le RPE dans l'état fondamental est plus important que dans l'état excité.

Afin de mieux cerner l'effet de la dimensionalité, nous suivons l'évolution des longueurs de confinement *effectives*. A l'état fondamental, elles sont respectivement  $L_{\rho_{eff}} = 1/\beta$  et  $L_{z_{eff}} = 1/(\sqrt{2}\gamma)$  dans le plan  $(x, y)$  et dans la direction  $z$ . Le cas du confinement selon deux directions dans le plan  $(x, y)$  ( $\Omega \gg K$ ) est présenté à la **figure 14.(a)**. Pour des valeurs du couplage polaire  $\alpha$  inférieures à 5, lorsque le confinement selon le plan  $(x, y)$  est réduit ( $L_\rho \geq 1$ ), on observe la divergence de la longueur de confinement effective avec  $L_{z_{eff}} = L_z \rightarrow \infty$ , due à l'absence de potentiel de confinement appliqué en  $z$ . Puis, l'application d'un potentiel de confinement important en  $(x, y)$  ( $L_\rho < 1$ ) a un effet de confinement dans la direction  $z$  suggéré par le fait que  $L_{z_{eff}}$  prend une valeur finie.

Pour des couplages polaires plus élevés, la divergence de  $L_{z_{eff}}$  est totalement évitée, quelque soit la force du confinement appliqué en  $(x, y)$  :  $L_{z_{eff}}$  a une valeur finie caractéristique du régime de couplage fort, et décroît avec la longueur de confinement  $L_\rho$  en  $(x, y)$ . Ainsi il apparaît que le couplage polaire a un effet de confinement en  $z$  de même que la force du potentiel en  $(x, y)$ . La cassure de la courbe donnant l'évolution de  $L_{z_{eff}}$  en fonction de  $L_\rho$  pour une valeur de  $\alpha = 3$  à la **figure 14.(a)** est indicatrice de la valeur de confinement  $2D$  dans le plan  $(x, y)$  qui a un effet de confinement dans la direction  $z$  : à partir de confinement  $2D$  en  $(x, y)$  suffisamment élevé, un effet de confinement est induit dans la direction  $z$ ; la longueur effective de confinement en  $z$  dépend alors de la force du confinement imposés en  $(x, y)$  : elle est fortement réduite, de la valeur associée à l'absence de confinement appliqué en  $z$  à une valeur finie qui décroît quand le confinement en  $(x, y)$  est augmenté.

Dans la limite ( $2D$ ) du puits, caractérisée par un confinement important selon  $z$  avec  $L_\rho \gg 1 \gg L_z$  (**figure 14.(b)**), nous observons la divergence de  $L_{\rho_{eff}}$  pour des valeurs de  $\alpha$  inférieures à un certain seuil, quand la longueur de confinement en  $z$  est inférieur au rayon polaronique. Le couplage polaire représenté par ces valeurs de  $\alpha$  est en fait insuffisamment élevé pour induire un effet de confinement dans le plan  $(x, y)$ ; dans cette région, nous avons bien  $L_{\rho_{eff}} = L_\rho \rightarrow \infty$  en l'absence de confinement dans le plan  $(x, y)$  ( $\Omega = 0$ ). Par contre, pour des valeurs de couplage plus élevées,  $L_{\rho_{eff}}$  reste finie : le couplage polaire induit un fort effet de confinement dans le plan  $(x, y)$ . Cet effet augmente quand la largeur du puits  $L_z$  diminue. Dans cette région de couplage, l'augmentation du potentiel de confinement selon la direction  $z$  provoque le renforcement de l'effet confinement effectif dû au couplage polaire dans le plan  $(x, y)$ .

Les **figures 15** donnent les variations des longueurs effectives en fonction du confinement appliqué, pour différentes forces de couplage polaire, dans l'état excité. Pour un



potentiel de confinement dans le plan  $(x, y)$  fixé, il apparaît qu'en couplage faible,  $L_{\rho_{eff}} = L_{\rho} = \sqrt{2}/\Omega$ . Par contre, en couplage fort,  $L_{\rho_{eff}} < L_{\rho}$  : la longueur de confinement effective dans le plan  $(x, y)$  diminue avec la force du couplage et avec la force du confinement dans la direction  $z$  (**figure 15.(a)**). Nous observons le même phénomène pour la longueur de confinement effective  $L_{z_{eff}}$  dans la direction  $z$  à potentiel de confinement  $L_z$  fixé (**figure 15.(b)**). Comme étudié par [53] pour l'état fondamental, il ressort donc que le couplage polaire produit un effet de confinement.

### 3.4 Conclusion

Nous avons obtenu une expression variationnelle analytique de l'énergie de l'état fondamental et du premier état excité d'un polaron de Fröhlich confiné dans un puits de potentiel parabolique anisotrope, complétant ainsi les résultats de la référence [32]. Leur approche, dans le cadre de la théorie de l'intégrale de chemin de Feynman-Haken, ne traite que le cas de confinement isotrope : fil quantique ( $K = 0$ ) ou point isotrope ( $\Omega = K$ ) et leur méthode ne permet pas d'obtenir les masses effectives polaroniques.

Ici, dans le cadre des hypothèses de Fröhlich, notre expression est valide dans toute la gamme de couplage et pour tout degré de confinement. Les différentes limites asymptotiques reproduisent les expressions obtenues antérieurement dans les limites de couplage faible et fort, pour différents degrés de confinement. Notre approche fournit une description unifiée de ces résultats ainsi que des cas de couplage intermédiaire, et permet d'étudier l'effet de l'anisotropie du confinement.

Nous avons mis en évidence qu'un confinement a pour effet d'augmenter l'énergie propre du polaron et qu'un confinement anisotrope est encore plus efficace qu'un confinement isotrope. En particulier, un confinement selon deux dimensions ( $2D$ ) fait apparaître un polaron  $1D$  dont l'énergie propre croît de façon logarithmique. Un confinement selon une direction ( $1D$ ) donne lieu à un polaron  $2D$  d'énergie propre augmentée. Cet accroissement de l'énergie propre du polaron par confinement peut être associé à la réduction de l'espace de phase de l'électron, semblable à l'effet de localisation induit en régime de couplage polaire fort.

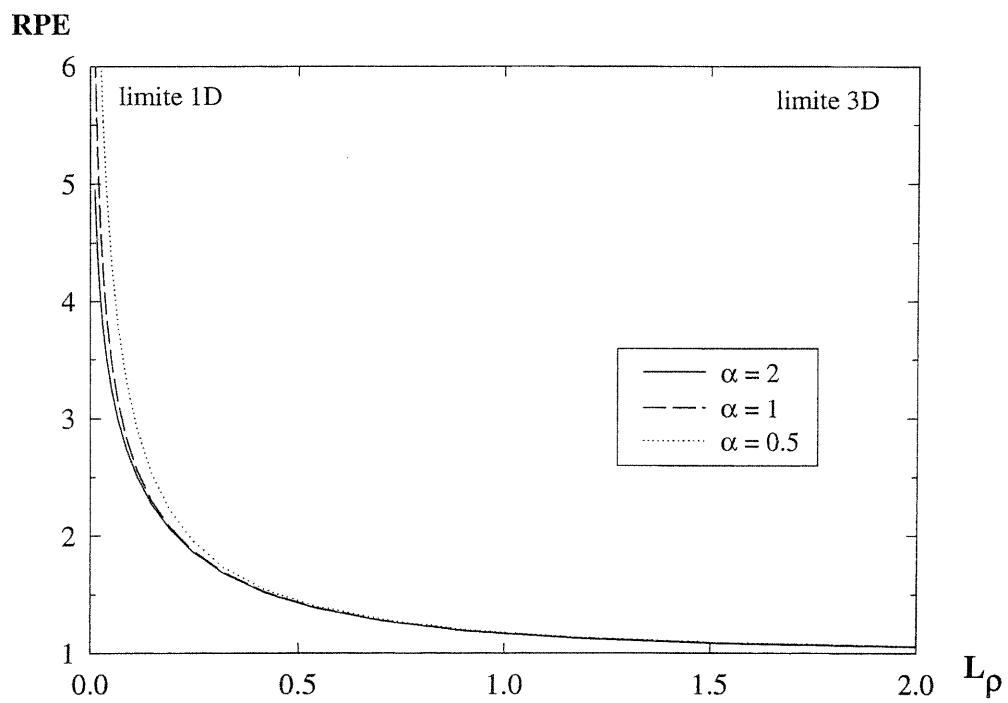


Figure 6. RPE à l'état fondamental en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 2$  ( $K = 0.35$ ) et  $\alpha = 0.5, 1, 2$ .

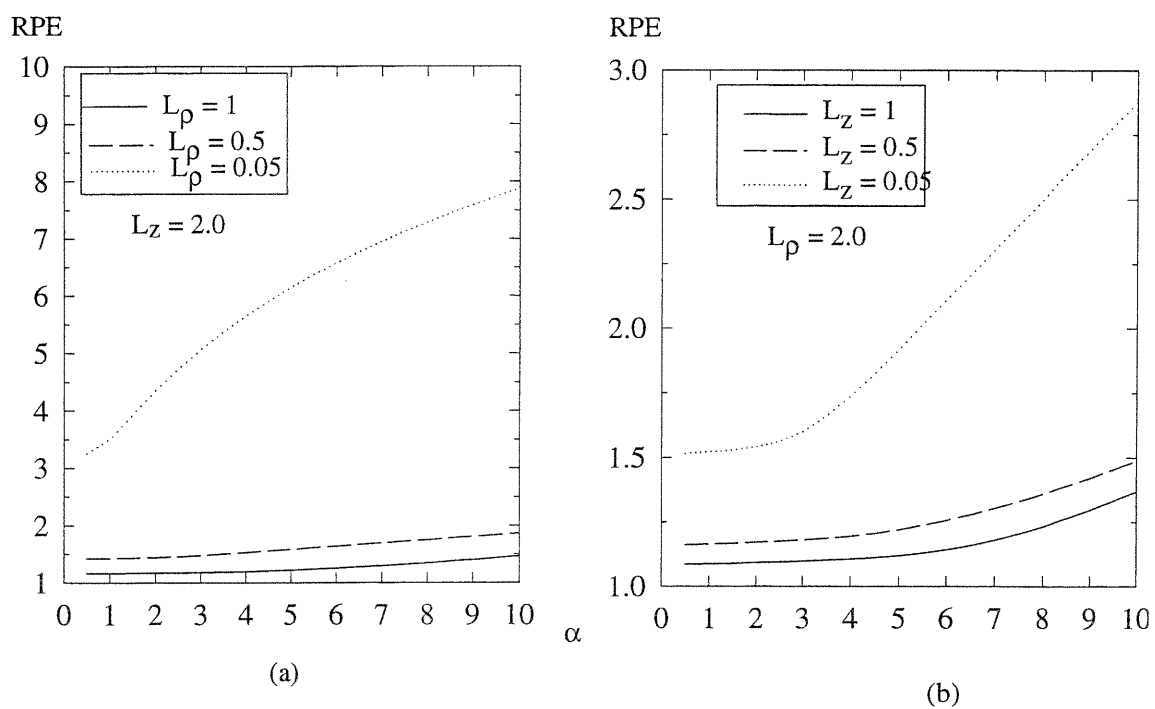


Figure 7. RPE à l'état fondamental en fonction de  $\alpha$ . (a) :  $L_z = 2$  et  $L_\rho = 0.05, 0.5, 1$  ( $\Omega = 20, 2, 1$ ). (b) :  $L_\rho = 2$  et  $L_z = 1, 0.5, 0.05$ .

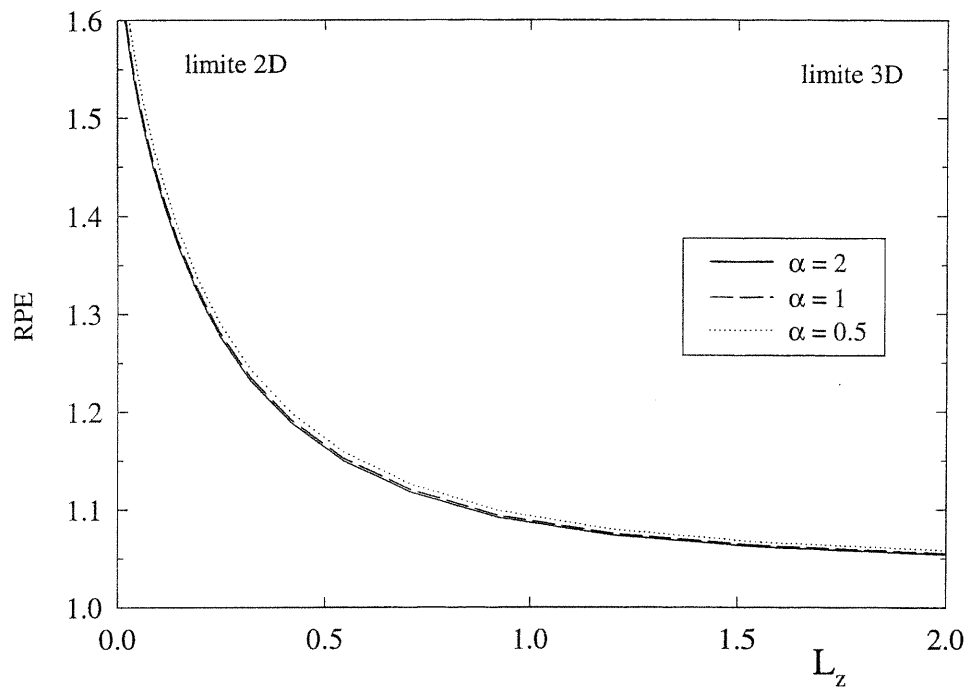


Figure 8. RPE à l'état fondamental en fonction de  $L_z$  avec  $L_\rho = 2$  ( $\Omega = 0.5$ ) et  $\alpha = 0.5, 1, 2$

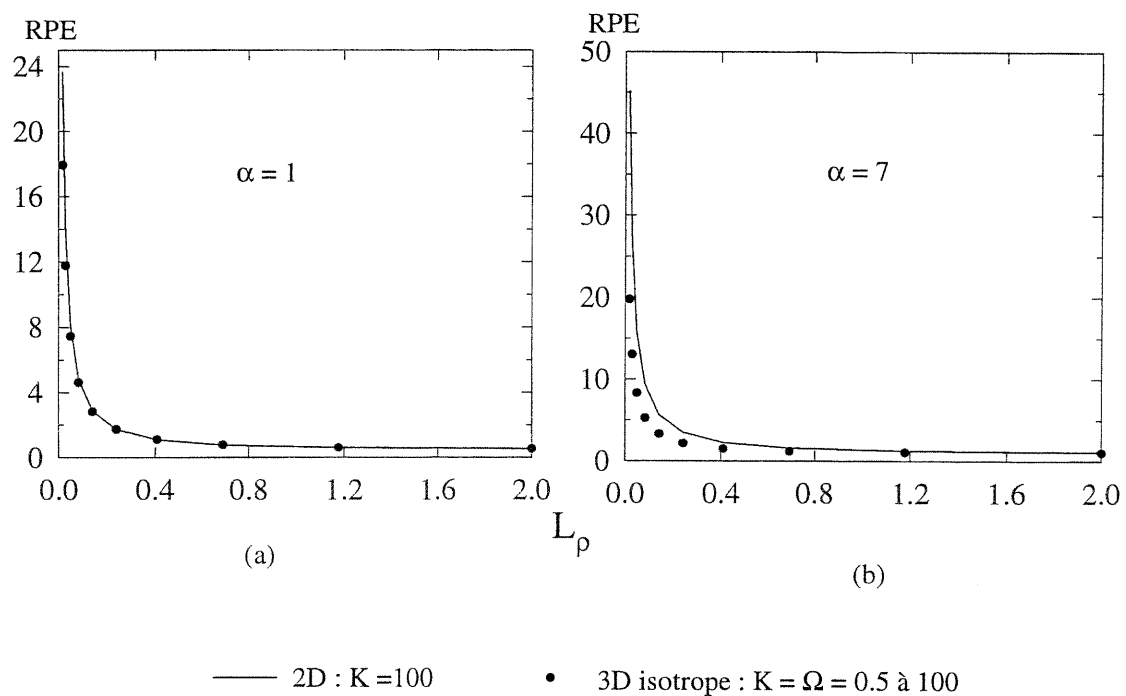


Figure 9. RPE à l'état fondamental en fonction de  $L_\rho$  avec  $\alpha = 1$  et  $\alpha = 7$ .

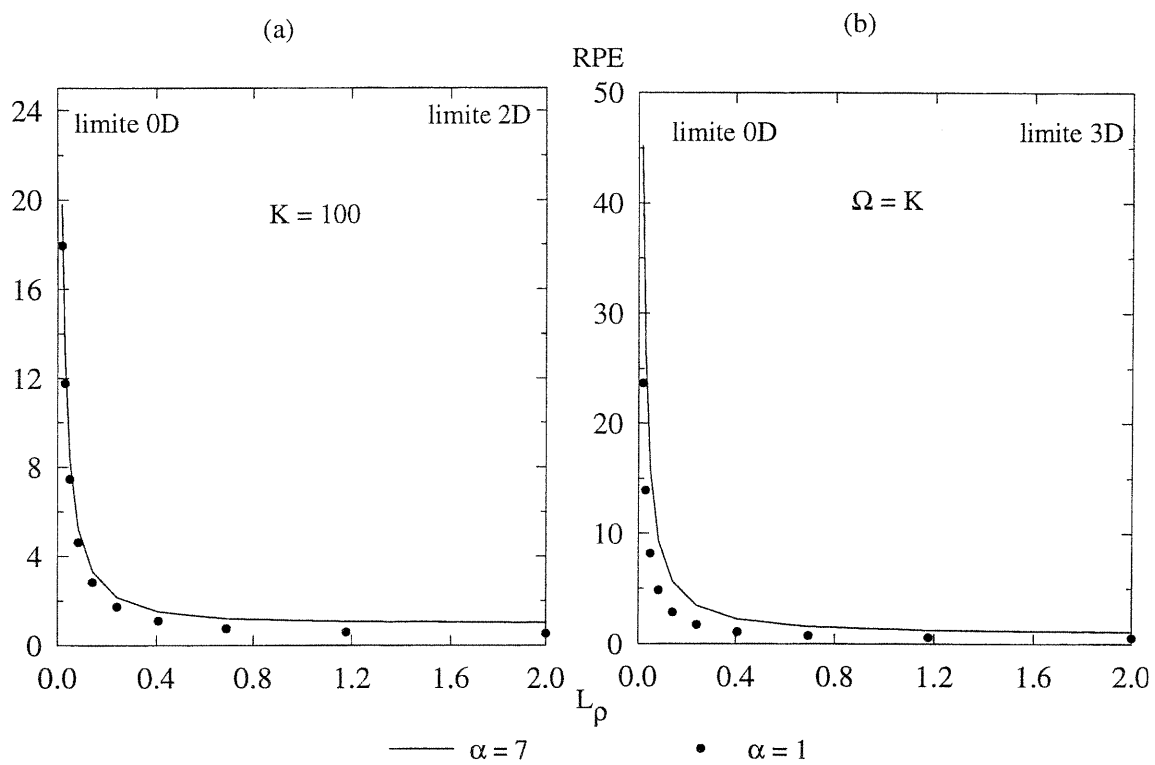


Figure 10. RPE à l'état fondamental en fonction de  $L_\rho$  pour  $\alpha = 1$  et  $\alpha = 7$ .

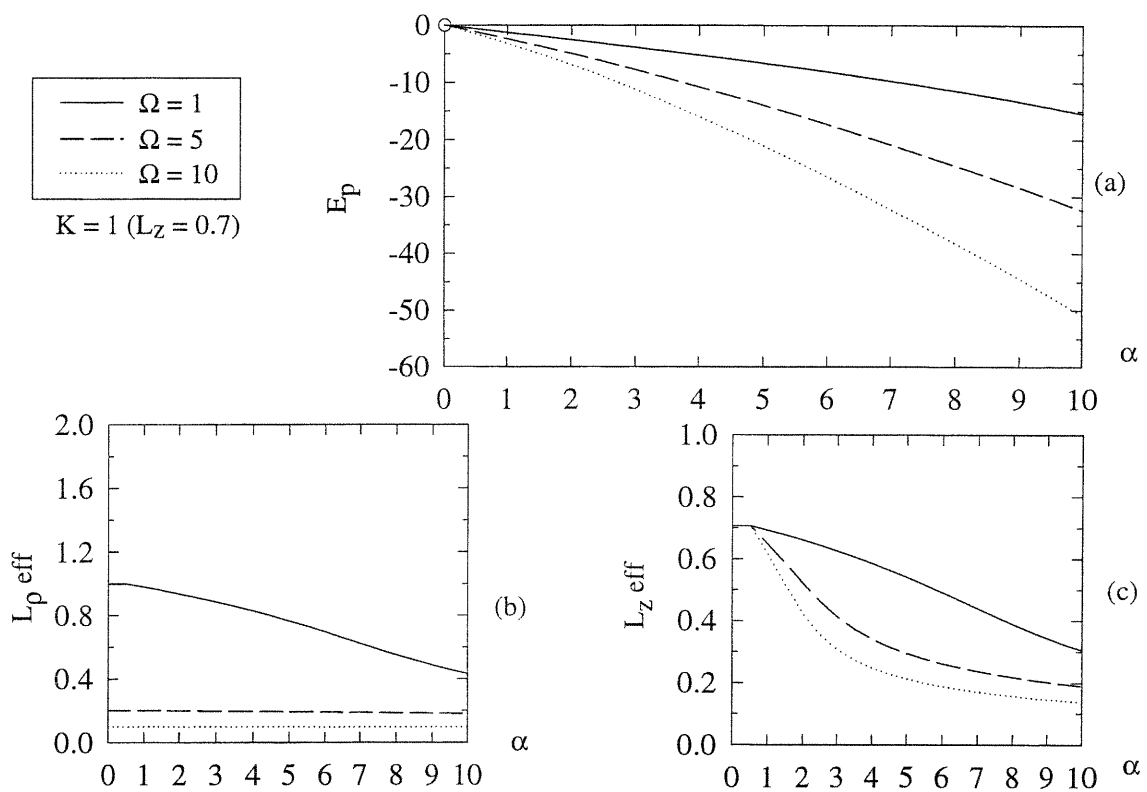
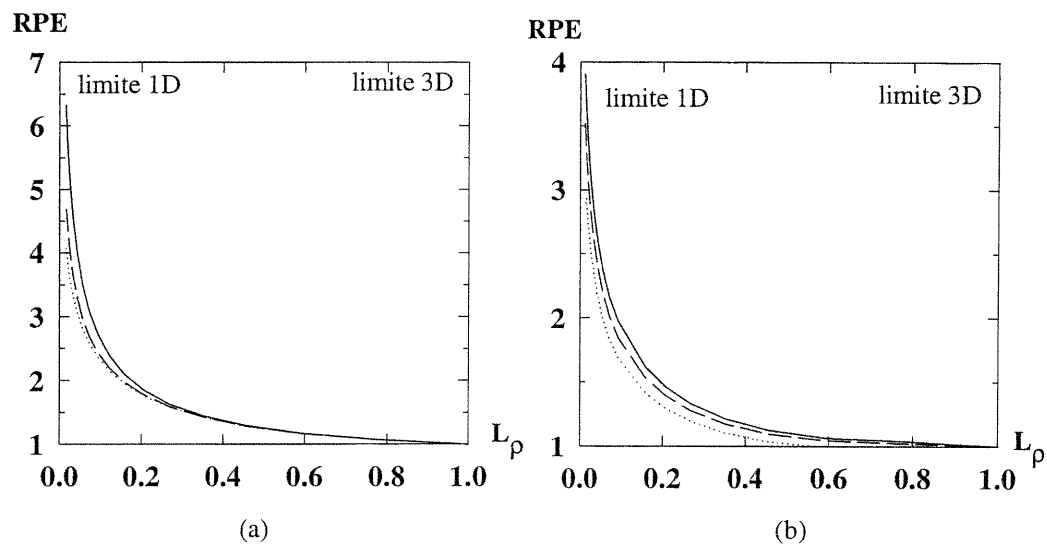


Figure 11. Etat fondamental. (a) : Energie propre. (b) :  $L_\rho$  effective. (c) :  $L_z$  effective, en fonction de la constante de couplage  $\alpha$ , pour  $L_z = 0.7 = \text{constante}$  ( $K = 1$ ), et  $\Omega = 1, 5, 10$  ( $L_\rho = 1, 0.2, 0.1$  respectivement).



$L_z = 1.22$

—  $\alpha = 2$   
 - -  $\alpha = 1$   
 .....  $\alpha = 0.5$

Figure 12. (a) : RPE dans l'état fondamental. (b) : RPE dans le premier état excité, en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 1.2$  et  $\alpha = 0.5, 1, 2$ .



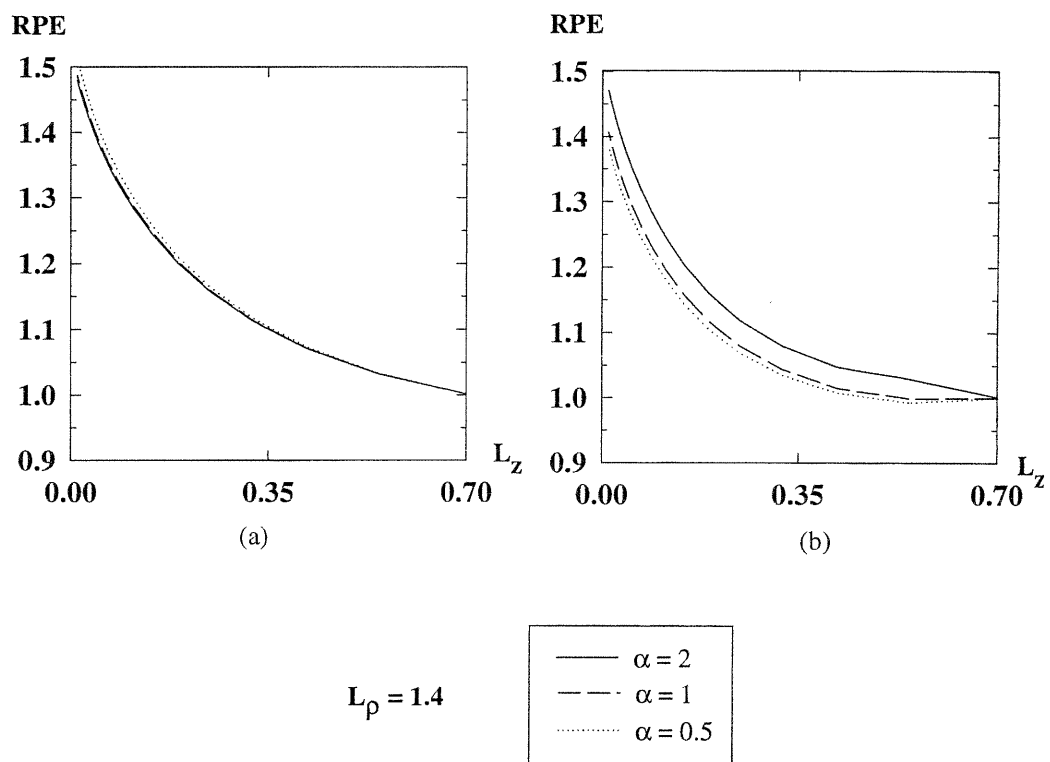


Figure 13. (a) : RPE dans l'état fondamental. (b) : RPE dans le premier état excité en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 1.4$  et  $\alpha = 0.5, 1, 2$ .

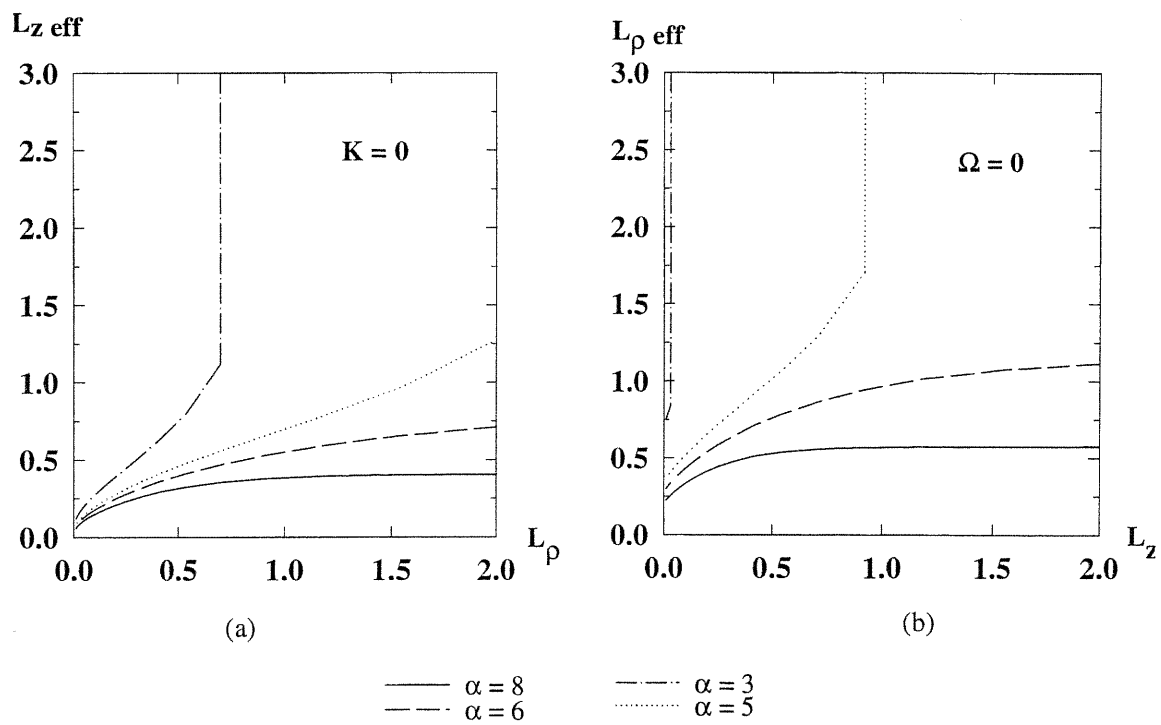


Figure 14.  $L_z$  et  $L_\rho$  effectives à l'état fondamental. (a) : limite du fil (1D). (b) : limite du puits (2D).

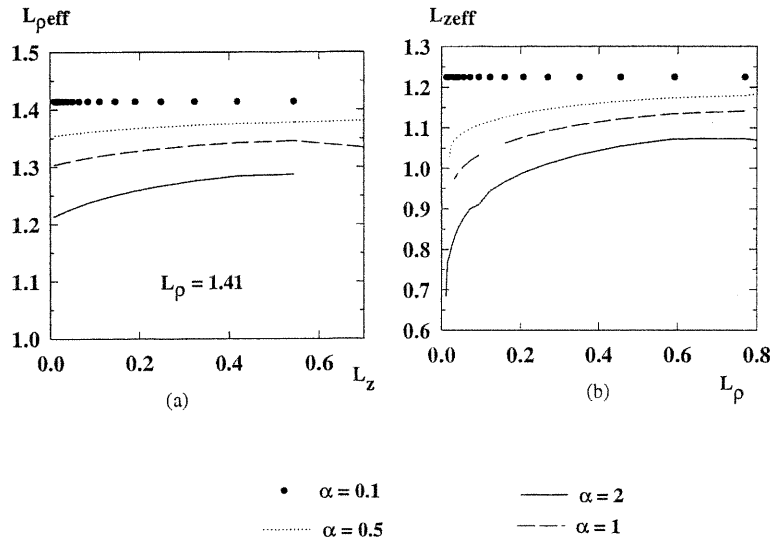


Figure 15. Premier état excité,  $\alpha = 0.1, 3, 5, 8$ . (a):  $L_{\rho}$  effective en fonction de  $L_z$  pour une longueur de confinement nominale dans le plan  $(x, y)$  de  $L_{\rho} = 1.76$ . (b):  $L_z$  effective en fonction de  $L_{\rho}$  pour une longueur de confinement nominale dans la direction  $z$  de  $L_z = 1.53$ .

## CHAPITRE 4

### Polaron lié dans un point quantique

Le polaron lié est constitué d'un électron et d'un défaut dans le réseau d'un semi-conducteur polaire ou d'un cristal ionique. C'est une bonne description des défauts tels que les donneurs dans les composés III-V [20, 54, 1].

Dans le cadre de l'approche variationnelle que nous développons, le spectre modèle doit pouvoir décrire le défaut hydrogénoïde et la polarisation qu'il induit, en plus de celle créée par l'électron. La présence du défaut suggère l'utilisation d'un spectre modèle de type coulombien.

Dans le cas du polaron libre, le spectre gaussien fournit l'état fondamental d'énergie minimale. Il reste acceptable tant que l'interaction coulombienne est faible par rapport à l'effet de la polarisation, c'est à dire quand le couplage électron-phonons est dominant devant le couplage électron-défaut. Par analogie avec la force du couplage polaire évaluée par l'intermédiaire de la constante  $\alpha$ , nous désignons la force du couplage coulombien entre l'électron et le défaut par une constante  $R$ . Nous pouvons envisager les domaines extrêmes de force respective du potentiel coulombien  $R$  et du couplage polaronique  $\alpha$  de façon approximative :

- Dans le cas de couplage coulombien ou polaire fort ( $R \gg 1$  ou  $\alpha \gg 1$ ), l'approximation adiabatique de Born-Oppenheimer est valide, pour un traitement variationnel. Le choix de la composante électronique de la fonction d'onde dépend de la nature de la liaison électronique. Pour un couplage polaronique prédominant, en première approximation l'électron se comporte comme un polaron libre; l'état fondamental est approché par une fonction d'onde gaussienne. Un spectre variationnel de type hydrogénoïde est préféré dans le cas où l'interaction coulombienne est plus forte que l'interaction électron-phonons. Pour des valeurs intermédiaires, le choix de l'un ou l'autre de ces deux types de spectres sous-estime l'une ou l'autre des interactions [55].
- Pour des couplages faibles, ( $R \leq 1$  et  $\alpha \leq 1$ ), les théories perturbatives s'appliquent.

En première approche au problème du polaron lié, le modèle du polaron en régime

intermédiaire de Lee Low Pines a été adapté en utilisant une modification variationnelle multi-paramètres [56]. Il est apparu que, en général, dans le cas des états hautement excités, l'interaction électron-défaut est écrantée par la constante diélectrique statique. Pour l'état fondamental, l'effet de l'écrantage est moindre; les énergies de polarisation sont plus élevées que dans le cas de l'électron libre ou du défaut libre. L'énergie de liaison du polaron lié est accrue en conséquence en comparaison avec la valeur correspondant à un effet de l'écrantage diélectrique complet.

Si l'énergie de liaison du défaut dans le système est faible devant celle des phonons ( $R \ll 1$ ), la particule se déplace si lentement que le réseau peut la "suivre"; l'effet principal résulte de l'écrantage statique en  $\epsilon_0$ . Par contre, dans le cas où l'énergie des phonons est plus faible ( $R \gg 1$ ), le réseau ne peut plus suivre la particule; l'effet de l'écrantage dynamique en  $\epsilon_\infty$  domine [57]. Ces arguments intuitifs sont valides dans les cas limites, mais ne résolvent pas le problème dans les cas intermédiaires, en particulier quand les constantes diélectriques basse et haute fréquences sont très différentes l'une de l'autre dans le matériau considéré.

Dans les structures  $2D$  de super-réseau et de puits quantiques [58, 59, 60], en première approximation, la variation de l'énergie de liaison est due à la renormalisation de la masse effective de l'électron sous l'effet de l'interaction avec les phonons. L'approximation adiabatique s'applique seulement dans le cas d'énergies de liaison grandes devant l'énergie des phonons optiques longitudinaux. L'approximation des phonons de volume et l'approximation de la masse effective sont valides pour des puits pas trop étroits. La correction polaronique  $2D$  est alors estimée à plus de 10% de l'énergie de liaison en l'absence d'interaction en  $E_L = 4R_0$  [61]. L'énergie de liaison diminue quand la dimensionalité du système augmente du fait de l'étalement de la fonction d'onde [62, 63].

Le problème met en présence différentes forces. L'énergie de confinement peut être grande comparée soit à l'énergie coulombienne, soit à l'énergie des phonons [64]. Quand l'énergie de confinement est grande devant celle des phonons, les transitions entre états électroniques dues aux phonons sont peu nombreuses. Nous pouvons alors ignorer les corrélations entre phonons (modèle des phonons indépendants). Par contre, si l'énergie des phonons est plus forte, les transitions entre états électroniques deviennent nombreuses; le système se comporte comme en volume, avec des bandes d'énergie de type volumique.

Dans la région dite de confinement fort, l'énergie de confinement est prépondérante devant l'énergie coulombienne. Le confinement est le résultat principalement du potentiel de confinement [65]. La région où l'énergie coulombienne est supérieure à l'énergie de confinement du défaut, mais inférieure à celle de l'électron détermine le confinement intermédiaire.

#### 4.1 Point parabolique, approximation des phonons de volume

Nous nous intéressons au système constitué d'un électron dans un puits de potentiel parabolique anisotrope, en interaction coulombienne avec un défaut ponctuel de masse infinie et de charge positive  $+e$  fixé à l'origine du système de coordonnées, dans un matériau polaire. Comme précédemment, le potentiel de confinement  $V(r)$  est caractérisé par les constantes  $K$  dans la direction  $z$  et  $\Omega$  dans le plan  $(x, y)$ . L'hamiltonien du système contient l'énergie cinétique de l'électron, l'énergie des phonons libres, le potentiel de confinement dans le point. Se rajoutent le potentiel d'interaction coulombienne entre l'électron et le défaut noté  $V_{coul}$  et les hamiltoniens d'interaction de type Fröhlich entre l'électron et le champ de phonons d'une part ( $H_{él-ph}$ ), et le défaut en  $\vec{r} = 0$  et le champ de phonons d'autre part ( $H_{défaut-ph}$ ), dans l'approximation des phonons de volume :

$$\begin{aligned}
 H &= p^2 + \sum_k a_k^\dagger a_k + V(r) + V_{coul} + H_{él-ph} + H_{défaut-ph} \\
 V(r) &= K^4 z^2 + \Omega^4 \rho^2 \\
 V_{coul} &= -\frac{2R_\infty^{1/2}}{r} \\
 H_{él-ph} &= \sum_k (V_k a_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + c.h.) \\
 H_{défaut-ph} &= -\sum_k (V_k a_k + c.h.)
 \end{aligned}$$

La constante de couplage électron-défaut, notée ici  $R_\infty$ , est le rapport du Rydberg, défini avec la constante diélectrique haute fréquence, par l'énergie des phonons optiques longitudinaux :

$$R_\infty^{1/2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{\epsilon_\infty r_0 \hbar \omega_{LO}}$$

Nous avons affaire à une interaction polaire totale électron-phonons et défaut-phonons de la forme :

$$H_{int} = \sum_k V_k (a_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - 1) + c.h$$

L'ion est placé à l'origine ( $\vec{r} = 0$ ), d'où le  $(-1)$ . La transformation unitaire de Platzman en volume [66] permet de simplifier le problème en éliminant le terme d'interaction défaut-phonons :

$$\begin{aligned}
 U : a_k &\rightarrow a_k + V_k \\
 H &\rightarrow U^{-1} H U = p^2 + \sum_k a_k^\dagger a_k + V(r) + H_{él-ph} + V_{coul} + V_{échange} + E
 \end{aligned}$$

La transformation fait disparaître le terme d'interaction entre l'ion et le champ de phonons au profit d'un terme d'échange  $V_{\text{échange}}$  et d'un terme constant infini  $E$ . Simultanément, l'interaction coulombienne  $V_{\text{coul}}$  se trouve renormalisée en  $\tilde{V}_{\text{coul}}$  :

$$V_{\text{échange}} = -\left(\frac{1}{\epsilon_{\infty}} - \frac{1}{\epsilon_0}\right) \frac{e^2}{r}$$

$$\tilde{V}_{\text{coul}} = V_{\text{coul}} + V_{\text{échange}} = -\frac{e^2}{\epsilon_0 r}$$

L'ion voit son champ coulombien écranté par les phonons. Son interaction avec le champ de phonons se traduit simplement par la renormalisation de son potentiel d'interaction coulombienne avec l'électron. Le terme constant infini  $E$  représente l'énergie propre de la charge ponctuelle statique. Il n'introduit qu'un décalage de l'énergie; nous ne le prenons pas en compte. Finalement, l'hamiltonien final à traiter se réduit à :

$$H = p^2 + V(r) - \frac{2R^{1/2}}{r} + \sum_k (V_k a_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + c.h) \quad (4.1)$$

La constante de couplage coulombien, notée ici  $R$ , est le rapport du Rydberg, défini avec la constante diélectrique statique, par l'énergie des phonons optiques longitudinaux :

$$R^{1/2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{\epsilon_0 r_0 \hbar \omega_{LO}}$$

Le système est caractérisé par deux échelles de grandeurs : le rayon du polaron  $r_0$  et le rayon de Bohr du défaut  $a_0^*$ , tels que :

$$a_0^* = \frac{r_0}{\sqrt{R}} = \frac{\hbar^2 \epsilon_0}{m e^2}$$

L'approximation du continuum reste valide tant que le rayon de Bohr du défaut est grand devant le paramètre du réseau  $a_{\text{réseau}}$  :

$$r_0 \gg a_{\text{réseau}} \sqrt{R}$$

Dans de nombreux cristaux, le rayon polaronique est de l'ordre de quatre fois la maille du réseau  $a_{\text{réseau}}$  [1]. Ainsi, l'approximation du continuum implique que  $R \ll 16$ .

A titre d'exemple, nous rappelons la constante de couplage polaire  $\alpha$ , le rayon de Bohr du défaut en unité de  $r_0$ , et la constante de couplage coulombien  $R$  dans GaAs, InSb (III-V), et CdTe (II-VI) [65] :

	$\alpha$	$\frac{a_0^*}{r_0}$	$R$
GaAs	0.07	2.56	0.15
InSb	0.03	5.77	0.03
CdTe	0.4	1.27	0.62

Dans le cadre du traitement de Fock de Matz et Burkey, nous utilisons le spectre modèle harmonique anisotrope du chapitre 3. Ignorant la corrélation électron-défaut, ce modèle est d'autant meilleur que le couplage au défaut est faible devant le couplage aux phonons ou devant l'effet du confinement ( $R$  faible).

## 4.2 Etat fondamental

Avec ce spectre modèle, l'expression variationnelle de l'énergie de l'état fondamental est :

$$E_{000} = \beta^2 + \frac{\gamma^2}{2} + \frac{\Omega^4}{\beta^2} + \frac{K^4}{2\gamma^2} + \tilde{V}_{coul} + F_{000}(\beta, \gamma)$$

Le terme de Fock est donné au chapitre 3 (relation 3.4). Le terme coulombien dans l'état fondamental du spectre modèle s'écrit :

$$\tilde{V}_{coul} = \begin{cases} -4\sqrt{\frac{R}{\pi}} \gamma \frac{\tan^{-1} \sqrt{\nu_0}}{\sqrt{\nu_0}} & \gamma > \beta \\ -4\sqrt{\frac{R}{\pi}} \gamma \frac{\tanh^{-1} \sqrt{-\nu_0}}{\sqrt{-\nu_0}} & \gamma < \beta \end{cases}$$

avec :

$$\nu = \frac{\gamma^2(1 - e^{-2\beta^2 t})}{\beta^2(1 - e^{-2\gamma^2 t})} - 1 \quad \nu_0 = \frac{\gamma^2}{\beta^2} - 1$$

Les mêmes paramètres que précédemment nous permettent de caractériser le polaron :

- la correction polaronique  $\Delta E_p = E(\alpha = 0) - E(\alpha \neq 0)$  et l'énergie propre du polaron  $E_p = -\Delta E_p$ ;
- la longueur de confinement dans la direction  $z$ , soit  $L_z = \langle \psi_m | z^2 | \psi_m \rangle^{1/2}$ , et la longueur de confinement dans le plan  $(x, y)$ , soit  $L_\rho = \langle \psi_m | \rho^2 | \psi_m \rangle^{1/2}$ , définies comme la valeur moyenne de  $z^2$  et comme la valeur moyenne de  $\rho^2$  respectivement, pour la fonction d'onde du potentiel de confinement, ainsi que la longueur de confinement effective dans la direction  $z$ , soit  $L_{z_{eff}} = \langle \psi_{\beta, \gamma} | z^2 | \psi_{\beta, \gamma} \rangle^{1/2}$ , et la longueur de confinement effective dans le plan  $(x, y)$ , soit  $L_{\rho_{eff}} = \langle \psi_{\beta, \gamma} | \rho^2 | \psi_{\beta, \gamma} \rangle^{1/2}$ , définies comme la valeur moyenne de  $z^2$  et comme la valeur moyenne de  $\rho^2$  respectivement, pour la fonction d'onde obtenue après minimisation par rapport aux paramètres variationnels.

De plus, nous calculons l'énergie de liaison  $E_l$  du défaut coulombien. Elle est définie comme la différence entre l'énergie de l'état en l'absence de défaut  $E(R = 0)$  et l'énergie de l'état en présence du défaut  $E(R \neq 0)$  [41, 42] :

$$E_l = E(R = 0) - E(R \neq 0)$$



Nous évaluons l'effet du couplage polaire sur l'énergie de liaison par la correction polaronique à l'énergie de liaison, définie telle que :

$$\Delta_p = E_l(\alpha \neq 0) - E_l(\alpha = 0)$$

L'effet du confinement sur l'énergie de liaison du polaron lié dans un point peut être évalué de façon analytique dans certains cas limites.

#### 4.2.1 Etat fondamental : Limite isotrope

La limite du confinement isotrope est représentée par  $\Omega = K$ . L'interaction coulombienne n'affectant pas l'isotropie,  $\beta = \gamma$ . Le terme coulombien tend alors vers  $\tilde{V}_{coul} = -4\sqrt{\frac{R}{\pi}}\beta$ , et :

$$E_{000} \rightarrow \frac{3\beta^2}{2} + \frac{3\Omega^4}{2\beta^2} - 4\sqrt{\frac{R}{\pi}}\beta + F_{000}$$

- En couplage polaire ou confinement fort, la fonction d'onde électronique est fortement localisée. Alors  $\beta \gg 1$ , d'où :

$$\alpha \text{ ou } \Omega = K \gg 1 \text{ et } \sqrt{R} \ll \alpha, \Omega$$

$$E_{000} \rightarrow \frac{3\beta^2}{2} + \frac{3\Omega^4}{2\beta^2} - 4\sqrt{\frac{R}{\pi}}\beta - \sqrt{\frac{2}{\pi}}\alpha\beta$$

Si l'effet du confinement est prédominant sur l'effet de la polarisation, l'interaction coulombienne diminue l'énergie élastique sans perturber l'énergie propre :

$$\Omega = K \gg \alpha \gg \sqrt{R}, 1$$

$$E_{000} \rightarrow 3\Omega^2 \left( 1 - \frac{4}{3\Omega} \sqrt{\frac{R}{\pi}} \right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}}\alpha\Omega$$

$$E_p = -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\alpha\Omega$$

$$E_l = 4\sqrt{\frac{R}{\pi}}\Omega$$

L'énergie de liaison varie linéairement avec la force de confinement dans le plan  $(x, y)$ , indépendamment de la force du couplage polaire.

Dans le cas où la polarisation est plus forte que le confinement, nous obtenons l'énergie du polaron 3D autopiégé de la limite de couplage fort, corrigée par

l'énergie potentielle harmonique. La contribution coulombienne à l'énergie propre est indépendante du confinement :

$$\begin{aligned}\alpha \gg \Omega = K \gg \sqrt{R}, 1 \\ E_{000} &\rightarrow -\frac{\alpha^2}{3\pi} \left(1 + \frac{4}{\alpha} \sqrt{2R}\right) + \frac{27\pi\Omega^4}{4\alpha^2} \\ E_p &= -\frac{\alpha^2}{3\pi} \\ E_l &= \frac{4}{3}\alpha \sqrt{2R}\end{aligned}$$

Pour un couplage coulombien dominant, l'énergie tend vers :

$$\begin{aligned}\sqrt{R} \gg \alpha, \Omega = K \gg 1 \\ E_{000} &\rightarrow -\frac{8R}{3\pi} - \frac{4}{3\pi}\alpha\sqrt{2R} + \frac{27\pi\Omega^4}{32R} \\ E_l &= \frac{8R}{3\pi} \left(1 + \frac{\alpha}{2}\sqrt{\frac{2}{R}}\right) \\ \Delta_p &= \frac{4}{3\pi}\alpha\sqrt{2R}\end{aligned}$$

Ici, le modèle gaussien donne un terme d'énergie coulombienne en  $\frac{8R}{3\pi}$  au lieu de  $R$  obtenu avec un modèle hydrogénoïde. Notre modèle, comme prévu, sous-estime l'interaction coulombienne (erreur de 10 importants car ils donnent une description qualitative, telle une énergie propre en  $\alpha\sqrt{R}$ ).

- En condition de couplage polaronique faible dominant le couplage coulombien, pour un confinement fort, nous retrouvons le résultat du cas du couplage polaire fort.

Pour un confinement faible, nous obtenons un comportement de masse effective. La masse effective du polaron  $3D$  lié dans un potentiel harmonique se trouve augmentée d'une contribution coulombienne inversement proportionnelle à la force du confinement :

$$\begin{aligned}1 \gg \alpha, \Omega = K \gg \sqrt{R} \\ E_{000} &\rightarrow -\alpha + 3\Omega^2 \left(1 - \frac{\alpha}{12} - \frac{4}{3}\sqrt{\frac{R}{\pi}} \frac{1}{\Omega}\right) \\ \frac{1}{\sqrt{m^*}} &= 1 - \frac{\alpha}{12} - \frac{4}{3}\sqrt{\frac{R}{\pi}} \frac{1}{\Omega} \\ E_p &= -\alpha \left(1 + \frac{\Omega^2}{4}\right)\end{aligned}$$

$$E_l = 4\Omega \sqrt{\frac{R}{\pi}}$$

- En couplage polaronique faible sous faible confinement, une interaction coulombienne faible mais dominante fait apparaître l'énergie d'un électron lié à un défaut avec une masse renormalisée à la masse effective du polaron en régime perturbatif :

$$1 \gg \sqrt{R} \gg \Omega = K, \alpha$$

$$E_{000} \rightarrow -\alpha - \frac{8R}{3\pi} (1 + \alpha/6) + \frac{27\pi}{32} \frac{\Omega^4}{R}$$

$$m^* = 1 + \frac{\alpha}{6}$$

Le spectre hydrogénoïde donnerait quant à lui un terme en  $-R \left(1 + \frac{\alpha}{6}\right)$ . Le polaron est en mouvement lent autour du centre coulombien, selon une orbite hydrogénoïde de rayon de Bohr  $a_0 \frac{m}{m^*}$  d'autant plus grand que  $R$  est faible.

Nous résumons les résultats obtenus suivant le degré de confinement harmonique isotrope appliqué dans le tableau ci-dessous :

Cas	Confinement	$E_p$	$E_l$
	en $3D$		
$a$	$\Omega = K \gg \alpha \gg \sqrt{R}, 1$	$-\sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha \Omega$	$4\sqrt{\frac{R}{\pi}} \Omega$
$b$	$\sqrt{R} \gg \alpha, \Omega = K \gg 1$	$-\frac{4}{3\pi} \alpha \sqrt{2R}$	$\frac{8R}{3\pi} \left(1 + \frac{\alpha}{2} \sqrt{\frac{2}{R}}\right)$
$c$	$\alpha \gg \Omega = K \gg \sqrt{R}, 1$	$-\frac{\alpha^2}{3\pi}$	$\frac{4}{3} \alpha \sqrt{2R}$
	en $0D$		
$d$	$1 \gg \alpha, \Omega = K \gg \sqrt{R}$	$-\alpha \left(1 + \frac{\Omega^2}{4}\right)$	$4\Omega \sqrt{\frac{R}{\pi}}$
$e$	$1 \gg \sqrt{R} \gg \Omega = K, \alpha$	$\frac{4}{9\pi} \alpha R$	$\frac{8R}{3\pi} (1 + \alpha/6)$

Ainsi, pour l'état fondamental, sous confinement isotrope fort supérieur à l'effet de la polarisation, si l'interaction coulombienne est faible (cas  $a$ ), c'est à dire que le rayon effectif de Bohr est grand devant le rayon du polaron, nous obtenons l'énergie de l'oscillateur harmonique isotrope  $3D$  en  $3\Omega^2$ . Des corrections en  $\alpha \Omega$  et  $\sqrt{R}\Omega$  sont introduites par les effets de la polarisation et du couplage coulombien respectivement.

Quand l'effet de la polarisation est prépondérant devant l'effet du confinement (cas  $c$ ), l'énergie en  $-\frac{\alpha^2}{3\pi}$  du polaron en régime de couplage fort se trouve corrigée par les effets du confinement harmonique et de l'interaction coulombienne.

Si l'interaction coulombienne est forte et dominante (cas *b*), nous obtenons l'énergie de l'état d'un défaut coulombien calculée à partir d'un spectre gaussien, en  $-\frac{8R}{3\pi}$  : le polaron se déplace si rapidement autour du défaut qu'il retrouve sa masse d'électron libre. Cependant l'électron crée une polarisation statique du réseau sur sa trajectoire, d'où un terme en  $\alpha\sqrt{R}$  [20]. Si l'interaction polaronique forte est dominante, l'énergie du polaron libre en couplage fort est corrigée par une polarisation statique en  $\alpha\sqrt{R}$  créée par la combinaison des effets du défaut et de l'électron dont la fonction d'onde est centrée sur le défaut.

Sous confinement isotrope faible, dans la limite de couplage polaronique faible, avec une interaction coulombienne petite (cas *d*), nous retrouvons un comportement de masse effective. La masse effective du polaron lié se trouve augmentée d'une contribution coulombienne en  $\frac{\sqrt{R}}{\Omega}$ .

Sous confinement isotrope faible, dans la limite de couplage polaronique faible, si le confinement est faible devant l'interaction coulombienne (cas *e*), le polaron de couplage faible voit sa masse effective modifiée par l'effet coulombien.

#### 4.2.2 Etat fondamental : Limite 1D ( $\Omega \gg K$ )

Dans la limite où le confinement dans le plan  $(x, y)$  est beaucoup plus important que le confinement dans la direction  $z$ ,  $\Omega \gg K$  entraîne que  $\beta \gg \gamma$ . Le potentiel coulombien tend alors vers :

$$\tilde{V}_{coul} \rightarrow -4\sqrt{\frac{R}{\pi}}\gamma \ln\left(\frac{2\beta}{\gamma}\right)$$

- si  $\Omega \gg K \gg \alpha \gg 1$  et  $\sqrt{R} \ll \Omega, K, \alpha$  :

$$E_{000} \rightarrow 2\Omega^2 + K^2 - \left(\alpha + 4\sqrt{\frac{R}{2}}\right) K\sqrt{\frac{2}{\pi}} \ln\left(\frac{2\Omega}{K}\right)$$

$$E_p = -\alpha K\sqrt{\frac{2}{\pi}} \ln\left(\frac{2\Omega}{K}\right)$$

$$E_l = +4K\sqrt{\frac{R}{\pi}} \ln\left(\frac{2\Omega}{K}\right)$$

C'est l'énergie des oscillateurs harmoniques 2D et 1D corrigée par les effets de la polarisation et de l'interaction coulombienne. L'énergie propre et l'énergie coulombienne divergent en  $\ln \Omega$ .

- Pour  $\Omega \gg \alpha \gg K \gg 1, \sqrt{R}$ , nous obtenons :

$$E_{000} \rightarrow 2\Omega^2 - \frac{\alpha^2}{\pi} \ln^2(2\Omega) \left(1 + \frac{4\sqrt{2R}}{\alpha}\right) + \frac{\pi K^4}{4\alpha^2 \ln^2(2\Omega)}$$

$$E_p = -\frac{\alpha^2}{\pi} \ln^2(2\Omega)$$

$$E_l = \frac{4}{\pi} \alpha \ln^2(2\Omega) \sqrt{2R}$$

L'énergie de l'oscillateur harmonique  $2D$  est corrigée par l'effet de la polarisation.

- $\sqrt{R}, \Omega \gg K \gg \alpha \gg 1$  :

$$E_{000} \rightarrow 2\Omega^2 - \frac{8R}{\pi} \ln^2(2\Omega) \left(1 + \sqrt{\frac{2\alpha}{R}}\right) + \frac{K^4\pi}{32R \ln^2(2\Omega)}$$

$$\Delta_p = \frac{4}{\pi} \sqrt{2R} \ln^2(2\Omega) \alpha$$

Le premier terme représente l'énergie de l'oscillateur harmonique  $2D$  dans le plan  $(x, y)$ , le second est l'énergie coulombienne proportionnelle à  $R$  et logarithmiquement dépendante du confinement  $2D$ .

- $\Omega \gg 1 \gg \alpha, K \gg \sqrt{R}$  :

$$E_{000} \rightarrow 2\Omega^2 + K^2 + \frac{\alpha}{2} \gamma_{euler} - \frac{\alpha \ln 2}{2} - \alpha \ln \Omega - 4K \sqrt{\frac{R}{\pi}} \ln\left(\frac{2\Omega}{K}\right)$$

$$E_l = 4K \sqrt{\frac{R}{\pi}} \ln\left(\frac{2\Omega}{K}\right)$$

$$\Delta_p = 0$$

- $\sqrt{R}, \Omega \gg 1 \gg \alpha, K$  :

$$E_{000} \rightarrow 2\Omega^2 - \frac{8}{\pi} R \ln^2(2\Omega) - \alpha \ln \Omega - \frac{\alpha \ln 2}{2} + \frac{\gamma_{euler}}{2} \alpha + \frac{K^4\pi}{32R \ln^2(2\Omega)}$$

$$E_l = \frac{8}{\pi} R \ln^2(2\Omega)$$

$$\Delta_p = 0$$

L'effet polaronique est indépendant de l'interaction coulombienne.

En résumé, dans la limite de confinement géométrique  $2D$ , lorsque l'interaction coulombienne est faible, en l'absence de couplage polaronique, l'énergie de l'état fondamental est :

$$E_{000}(\alpha = 0) = 2\Omega^2 + K^2 - 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} K \ln \frac{2\Omega}{K}$$

En présence d'un couplage polaronique fini, l'énergie propre du polaron est indépendante de  $\sqrt{R}$  sauf dans le cas où la polarisation est importante ( $\Omega \gg \alpha \gg K \gg 1$ ).

En présence d'une interaction coulombienne dominante, l'énergie de l'état fondamental sans couplage électron-phonons est :

$$E_{000}(\alpha = 0) = 2\Omega^2 - \frac{8R}{\pi} \ln^2(2\Omega) + \frac{\pi K^4}{32R \ln^2(2\Omega)}$$

En couplage polaronique faible, l'énergie propre du polaron est inchangée par le couplage coulombien. Par contre, en couplage polaronique fort, l'énergie propre du polaron est en  $\alpha\sqrt{R}$ . Dans la limite 1D ( $\Omega \rightarrow \infty$ ), les énergies coulombiennes et polaroniques divergent.

#### 4.2.3 Etat fondamental : limite 2D ( $K \gg \Omega$ )

Dans la limite où le confinement selon la direction  $z$  est beaucoup plus élevé que le confinement dans le plan  $(x, y)$ , on parle de point 2D. Alors le terme coulombien perturbatif est  $\tilde{V}_{coul} \rightarrow -2\sqrt{R}\pi\beta$ , indépendant du confinement en  $z$ .

- $K \gg \Omega \gg \alpha \gg \sqrt{R}$  :

$$\begin{aligned} E_{000} &\rightarrow K^2 + 2\Omega^2 - (\alpha + 2\sqrt{2R})\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Omega \\ E_p &= -\alpha\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Omega \\ E_l &= 2\sqrt{2R}\Omega \\ \Delta_p &= 0 \end{aligned}$$

L'énergie de l'oscillateur harmonique anisotrope est diminuée par un terme dû à la polarisation et un terme coulombien, tous deux croissant avec la force du confinement dans le plan  $(x, y)$ .

- $K \gg \alpha \gg \Omega \gg 1, \sqrt{R}$  :

$$\begin{aligned} E_{000} &\rightarrow K^2 - \frac{\pi}{8}\alpha^2 \left(1 + \frac{8}{\alpha}\sqrt{\frac{R}{\pi}}\right) + \frac{8\Omega^4}{\pi\alpha^2} \\ E_p &= -\frac{\pi}{8}\alpha^2 \\ E_l &= \alpha\sqrt{R}\pi \end{aligned}$$

Le premier terme est l'énergie de l'oscillateur harmonique 1D dans la direction  $z$ . Le second est l'énergie du polaron en couplage fort, légèrement augmentée par la contribution de l'interaction coulombienne en  $\alpha\sqrt{R}$ .

- $\sqrt{R} \gg K \gg \Omega, \alpha \gg 1$  :

$$\begin{aligned} E_{000} &\rightarrow K^2 - R\pi \left( 1 - \frac{\Omega^4}{(R\pi)^2} \right) - \alpha \sqrt{\frac{R}{2}} \pi \\ E_p &= -\alpha \sqrt{\frac{R}{2}} \pi \\ E_l &= R\pi \end{aligned}$$

Lorsque l'interaction coulombienne est prépondérante, nous obtenons l'énergie d'un électron lié telle que fournie par un spectre gaussien, et l'énergie de l'oscillateur harmonique 1D en  $z$ . L'effet de la polarisation est en  $\alpha\sqrt{R}$ .

- $K \gg 1 \gg \alpha, \Omega, \sqrt{R}$  :

$$\begin{aligned} E_{000} &\rightarrow K^2 - \frac{\pi}{2}\alpha + 2\Omega^2 \left( 1 - \frac{\pi}{16}\alpha - \frac{\sqrt{R\pi}}{\Omega} \right) \\ \frac{1}{\sqrt{m^*}} &= 1 - \frac{\pi}{16}\alpha - \frac{\sqrt{R\pi}}{\Omega} \\ E_p &= -\frac{\pi}{2}\alpha \\ E_l &= 2\sqrt{R\pi} \end{aligned}$$

La masse effective se trouve augmentée par le terme coulombien par rapport au cas du polaron libre étudié au chapitre 3.

- En présence d'un couplage coulombien dominant tel que  $\sqrt{R}, K \gg 1 \gg \alpha, \Omega$ , l'énergie propre diminue :

$$\begin{aligned} E_{000} &\rightarrow -R\pi \left( 1 - \frac{\Omega^4}{(R\pi)^2} - \frac{\pi\alpha}{8} \right) + K^2 - \frac{\alpha\pi}{2} \\ E_p &= -\frac{\pi^2}{8} \alpha R \\ E_l &= R\pi \end{aligned}$$

Dans la limite de confinement 1D, pour un couplage coulombien faible, l'énergie de l'état fondamental sans interaction électron-phonons obtenue avec le spectre gaussien est  $K^2 + 2\Omega^2 - 2\sqrt{R\pi}\Omega$ . L'énergie propre du polaron n'est affectée par l'interaction supplémentaire coulombienne que dans le cas d'une interaction polaronique élevée :

$$\begin{aligned} K \gg \alpha \gg \Omega \gg 1, \sqrt{R} \\ E_{000} &= K^2 - \frac{\pi\alpha^2}{8} + \frac{8\Omega^4}{\pi\alpha^2} - \sqrt{\frac{R}{2}} \pi \alpha \end{aligned}$$

Un couplage coulombien dominant n'affecte l'énergie propre que dans la limite de couplage fort :

$$\sqrt{R} \gg K \gg \Omega, \alpha \gg 1$$

$$E_{000} = -R\pi + K^2 - \sqrt{\frac{R}{2}}\pi\alpha + \frac{\Omega^4}{R\pi}$$

### 4.3 Premier état excité

Le terme d'interaction coulombienne est le seul terme additionnel à l'expression variationnelle calculée à partir du premier état excité du spectre modèle gaussien obtenu dans le chapitre 3. Ainsi, à partir de l'état  $(1, 0, 0)$  du spectre modèle, nous obtenons, pour  $\beta < \gamma$  :

$$E_{100} = 2\beta^2 + \frac{\gamma^2}{2} + \frac{2\Omega^4}{\beta^2} + \frac{K^4}{2\gamma^2} + \tilde{V}_{coul} + F_{100}(\beta, \gamma) \quad (4.2)$$

$F_{100}(\beta, \gamma)$  est le terme de Fock, avec une singularité en  $\beta^2 = 1/2$ , exprimé au chapitre 3 (relation 3.5).  $\tilde{V}_{coul}$  est ici :

$$\tilde{V}_{coul} = -2\gamma\sqrt{\frac{R}{\pi}}\frac{1}{\nu_0} \left( 1 + \frac{\tan^{-1}\sqrt{\nu_0}}{\sqrt{\nu_0}}(\nu_0 - 1) \right) \quad \gamma > \beta$$

Pour  $\beta > \gamma$ , l'expression variationnelle obtenue à partir de l'état  $(0, 0, 1)$  du spectre modèle est :

$$E_{001} = \beta^2 + \frac{3}{2}\gamma^2 + \frac{\Omega^4}{\beta^2} + \frac{3K^4}{2\gamma^2} + F_{001}(\beta, \gamma) + \tilde{V}_{coul} \quad (4.3)$$

$F_{001}(\beta, \gamma)$  est le terme de Fock, avec une singularité en  $\gamma^2 = 1/2$ , donné au chapitre 3 (relation 3.6)  $\tilde{V}_{coul}$  est ici :

$$\tilde{V}_{coul} = -4\sqrt{\frac{R}{\pi}}\frac{\gamma^3}{\beta^2}\frac{1}{\nu_0} \left( \frac{\tanh^{-1}\sqrt{-\nu_0}}{\sqrt{-\nu_0}} - \frac{1}{1 + \nu_0} \right) \quad \gamma < \beta$$

#### 4.3.1 Limite isotrope

Dans la limite de potentiel de confinement isotrope,  $\beta = \gamma$  et  $V_{coul} \rightarrow -\frac{8}{3}\gamma\sqrt{\frac{R}{\pi}}$ .

- Dans la limite de couplage fort,  $\alpha$  ou  $\Omega = K \gg 1$ , si bien que la fonction d'onde électronique est fortement localisée, et  $\beta \gg 1$ . Si le confinement est



supérieur à la polarisation  $\beta \rightarrow \Omega$  et :

$$\Omega = K \gg \alpha \gg 1 \gg \sqrt{R}$$

$$E_{exc} \rightarrow 5\Omega^2 - \frac{8}{3} \sqrt{\frac{R}{\pi}} \Omega - \frac{11}{12} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \Omega \alpha$$

$$E_p = -\frac{11}{12} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \Omega \alpha$$

$$E_l = \frac{8}{3} \sqrt{\frac{R}{\pi}} \Omega$$

L'interaction coulombienne contribue un terme supplémentaire en  $\sqrt{R}\Omega$  par rapport au cas du polaron libre du chapitre 3.

Si l'effet de la polarisation est prédominant,  $\beta \rightarrow \frac{11}{60} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha$  et :

$$\alpha \gg \Omega = K \gg 1 \gg \sqrt{R}$$

$$E_{exc} \rightarrow -\frac{121\alpha^2}{720\pi} + \frac{4500\pi\Omega^4}{121\alpha^2} - \frac{22\alpha}{45\pi} \sqrt{2R}$$

$$E_p = -\frac{121\alpha^2}{720\pi}$$

$$E_l = \frac{22\alpha}{45\pi} \sqrt{2R}$$

Le premier terme est l'énergie du premier état excité relâché du polaron libre en couplage fort. Le terme en  $\alpha\sqrt{R}$  vient de la polarisation statique créée par les effets combinés de défaut coulombien et de l'électron, dont la fonction d'onde est centrée sur le défaut [20].

- Dans la limite de couplage faible, pour un confinement faible supérieur au couplage coulombien,  $\beta \rightarrow \Omega$ . La masse effective se trouve augmentée d'une contribution en  $\frac{\sqrt{R}}{\Omega}$  due au couplage coulombien :

$$1 \gg \alpha, K = \Omega \gg \sqrt{R}$$

$$E_{exc} \rightarrow -\alpha + 5\Omega^2 \left( 1 - \frac{\alpha}{12} - \frac{8}{15} \sqrt{\frac{R}{\pi}} \frac{1}{\Omega} \right)$$

$$\frac{1}{\sqrt{m^*}} = \frac{1}{1 - \frac{\alpha}{12} - \frac{8}{15} \sqrt{\frac{R}{\pi}} \frac{1}{\Omega}}$$

$$E_p = -\alpha$$

$$m^* = 1 + \frac{\alpha}{6} + \frac{16}{15} \sqrt{\frac{R}{\pi}} \frac{1}{\Omega}$$

$$E_l = \frac{8}{3} \sqrt{\frac{R}{\pi}} \Omega$$

Pour un couplage coulombien supérieur au confinement,  $\beta \rightarrow \frac{8}{15}\sqrt{\frac{R}{\pi}}$  et :

$$1 \gg \alpha \gg \sqrt{R} \gg K = \Omega$$

$$E_{exc} \rightarrow -\alpha - \frac{32R}{45\pi} \left(1 + \frac{\alpha}{6}\right) + \frac{1125\pi \Omega^4}{128R}$$

$$E_l = \frac{32R}{45\pi} \left(1 + \frac{\alpha}{6}\right)$$

$$m^* = 1 + \frac{\alpha}{6}$$

Le premier terme est l'énergie propre du polaron libre. Le second est l'énergie du premier état excité d'un électron lié à un défaut avec renormalisation de la masse électronique à la masse effective perturbative du polaron. Le facteur  $\frac{32}{45\pi}$  au lieu de  $1/4$  vient de l'utilisation du spectre gaussien au lieu du spectre coulombien. Comme pour l'état fondamental, le spectre gaussien sous-estime fortement l'interaction coulombienne. Dans cette limite, à gauche de la singularité, comme discuté dans [20] l'état obtenu est un l'état polaronique fondamental non perturbé par le potentiel coulombien, au moins au premier ordre, et lié à un défaut dans l'état excité. Par rapport au résultat du polaron lié  $3D$ , il apparaît un terme dû au potentiel de confinement parabolique. Pour un confinement fort  $1 \gg \alpha$  et  $\Omega \gg 1$ , nous retrouvons le résultat du cas  $K = \Omega \gg \alpha \gg 1$ .

- Pour un couplage coulombien dominant  $\beta \rightarrow \frac{8}{15}\sqrt{\frac{R}{\pi}}$  :

$$\sqrt{R} \gg \Omega = K \gg \alpha, 1$$

$$E_{100} \rightarrow -\frac{32R}{45\pi} + \frac{1125\pi\Omega^4}{128R} - \frac{22\alpha}{45\pi} \sqrt{2R}$$

$$E_p = -\frac{22\pi}{45} \alpha \sqrt{2R}$$

$$E_l = \frac{32R}{45\pi}$$

Le premier terme est l'énergie de l'état excité  $2p$  d'un défaut coulombien calculé à partir d'une fonction d'onde gaussienne. Comme étudié par [20], lorsque  $R$  est grand, le polaron se déplace si rapidement autour du défaut qu'il retrouve la masse de l'électron libre. Par contre, comme l'électron se déplace de façon constante dans la même région de l'espace autour du défaut, une polarisation statique du réseau est créée sur sa trajectoire, d'où le terme en  $\alpha\sqrt{R}$ .

Comme pour l'état fondamental, un couplage coulombien faible renforce l'énergie propre du polaron dans le cas d'une forte polarisation ( $\alpha$  grand). Un couplage coulombien élevé accentue l'énergie propre quelle que soit la force du couplage polaire.

### 4.3.2 Limite 1D ( $\Omega \gg K$ )

Dans la limite de confinement selon deux dimensions, le potentiel coulombien tend vers :

$$\tilde{V}_{coul} \rightarrow -4\gamma \sqrt{\frac{R}{\pi}} \left( 1 - \frac{\gamma^2}{\beta^2} \ln \frac{2\beta}{\gamma} \right)$$

- Dans la limite de couplage fort, si  $\Omega \gg K \gg \alpha \gg 1, \sqrt{R}$ , alors  $\beta \rightarrow \Omega$  et  $\gamma \rightarrow K$ . L'énergie propre diverge, mais pas l'énergie de liaison :

$$\Omega \gg K \gg \alpha \gg 1, \sqrt{R}$$

$$E_{001} \rightarrow 2\Omega^2 + 3K^2 - 4K \sqrt{\frac{R}{\pi}} - \frac{3}{4} \alpha K \ln \frac{2\Omega}{K}$$

$$E_p = -\frac{3}{4} \alpha K \ln \frac{2\Omega}{K}$$

$$E_l = 4K \sqrt{\frac{R}{\pi}}$$

Par contre, pour  $\Omega, \alpha \gg K \gg 1, \sqrt{R}$ , nous avons :  $\beta \rightarrow \Omega$  et  $\gamma \rightarrow \frac{\alpha}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \ln(2\Omega)$ . Les deux énergies divergent :

$$\Omega, \alpha \gg K \gg 1, \sqrt{R}$$

$$E_{001} \rightarrow 2\Omega^2 - \frac{3}{16} \frac{\alpha^2}{\pi} \ln^2 2\Omega - \frac{\alpha}{\pi} \sqrt{2R} \ln(2\Omega) + \frac{12\pi K^4}{\alpha^2 \ln^2(2\Omega)}$$

$$E_p = \frac{3}{16} \frac{\alpha^2}{\pi} \ln^2 2\Omega$$

$$E_l = \frac{\alpha}{\pi} \sqrt{2R} \ln(2\Omega)$$

- Pour un couplage coulombien dominant  $\beta \rightarrow \Omega$  et  $\gamma \rightarrow \frac{4}{3} \sqrt{\frac{R}{\pi}}$  :

$$\sqrt{R} \gg \Omega \gg K \gg 1, \alpha$$

$$E_{001} \rightarrow -\frac{8R}{3\pi} + 2\Omega^2 + \frac{27\pi K^4}{32R} - \frac{\alpha}{\pi} \sqrt{2R} \ln(2\Omega)$$

$$E_p = -\frac{\alpha}{\pi} \sqrt{2R} \ln(2\Omega)$$

$$E_l = \frac{8R}{3\pi}$$

$$1 \gg \sqrt{R} \gg \alpha, \Omega \gg K$$

$$E_{001} \rightarrow -\frac{8R}{3\pi} - \alpha + 2\Omega^2 \left(1 - \frac{\alpha}{12}\right) + \frac{27\pi K^4}{32R}$$

$$m^* = 1 + \frac{\alpha}{6}$$

De la même façon qu'observé précédemment dans l'état fondamental, un couplage coulombien faible ne contribue à l'énergie propre du polaron, dans la limite de confinement  $2D$ , que dans le cas d'une polarisation élevée.

### 4.3.3 Limite $2D$ ( $K \gg \Omega$ )

Dans la limite de confinement selon la direction  $z$  ( $K \gg \Omega$ ) :

$$\tilde{V}_{coul} \rightarrow -\sqrt{R\pi} \beta \left(1 + \frac{2\beta}{\pi\gamma}\right)$$

- Si  $K \gg \Omega \gg \alpha \gg 1, \sqrt{R}$  alors  $\gamma \rightarrow K$  et  $\beta \rightarrow \Omega$ . L'énergie propre n'est pas altérée par le couplage coulombien :

$$K \gg \Omega \gg \alpha \gg 1, \sqrt{R}$$

$$E_{100} \rightarrow K^2 + 4\Omega^2 - \frac{3}{4} \alpha \sqrt{\frac{\pi}{2}} \Omega - \sqrt{R\pi} \Omega$$

$$E_p = -\frac{3}{4} \alpha \sqrt{\frac{\pi}{2}} \Omega$$

$$E_l = \sqrt{R\pi} \Omega$$

- Si  $K \gg \alpha \gg \Omega \gg 1\sqrt{R}$ , alors  $\gamma \rightarrow K$  et  $\beta \rightarrow \frac{3\alpha}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}}$ . L'énergie propre se trouve augmentée d'une contribution en  $\alpha\sqrt{R}$  :

$$K \gg \alpha \gg \Omega \gg 1\sqrt{R}$$

$$E_{100} \rightarrow K^2 - \frac{9\pi\alpha^2}{16^2} + \frac{4 * 16^2 \Omega^4}{9\pi\alpha^2} - \frac{3\pi}{16} \sqrt{\frac{R}{2}} \alpha$$

$$E_p = \frac{9\pi\alpha^2}{16^2}$$

$$E_l = \frac{3\pi}{16} \sqrt{\frac{R}{2}} \alpha$$

- Pour un couplage coulombien dominant  $\gamma \rightarrow K$  et  $\beta \rightarrow \frac{\sqrt{R\pi}}{4}$ . L'énergie propre est en  $\alpha\sqrt{R}$  :

$$\sqrt{R} \gg K \gg \Omega, \alpha, 1$$

$$\begin{aligned} E_{100} &\rightarrow -\frac{R\pi}{8} + K^2 + \frac{32\Omega^4}{R\pi} - \frac{3\alpha\pi}{16} \sqrt{\frac{R}{2}} \\ E_p &= -\frac{3\alpha\pi}{16} \sqrt{\frac{R}{2}} \\ E_l &= \frac{R\pi}{8} \end{aligned}$$

Pour des couplages coulombien et polaire faibles, nous observons un comportement de masse effective :

$$1 \gg \sqrt{R} \gg \alpha, K \gg \Omega$$

$$\begin{aligned} E_{100} &\rightarrow -\frac{R\pi}{8} + K^2 \left(1 - 2\frac{\alpha}{3}\right) - \alpha + \frac{32\Omega^4}{R\pi} \\ m^* &= 1 + \frac{\alpha}{3} \end{aligned}$$

Au total, dans cette étude du premier état excité du polaron de Fröhlich lié dans un point quantique isotrope, nous retrouvons les résultats principaux de [20] (polaron lié 3D isotrope). Les états obtenus dans la région à gauche de la singularité avec  $\beta = \gamma$  faibles décrivent un polaron non perturbé dans l'état fondamental, lié à un défaut dans l'état excité. Les états obtenus dans la région à droite de la singularité sont des états excités relâchés. Ils correspondent à une excitation du polaron lié. Ces états sont de type polaron ou de type défaut selon les valeurs relatives de  $\alpha$  et de  $R$ . Le présent formalisme ne révèle pas de comportement de masse effective dans la région de couplage fort (polaron non perturbé lié à un défaut) car il ne permet de décrire qu'un seul nuage de polarisation.

#### 4.4 Effet de la polarisation et du confinement sur l'énergie de liaison

Nous évaluons la correction polaronique à l'énergie de liaison en comparant les énergies de liaison  $E_l(\alpha \neq 0)$  et  $E_l(\alpha = 0)$  obtenues respectivement en présence et en absence de couplage électron-phonons, dans les cas limites de confinement isotrope et de confinement anisotrope.

##### A l'état fondamental

- Dans la limite de confinement isotrope, en confinement fort prépondérant devant l'effet polaronique ( $K = \Omega \gg \alpha, 1, \sqrt{R}$ ), ou en confinement et couplage polaronique faible, l'énergie de liaison est indépendante de la polarisation et linéaire à la force du confinement :

$$E_l(\alpha \neq 0) = E_l(\alpha = 0) = 4\sqrt{\frac{R}{\pi}}\Omega \quad (4.4)$$

Par contre, en régime de couplage polaronique fort ( $\alpha \gg \Omega = K \gg 1, \sqrt{R}$ ), l'énergie de liaison est proportionnelle à  $\alpha$  :

$$\begin{aligned} E_l(\alpha \neq 0) &= \frac{4\sqrt{2R}}{3\pi}\alpha \\ \frac{E_l(\alpha \neq 0)}{E_l(\alpha = 0)} &= \frac{1}{3}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\alpha}{\Omega} \end{aligned}$$

- Dans la limite 1D ( $\Omega \gg K$ ), l'énergie de liaison diverge de façon logarithmique en  $\Omega$ . En régime de couplage polaronique faible, pour  $\Omega \gg K \gg \alpha, 1$  et  $\Omega \gg 1 \gg K, \alpha$ , la polarisation n'a pas d'effet :

$$E_l(\alpha \neq 0) = E_l(\alpha = 0) = 4K\sqrt{\frac{R}{\pi}}\ln\left(\frac{2\Omega}{K}\right)$$

En régime de couplage polaronique fort ( $\Omega \gg \alpha \gg K \gg 1$  ou  $\alpha \gg \Omega \gg K \gg 1$ ) :

$$\begin{aligned} E_l(\alpha \neq 0) &= \frac{4\sqrt{2R}}{\pi}\alpha \ln^2(2\Omega) \\ \frac{E_l(\alpha \neq 0)}{E_l(\alpha = 0)} &= \sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\alpha}{K} \ln(2\Omega) \end{aligned}$$

L'énergie de liaison du défaut  $1D$  augmente avec l'effet de la polarisation, de façon logarithmique avec la force du confinement dans le plan, d'autant plus que la force de confinement transverse est faible.

- Dans la limite  $2D$  ( $K \gg \Omega$ ), en régime de couplage polaronique faible, pour  $K \gg \Omega \gg \alpha, 1$  et  $K \gg 1 \gg \alpha, \Omega$ , l'énergie de liaison est une fonction croissante de la force du confinement dans le plan  $(x, y)$  :

$$E_l(\alpha \neq 0) = E_l(\alpha = 0) = 2\sqrt{R\pi}\Omega$$

En régime de couplage polaronique fort ( $K \gg \alpha \gg \Omega \gg 1$  ou  $\alpha \gg K \gg \Omega \gg 1$ ), l'énergie de liaison augmente avec la force du couplage électron-phonon, d'autant plus que le confinement dans le plan  $(x, y)$  est faible :

$$\begin{aligned} E_l(\alpha \neq 0) &= \pi\sqrt{\frac{R}{2}}\alpha \\ \frac{E_l(\alpha \neq 0)}{E_l(\alpha = 0)} &= \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\alpha}{\Omega} \end{aligned}$$

Ainsi, il apparaît que dans la limite du point isotrope  $0D$  ( $\Omega = K \gg \alpha, 1$ ), dans laquelle les états sont localisés, l'énergie de liaison du défaut situé au centre du point n'est pas sensible à l'effet de la polarisation : le potentiel coulombien est le même en l'absence ou en présence d'interaction électron-phonons. Ceci corrobore les résultats de [41]. En régime de couplage électron-phonons faible, l'énergie de liaison croît avec la force du confinement et diminue rapidement quand la longueur de confinement augmente (limite point  $3D$ ). Quand la longueur de confinement est grande, l'effet du confinement est moindre comparée à l'effet de la polarisation. Ainsi, en régime de couplage polaire fort, l'effet de la polarisation vient accentuer l'énergie de liaison d'autant plus que les longueurs de confinement sont élevées, contrairement à la correction polaronique à l'énergie de l'état fondamental.

- Pour une interaction coulombienne forte et dominante, le terme d'énergie coulombienne à l'état fondamental diverge dans la limite  $1D$  :

$$\begin{aligned} E_{coul}(iso) &= -\frac{8R}{3\pi} \\ E_{coul}(1D) &= -\frac{8R}{\pi} \ln^2(2\Omega) \\ E_{coul}(2D) &= -R\pi \end{aligned}$$

**Dans le premier état excité :**

- Dans la limite isotrope, pour un confinement dominant en couplage polaronique fort, ou en couplage polaronique et confinement faible, l'énergie de liaison est indépendante du couplage électron-phonons :

$$\begin{aligned}\Omega &= K \gg \alpha \gg 1, \sqrt{R} \\ 1 &\gg \Omega = K, \alpha \gg \sqrt{R} \\ E_l(\alpha \neq 0) &= E_l(\alpha = 0) = \frac{8}{3} \sqrt{\frac{R}{\pi}} \Omega\end{aligned}$$

En couplage polaronique fort dominant :

$$\begin{aligned}\alpha &\gg \Omega = K \gg 1, \sqrt{R} \\ E_l &= \frac{22\alpha}{45\pi} \sqrt{2R} \\ \frac{E_l(\alpha \neq 0)}{E_l(\alpha = 0)} &= \frac{11}{60} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\alpha}{\Omega}\end{aligned}$$

- dans la limite 1D :

$$\begin{aligned}\Omega &\gg K \gg \alpha \gg 1, \sqrt{R} \\ E_l(\alpha \neq 0) &= E_l(\alpha = 0) = 4K \sqrt{\frac{R}{\pi}} \\ \Omega &\gg \alpha \gg K \gg 1, \sqrt{R} \\ E_l &= \frac{\alpha}{\pi} \sqrt{2R} \ln 2\Omega \\ \frac{E_l(\alpha \neq 0)}{E_l(\alpha = 0)} &= \frac{\alpha}{4K} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \ln 2\Omega\end{aligned}$$

- dans la limite 2D :

$$\begin{aligned}K &\gg \Omega \gg \alpha \gg 1, \sqrt{R} \\ E_l(\alpha \neq 0) &= E_l(\alpha = 0) = \sqrt{R\pi} \Omega \\ K, \alpha &\gg \Omega \gg 1, \sqrt{R} \\ E_l &= \frac{3\pi}{16} \sqrt{\frac{R}{2}} \alpha \\ \frac{E_l(\alpha \neq 0)}{E_l(\alpha = 0)} &= \frac{3}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\alpha}{\Omega}\end{aligned}$$



- Pour un couplage coulombien fort dominant, le terme d'énergie coulombienne est toujours inférieur au terme correspondant dans l'état fondamental :

$$\begin{aligned} E_{coul}(iso) &= -\frac{32R}{45\pi} \\ E_{coul}(1D) &= -\frac{8R}{3\pi} \\ E_{coul}(2D) &= -\frac{R\pi}{8} \end{aligned}$$

#### 4.5 Résultats numériques

L'énergie propre et l'énergie de liaison du polaron lié à l'état fondamental, en fonction de la longueur de confinement selon  $z$  (avec  $L_\rho = 2$ ) et la longueur de confinement dans le plan  $(x, y)$  (avec  $L_z = 2$ ), pour différentes valeurs de couplage polaire et de couplage coulombien sont présentées aux **figures** 16 et 17.

L'énergie propre présente essentiellement le même comportement que dans le cas du polaron libre (**figure** 16 (a)). A partir de la limite 3D, elle reste pratiquement indépendante du confinement jusqu'à des valeurs de longueurs de confinement  $L_z$  de l'ordre de la moitié du rayon quantique du polaron, à partir desquelles elle augmente rapidement vers la limite 2D. Cette valeur de  $L_z$  à laquelle l'effet du confinement quantique devient important diminue avec la valeur de la constante de couplage polaire  $\alpha$ ; ainsi, pour des matériaux très faiblement polaires, l'effet du confinement quantique sur l'énergie propre n'intervient que dans les limites de fort confinement. L'interaction coulombienne ne modifie pas qualitativement ce comportement. Elle accentue l'énergie propre, d'autant plus que  $\alpha$  est élevé, et augmente les valeurs de confinement  $L_z$  où l'énergie propre commence à tendre vers sa limite 2D : ainsi, le couplage coulombien a un effet de localisation.

Dans le cas du confinement dans le plan  $(x, y)$ , (**figure** 17 (a)), l'énergie propre a le même comportement. Il est à noter qu'elle atteint de plus fortes valeurs pour un confinement 1D que dans le cas du confinement 2D. L'énergie propre et l'énergie de liaison présentent une divergence logarithmique dans la limite 1D.

L'énergie de liaison est d'autant plus forte que les couplages polaire et coulombien sont grands (**figures** 16 (b) et 17 (b)). Les limites 3D correspondent aux valeurs estimées de façon analytique. Ainsi, pour un couplage coulombien dominant, l'énergie de liaison tend vers  $\frac{8R}{3\pi} + \frac{4}{3\pi}\alpha\sqrt{R\pi}$ . Pour un couplage polaire dominant, elle tend vers  $\frac{4}{3\pi}\alpha\sqrt{R\pi}$ . Dans la limite du puits ( $L_\rho = 2 = \text{constante}$ ), elle augmente d'abord lentement, puis rapidement dès que  $L_z < 1$ , d'autant plus rapidement que l'interaction coulombienne est élevée (**figure** 16 (b)). Dans la limite du fil présentée à la **figure** 17 (b) ( $L_z = 2 = \text{constante}$ ), dès que  $L_\rho < 1.5$ , elle croît très rapidement

et diverge en  $\ln \Omega$  dans la limite  $1D$ .

Nous étudions l'évolution des longueurs de confinement effectives dans les mêmes conditions qu'aux **figures** 16 et 17, de façon à déterminer comment s'effectue la localisation (**figure** 18). La **figure** 18 (a) représente la longueur de confinement effective dans le plan  $(x, y)$  en fonction du confinement appliqué dans la direction  $z$ , le confinement appliqué dans le plan  $(x, y)$  restant constant et déterminant une longueur de confinement nominale  $L_\rho = 2$ . Dans la limite  $3D$ , en l'absence de confinement, le confinement effectif en  $(x, y)$  correspond au confinement appliqué, c'est à dire :  $L_{\rho_{eff}} = L_\rho$ , quelle que soit la valeur des couplages coulombien ou polaire. Quand le confinement appliqué dans la direction  $z$  augmente,  $L_z$  diminue. La longueur de confinement effective en  $(x, y)$  diminue linéairement avec  $L_z$  à partir de sa valeur nominale  $3D$ , d'autant plus vite que  $\alpha$  est fort à  $R$  donné, et que  $R$  est élevé à  $\alpha$  fixé, jusqu'à une première valeur  $L_z$  critique à laquelle apparaît une cassure. Cette valeur de  $L_z$  est d'autant plus élevée que  $\alpha$  est fort pour un couplage coulombien faible ( $R = 1$ ), et semble indépendante de  $\alpha$  pour un couplage coulombien fort ( $R = 4$ ). Quand  $L_z$  diminue en deçà de cette longueur,  $L_{\rho_{eff}}$  reste pratiquement indépendante de  $L_z$  : dans une région de confinement entre  $L_z \approx 0.5$  et  $L_z \approx 1.6$ ,  $L_{\rho_{eff}}$  ne dépend que des couplages polaire et coulombien. Finalement, pour une valeur de  $L_z$  inférieure à la moitié du rayon du polaron ( $< 0.5$ ),  $L_{\rho_{eff}}$  diminue rapidement jusqu'à sa valeur  $2D$ , contrôlée par la force du potentiel de confinement dans la direction  $z$ .

La **figure** 18 (b) représente la longueur de confinement effective dans la direction  $z$  en fonction du confinement appliqué dans le plan  $(x, y)$ , le confinement appliqué dans la direction  $z$  restant constant et déterminant une longueur de confinement nominale de  $L_z = 2$ .  $L_{z_{eff}}$  diminue d'abord linéairement avec  $L_\rho$  à partir de  $L_z$  nominale, d'autant plus vite que les couplages coulombien et polaire sont forts, jusqu'à une valeur seuil de  $L_\rho$  en deçà de laquelle commence un autre type de comportement dépendant de la force des couplages : si les couplages sont forts ( $R = 4$  ou  $\alpha = 5$ ),  $L_{z_{eff}}$  reste indépendante de  $L_\rho$  autour de  $L_{z_{eff}} \approx 0.25$ , alors que pour des couplages faibles,  $L_{z_{eff}}$  diminue avec  $L_\rho$ . Dans la limite  $1D$ , comme prévu de façon analytique,  $L_{z_{eff}}$  devient infiniment petit suivant une dépendance logarithmique en  $\ln(L_\rho)$ , quelles que soient les valeurs de  $\alpha$  ou de  $R$ . Ainsi, les cassures observées sur les **figures** 18 indiquent des transitions entre un régime où le confinement  $1D$  (18 (a)) ou  $2D$  (18 (b)) détermine la configuration du système (régime anisotrope), et celui où la configuration est déterminée en premier lieu par  $R$  ou  $\alpha$  (régime isotrope).

La **figure** 19 donne l'évolution de l'énergie propre (a) et de l'énergie de liaison (b) dans le premier état excité, en fonction de la longueur de confinement dans la direction  $z$ , avec un confinement radial fixé à  $L_\rho = 1.41$ . Comme à l'état fondamental,

il apparaît que l'énergie propre ne dépend que faiblement de  $R$  en couplage polaire faible, et qu'elle est une fonction croissante de  $\alpha$  et de  $R$  en couplage polaire fort. L'énergie propre est réduite par rapport à celle de l'état fondamental. L'énergie de liaison correspond à  $\sqrt{R\pi}\Omega$  dans la limite  $L_z = 0.5$  avec  $\Omega = 1$ , indépendante de  $\alpha$ . Dans la limite de confinement extrême en  $z$ , sous fort couplage coulombien ( $R = 4$ ), elle tend vers  $\frac{R\pi}{8} + \frac{3\alpha\pi}{16}\sqrt{\frac{R}{2}}$  pour  $\alpha = 5$ .

La **figure 20** présente l'évolution de la longueur de confinement effective dans le plan  $(x, y)$  dans les conditions de la figure précédente, dans le premier état excité.  $L_{\rho_{eff}}$  est une fonction décroissante du confinement dans la direction  $z$ , décroissant d'autant plus rapidement que les couplages coulombien et polaire sont importants.

Physiquement, on s'attend que l'effet polaronique soit plus prononcé pour  $\alpha$  et  $R$  forts. Les **figures (21 et 22) et (23 et 24)** décrivent le comportement de l'énergie propre et des longueurs effectives de confinement à l'état fondamental dans les limites  $2D$  (puits) et  $1D$  (fil) respectivement en fonction de l'importance des couplages polaire et coulombien. Dans la limite  $2D$ , avec  $R$  fixé, l'énergie propre augmente rapidement avec  $\alpha$ , d'autant plus que le confinement est important (**figure 21 (a)**). Elle augmente moins rapidement avec  $R$  à  $\alpha$  fixé (**figure 21 (b)**). Il apparaît que l'énergie propre est davantage sensible à  $\alpha$  qu'à  $R$ , et est une fonction croissante du rayon du point. Si l'on s'intéresse à l'évolution des longueurs de confinement effectives en fonction de l'un et de l'autre des deux types de couplage (**figure 22**), il apparaît en fait que dans la limite  $2D$ , quand le confinement est dominant, les longueurs de confinement sont les longueurs de confinement nominales :  $L_{\rho_{eff}} = L_{\rho} = \frac{1}{\Omega}$  et  $L_{z_{eff}} = L_z = \frac{1}{\sqrt{2}K}$ . Par contre, quand la polarisation augmente, la longueur de confinement effective dans le plan  $(x, y)$  diminue rapidement, d'autant plus que le confinement en  $z$  est élevé, et tend vers une limite indépendante du confinement  $L_{\rho_{eff}} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{2}{\alpha}$  (**figure 22 (a)**). L'effet de localisation dans le plan  $(x, y)$  est un peu moins rapide en fonction de  $R$ ; la limite de couplage coulombien très élevé est indépendante du confinement :  $L_{\rho_{eff}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}$  (**figure 22 (b)**). La longueur de confinement effective dans la direction  $z$  varie sur un intervalle beaucoup plus restreint, mais diminue également, et tend vers une limite indépendante des confinements (**figure 24**). Des couplages polaire et coulombien élevés provoquent donc un effet de localisation assez semblables.

Nous appliquons notre traitement à des matériaux étudiés par [67, 68, 69]:

matériau	$m$	$\omega_{LO}$	$\alpha$	$\epsilon_0$	$\epsilon_\infty$	$a$	$E_g$
GaAs	0.066	36.7	0.068	13.8	10.9	5.653	1.519
CdS	0.155	38.26	0.527	8.45	5.32	2.573	4.136
CdSe	0.130	26.58	0.460	9.3	6.1	6.052	1.9
CdTe	0.091	20.84	0.315	10.2	7.1	6.482	1.606
InSb	0.0138	24.46	0.022	16.8	15.68	6.479	0.236

$\omega_{LO}$  est exprimé en meV,  $m$  en unité de la masse de l'électron nu,  $a$  est le paramètre de maille du réseau en Angströms,  $E_g$  est l'énergie de la bande interdite en eV.

matériau	$a_0^*$	$r_0$	$\frac{a_0^*}{r_0}$	$Ry$	$R$
GaAs	99.5	39.7	2.507	5.8	0.159
CdS	25.9	25.3	1.025	36.42	0.952
CdSe	34.0	33.2	1.024	25.33	0.953
CdTe	53.3	44.8	1.189	14.73	0.707
InSb	579.0	106.2	5.450	0.83	0.034

$a_0^*$  est le rayon de Bohr effectif, en Angströms,  $r_0$  est le rayon quantique du polaron, en Angströms.  $Ry$  est le Rydberg effectif en meV, et  $R$  le coefficient de couplage coulombien sans dimension ( $\frac{Ry}{\hbar\omega_{LO}}$ ).

L'effet polaronique est assez prononcé dans ces matériaux dès que les longueurs de confinement sont inférieures à environ  $0.5r_0$ . Il diminue de façon monotone quand le rayon augmente et tend lentement vers la limite 3D (figures 25 et 26 : état fondamental, figures 27 et 28 : premier état excité).

## 4.6 Conclusion

Pour le polaron lié, en l'absence de confinement, dans le cas limite où l'interaction coulombienne est nulle, on retrouve l'hamiltonien du polaron libre. Ainsi, dans l'état fondamental, en couplage faible, l'énergie propre est égale à  $-\alpha$ ; elle résulte de l'interaction de l'électron avec son champ de polarisation induit. Le polaron est caractérisé par une masse effective donnée, au premier ordre en  $\alpha$  par :  $\frac{m^*}{m} = (1 - \alpha/6)^{-1}$ . L'étude de la région de couplage coulombien faible conduit simplement à prendre comme valeurs de minimisation pour les paramètres variationnels celles du polaron libre. Ainsi, l'énergie propre du polaron lié se trouve inchangée au premier ordre, le défaut se comportant comme une particule de masse effective tant que  $\alpha \gg \sqrt{R}$  et que  $\sqrt{R}$  est faible. En régime de couplage polaronique

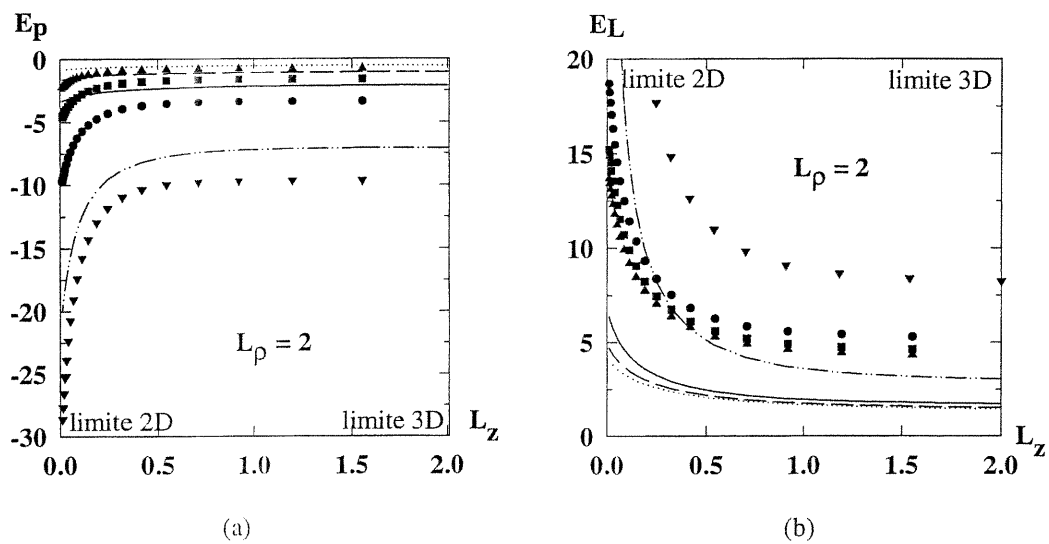
fort, le champ de polarisation peut devenir très important et l'énergie d'interaction peut être suffisamment forte pour localiser l'électron. Sa fréquence d'oscillation excède alors considérablement la fréquence des phonons optiques, caractéristique du temps de réponse du réseau. Dans cette limite, le champ de polarisation est considéré comme statique. La minimisation donne des valeurs des paramètres variationnels différents du cas du polaron libre. On retrouve les résultats de la description variationnelle de Pekar où l'énergie contient un terme en  $\alpha^2$ . Dans ces conditions, en présence d'un couplage coulombien fini, l'hamiltonien du polaron lié dépend de deux constantes de couplage, soient  $\alpha$  reliée au couplage électron-phonons, et  $\sqrt{R}$  caractéristique du couplage coulombien. Pour de faibles valeurs de  $\sqrt{R}$ , la description du système en terme d'une quasi-particule dotée de sa masse effective en orbite hydrogénoïde autour du défaut est bonne, puisqu'en régime de couplage polaronique faible, la masse polaronique est  $(1 - \alpha/6)^{-1}$ . Par contre, pour des valeurs plus élevées de  $\sqrt{R}$ , cette description n'est plus valide et le terme correctif est en  $\alpha R^{1/2}$ . Ce résultat peut être associé à l'image d'un polaron centré sur le défaut, c'est à dire que le champ de polarisation s'adapte à la distribution de charge électronique autour du défaut [70].

Sous confinement, pour une impureté placée au centre du système de coordonnées, l'énergie de liaison du polaron lié, dans son état fondamental, croît avec la constante de couplage électron-phonon et avec la force du confinement. Il est remarquable que la correction polaronique à l'énergie de liaison n'est pas aussi importante que la correction polaronique à l'énergie du fondamental. Elle est principalement déterminée par la constante de couplage électron-phonon  $\alpha$ . Ainsi, en régime de couplage faible (GaAs), la contribution polaronique à l'énergie de liaison est trop faible pour être observée :  $\Delta_{p(l)} \rightarrow 0$ . Dans la limite du point isotrope  $0D$ , ( $\Omega = K \rightarrow \infty$ ), l'état fondamental est localisé, et l'énergie du polaron lié est principalement déterminée par l'énergie de confinement et l'énergie de liaison n'est pas affectée par le couplage électron-phonon, et est en fait indépendante de la position de l'impureté dans le point [41] :

$$E_l(\alpha = 0) = E_l(\alpha \neq 0) = 4\sqrt{\frac{R}{\pi}}\Omega$$

$$\Delta_{p(l)} \rightarrow 0$$

Avec le modèle de l'impureté fixée au centre, nous estimons la correction polaronique maximale à l'énergie de liaison, car celle-ci décroît avec le déplacement de l'impureté [41]. La correction polaronique à l'énergie de liaison est une fonction décroissante de la taille du point, et tend vers zéro pour des longueurs de confinement faibles.



**R = 4**  
 ▲  $\alpha = 0.5$   
 ■  $\alpha = 1$   
 •  $\alpha = 2$   
 ▼  $\alpha = 5$

**R = 1**  
 .....  $\alpha = 0.5$   
 - - -  $\alpha = 1$   
 ———  $\alpha = 2$   
 - - -  $\alpha = 5$

Figure 16. Polaron lié à l'état fondamental en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 2.0$ ,  $R = 1, 4$  et  $\alpha = 0.5, 1, 2, 5$ . (a) : Energie propre. (b) : Energie de liaison.

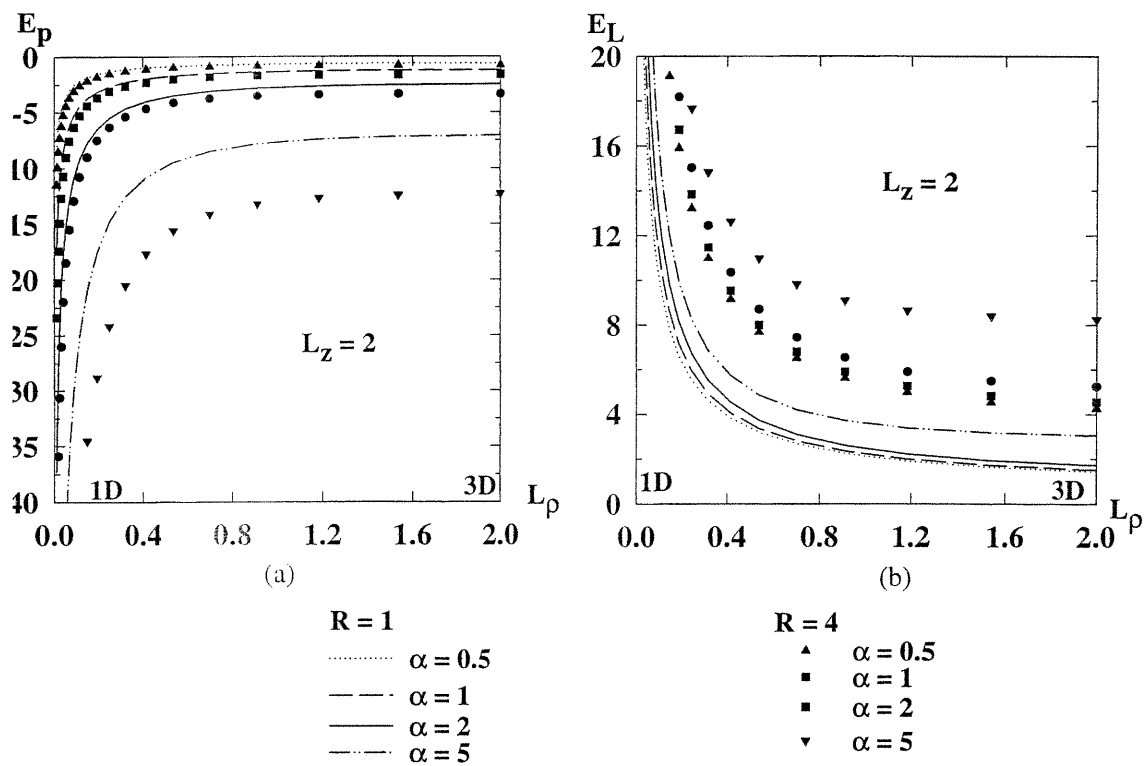


Figure 17. Polaron lié dans son état fondamental en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 2.0$ ,  $R = 1, 4$  et  $\alpha = 0.5, 1, 2, 5$ . (a) : Energie propre. (b) : Energie de liaison

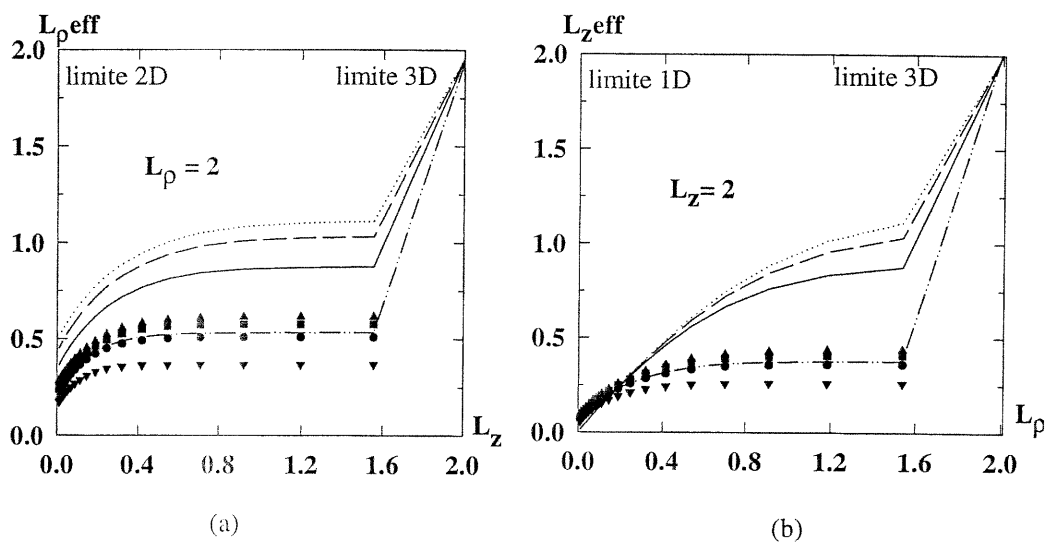


Figure 18. Polaron lié dans son état fondamental pour  $R = 1, 4$  et  $\alpha = 0.5, 1, 2, 5$ . (a) :  $L_{\rho}^{eff}$  en fonction de  $L_z$  pour  $L_{\rho} = 2$  ( $\Omega = 0.5$ ). (b) :  $L_z^{eff}$  en fonction de  $L_{\rho}$  pour  $L_z = 2$  ( $K = 0.35$ ).



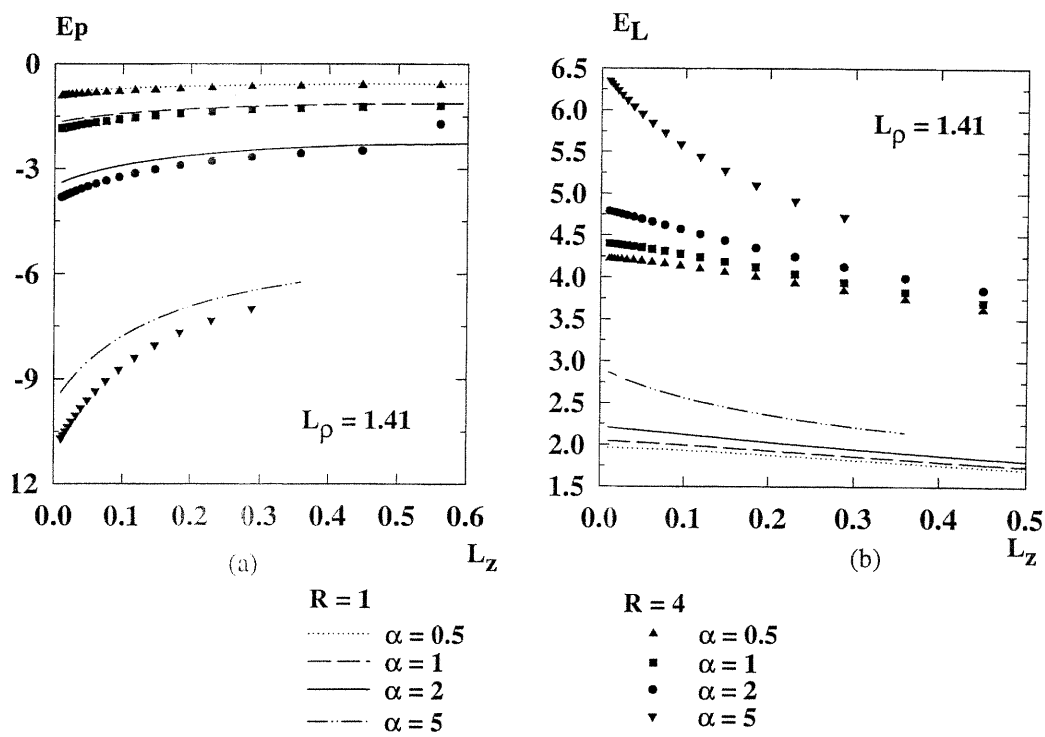


Figure 19. Polaron lié dans son premier état excité en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 1.41$ .  
 (a) : Energie propre. (b) : Energie de liaison.

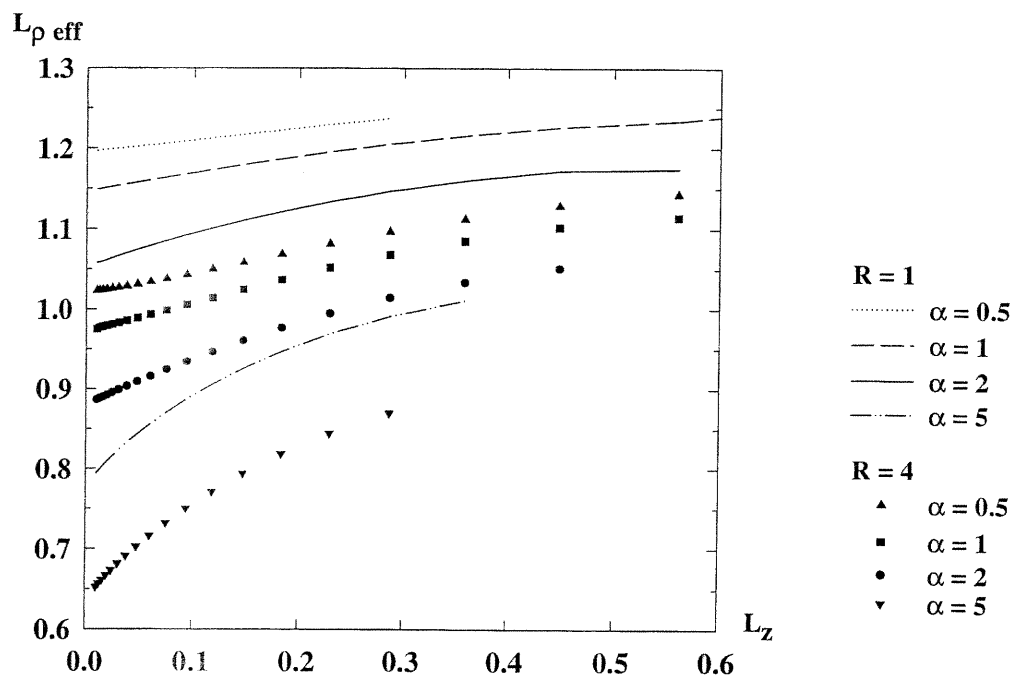
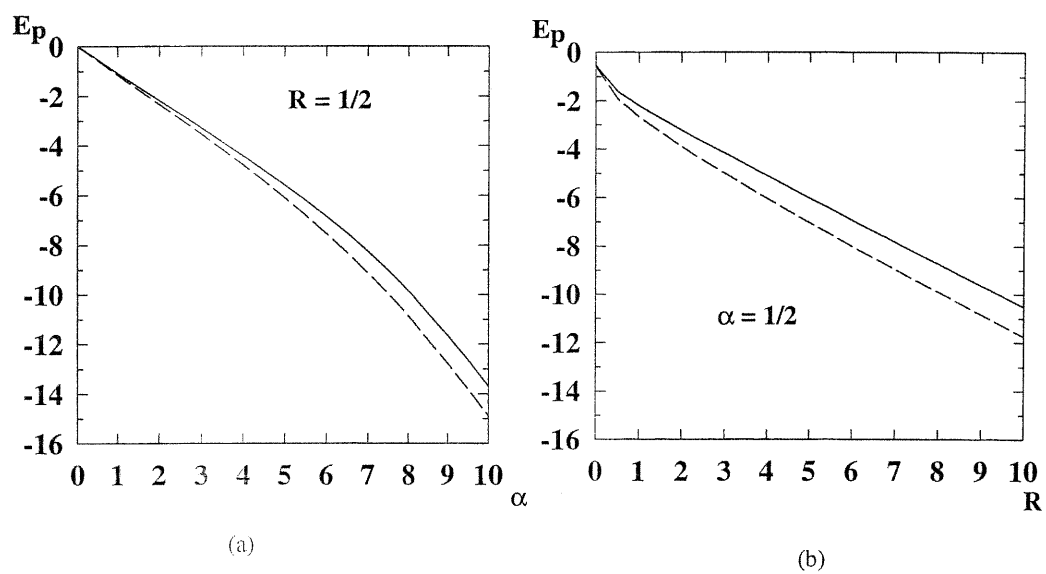


Figure 20. Polaron lié dans son premier état excité : longueur de confinement effective radiale  $L_{\rho \text{ eff}}$  en fonction de  $L_z$  pour  $L_{\rho} = 1.41$ ,  $R = 1, 4$  et  $\alpha = 0.5, 1, 2, 5$



$L_\rho = 2$  ( $\Omega = 0.5$ )

—  $L_z = 1$  ( $K = 0.35$ )  
 - -  $L_z = 0.5$  ( $K = 0.7$ )

Figure 21. Energie propre du polaron lié dans l'état fondamental dans la limite 2D (puits) :  $L_\rho = 2$  ( $\Omega = 0.5$ ), avec  $L_z = 1$  et  $L_z = 0.5$ . (a) : avec  $R = 1/2$  en fonction de  $\alpha$ . (b) : avec  $\alpha = 1/2$  en fonction de  $R$ .

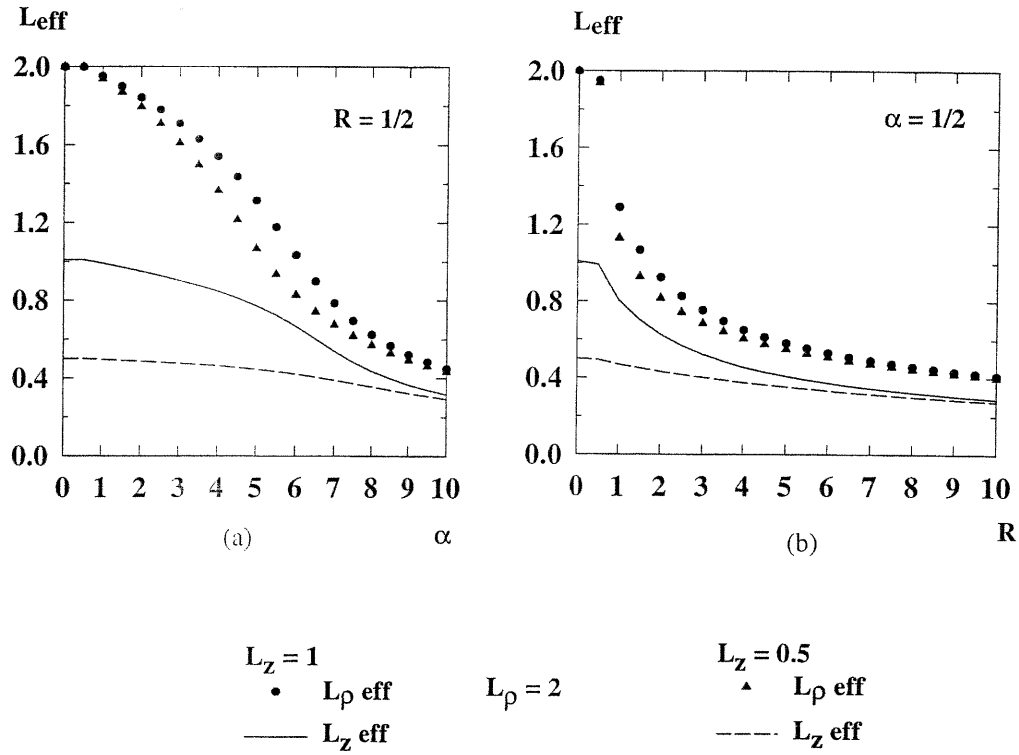


Figure 22. Longueurs de confinement effectives dans l'état fondamental du polaron lié dans la limite  $2D$  (puits) :  $L_{\rho} = 2$  ( $\Omega = 0.5$ ), avec  $L_z = 1$  et  $L_z = 0.5$ . (a) : pour  $R = 1/2$ , en fonction de  $\alpha$ . (b) : pour  $\alpha = 1/2$ , en fonction de  $R$ .

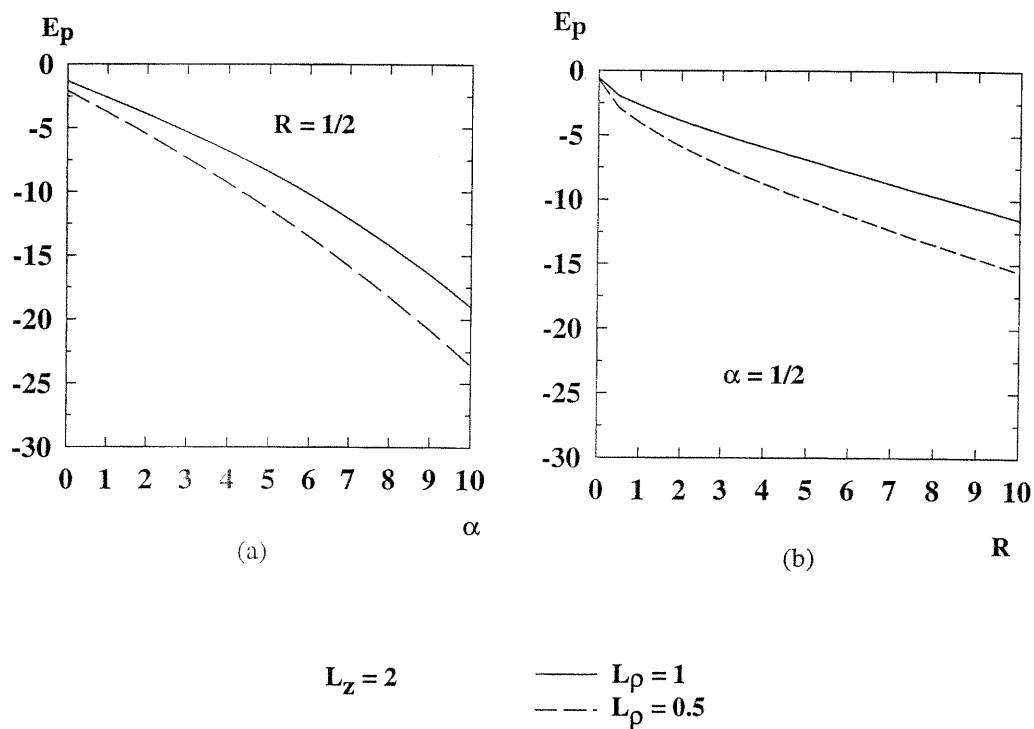


Figure 23. Energie propre du polaron lié dans la limite 1D (fil) :  $L_z = 2$  ( $K = 0.35$ ), avec  $L_\rho = 1$  et  $L_\rho = 0.5$ . (a) : pour  $R = 1/2$  en fonction de  $\alpha$ . (b) : pour  $\alpha = 1/2$  en fonction de  $R$ .

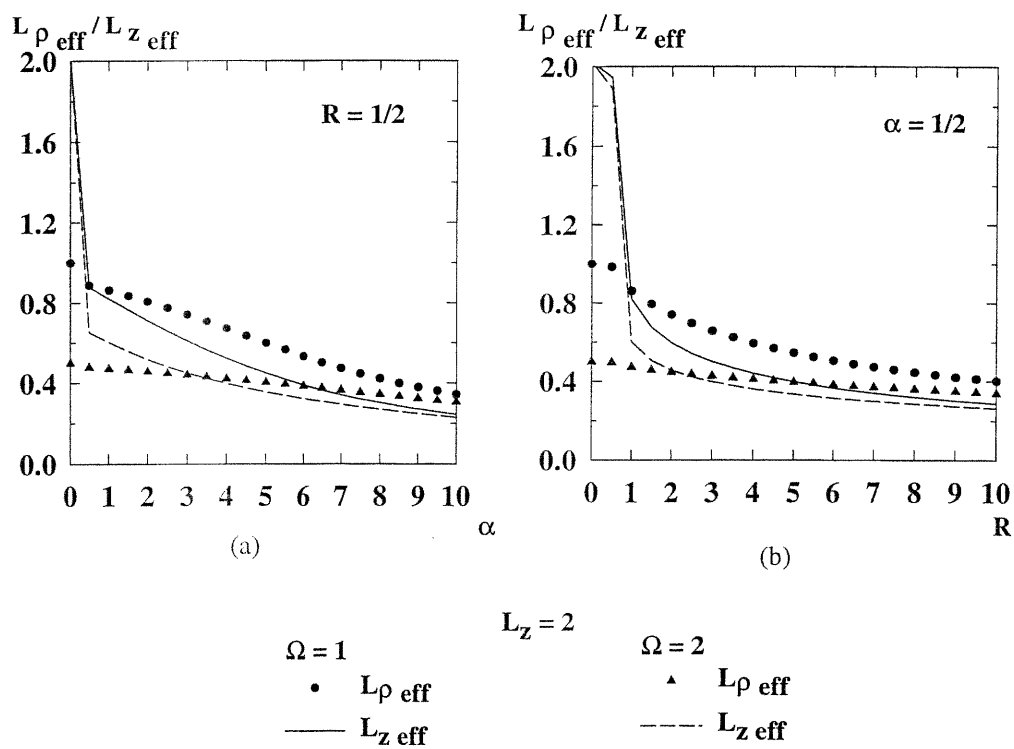


Figure 24. Longueurs de confinement effectives dans l'état fondamental du polaron lié dans la limite 1D (fil) :  $L_z = 2$  ( $K = 0.35$ ). (a) : pour  $R = 1/2$ , en fonction de  $\alpha$ . (b) : pour  $\alpha = 1/2$ , en fonction de  $R$ .

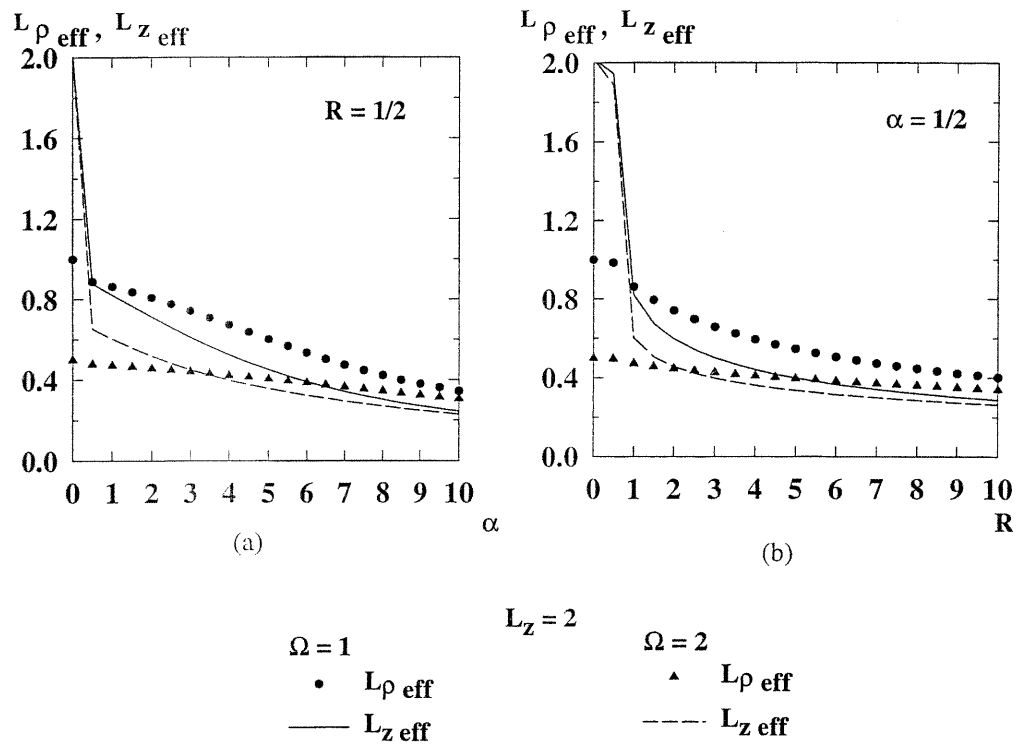
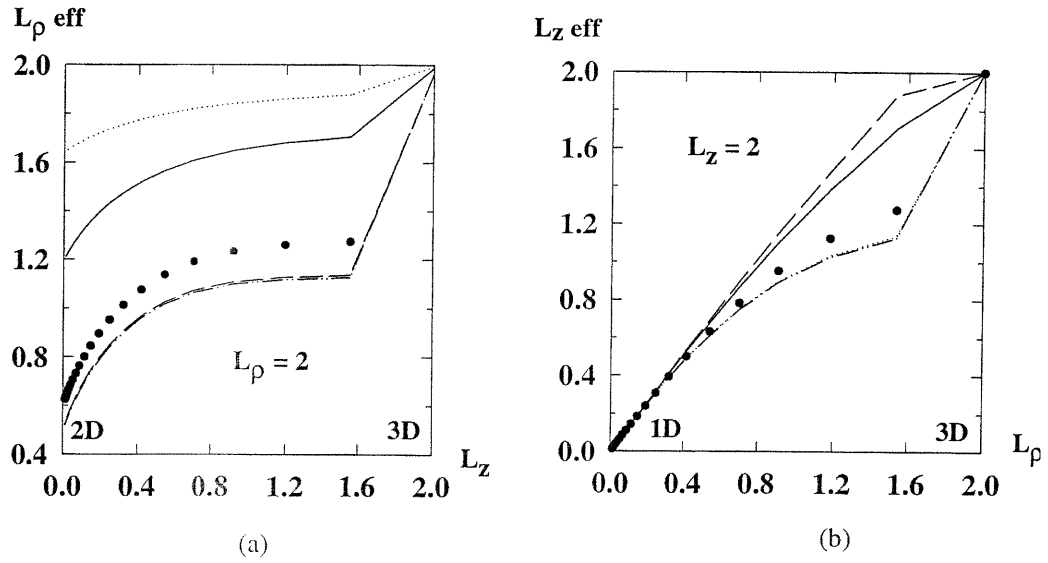


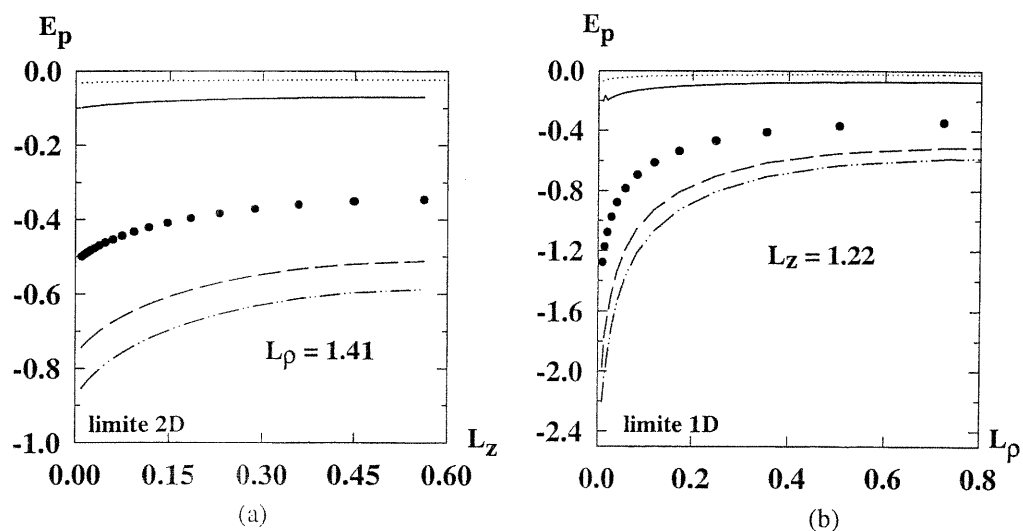
Figure 25. Energie propre du polaron lié à l'état fondamental dans CdS, CdSe, CdTe, GaAs, InSb. (a) : en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 2$ . (b) : en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 2$ .



..... InSb :  $\alpha = 0.022$   $R = 0.034$   
 - - - CdS :  $\alpha = 0.527$   $R = 0.952$     • CdTe :  $\alpha = 0.315$   $R = 0.707$   
 - - - CdSe :  $\alpha = 0.460$   $R = 0.953$     — GaAs :  $\alpha = 0.068$   $R = 0.159$

Figure 26. Longueurs de confinement effectives dans l'état fondamental du polaron lié dans CdS, CdSe, CdTe, GaAs, InSb. (a) :  $L_{\rho eff}$  en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 2$ . (b) :  $L_{z eff}$  en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 2$ .





..... InSb :  $\alpha = 0.022$   $R = 0.034$   
 - - - - CdS :  $\alpha = 0.527$   $R = 0.952$     • CdTe :  $\alpha = 0.315$   $R = 0.707$   
 - - - - CdSe :  $\alpha = 0.460$   $R = 0.953$     — GaAs :  $\alpha = 0.068$   $R = 0.159$

Figure 27. Energie propre du polaron lié dans le 1<sup>er</sup> état excité dans CdS, CdSe, CdTe, GaAs, InSb. (a) : en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 1.41$ . (b) : en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 1.22$ .

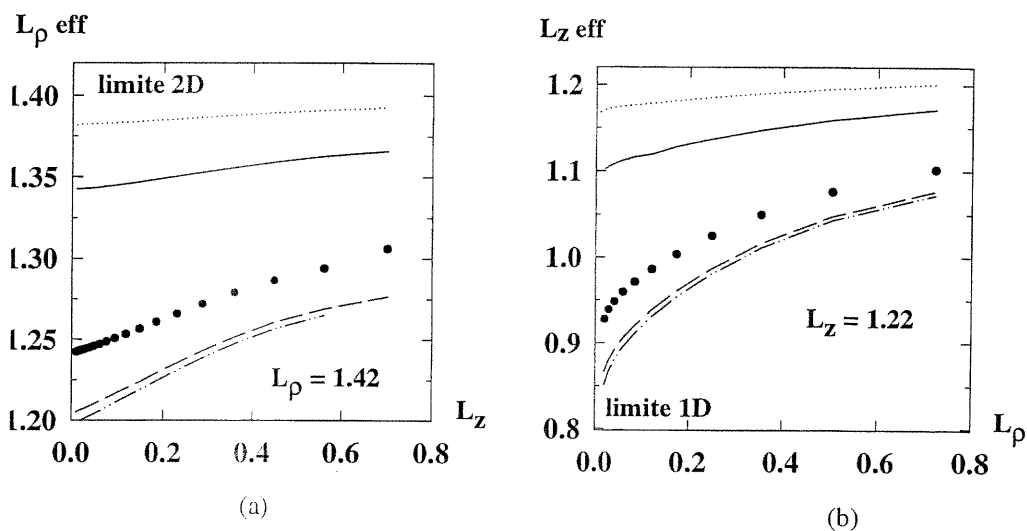


Figure 28. Longueurs de confinement effectives dans le 1<sup>er</sup> état excité du polaron lié dans CdS, CdSe, CdTe, GaAs, InSb. (a) :  $L_{\rho eff}$  en fonction de  $L_z$  pour  $L_\rho = 1.41$ . (b) :  $L_{z eff}$  en fonction de  $L_\rho$  pour  $L_z = 1.22$ .

## CHAPITRE 5

### Magnétopolaron dans un point quantique

Dans un matériau polaire, un électron en excès dans le réseau interagit avec les phonons optiques longitudinaux, formant des polarons, caractérisés par des énergies déplacées vers des valeurs inférieures et une masse renormalisée [71, 72]. Expérimentalement, les propriétés polaroniques sont étudiées par résonance cyclotron : en présence d'un champ magnétique, la différence d'énergie entre l'état fondamental et un état excité de l'électron est mesurée si la transition est autorisée. La masse cyclotron polaronique correspondante est déduite en fonction de l'amplitude du champ magnétique et de son inclinaison par rapport à l'axe  $z$ . Il est donc utile de s'intéresser au comportement du polaron confiné en présence d'un champ magnétique.

#### 5.1 Généralités

En volume, le polaron en présence d'un champ magnétique a été étudié sous l'appellation de magnétopolaron [73]. Le cas du couplage polaire faible et du champ faible s'apparente au cas d'une particule libre dans un champ magnétique. Les niveaux de Landau de l'électron se trouvent déplacés de  $-\alpha$  par les effets d'énergie propre. Sa masse est remplacée par la masse polaronique. Il apparaît des effets d'accrochage ("pinning") quand les niveaux de Landau pénètrent le continuum des phonons [74, 75]. Le système présente des analogies avec la particule liée dans un puits de potentiel. La particule n'est cependant pas un électron mais un polaron, c'est à dire une particule étendue de rayon  $r_0$ .

Ainsi, en présence d'un champ magnétique faible tel que  $\omega_c \ll \omega_{LO}$ , la masse de bande de l'électron est remplacée par la masse du polaron dans l'expression de la fréquence cyclotron, notée  $\omega_c$ . Les niveaux de Landau restent linéaires en  $\omega_c$  mais avec une pente modifiée. Quand le champ magnétique s'élève et que la fréquence cyclotron devient supérieure à la fréquence des phonons LO ( $\omega_c \gg \omega_{LO}$ ), les niveaux de Landau ne sont plus linéaires en  $\omega_c$ . Dans la limite de champ magnétique (noté B) très fort, dans l'état fondamental, les électrons sont en rotation si rapide autour de la direction du champ que les ions du réseau ne peuvent pas suivre ce mouvement.

Le polaron est localisé, de rayon  $r_{0_{B \rightarrow \infty}} = (\frac{\omega_{LO}}{\omega_c})^{1/2} r_{0_{B \rightarrow 0}}$ . L'énergie propre atteint  $-\alpha(\frac{\omega_c}{\omega_{LO}})^{1/2}$ .

Dans un puits quantique, le magnétopolaron est traité en général dans l'approximation  $2D$  idéale [76, 77, 78, 79]; l'extension de la fonction d'onde électronique dans la direction perpendiculaire au puits est considérée infiniment faible [80, 81, 82, 71, 83, 84]. Cette approximation surestime les effets polaroniques. Elle permet cependant des formulations simples en première approche.

Dans le cas d'un polaron dans un fil quantique selon  $z$ , sous un champ perpendiculaire, le potentiel de confinement lève la dégénérescence des niveaux de Landau [85, 86, 45]. En outre, contrairement aux cas de volume et du puits ( $2D$ ) où un croisement des niveaux de Landau a lieu pour  $n\omega_c = \omega_{LO}$  ( $n$  entier) quelle que soit la géométrie, dans le cas du confinement parabolique quasi- $1D$ , l'apparition de cette résonance dépend fortement de l'énergie du confinement. Les niveaux d'énergie dus au confinement prennent un caractère de type niveaux de Landau en présence d'un champ magnétique fort. La masse cyclotron est essentiellement la masse cyclotron du polaron  $2D$  en l'absence de confinement. En couplage nul, c'est la masse de l'électron dans la bande de conduction.

Le problème du magnétopolaron dans un point quantique parabolique est généralement envisagé dans la limite du point  $2D$ ; seul le mouvement dans le plan  $(x, y)$  est considéré en supposant que l'électron est beaucoup plus fortement confiné selon la direction  $z$  ( $|\phi(z)|^2 = \delta(z)$ ) [46, 82, 43, 87, 47, 45].

Dans toutes ces études, l'approximation des phonons de volume est justifiée quand les structures sont confinées par l'application d'un champ magnétique sans intervention des modes de phonons de surface ou d'interface. Les résultats obtenus donnent des indications qualitatives.

## 5.2 Notre étude

Nous nous intéressons ici au système constitué d'un électron dans un matériau polaire, soumis à un potentiel harmonique anisotrope, sous un champ magnétique statique uniforme appliqué selon la direction  $z$ . Nous supposons que l'hamiltonien de Fröhlich reste valide en présence du champ magnétique. Cette hypothèse est raisonnable pour de faibles champs magnétiques. Par contre, sous un champs magnétique plus fort, la structure de bande se trouve modifiée et perd sa parabolicité. De

plus, les constantes diélectriques sont altérées. Par ailleurs, les orbites de Landau deviennent de plus en plus petites au risque de compromettre l'hypothèse du continu : quand le rayon des orbites devient inférieur à une distance interatomique, il conviendrait d'écrire un nouvel hamiltonien tenant compte de la nature discrète du réseau.

Notre hamiltonien de base est l'hamiltonien de Fröhlich dans lequel le terme cinétique contient le champ magnétique. Suite aux travaux de [28], nous choisissons de travailler dans la jauge symétrique définie par le potentiel vecteur  $\vec{A} = (-\frac{1}{2}B_y, \frac{1}{2}B_x, 0)$ . De fait, si dans la formulation exacte du problème, l'énergie ne dépend pas de la jauge utilisée, pour une solution variationnelle, la jauge la plus compatible avec le modèle donne les meilleurs résultats [73, 22]. Sous la forme adimensionnelle habituelle ( $\hbar = 1, 2m = 1, \hbar\omega_{LO} = 1$ ), dans l'approximation des phonons de volume, et dans la jauge symétrique pour le champ magnétique, notre hamiltonien s'écrit :

$$\begin{aligned} H &= H_e + H_{ph} + H_{int} + V(r) \\ H_e &= \hat{p}^2 + \frac{\Lambda^4}{16}\rho^2 + \frac{\Lambda^2}{2}\hat{l}_z \end{aligned}$$

$l_z = xp_y - yp_x$  est le moment angulaire dans la direction  $z$ .  $\Lambda^2$  est le rapport de l'énergie magnétique sur l'énergie des phonons LO :

$$\Lambda^2 = \frac{\omega_c}{\omega_{LO}} \quad (5.1)$$

Le potentiel de confinement harmonique anisotrope est le même qu'aux chapitres précédents, caractérisé par les constantes de ressort  $\Omega$  dans le plan  $(x, y)$  et  $K$  dans la direction  $z$ .

### 5.3 Choix du spectre modèle.

Nous généralisons le spectre modèle discuté dans [73, 24], d'un électron dans un champ magnétique et dans un potentiel de confinement harmonique isotrope. Nous considérons pour notre part un potentiel de confinement harmonique anisotrope. L'hamiltonien modèle s'écrit alors, dans la jauge symétrique :

$$H_{0,m} = \hat{p}^2 + \gamma^4\rho^2 + \beta^4\rho^2 + 2\gamma^2\hat{l}_z + \delta^4 z^2 \quad (5.2)$$

Suivant les valeurs des paramètres variationnels  $\beta$ ,  $\gamma$  et  $\delta$ , ce spectre présente différentes symétries :

- si  $\gamma = \delta = \beta = 0$ , c'est l'hamiltonien de l'électron libre;
- si  $\delta \neq 0$ ,  $\beta \neq 0$  et  $\gamma = 0$ , c'est l'hamiltonien d'un électron dans un potentiel harmonique  $3D$ , en l'absence de champ magnétique, comme au chapitre 3;
- si  $\delta = \beta = 0$ , c'est l'hamiltonien d'un électron dans un champ magnétique de force  $2\gamma^2$ , exprimé dans la jauge symétrique. Il a un spectre de valeurs propres dégénérées en raison du nombre infini de valeurs propres discrètes négatives de la composante  $z$  du moment angulaire électronique  $\hat{l}_z$ .
- si  $\delta = \beta$ , c'est l'hamiltonien d'un électron dans un puits de potentiel harmonique isotrope, dans un champ magnétique, utilisé par [28].

Les fonctions d'onde, les valeurs propres et la fonction de Green du modèle avec un confinement harmonique isotrope sont décrites dans [28]. Nous obtenons les équivalents pour le cas du potentiel anisotrope, en coordonnées cylindriques :

$$\begin{aligned}\Phi_{n,m,\nu}(\rho, \phi, z) &= \frac{a}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{\delta}{\sqrt{\pi} 2^\nu \nu!} \right)^{1/2} \left( \frac{n!}{(n+|m|)!} \right)^{1/2} \\ &H_\nu(\delta z) \exp\left(\frac{-\delta^2 z^2}{2}\right) \xi^{|m|/2} \exp(-\xi/2) L_n^{|m|}(\xi) \exp(im\phi) \\ \epsilon_{n,m,\nu} &= 2\gamma^2 m + 2a^2(|m| + 2n + 1) + (\nu + 1/2)2\delta^2\end{aligned}$$

$H_i$  est le polynôme d'Hermite de degré  $i$ .  $L_n^m$  est le polynôme de Laguerre associé.  $n$  est le nombre quantique radial, indice des niveaux de Landau ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ).  $m$  est le nombre quantique azimuthal ( $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ).  $\nu$  est l'indice des niveaux du potentiel harmonique en  $z$  ( $\nu = 0, 1, 2, \dots$ ). Dans le plan  $(x, y)$ , nous devons prendre en compte non seulement l'effet du champ magnétique, mais aussi l'effet du potentiel de confinement. Nous avons donc un paramètre variationnel composé noté  $a^2 = \sqrt{\beta^4 + \gamma^4}$  et  $\xi = a^2 \rho^2$ .

La fonction d'onde, l'énergie et les longueurs de confinement nominales et effectives dans la direction  $z$  et dans le plan  $(x, y)$  de l'état fondamental de ce spectre modèle sont respectivement :

$$\begin{aligned}\Phi_{000}(\vec{r}) &= \frac{a}{\sqrt{\pi}} \frac{\delta^{1/2}}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{\delta^2 z^2}{2}\right) \exp\left(-\frac{a^2 \rho^2}{2}\right) \\ \epsilon_{000} &= 2a^2 + \delta^2 \\ L_z &= \frac{1}{\sqrt{2K}} \quad L_\rho = \frac{1}{\left(\Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16}\right)^{1/4}} \\ L_{zeff} &= \frac{1}{\sqrt{2}\gamma} \quad L_{\rho eff} = \frac{1}{a}\end{aligned}$$

Le spectre des états excités de notre hamiltonien modèle est complexe. Les états excités d'énergies les plus faibles sont :

$$\begin{aligned}\epsilon_{0-10} &= -2\gamma^2 + 4a^2 + \delta^2 \\ \epsilon_{001} &= 2a^2 + 3\delta^2 \\ \epsilon_{010} &= 2\gamma^2 + 4a^2 + \delta^2 \\ \epsilon_{100} &= 6a^2 + \delta^2\end{aligned}$$

En l'absence de champ magnétique ( $\Lambda = 0$  et  $\gamma \rightarrow 0$ ), les états  $(0, 1, 0)$  et  $(0, -1, 0)$  sont dégénérés avec une énergie  $4a^2 + \delta^2$  (cf spectre gaussien, chapitre 3). En présence d'un champ magnétique,  $\epsilon_{0,1,0} > \epsilon_{0,-1,0} \geq \epsilon_{0,0,0}$ , quelles que soient les valeurs des paramètres  $a$  et  $\delta$ . Les états  $(0, -1, 0)$  et  $(0, 0, 0)$  sont dégénérés pour  $a = \gamma$ , c'est à dire en l'absence de confinement géométrique dans le plan  $(x, y)$ , avec une énergie de  $2\gamma^2 + \delta^2$ . Dans la limite  $2D$ , en négligeant le mouvement dans la direction  $z$ ,  $\epsilon_{0,0} \leq \epsilon_{0,-1} \leq \epsilon_{0,1}$ . L'état fondamental étant  $(0, 0)$ , seuls les états  $(0, -1)$  et  $(0, 1)$  sont intéressants par rapport aux transitions optiques.

Les fonctions d'onde et énergies respectives des état  $(0, 1, 0)$  et  $(0, -1, 0)$  de notre spectre modèle sont données dans le tableau suivant :

fonction d'onde	énergie
$\Phi_{0,1,0} = \frac{a^2\delta^{1/2}}{\pi^{3/4}} \exp - \left(\frac{\delta^2 z^2}{2}\right) \exp - \left(\frac{a^2 \rho^2}{2}\right) \exp (i\phi) \rho$	$\epsilon_{0,1,0} = 2\gamma^2 + 4a^2 + \delta^2$
$\Phi_{0,-1,0} = \frac{a^2\delta^{1/2}}{\pi^{3/4}} \exp - \left(\frac{\delta^2 z^2}{2}\right) \exp - \left(\frac{a^2 \rho^2}{2}\right) \exp (-i\phi) \rho$	$\epsilon_{0,-1,0} = -2\gamma^2 + 4a^2 + \delta^2$

Les longueurs de confinement caractéristiques sont les mêmes dans ces deux états :

$$\begin{aligned}L_z &= \frac{1}{\sqrt{2}K} & L_\rho &= \frac{\sqrt{2}}{\left(\Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16}\right)^{1/4}} \\ L_{z\text{eff}} &= \frac{1}{\sqrt{2}\gamma} & L_{\rho\text{eff}} &= \frac{\sqrt{2}}{a}\end{aligned}$$

La longueur de confinement dans le plan  $(x, y)$  dépend à la fois du potentiel de confinement de force  $\Omega$  appliqué et du champ magnétique. Nous désignons la longueur de confinement dans le plan  $(x, y)$  due au confinement harmonique ( $\Omega$ ) seul par  $L_\Omega$  définie par  $L_\Omega = L_\rho(\Lambda = 0)$ .

Nous appliquons le procédé utilisé aux chapitres précédents et dérivons les expressions variationnelles de Fock obtenues à partir de ces états. La somme sur les états du spectre modèle magnétique est effectuée grâce à la règle de somme exposée

dans [88]. Nous introduisons les notations suivantes :

$$\begin{aligned}\mu &= \frac{\delta^2 (1 - \cosh(2\gamma^2 t) e^{-2a^2 t})}{a^2 (1 - e^{-2\delta^2 t})} - 1 \\ \mu_0 &= \frac{\delta^2}{a^2} - 1\end{aligned}$$

En introduisant le spectre modèle dans l'équation 3.2, nous obtenons pour l'état fondamental :

$$E_{000} = \frac{\delta^2}{2} + a^2 + \frac{K^4}{2\delta^2} + \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right) \frac{1}{a^2} + F_{000}(\delta, a) \quad (5.3)$$

Le terme de Fock  $F_{000}(\delta, a)$  est défini par :

$$F_{000}(\delta, a) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha \begin{cases} \delta \int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{\sqrt{1-e^{-2\delta^2 t}}} \frac{\tan^{-1} \sqrt{\mu}}{\sqrt{\mu}} & \mu > 0 \\ \delta \int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{\sqrt{1-e^{-2\delta^2 t}}} \frac{\tanh^{-1} \sqrt{-\mu}}{\sqrt{-\mu}} & \mu < 0 \end{cases}$$

Nous retrouvons l'expression (14) de [45] lorsque  $\Omega$  et  $K$  tendent vers l'infini avec  $\delta \gg a \gg 1$ , dans la limite du point quantique quasi-0D.

L'expression variationnelle de Fock de Matz et Burkey obtenue à partir de l'état  $(0, 1, 0)$  du spectre modèle s'écrit (à partir de la relation 3.3) :

$$E_{0,1,0} = 2a^2 + \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{2}{a^2} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right) + \frac{\delta^2}{2} + \frac{K^4}{2\delta^2} + F_{0,1,0}(\delta, a) \quad (5.4)$$

$F_{0,1,0}(\delta, a)$  est le terme de Fock correspondant. A gauche de la première singularité qui a lieu en  $a^2 + \gamma^2 = 1/2$  :

$$\begin{aligned}F_{0,1,0} &= -\alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} \delta \int_0^\infty dt e^{-t} \left\{ \frac{1}{\sqrt{1-e^{-2\delta^2 t}}} \frac{\tanh^{-1} \sqrt{-\mu}}{\sqrt{-\mu}} \right. \\ &+ \frac{\delta^2}{4a^2} \frac{1}{\mu} \frac{1}{(1-e^{-2\delta^2 t})^{3/2}} \\ &\left. \left( \frac{\tanh^{-1} \sqrt{-\mu}}{\sqrt{-\mu}} - \frac{1}{1+\mu} \right) \left( e^{-2(a^2-\gamma^2)t} - 2 + e^{2(a^2-\gamma^2)t} \right) \right\}\end{aligned}$$

L'expression variationnelle obtenue à partir de l'état  $(0, -1, 0)$  s'écrit :

$$E_{0,-1,0} = 2a^2 - \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{2}{a^2} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right) + \frac{\delta^2}{2} + \frac{K^4}{2\delta^2} + F_{0,-1,0}(\delta, a) \quad (5.5)$$



La condition  $a^2 - \gamma^2 > 0$  assure que  $\epsilon_{0,-1,0} > \epsilon_{000}$ , et la condition  $\delta^2 > a^2 - \gamma^2$  fait que  $\epsilon_{0,-1,0} < \epsilon_{001}$ . Une première singularité dans le terme de Fock  $F_{0,-1,0}(\delta, a)$  apparaît en  $a^2 - \gamma^2 = 1/2$  :

$$\begin{aligned}
F_{0,-1,0}(\delta, a) = & -\alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} \delta \int_0^\infty dt e^{-t} \left\{ \frac{1}{\sqrt{1 - e^{-2\delta^2 t}}} \right. \\
& \left( \frac{\tanh^{-1} \sqrt{-\mu}}{\sqrt{-\mu}} \right. \\
& + \frac{\delta^2}{4a^2} \frac{1}{\mu} \frac{1}{1 - e^{-2\delta^2 t}} \left( \frac{\tanh^{-1} \sqrt{-\mu}}{\sqrt{-\mu}} - \frac{1}{1 + \mu} \right) \left( e^{-2(a^2 - \gamma^2)t} - 2 \right) \Bigg) \\
& + \frac{\delta^2}{4a^2} e^{2(a^2 - \gamma^2)t} \\
& \left( \frac{1}{(1 - e^{-2\delta^2 t})^{3/2}} \frac{1}{\mu} \left( \frac{\tanh^{-1} \sqrt{-\mu}}{\sqrt{-\mu}} - \frac{1}{\mu + 1} \right) \right. \\
& \left. \left. - \frac{1}{\mu_0} \left( \frac{\tanh^{-1} \sqrt{-\mu_0}}{\sqrt{-\mu_0}} - \frac{1}{\mu_0 + 1} \right) \right) \right\} \\
& + \frac{\alpha}{4} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\delta^3}{a^2} \frac{1}{2(a^2 - \gamma^2) - 1} \frac{1}{\mu_0} \left( \frac{\tanh^{-1} \sqrt{-\mu_0}}{\sqrt{-\mu_0}} - \frac{1}{\mu_0 + 1} \right)
\end{aligned}$$

Nous cherchons maintenant à évaluer les énergies de l'état fondamental et du premier état excité du magnétopolaron par minimisation de ces expressions variationnelles.

## 5.4 Résultats asymptotiques

### 5.4.1 Couplage faible - Champ fort

Le spectre modèle utilisé est de type magnétique. Il est donc particulièrement adapté à la description de la limite de champ élevé, dans laquelle le rayon de l'orbite de Landau est petit devant le rayon quantique du polaron et les longueurs de confinement dues aux potentiels paraboliques.

- $\Lambda \gg 1 \gg K, \Omega, \alpha$

$$\begin{aligned}
E_{000} &= \frac{\Lambda^2}{2} + K^2 - \alpha \ln \Lambda + \frac{4\Omega^4}{\Lambda^2} + \frac{\alpha}{2} \gamma_{euler} \\
E_p &= -\alpha \ln \Lambda + \frac{\alpha}{2} \gamma_{euler}
\end{aligned}$$

Dans cette limite de confinement faible, avec des corrections supplémentaires dues au confinement parabolique, on retrouve le résultat de [28] (équation 10) obtenu pour le polaron libre étudié avec le spectre modèle d'un électron dans un champ magnétique : à très fort champ magnétique, le polaron se comporte comme un électron dans un état de Landau (1<sup>er</sup> terme). Le second terme est l'énergie de l'oscillateur harmonique 1D dans la direction  $z$ . Le terme  $(-\alpha \ln \Lambda)$  représente une déformation statique du réseau qui s'est adapté à la position moyenne de l'électron.

Quant à l'état  $(0, -1, 0)$ , dans cette région à gauche de la singularité :

$$E_{0-10} = \frac{\Lambda^2}{2} - \alpha \ln \Lambda + \frac{8\Omega^4}{\Lambda^2} + K^2 + \frac{\alpha}{2} \gamma_{euler} \quad (5.6)$$

C'est une borne supérieure à  $E_{000}$ . La correction polaronique est celle de l'état fondamental.

- $\Lambda \gg K \gg 1 \gg \Omega, \alpha$

$$E_{000} = \frac{\Lambda^2}{2} + K^2 + \frac{4\Omega^4}{\Lambda^2} - \alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} K \ln \left( \frac{\Lambda}{K} \right) - \alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} K \ln 2$$

$$E_p = -\alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} K \ln \left( \frac{\Lambda}{2K} \right)$$

Le confinement quantique 1D entraîne, en l'absence de champ magnétique, un comportement polaronique 2D. Nous notons que l'application d'un champ magnétique élevé fait apparaître une divergence logarithmique en  $\Lambda$  de l'énergie propre, caractéristique d'un comportement 1D.

Pour l'état  $(0, -1, 0)$ , à gauche de la singularité, on obtient la même correction polaronique :

$$E_{0-10} = \frac{\Lambda^2}{2} + K^2 + \frac{8\Omega^4}{\Lambda^2} - \alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} K \ln \left( \frac{\Lambda}{K} \right) - \alpha \sqrt{\frac{2}{\pi}} K \ln 2$$

Ainsi, dans un champ magnétique très fort, le polaron se comporte comme un électron dans un état de Landau ( $\frac{\Lambda^2}{2}$ ), déplacé par l'effet de la polarisation ou du confinement, suivant la force relative de l'une et de l'autre. Le champ magnétique appliqué selon la direction  $z$  a un effet de confinement dans le plan transverse  $(x, y)$ .

#### 5.4.2 Couplage fort - Champ faible

Dans le cas d'un champ magnétique faible, le rayon de l'orbite de Landau est grand.

- $\Omega \gg \alpha \gg K \gg 1 \gg \Lambda$

$$E_{000} = 2\Omega^2 - \frac{\alpha^2}{\pi} \ln^2(2\Omega) + \frac{\pi K^4}{4\alpha^2 \ln^2(2\Omega)} + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^2}$$

$$E_p = -\frac{\alpha^2}{\pi} \ln^2(2\Omega) + \frac{\pi K^4}{4\alpha^2 \ln^2(2\Omega)}$$

On retrouve l'énergie harmonique  $2D$  ( $2\Omega^2$ ) corrigée par la polarisation du réseau induite par les oscillations de l'électron (divergence logarithmique en  $\Omega$ ). Le champ magnétique faible n'affecte pas l'énergie propre.

- $\Omega \gg K \gg \alpha \gg 1 \gg \Lambda$

$$E_{000} = 2\Omega^2 + K^2 - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha K \ln\left(\frac{2\Omega}{K}\right) + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^2}$$

$$E_p = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha K \ln\left(\frac{2\Omega}{K}\right)$$

C'est l'énergie harmonique  $2D$  ( $2\Omega^2$ ) et l'énergie harmonique  $1D$  ( $2K^2$ ) avec une correction de polarisation perturbative au comportement logarithmique (cf chapitre 3), inchangée par l'application du champ magnétique.

- $K \gg \alpha \gg \Omega \gg 1 \gg \Lambda$

$$E_{000} = K^2 - \frac{\pi}{8} \alpha^2 + \frac{8\Omega^4}{\pi\alpha^2} \left(1 + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^4}\right)$$

$$E_p = -\frac{\pi}{8} \alpha^2 + \frac{8\Omega^4}{\pi\alpha^2} \left(1 + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^4}\right)$$

C'est la même expression qu'au chapitre 3 en l'absence de champ magnétique, avec une correction faible due au champ magnétique. Le premier terme est l'énergie harmonique  $1D$ , le second représente l'énergie propre du polaron de Fröhlich  $2D$  en couplage fort. Le troisième terme indique une correction due au couplage harmonique en  $(x, y)$ .

Pour l'état  $(0, -1, 0)$ , à droite de la singularité :

$$E_{0-10} = K^2 - \frac{\pi}{16} \alpha^2 - \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{64\Omega^4}{\pi\alpha^2} \left(1 + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^4}\right)$$

$$E_p = -\frac{\pi}{16} \alpha^2 - \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{64\Omega^4}{\pi\alpha^2} \left(1 + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^4}\right)$$

L'énergie propre du polaron  $2D$  en couplage fort est plus faible dans le premier état excité qu'à l'état fondamental.

L'énergie de transition est augmentée par la contribution polaronique :

$$\Delta E = \frac{\pi\alpha^2}{16} - \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{56\Omega^2}{\pi\alpha^2} \left(1 + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^4}\right)$$

- $K \gg \Omega \gg \alpha \gg 1 \gg \Lambda$

$$E_{000} = K^2 + 2\Omega^2 - \sqrt{\frac{\pi}{2}}\alpha\Omega + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^2}$$

$$E_p = -\sqrt{\frac{\pi}{2}}\alpha\Omega$$

C'est l'énergie harmonique diminuée par l'effet de la polarisation. Par rapport au cas de champ nul du chapitre 3, il y a une légère augmentation due au champ, mais l'énergie propre est inchangée.

Pour l'état  $(0, -1, 0)$ , à droite de la singularité, nous obtenons un état excité d'oscillateur harmonique :

$$E_{0-10} = K^2 - \frac{\Lambda^2}{2} + 4\Omega^2 - \frac{\alpha}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Omega + \frac{\Lambda^4}{8\Omega^2}$$

$$E_p = -\frac{\alpha}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Omega$$

La correction polaronique est inférieure à celle obtenue à l'état fondamental. L'énergie de transition est celle de l'oscillateur harmonique  $2D(2\Omega^2)$  et entre états de Landau  $(\frac{\Lambda^2}{2})$ , augmentée par les effets de l'interaction polaronique et du confinement :

$$\Delta E = 2\Omega^2 - \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{\alpha}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Omega + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^4}$$

Quand le champ tend vers zéro, nous retrouvons les résultats du polaron libre dans un potentiel parabolique du chapitre 3 : l'énergie propre est légèrement accrue par l'application du champ magnétique. A l'état fondamental, nous notons l'absence de contribution proportionnelle au champ (en  $\Lambda^2$ ).

### 5.4.3 Couplage faible - Champ faible

- $1 \gg K \gg \Omega \gg \Lambda, \alpha$

$$E_{000} = -\alpha + \frac{K^2}{\sqrt{m^*}} + 2\Omega^2 + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^2}$$

La masse effective s'écrit :

$$m^* \approx 1 + \alpha/6$$

On retrouve l'énergie propre du polaron  $3D$  en couplage faible et l'énergie élastique d'un polaron lié à un potentiel harmonique, comme obtenue par la théorie des perturbations en couplage faible. La masse effective est renormalisée

à la masse effective du polaron 3D. Le champ magnétique contribue seulement un faible terme positif à l'énergie totale.

Dans l'état  $(0, -1, 0)$ , à gauche de la singularité :

$$E_{0-10} = -\alpha + \frac{K^2}{\sqrt{m^*}} + 4\Omega^2 + \frac{\Lambda^4}{8\Omega^2}$$

où la masse effective s'écrit :

$$m^* \approx 1 + \alpha/6$$

- $1 \gg \Lambda \gg K \gg \Omega, \alpha$

$$E_{000} = -\alpha + \frac{\Lambda^2}{2} \left(1 - \frac{\alpha}{12}\right) + K^2 \frac{4\Omega^4}{\Lambda^2}$$

$$m^* \approx 1 + \alpha/6$$

Le premier terme est l'énergie interne du polaron en couplage faible. Le second est l'énergie d'un électron dans un champ magnétique (premier niveau de Landau) avec une masse effective renormalisée.

L'état  $(0, -1, 0)$ , à gauche de la singularité, constitue une borne supérieure à l'état fondamental :

$$E_{0-10} = -\alpha + \frac{\Lambda^2}{2} \sqrt{m^*} + K^2 + \frac{8\Omega^4}{\Lambda^2}$$

$$m^* \approx 1 + \alpha/6$$

Le présent formalisme ne prédit pas de comportement de masse effective ni en couplage fort, ni quand  $\Lambda \gg \alpha$ . En couplage fort, le mouvement de l'électron est trop rapide pour que le réseau puisse le suivre. Lorsque le champ magnétique est fort, l'électron se déplace en orbite autour de la direction du champ si rapidement que les ions ne peuvent pas suivre son mouvement.

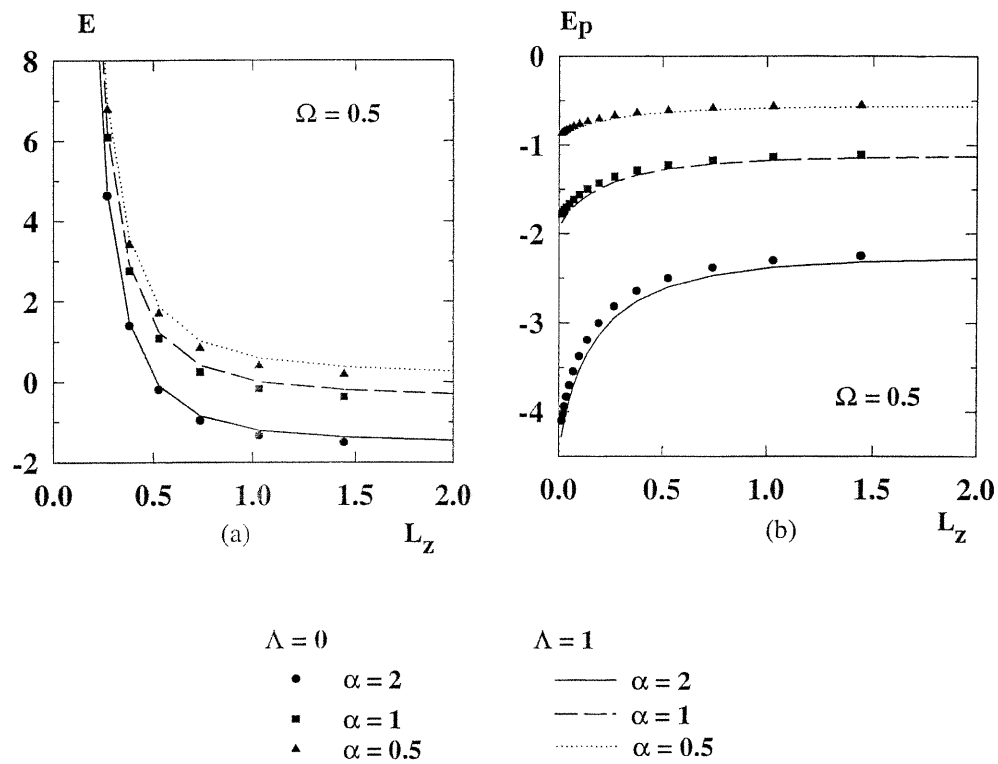


Figure 29. Magnétopolaron dans son état fondamental en fonction de  $L_z$  pour  $\Omega = 0.5$  et  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , avec  $\Lambda = 0$  ( $\rightarrow L_\rho = 2.0$ ) et  $\Lambda = 1$  ( $\rightarrow L_\rho = 1.68$ ). (a): Energie. (b): Energie propre.

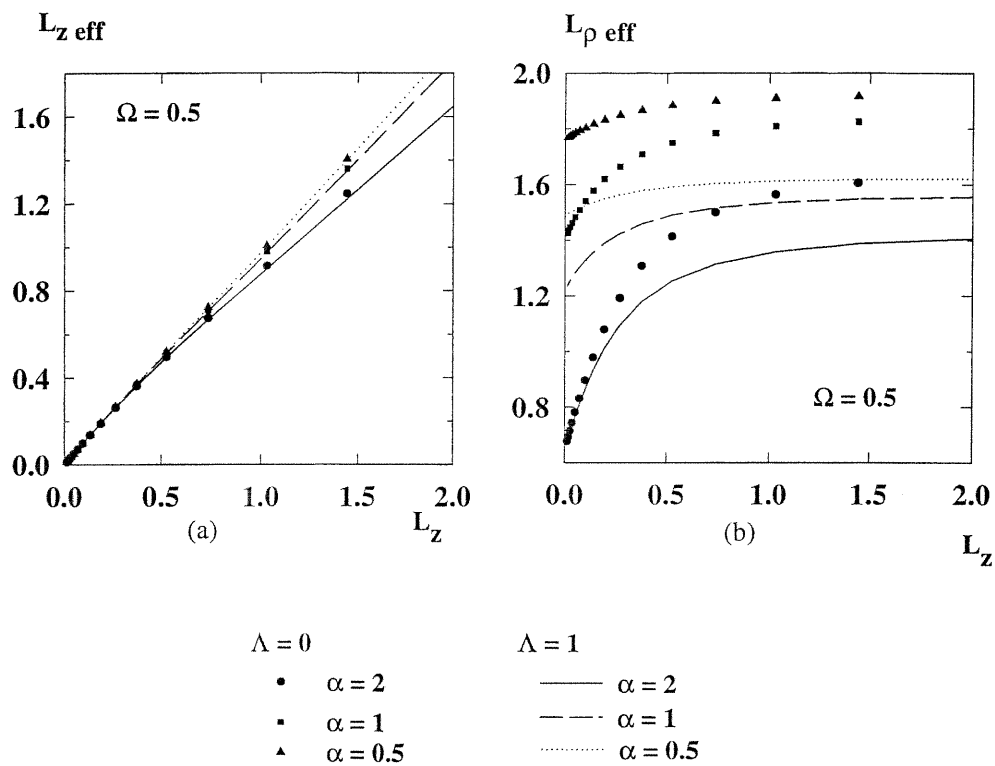


Figure 30. Magnétopolaron dans son état fondamental en fonction de  $L_z$  pour  $\Omega = 0.5$  ( $L_\rho = 1.68$ ) et  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , avec  $\Lambda = 0$  et  $\Lambda = 1$ . (a):  $L_{z \text{ eff}}$ . (b):  $L_{\rho \text{ eff}}$ .

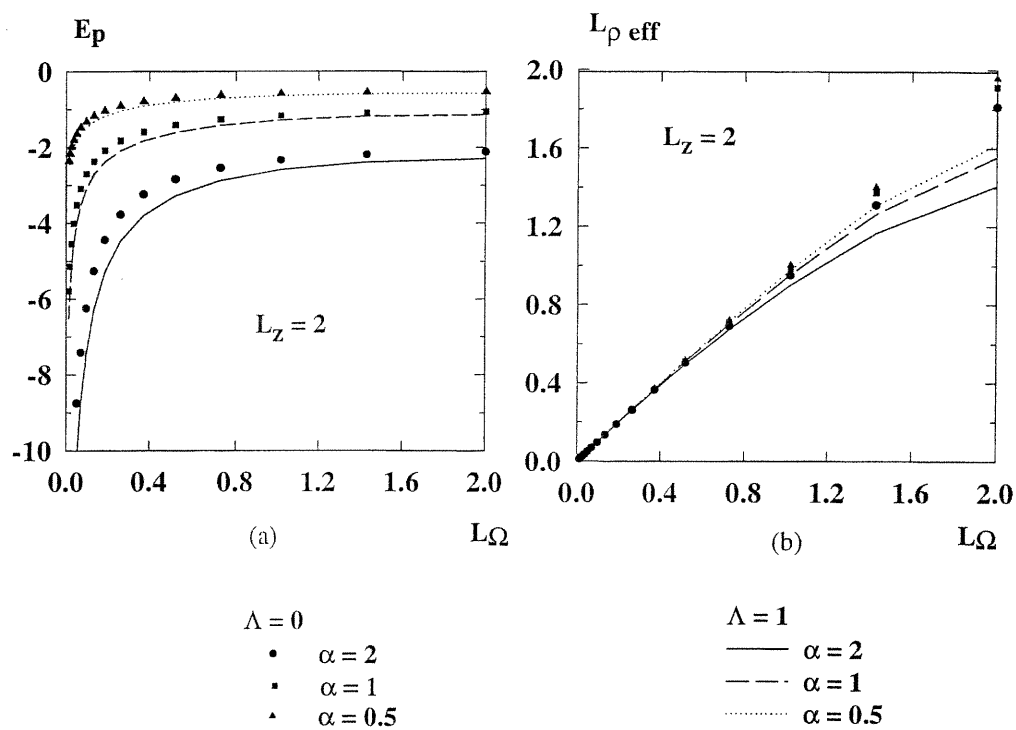


Figure 31. Magnétopolaron dans son état fondamental en fonction de  $L_\Omega$  pour  $L_z = 2$  ( $K = 0.35$ ) et  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , avec  $\Lambda = 0$  et  $\Lambda = 1$ . (a): Energie propre. (b):  $L_{\rho \text{ eff}}$ .



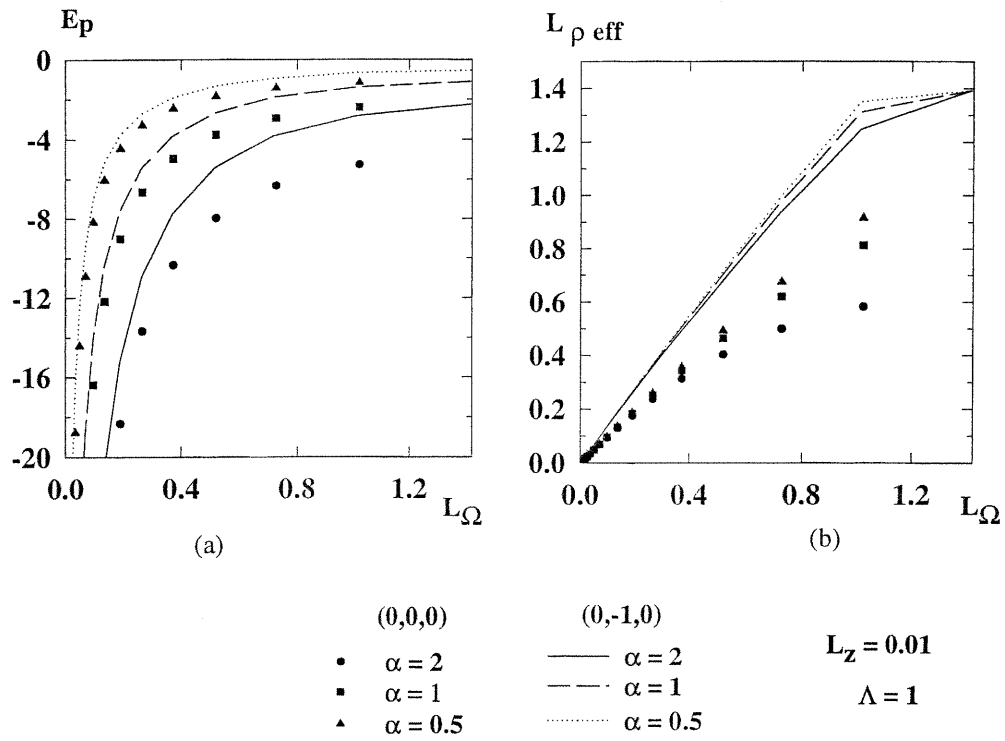


Figure 32. Magnétopolaron dans son état fondamental et l'état  $(0, -1, 0)$  fonction de  $L_\Omega$ , avec  $L_z = 0.01$  et  $\Lambda = 1$ , pour  $\alpha = 0.5, 1, 2$ . (a): Energie propre. (b):  $L_{\rho \text{ eff}}$ .

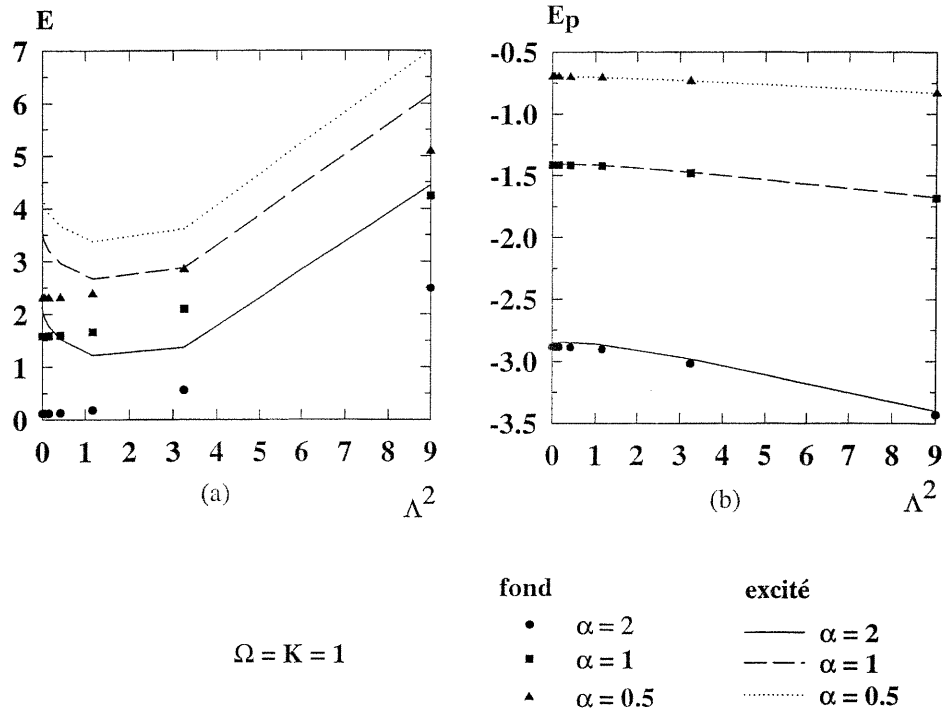


Figure 33. Magnétopolaron dans l'état fondamental et l'état  $(0, -1, 0)$  en fonction de  $\Lambda^2$  pour  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , avec  $L_z = 0.7$ ,  $\Omega = 1$ . (a): Energie. (b): Energie propre.

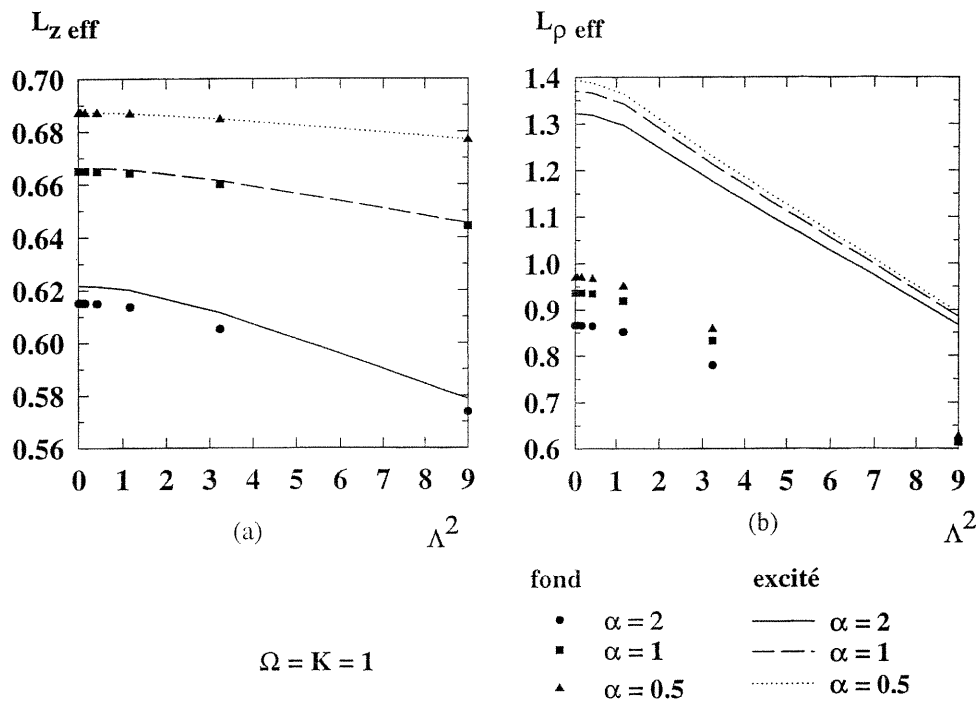


Figure 34. Magnétopolaron dans l'état fondamental et l'état  $(0, -1, 0)$  en fonction de  $\Lambda^2$  pour  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , avec  $L_z = 0.7$ ,  $\Omega = 1.0$ . (a):  $L_z \text{ eff}$ . (b):  $L_\rho \text{ eff}$ .

## 5.5 Résultats numériques

Nous nous intéressons d'abord à l'effet du confinement anisotrope sur l'énergie et l'énergie propre du magnétopolaron dans l'état fondamental. La **figure 29** présente l'évolution de l'énergie (**figure 29.a**) et de l'énergie propre (**figure 29. b**) du polaron en fonction de la longueur de confinement dans la direction  $z$  pour un confinement dans le plan  $(x, y)$  constant fixé par  $\Omega = 0.5$  c'est à dire avec une longueur de confinement nominale dans le plan  $(x, y)$   $L_\Omega = 2$ . Pour un confinement appliqué en  $z$  faible (longueurs de confinement élevées dans la direction  $L_z$ ), en l'absence de champ magnétique ( $\Lambda = 0$ ), nous retrouvons la limite asymptotique  $3D$  de l'énergie propre :  $E_p \rightarrow -\alpha$ . Quand  $L_z$  diminue, l'énergie propre augmente rapidement. Le couplage polaire a pour effet d'augmenter l'énergie propre. En présence d'un champ magnétique ( $\Lambda = 1$  ici), nous notons une augmentation de l'énergie propre, d'autant plus marquée que le couplage polaire est élevé (**figure 29 (b)**). Pour un couplage polaronique suffisamment important (**figure 30.a**,  $\alpha = 2$ ), sous champ magnétique, la longueur effective de confinement en  $z$  est sensiblement inférieure à la longueur effective en l'absence de champ magnétique qui correspond à la valeur nominale due au confinement appliqué en  $z$  :  $L_{z_{eff}}(\alpha = 2, \Lambda \neq 0) < L_{z_{eff}}(\alpha = 2, \Lambda = 0)$ . Ainsi, il apparaît que le couplage polaire et le champ magnétique contribuent à localiser le polaron en accentuant l'effet du confinement dans la direction  $z$ . De même, la longueur de confinement dans le plan  $(x, y)$  se trouve diminuée de la valeur due au confinement appliqué  $L_{\rho_{eff}} = L_\Omega = \frac{1}{\Omega} = 2$  à une valeur inférieure, ce qui met en évidence un effet de confinement du champ magnétique dans le plan  $(x, y)$ .

A la **figure (30 (b))**,  $L_{\rho_{eff}}$  tend vers  $L_{\rho_{eff}} = \frac{1}{(\Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16})^{1/4}}$  sous faible confinement selon  $z$  et pour  $\Lambda = 1$ . Elle reste pratiquement indépendante du confinement dans la direction  $z$  jusqu'à la limite  $L_z \rightarrow 0$  où l'effet du confinement selon  $z$  intervient.

Pour un confinement fixé dans la direction  $z$  tel que  $L_z = 2$ , la **figure 31 (a)** présente l'évolution de l'énergie propre du magnétopolaron dans l'état fondamental en fonction de la longueur de confinement  $L_\Omega$  dans le plan  $(x, y)$  due au potentiel harmonique seul, en l'absence de champ magnétique ( $\Lambda = 0$ ) et sous champ magnétique ( $\Lambda = 1$ ). Il apparaît que l'énergie propre est augmentée sous champ magnétique d'autant plus que le couplage polaire ( $\alpha$ ) est fort. Ceci résulte de l'effet de localisation dû au champ, tel que démontré à la **figure 31 (b)** : pour  $L_\Omega = 2$ , en l'absence de champ magnétique la longueur de confinement effective dans le plan  $(x, y)$  est bien  $L_{\rho_{eff}} = L_\Omega = 2$ , alors que pour un champ  $\Lambda = 1$ , elle est réduite à  $L_{\rho_{eff}} = 1.68$ . Puis, lorsque le confinement en  $\Omega$  appliqué dans le plan  $(x, y)$  augmente, la longueur de confinement effective dans le plan  $(x, y)$  diminue en  $\frac{1}{\Omega}$  à partir de ces valeurs de confinement effectif déterminées par le potentiel et le champ. Pour un potentiel

de confinement en  $(x, y)$  suffisamment fort, la longueur de confinement effective ne dépend plus du champ magnétique et  $L_{\rho_{eff}} \rightarrow L_{\Omega} \rightarrow 0$ , dans la limite  $1D$ . De fait, à la **figure 31 (a)**, l'énergie propre ne dépend plus du champ magnétique dès que la limite  $1D$  est atteinte ( $L_{\Omega} \rightarrow 0$ ).

La **figure 32** s'intéresse à l'état fondamental et à l'état  $(0, -1, 0)$  dans la limite quasi- $2D$  ( $L_z = 0.01$ ), sous un champ magnétique  $\Lambda = 1$ . L'énergie propre est plus élevée à l'état fondamental qu'à l'état  $(0, -1, 0)$ . L'état  $(0, -1, 0)$  est bien le premier état excité de notre système à droite de la singularité, c'est à dire pour  $\delta^2 > a^2 - \gamma^2 > 0.5$ . A gauche, il représente une borne supérieure de l'état fondamental, de même énergie propre. La longueur effective de confinement dans le plan  $(x, y)$  part de la valeur nominale déterminée conjointement par le potentiel harmonique en  $\Omega$  appliqué et le champ magnétique  $L_{\rho_{eff}} = L_{\rho} = 1.39$  dans l'état excité,  $L_{\rho_{eff}} = L_{\rho} = 0.98$  dans l'état fondamental, dans la limite de faible potentiel de confinement en  $(x, y)$  ( $L_{\Omega} = 1.4$ ). Elle diminue avec l'augmentation du potentiel de confinement  $(x, y)$  d'autant plus rapidement que le couplage polaire  $\alpha$  est fort, et tend vers zéro dans la limite de confinement élevé, indépendamment de  $\alpha$  (**figure 32 (b)**).

La **figure 33** présente l'évolution de l'énergie et de l'énergie propre à l'état fondamental et dans l'état  $(0, -1, 0)$  en fonction du champ magnétique, pour des confinements géométriques fixés : dans le plan  $(x, y)$ , le potentiel harmonique donne une longueur de confinement nominale  $L_{\Omega} = 1.41$  dans l'état  $(0, -1, 0)$  et  $L_{\Omega} = 1.0$  dans l'état fondamental. Dans la direction  $z$ , le potentiel appliqué donne une longueur de confinement nominale  $L_z = 0.71$  identique dans les deux états. L'état  $(0, -1, 0)$  a la même énergie propre que l'état fondamental (**figure 33 (b)**). De fait, dans ces conditions,  $\delta^2 > a^2 - \gamma^2$ , mais le système se trouve à gauche de la singularité. L'état  $(0, -1, 0)$  est un état de Landau excité. Les longueurs de confinement effectives correspondantes dans la direction  $z$  et dans le plan  $(x, y)$  sont représentées à la **figure 34**. En l'absence de champ magnétique,  $L_{z_{eff}}$  est diminuée par rapport à  $L_z = 0.71$  par l'effet de localisation dû au couplage polaire pour les deux états considérés. Le champ magnétique tend à faire diminuer la longueur de confinement effective dans la direction  $z$ , d'autant plus que le couplage polaire  $\alpha$  est fort (**figure 34 (a)**). Dans le plan  $(x, y)$ , en l'absence de champ, le confinement est légèrement accru par le confinement selon la direction  $z$ , proportionnellement à la force du couplage polaire :  $L_{\rho_{eff}}$  tend vers 1.4 par valeur inférieure dans l'état  $(0, -1, 0)$ , et  $L_{\rho_{eff}}$  tend vers 1 par valeur inférieure dans l'état  $(0, 0, 0)$ .  $L_{\rho_{eff}}$  diminue linéairement avec le champ magnétique, d'autant plus rapidement que le couplage polaire en  $\alpha$  est élevé.

## 5.6 Couplage coulombien

### 5.6.1 Introduction

Nous cherchons maintenant à évaluer comment le champ magnétique affecte les propriétés du polaron lié.

Dans le cas d'un fil de GaAs [86], quand le rayon du fil devient faible, l'énergie de liaison du magnétopolaron lié dans l'état fondamental diverge, tandis que celle du magnétopolaron dans l'état excité tend vers les résultats 1D. Dans des fils de grand rayon, les résultats sont semblables à ceux obtenus en volume. Quand le champ magnétique croît, les énergies de liaison dans l'état fondamental et dans l'état excité augmentent et varient plus rapidement pour des rayons de fil grands. Le cas d'un fil très mince, tel que le rayon effectif de confinement de l'électron dans le plan  $(x, y)$  est petit devant le rayon de Bohr ( $L_\rho \ll a_o^*$ ) est étudié dans [89]. L'électron dans le plan  $(x, y)$  est alors fortement confiné à l'origine; le terme coulombien peut être traité de façon perturbative. Pour un électron libre dans le champ magnétique, la résonance a lieu à  $\omega_c = \omega_{LO}$ . S'il est confiné dans le fil, sous champ magnétique,  $\omega_c$  dépend de la force de ce confinement, et la présence du défaut coulombien fait que  $\omega_c$  dépend à la fois de la force de ce confinement et du potentiel coulombien. L'effet d'accrochage a toujours lieu, mais il y a plus d'une valeur de résonance  $\omega_c$ . En outre, la masse est différente de celle obtenue en l'absence de confinement et de potentiel coulombien. Ces masses cyclotron croissent avec  $\omega_c$  à confinement fixé, et prennent plusieurs valeurs.

En présence d'un champ magnétique, l'énergie de liaison du donneur hydrogénoïde dépend de la concurrence entre deux longueurs caractéristiques : d'une part le rayon de Bohr effectif de l'impureté dans le matériau massif  $a_o^*$ , d'autre part le rayon effectif de confinement dans le plan  $(x, y)$ , défini par le confinement géométrique et l'effet du champ magnétique. Suivant les grandeurs respectives de ces deux rayons, le confinement ou l'interaction coulombienne prédominent [90].

### 5.6.2 Notre étude

Nous reprenons le système du chapitre précédent, à savoir celui d'un électron dans un point parabolique anisotrope de matériau semiconducteur polaire, soumis à un champ magnétique uniforme et constant selon la direction  $z$ . En présence d'un

défaut hydrogéoïde situé au centre ( $r = 0$ ), l'hamiltonien est donné par :

$$H = \hat{p}^2 + \frac{\Lambda^4}{16}\rho^2 + \frac{\Lambda^2}{2}\hat{l}_z + V(r) + \tilde{V}_{coul} + H_{phonon} + H_{interaction} \quad (5.7)$$

Le potentiel d'interaction coulombienne s'écrit dans les mêmes notations qu'au chapitre 4 :

$$\tilde{V}_{coul} = -\frac{2\sqrt{R}}{r}$$

Nous utilisons le spectre modèle magnétique, dont les fonctions d'onde ignorent la corrélation électron-défaut.

Avec ce spectre modèle, l'expression variationnelle de l'énergie de l'état fondamental est :

$$E_{000} = \frac{\delta^2}{2} + a^2 + \frac{K^4}{2\delta^2} + \frac{\Omega^4}{a^2} + \frac{\Lambda^4}{16a^2} + \tilde{V}_{coul} - \sqrt{\frac{2}{\pi}}\alpha F_{000}(\delta, a) \quad (5.8)$$

Le terme de Fock est le même qu'à dans la section précédente :

$$F_{000}(\delta, a) = -\sqrt{\frac{2}{\pi}}\alpha \begin{cases} \delta \int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{\sqrt{1-e^{-2\delta^2 t}}} \frac{\tan^{-1}\sqrt{\mu}}{\sqrt{\mu}} & \mu > 0 \\ \delta \int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{\sqrt{1-e^{-2\delta^2 t}}} \frac{\tanh^{-1}\sqrt{-\mu}}{\sqrt{-\mu}} & \mu < 0 \end{cases}$$

Quant au potentiel coulombien, il s'écrit :

$$\tilde{V}_{coul} = \begin{cases} -4\delta \sqrt{\frac{R}{\pi}} \frac{\tan^{-1}\sqrt{\mu_0}}{\sqrt{\mu_0}} & \mu_0 > 0 \\ -4\delta \sqrt{\frac{R}{\pi}} \frac{\tanh^{-1}\sqrt{-\mu_0}}{\sqrt{-\mu_0}} & \mu_0 < 0 \end{cases}$$

A l'état fondamental, l'expression variationnelle du terme d'énergie coulombienne a la même forme en l'absence ou en présence de champ magnétique; l'effet du champ intervient dans la valeur du paramètre variationnel  $a$ .

Dans les états  $(0, -1, 0)$  ou  $(0, 1, 0)$  du spectre modèle, le terme coulombien est :

$$\tilde{V}_{coul} = \begin{cases} -2\sqrt{\frac{R}{\pi}} \frac{\delta}{\mu_0} \left(1 + \frac{\tan^{-1}\sqrt{\mu_0}}{\sqrt{\mu_0}}(\mu_0 - 1)\right) & \mu_0 > 0 \\ -2\sqrt{\frac{R}{\pi}} \frac{\delta}{\mu_0} \left(1 + \frac{\tanh^{-1}\sqrt{-\mu_0}}{\sqrt{-\mu_0}}(\mu_0 - 1)\right) & \mu_0 < 0 \end{cases}$$

### 5.6.3 Résultats asymptotiques

Comme au chapitre 4, nous définissons l'énergie de liaison du défaut coulombien par la différence entre les énergies du système en l'absence et en présence de l'interaction coulombienne respectivement :

$$E_l = E(R = 0) - E(R \neq 0)$$

### 5.6.3.1 Limite isotrope

Dans la limite de confinement isotrope ( $\Omega = K$ ), si la force du confinement appliqué au système est dominante, dans l'état fondamental et dans l'état  $(0, -1, 0)$  le potentiel coulombien tend vers :

$$\begin{aligned}\tilde{V}_{coul}(000) &\rightarrow -4\beta\sqrt{\frac{R}{\pi}} \\ \tilde{V}_{coul}(0, -1, 0) &\rightarrow -\frac{8}{3}\beta\sqrt{\frac{R}{\pi}}\end{aligned}$$

L'application d'un champ magnétique n'affecte pas l'isotropie du système ni l'énergie de liaison du défaut. Nous retrouvons l'énergie obtenue au chapitre 4 avec un terme correctif en  $\frac{\Lambda^4}{16\Omega^2}$  à l'état fondamental, et en  $\frac{\Lambda^4}{8\Omega^2}$  dans l'état calculé à partir de l'état excité du spectre modèle. L'énergie de liaison croît avec la force de confinement quel que soit le champ, indépendamment du couplage électron-phonons :

$$\Omega = K \gg \alpha \gg 1 \gg \Lambda, \sqrt{R}$$

$$\begin{aligned}E_{000} &= 3\Omega^2 + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^2} - 4\Omega\sqrt{\frac{R}{\pi}} - \sqrt{\frac{2}{\pi}}\alpha\Omega \\ E_l &= 4\sqrt{\frac{R}{\pi}}\Omega \\ E_{0-10} &= 5\Omega^2 + \frac{\Lambda^4}{8\Omega^2} - \frac{11}{12}\alpha\sqrt{\frac{2}{\pi}}\Omega - \frac{8}{3}\sqrt{\frac{R}{\pi}}\Omega - \frac{\Lambda^2}{2} \\ E_l &= \frac{8}{3}\sqrt{\frac{R}{\pi}}\Omega\end{aligned}$$

L'état  $(0, -1, 0)$  observé est un état excité du potentiel harmonique isotrope. De même, si l'effet de la polarisation est prépondérant, l'énergie de liaison est inchangée par rapport au cas sans champ magnétique :

$$\alpha \gg \Omega = K \gg 1, \Lambda, \sqrt{R}$$

$$\begin{aligned}E_{000} &= -\frac{\alpha^2}{3\pi} - \frac{4\sqrt{2R}}{3\pi}\alpha + \frac{9\pi\Omega^4}{4\alpha^2} + \left(\Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16}\right)\frac{9\pi}{2\alpha^2} \\ E_l &= 4\frac{\sqrt{2R}}{3\pi}\alpha \\ E_{0-10} &= -\frac{11^2\alpha^2}{12 \cdot 60\pi} - \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{45 \cdot 60\pi\Omega^4}{11^2\alpha^2} + \frac{15\pi\Lambda^4}{11^2\alpha^2} \\ E_l &= \frac{11}{6\pi}\sqrt{2R}\alpha\end{aligned}$$



Lorsque le champ magnétique appliqué est fort, quelle que soit la force du confinement, l'énergie de liaison diverge de façon logarithmique en  $\ln\left(\frac{\Lambda}{\Omega}\right)$  :

$$\Lambda \gg \Omega = K \gg 1, \alpha, \sqrt{R}$$

$$E_{000} = \frac{\Lambda^2}{2} + \Omega^2 + \frac{4\Omega^4}{\Lambda^2} - 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} \Omega \ln\left(\frac{\Lambda}{\Omega}\right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha \Omega \ln\left(\frac{\Lambda}{\Omega}\right)$$

$$E_l = 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} \Omega \ln\left(\frac{\Lambda}{\Omega}\right)$$

$$E_{0-10} = \Omega^2 + \frac{8\Omega^2}{\Lambda^2} + \frac{\Lambda^2}{2} - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha \Omega \ln\left(\frac{\Lambda}{\Omega}\right) - 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} \ln\left(\frac{\Lambda}{\Omega} \Omega\right)$$

$$E_l = 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} \ln\left(\frac{\Lambda}{\Omega}\right) \Omega$$

$$\Lambda \gg 1 \gg \Omega = K, \alpha, \sqrt{R}$$

$$E_{000} = \frac{\Lambda^2}{2} + \Omega^2 + \frac{4\Omega^4}{\Lambda^2} - 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} \Omega \ln\left(\frac{\Lambda}{\Omega}\right) - \alpha \ln \Lambda + \frac{\alpha}{2} \gamma_{euler}$$

$$E_l = 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} \Omega \ln\left(\frac{\Lambda}{\Omega}\right)$$

$$\Lambda \gg 1 \gg \sqrt{R} \gg \Omega = K, \alpha$$

$$E_{000} = \frac{\Lambda^2}{2} - \frac{8R}{\pi} \ln^2 \Lambda - \alpha \ln \Lambda + \frac{\alpha}{2} \gamma_{euler}$$

$$E_l = \frac{8R}{\pi} \ln^2 \Lambda$$

Dans la limite du point isotrope, quand le confinement domine, l'énergie de liaison ne dépend pas du champ magnétique. Elle diminue quand la longueur de confinement augmente, et est accentuée par l'effet de la polarisation. Par contre, l'application d'un champ magnétique suffisamment élevé, en régime de confinement fort, brise l'isotropie du système et en diminue la dimensionalité. L'énergie de liaison croît avec cette diminution de dimensionalité. Quand le champ domine le confinement, l'énergie de liaison dépend du champ de façon logarithmique. Le champ magnétique confinant l'électron dans le plan perpendiculaire, l'électron est beaucoup plus proche, en moyenne, du donneur. L'interaction coulombienne s'en trouve renforcée; l'étendue de la fonction d'onde dans la direction du champ diminue [91].

### 5.6.3.2 Limite 1D

Dans la limite de confinement géométrique 2D dans le plan  $(x, y)$ , sous champ magnétique faible, l'énergie de liaison reste divergente en  $\ln(2\Omega)$ . Elle diminue quand le rayon du fil ( $L_\rho$ ) augmente. Elle diverge quand il tend vers zéro [92] :

$$\Omega \gg K \gg \alpha \gg 1 \gg \Lambda, \sqrt{R}$$

$$\begin{aligned} E_{000} &= K^2 + 2\Omega^2 + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^2} \\ &\quad - 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} K \ln\left(\frac{2\Omega}{K}\right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha K \ln\left(\frac{\Lambda}{K}\right) \\ E_l &= 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} K \ln\left(\frac{2\Omega}{K}\right) \end{aligned}$$

$$\Omega \gg \alpha \gg K \gg 1 \gg \Lambda, \sqrt{R}$$

$$\begin{aligned} E_{000} &= 2\Omega^2 - \frac{3}{4\pi} \alpha^2 \ln^2(2\Omega^2) \\ &\quad + \frac{\pi K^4}{\alpha^2 \ln^2(2\Omega)} - \frac{2}{\pi} \alpha \sqrt{2R} \ln^2(2\Omega) \\ E_l &= \frac{2}{\pi} \sqrt{2R} \alpha \ln^2(2\Omega) \end{aligned}$$

Ainsi, les effets polaroniques sont importants dans des fils de faible rayon. Sous champ magnétique élevé, l'énergie de liaison diverge en  $\ln\left(\frac{\Lambda}{K}\right)$  :

$$\Lambda \gg \Omega \gg K \gg 1, \alpha, \sqrt{R}$$

$$\begin{aligned} E_{000} &= 2\Omega^2 + K^2 \\ &\quad + \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{4\Omega^4}{\Lambda^2} - 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} K \ln\frac{\Lambda}{K} - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \alpha K \ln\frac{\Lambda}{K} \\ E_l &= 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} K \ln\left(\frac{\Lambda}{K}\right) \end{aligned}$$

### 5.6.3.3 Limite 3D

Dans la limite du polaron 3D obtenue pour un confinement anisotrope faible, un champ magnétique fort entraîne la divergence de l'énergie de liaison, caractéristique d'un confinement 2D :

$$\Lambda \gg 1 \gg K \gg \Omega, \alpha, \sqrt{R}$$

$$\begin{aligned}
E_{000} &= K^2 + \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{4\Omega^4}{\Lambda^2} \\
&\quad - \alpha \ln \Lambda - 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} K \ln\left(\frac{\Lambda}{K}\right) + \frac{\alpha}{2} \ln 2 + \frac{\alpha}{2} \gamma_{euler} \\
E_l &= 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} K \ln\left(\frac{\Lambda}{K}\right) \\
E_{0-10} &= \frac{\Lambda^2}{2} + K^2 + \frac{8\Omega^4}{\Lambda^2} \\
&\quad - 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} K \ln\left(\frac{\Lambda}{K}\right) + \frac{\alpha}{2} \ln 2 + \frac{\alpha}{2} \gamma_{euler} \\
E_l &= 4\sqrt{\frac{R}{\pi}} K \left( \ln\left(\frac{\Lambda}{K}\right) - \frac{1}{2} \right)
\end{aligned}$$

Dans la limite du polaron  $2D$ , en champ magnétique faible, l'énergie de liaison est une fonction linéaire de la force de confinement dans le plan  $(x, y)$  et de la polarisation. En champ fort, elle dépend du confinement  $1D$  en  $z$  et présente un comportement logarithmique par rapport au champ.

#### 5.6.3.4 limite $2D$

Dans la limite de confinement géométrique  $1D$ , un champ magnétique faible n'affecte pas l'énergie de liaison :

$$K \gg \alpha \gg \Omega \gg 1 \gg \Lambda, \sqrt{R}$$

$$\begin{aligned}
E_{000} &= K^2 - \frac{\pi\alpha^2}{8} + \frac{8}{\pi\alpha^2} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda}{16} \right) - \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{R}{2}} \alpha \\
E_l &= \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{R}{2}} \alpha \\
E_{0-10} &= -\frac{\Lambda^2}{2} + K^2 \\
&\quad - \frac{\alpha^2\pi}{64} + \frac{16^2}{\pi\alpha^2} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right) - \frac{\pi}{8} \sqrt{\frac{R}{2}} \alpha \\
E_l &= \frac{\pi}{8} \sqrt{\frac{R}{2}} \alpha
\end{aligned}$$

$$K \gg \Omega \gg \alpha \gg 1 \gg \Lambda, \sqrt{R}$$

$$E_{000} = K^2 + 2\Omega^2 + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^2} - 2\sqrt{R\pi}\Omega - \sqrt{\frac{\pi}{2}}\alpha\Omega$$

$$\begin{aligned}
E_l &= 2\sqrt{R\pi}\Omega \\
E_{0-10} &= -\frac{\Lambda^2}{2} + 4\Omega^2 + \frac{\Lambda^4}{8\Omega^2} + K^2 - \sqrt{R\pi}\Omega - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\alpha\Omega \\
E_l &= \sqrt{R\pi}\Omega
\end{aligned}$$

Un champ magnétique fort provoque une divergence identique au cas du confinement  $2D$ . La fréquence cyclotron augmente quand la largeur du puits ( $L_\rho$ ) diminue. Elle reste inférieure à la fréquence des phonons LO ( $\omega_c^- < 1$ ) [93].

$$\Lambda \gg K \gg 1 \gg \Omega, \alpha, \sqrt{R}$$

$$\begin{aligned}
E_{000} &= \frac{\Lambda^2}{2} + K^2 + \frac{4\Omega^4}{\Lambda^2} \\
&\quad - 4\sqrt{\frac{R}{\pi}}K \ln\left(\frac{\Lambda}{K}\right) - \sqrt{\frac{2}{\pi}}\alpha K \ln\frac{\Lambda}{K} \\
E_l &= 4\sqrt{\frac{R}{\pi}}K \ln\left(\frac{\Lambda}{K}\right) \\
E_{0-10} &= \frac{\Lambda^2}{2} + K^2 + \frac{8\Omega^4}{\Lambda^2} \\
&\quad - \sqrt{\frac{2}{\pi}}\alpha K \ln\left(\frac{\Lambda}{K}\right) - 4\sqrt{\frac{R}{\pi}}K \ln\left(\frac{\Lambda}{K}\right) \\
E_l &= 4\sqrt{\frac{R}{\pi}}K \ln\left(\frac{\Lambda}{K}\right) \\
\omega_c^- &= \frac{4\Omega^4}{\Lambda^2}
\end{aligned}$$

Dans la limite du point  $0D$ , l'énergie de liaison est essentiellement indépendante du champ magnétique et de la polarisation. Dans la limite  $1D$ , en régime de couplage polaronique fort, elle est une fonction croissante de la polarisation et diverge de façon logarithmique avec la force du potentiel de confinement dans le plan  $(x, y)$ .



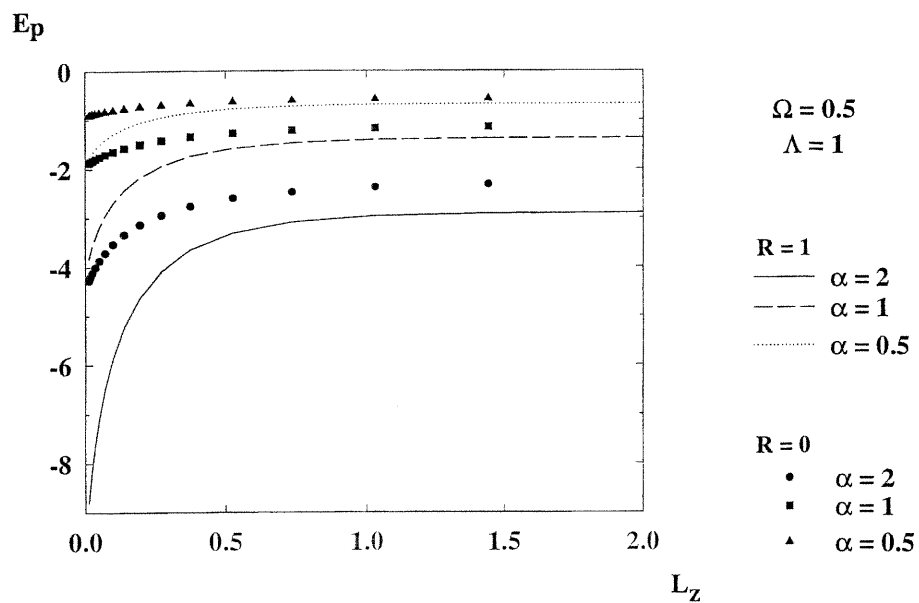
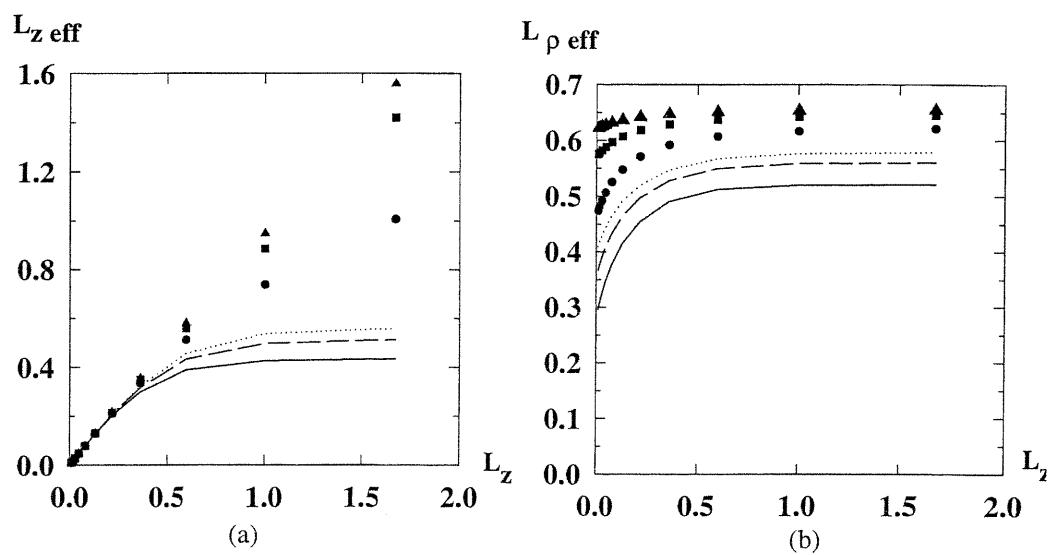


Figure 35. Energie propre du magnétopolaron libre ( $R = 0$ ) et lié ( $R = 1$ ) dans son état fondamental en fonction de  $L_z$  pour  $\Omega = 0.5$ ,  $\Lambda = 1$  ( $L_p = 1.68$ ) avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ .



$\Omega = 0.5$   
 $\Lambda = 3$   
 $L_\rho = 0.66$

$R = 0$	$R = 1$
• $\alpha = 2$	— $\alpha = 2$
▪ $\alpha = 1$	- - $\alpha = 1$
▲ $\alpha = 0.5$	⋯ $\alpha = 0.5$

Figure 36. Magnétopolaron libre ( $R = 0$ ) et lié ( $R = 1$ ) dans l'état fondamental, en fonction de  $L_z$ , pour  $\Omega = 0.5$  et  $\Lambda = 1$  ( $L_\rho = 1.68$ ), pour  $\alpha = 0.5, 1, 2$ . (a):  $L_{z\text{eff}}$ . (b):  $L_{\rho\text{eff}}$ .

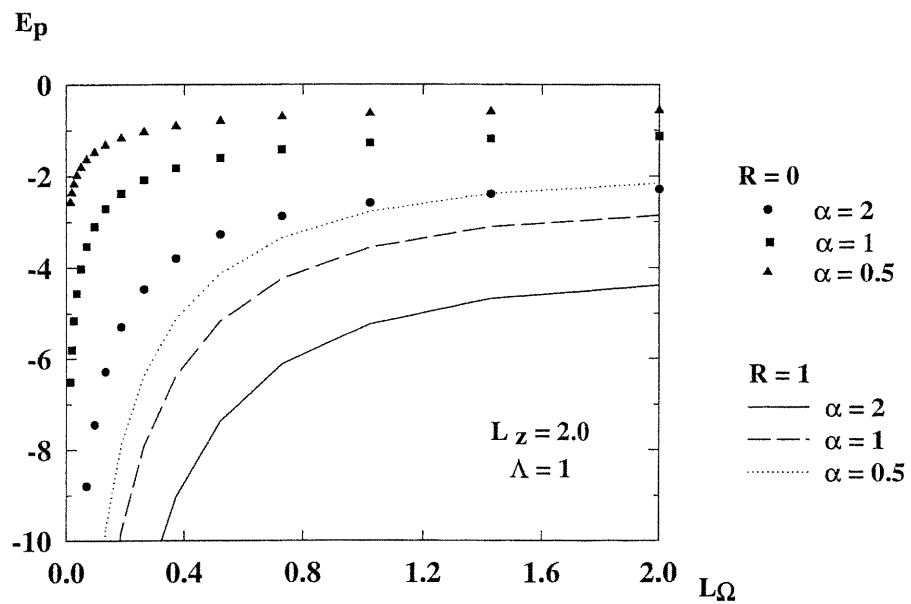


Figure 37. Energie propre du magnétopolaron libre ( $R = 0$ ) et lié ( $R = 1$ ) dans son état fondamental en fonction de  $L_\Omega$  pour  $\Lambda = 1$ ,  $L_z = 2.0$ , avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ .



#### 5.6.4 Résultats numériques

A l'état fondamental, les **figures** 35 et 37 présentent l'énergie propre du magnétopolaron ( $\Lambda = 1$ ) en fonction du confinement dans la direction  $z$  pour une longueur de confinement dans le plan  $(x, y)$  constante ( $L_\rho = 1.68$ ), et en fonction du confinement dans le plan  $(x, y)$  pour une longueur de confinement dans la direction  $z$  fixée à  $L_z = 2$  respectivement. Il apparaît que le couplage coulombien ( $R = 1$ ) a pour effet d'augmenter l'énergie propre surtout pour des valeurs de couplages polaires  $\alpha$  fortes et sous confinement important produisant des longueurs de confinement faibles. Au vu des **figures** 36 et 38, qui donnent l'évolution correspondante des longueurs de confinement effectives, il ressort que le couplage coulombien induit une localisation, aussi bien dans la direction  $z$  que dans le plan  $(x, y)$ , et ceci pour tout couplage  $\alpha$ .

L'effet du champ magnétique sur les états  $(0, 0, 0)$  et  $(0, -1, 0)$  est présenté à la **figure** 39, pour des longueurs de confinement fixées à  $L_z = 0.71$ ,  $L_\Omega = 1.41$  dans l'état  $(0, -1, 0)$  et  $L_\Omega = 1$  dans l'état fondamental. L'énergie propre augmente sous l'application du champ, d'autant plus que le couplage  $\alpha$  est élevé. Les longueurs de confinement effectives correspondantes sont présentées à la **figure** 40. L'effet de localisation est dû au couplage coulombien et au couplage polaire en l'absence de champ magnétique, puis accru par l'application du champ.

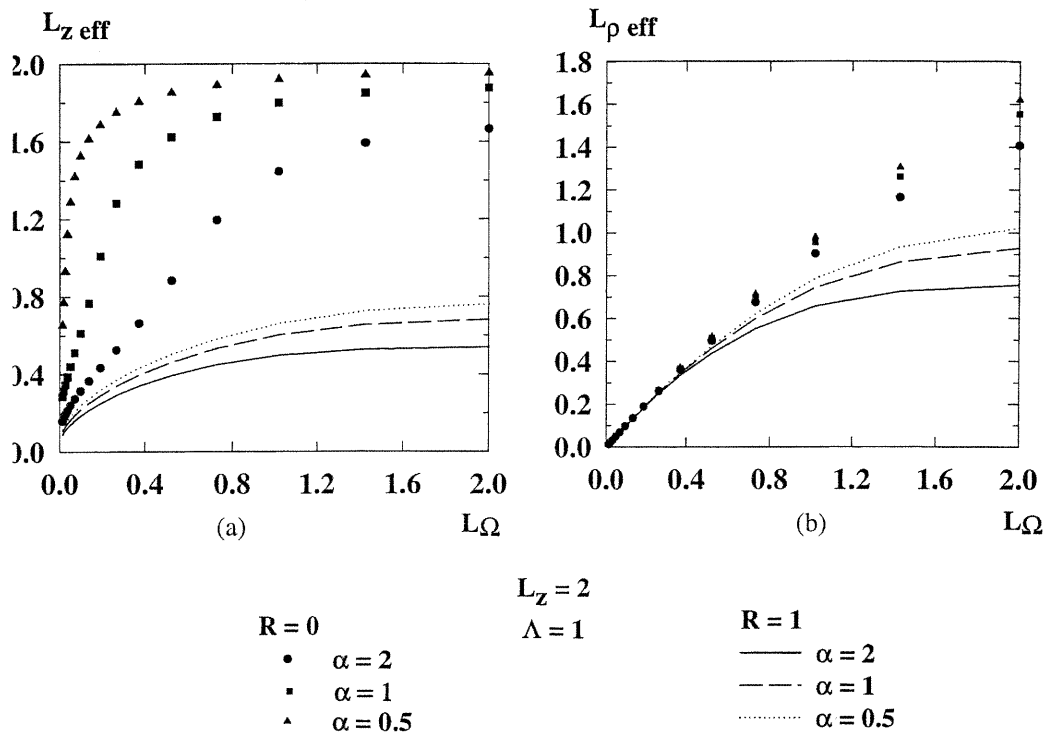


Figure 38. Magnétopolaron libre ( $R = 0$ ) et lié ( $R = 1$ ) dans l'état fondamental, en fonction de  $L_\Omega$  pour  $\Lambda = 1$ ,  $L_z = 2.0$ , avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ . (a) :  $L_z \text{ eff}$ . (b) :  $L_\rho \text{ eff}$ .

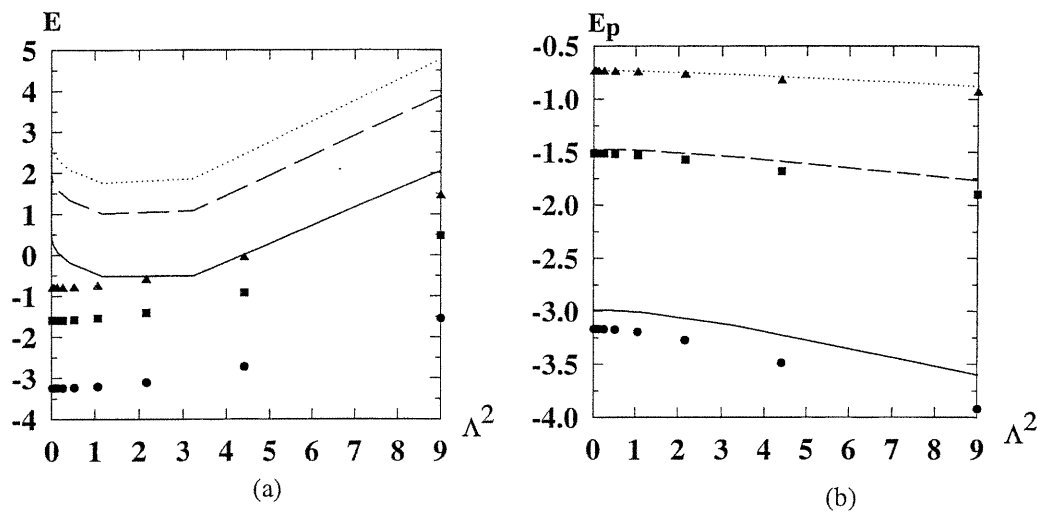


Figure 39. Magnétopolaron lié ( $R = 1$ ), en fonction de  $\Lambda^2$ , pour  $\Omega = 1.0$ ,  $L_z = 0.71$ , avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , dans les états  $(0, 0, 0)$  et  $(0, -1, 0)$ . (a): Energie. (b): Energie propre.

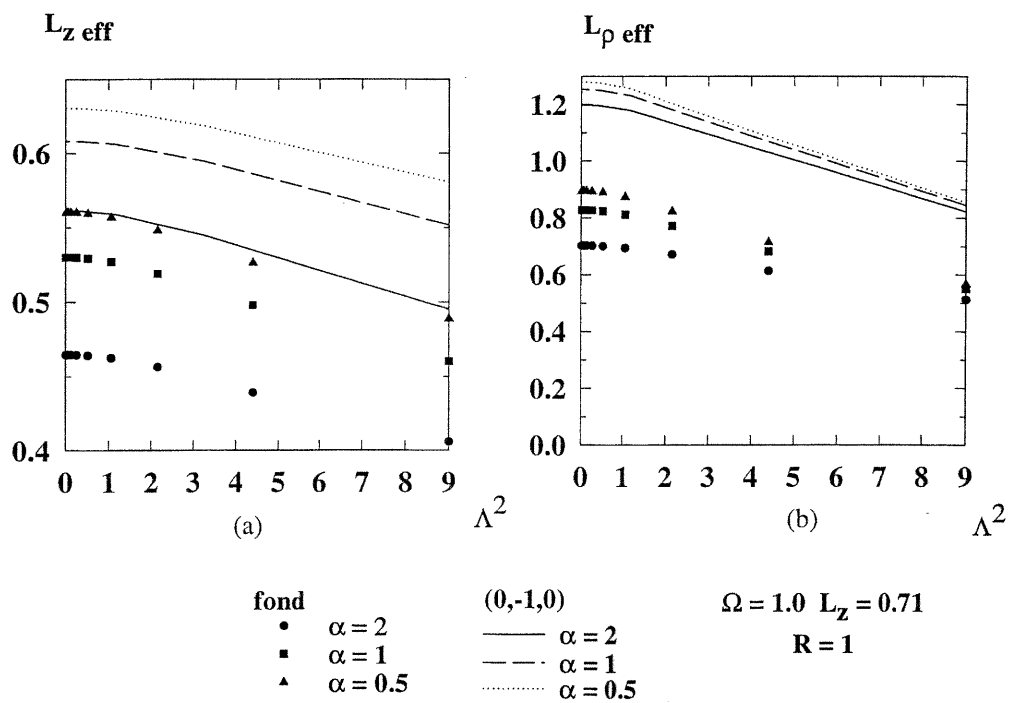


Figure 40. Magnétopolaron lié ( $R = 1$ ), en fonction de  $\Lambda^2$ , pour  $\Omega = 1.0$ ,  $L_z = 0.71$ , avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ , dans les états  $(0, 0, 0)$  et  $(0, -1, 0)$ . (a):  $L_{z\text{eff}}$ . (b):  $L_{\rho\text{eff}}$ .

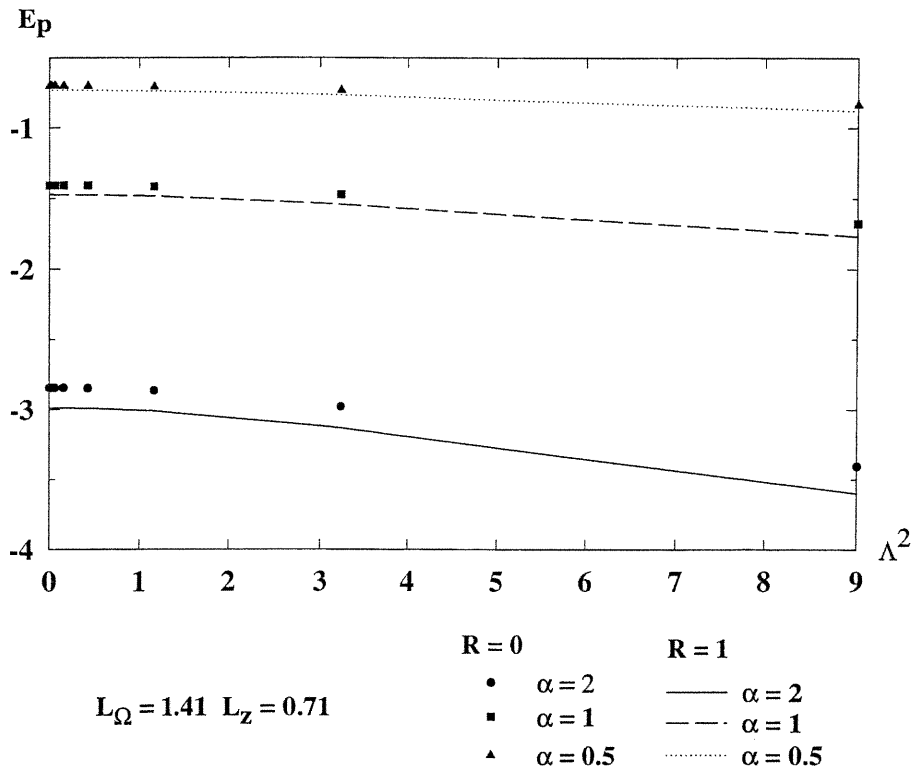


Figure 41. Magnétopolaron libre ( $R = 0$ ) et lié ( $R = 1$ ) dans l'état  $(0, -1, 0)$ : énergie propre en fonction de  $\Lambda^2$ , pour  $L_{\Omega} = 1.41$ ,  $L_z = 0.71$ , avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ .

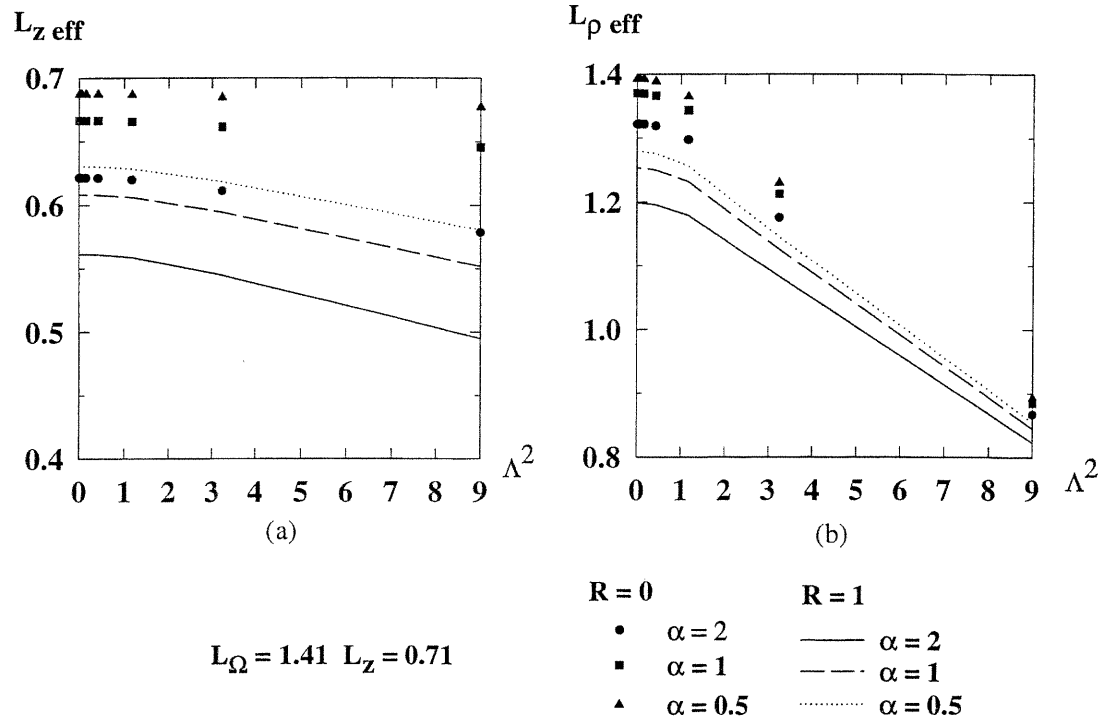


Figure 42. Magnétopolaron libre ( $R = 0$ ) et lié ( $R = 1$ ) dans l'état  $(0, -1, 0)$ , en fonction de  $\Lambda^2$ , pour  $L_{\Omega} = 1.41$ ,  $L_z = 0.71$ , avec  $\alpha = 0.5, 1, 2$ . (a):  $L_{z\text{eff}}$ . (b):  $L_{\rho\text{eff}}$ .

## 5.7 Cas 2D

Dans la limite où la longueur de confinement dans la direction  $z$  est beaucoup plus faible que celle dans le plan  $(x, y)$ , on décrit une charge ponctuelle dans la direction  $z$  et une charge électronique étendue en  $x$  et  $y$ . Si, en plus, on néglige la direction  $z$  dans l'énergie cinétique, l'effet de recul et la polarisation dans cette direction sont négligés : la polarisation induite est totalement 2D. Les énergies propres du polaron ainsi obtenues peuvent être beaucoup plus élevées que dans le cas 3D [19]. Cette approximation nous permet de comparer avec d'autres approches visant à décrire les données expérimentales sur des échantillons dans lesquels l'extension de la fonction d'onde selon  $z$  tend vers zéro [43, 45]. Pour comparer notre méthode avec les traitements perturbatifs du point 2D dans la limite de couplage faible, en champ fort [43], et pour tout champ magnétique [45], nous nous concentrons sur le système constitué d'un électron dont le mouvement selon la direction  $z$  est supprimé, dans un potentiel parabolique 2D en  $(x, y)$ , sous champ magnétique.

Pour spectre modèle, nous prenons :

$$\begin{aligned} H_m &= H_{0,m} + H_{\text{phonons}} + H_{\text{interaction}} \\ H_{0,m} &= \hat{p}^2 + \gamma^4 \rho^2 + \beta^4 \rho^2 + 2\gamma^2 \hat{l}_z \end{aligned}$$

Dans la limite perturbative, les paramètres variationnels prennent les valeurs suivantes :

$$\begin{aligned} \gamma^2 &= \frac{\Lambda^2}{4} \quad (= \frac{\omega_c}{4}) \\ \beta^4 &= \Omega^4 \end{aligned}$$

Ainsi, pour l'état fondamental, le terme de Fock et l'expression variationnelle de l'énergie s'écrivent :

$$\begin{aligned} E_{(00)} &= a^2 + \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right) \frac{1}{a^2} + F_{00} \\ F_{00} &= -a \sqrt{\frac{\pi}{2}} \alpha \int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{\sqrt{1 - e^{-(2a^2 t)} \cosh(2\gamma^2 t)}} \end{aligned}$$

La longueur de confinement dans la direction  $z$  est idéalement faible ( $L_z \rightarrow 0$ ) et la longueur de confinement dans le plan  $(x, y)$  à l'état fondamental est :

$$L_\rho = \frac{1}{\left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/4}}$$

Dans l'ordre croissant d'énergie, on a :  $E(0,0) \leq E(-1,0) \leq E(1,0)$ . Pour l'état  $(0,-1)$ , il faut tenir compte de la singularité en  $a^2 - \gamma^2 = 1/2$ . L'expression variationnelle de l'énergie de l'état  $(0,-1)$  s'écrit :

$$E_{(0,-1)} = 2a^2 - \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{2}{a^2} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right) + F_{0,-1} \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} F_{(0,-1)} = & -a \sqrt{\frac{\pi}{2}} \alpha \int_0^\infty dt e^{-t} \\ & \left\{ \frac{1}{\sqrt{1 - e^{-2a^2t} \cosh(2\gamma^2t)}} \left( 1 + \frac{1}{4} \frac{e^{-2(a^2-\gamma^2)t} - 2}{1 - e^{-2a^2t} \cosh(2\gamma^2t)} \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{4} e^{2(a^2-\gamma^2)t} \left( \frac{1}{(1 - e^{-2a^2t} \cosh(2\gamma^2t))^{3/2}} - 1 \right) \right\} \\ & + \frac{a}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \alpha \frac{1}{2(a^2 - \gamma^2) - 1} \end{aligned}$$

La longueur de confinement dans le plan  $(x, y)$  dans cet état est ( $L_z \rightarrow 0$ ) :

$$L_\rho = \frac{\sqrt{2}}{\left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/4}}$$

Pour l'état  $(0,1)$ , il faut calculer le terme de Fock  $2D$ , à partir de la fonction de Green  $2D$ , en traitant séparément les singularités. Contrairement au cas de l'état  $(0,-1)$ , celles-ci sont nombreuses, du fait de la dégénérescence en  $m$ . La première a lieu pour  $a^2 + \gamma^2 = 1/2$ . Au delà, l'espace des paramètres variationnels est divisé en de nombreuses régions délimitées par les singularités successives. Nous nous contentons donc de l'étude de l'état  $(0,+1)$  à gauche de la première singularité d'une part, et à très fort potentiel de confinement statique, d'autre part. Ainsi, pour  $a^2 + \gamma^2 < \frac{1}{2}$ , on a :

$$E_{(0,+1)} = 2a^2 + \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{2}{a^2} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right) + F_{0,+1} \quad (5.10)$$

avec :

$$\begin{aligned} F_{(0,+1)(2D)} = & -a \sqrt{\frac{\pi}{2}} \alpha \int_0^\infty dt \frac{e^{-t}}{\sqrt{1 - e^{-2a^2t} \cosh(2\gamma^2t)}} \\ & \left\{ 1 + \frac{1}{4} \frac{e^{-2(a^2+\gamma^2)t} + e^{2(a^2+\gamma^2)t} - 2}{1 - e^{-2a^2t} \cosh(2\gamma^2t)} \right\} \end{aligned}$$

La longueur de confinement dans le plan  $(x, y)$  dans cet état est ( $L_z \rightarrow 0$ ) :

$$L_\rho = \frac{\sqrt{2}}{\left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/4}}$$



Sous champ magnétique fort, la particule est en mouvement si rapide autour de la direction du champ magnétique que la polarisation ne peut pas suivre. L'approximation adiabatique permet de décrire cette limite, dans laquelle la polarisation du réseau est induite par la densité de charge électronique moyenne [4].

Le polaron est lié dans un potentiel de confinement parabolique de la forme :  $V_{conf}(\rho) = (\Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16}) \rho^2$ . Ainsi, le champ magnétique accentue l'effet du confinement. L'hamiltonien modèle, ses fonctions d'onde et les énergies des états correspondants s'écrivent en coordonnées cylindriques [93] :

$$\begin{aligned} H_{0,m} &= \hat{p}^2 + (\beta^4 + \gamma^4) \rho^2 - \frac{2\sqrt{R}}{\rho} \\ \phi_{nm}(\rho) &= \frac{a}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{n!}{n + |m|!} \right)^{1/2} (a\rho)^{|m|} e^{-\frac{a^2\rho^2}{2}} L_n^{|m|}(a^2\rho^2) e^{im\Phi} \\ E_{nm} &= 2\gamma^2 m + 2a^2(|m| + 2n + 1) \end{aligned}$$

Dans le plan  $(x, y)$  l'effet du champ magnétique n'apparaît que dans la modification de la force du confinement parabolique. Dans ce cas :

$$\begin{aligned} \langle 0, 0 | V_{coul} | 0, 0 \rangle &= -2\sqrt{R\pi} a \\ \langle exc | V_{coul} | exc \rangle &= -\sqrt{R\pi} a \end{aligned}$$

Le polaron lié dans un point  $2D$  isotrope, sous champ magnétique fort a été étudié dans la théorie de Lee Low Pines, à partir d'une fonction d'onde magnétique [93]. Il est commode de désigner les états par leurs limites hydrogénoïdes de volume. Ainsi, l'état  $(00)$  est nommé état  $1s$  ( $m = 0$ ), l'état  $(0 - 1)$  correspond à l'état  $2p^-$  ( $m = -1$ ), et l'état  $(0+1)$  à l'état  $2p^+$  ( $m = +1$ ). Nous obtenons les mêmes résultats dans cette limite perturbative (à droite de la singularité):

$$\Lambda \gg \Omega \gg 1$$

$$\begin{aligned} E_{(1s)} &= 2 \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} - \alpha \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/4} - 2\sqrt{R\pi} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/4} \\ E_i &= \sqrt{R\pi} \Lambda \left( 1 + \frac{16\Omega^4}{\Lambda^4} \right)^{1/4} \\ E_{(2p^-)} &= -\frac{\Lambda^2}{2} + 4 \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} \\ &\quad - \alpha \frac{11}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/4} - \sqrt{R\pi} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/4} \\ E_i &= \sqrt{R\pi} \frac{\Lambda}{2} \left( 1 + \frac{16\Omega^4}{\Lambda^4} \right)^{1/4} \end{aligned}$$

L'énergie propre du polaron et son énergie de liaison coulombienne sont plus faibles dans le premier état excité qu'à l'état fondamental, du fait de l'étalement de la fonction d'onde. L'énergie de transition entre ces deux états est accentuée par le couplage coulombien :

$$\Delta E = -\frac{\Lambda^2}{2} + 2 \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} + \alpha \frac{5}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/4} + \sqrt{R\pi} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/4}$$

### 5.7.1 Couplage faible - Champ fort

Dans la limite  $\Lambda \gg \Omega \gg 1 \gg 1$ , nous obtenons :

- pour l'état fondamental :

$$\begin{aligned} E_{(0,0)} &= 2 \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} - \alpha \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/4} \\ &\approx \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{8\Omega^4}{\Lambda^4} - \alpha \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\Lambda}{2} - \alpha \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{2\Omega^4}{\Lambda^3} \end{aligned}$$

C'est la même expression que celle obtenue par [46]. Dans cette étude, les auteurs s'intéressent au point quantique parabolique  $2D$ , pour des systèmes de type  $Al_xGa_{1-x}As - GaAs$ , dans lesquels l'interaction polaronique est faible ( $\alpha$  est de l'ordre de 0.1), soumis à de forts champs magnétiques. Ils utilisent la théorie de perturbation du second ordre de Rayleigh-Schrödinger pour obtenir la correction à l'énergie propre. Ils considèrent l'interaction entre l'électron et les phonons de volume comme la perturbation du système constitué de l'électron dans le champ magnétique  $\vec{B} = (0, 0, B)$ . Se contentant de la limite de fort champ magnétique ( $\Lambda \gg 1$ ), ils négligent les termes non-diagonaux de l'élément de matrice de l'interaction, d'où des expressions simples, pour les énergies de l'état fondamental et des états excités. [80] étudie la même limite dans le cas du polaron  $2D$  soumis à un champ magnétique perpendiculaire au plan  $2D$ .

- pour l'état  $E_{(0,-1)}$  à droite de la singularité, nous obtenons :

$$\begin{aligned} E_{(0,-1)} &= -\frac{\Lambda^2}{2} + 4 \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} - \alpha \frac{11}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/4} \\ &\approx \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{16\Omega^4}{\Lambda^2} - \frac{11}{32} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \Lambda^2 \alpha - \frac{11}{8} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\Omega^4}{\Lambda^3} \alpha \end{aligned}$$

C'est la même expression que [43]. L'énergie propre du polaron dans le premier état excité  $2D$  est réduite par rapport à celle obtenue dans l'état fondamental. L'énergie de transition est augmentée par l'effet de la polarisation et l'application du champ magnétique :

$$\begin{aligned}\Delta E &= -\frac{\Lambda^2}{2} + 2 \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} \\ &\quad + \frac{5}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} + \frac{5}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/4} \alpha \\ &\approx \frac{5}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\Lambda}{2} \alpha\end{aligned}$$

Si on évalue la masse polaronique obtenue à partir de la transition  $E_{(0,-1)} \rightarrow E_{(00)}$  par :

$$\frac{m_c^-}{m} = \frac{\Lambda^2}{E_{(0,-1)} - E_{(00)}} \quad (5.11)$$

nous obtenons comme [43], ce qui indique la validité de notre approche :

$$\begin{aligned}m_c^- &= \frac{\Lambda^2}{-\frac{\Lambda^2}{2} + 2 \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} + \frac{5}{16} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \alpha \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/4}} \\ &\approx \frac{\Lambda^2}{4\Omega^4 + \frac{5}{32} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{\alpha}{\Lambda} \left( 1 + \frac{4\Omega^4}{\Lambda^4} \right)}\end{aligned}$$

### 5.7.2 Couplage faible - champ faible - confinement faible

Dans la limite où  $\Lambda^2 \ll 1$  et  $\Omega^2 \ll 1$ , pour un couplage faible  $\alpha < 1$ , nous obtenons au premier ordre :

- Etat fondamental :

$$\begin{aligned}E_{00} &= 2 \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} - \alpha \frac{\pi}{2} \\ &\quad - \frac{\alpha \pi}{8 \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2}} \left( \frac{\Lambda^4}{16} + \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right) \right)\end{aligned}$$

Le terme de correction polaronique est la correction d'énergie du polaron strictement  $2D$  obtenu par la théorie perturbative de type Rayleigh-Schrödinger [45, 82].

- Etat  $(0, -1)$  à gauche de la singularité, nous obtenons comme [82] :

$$E_{(0,-1)} = -\frac{\Lambda^2}{2} + 4 \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} - \alpha \frac{\pi}{2} \\ - \alpha \frac{\pi}{8} \left( \frac{2\gamma^2}{\left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2}} + \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} - 2 \frac{\Lambda^2}{4} \right)$$

Le résultat de [45] donne une correction polaronique deux fois plus faible au premier ordre :

$$E_{(0,-1)} = -\frac{\Lambda^2}{2} + 4 \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} - \alpha \frac{\pi}{4}$$

- Etat  $(0, +1)$  : nous obtenons comme [82] :

$$E_{(0,+1)} = \frac{\Lambda^2}{2} + 4 \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} - \alpha \frac{\pi}{2} \\ - \alpha \frac{\pi}{8} \left( \frac{2\gamma^2}{\left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2}} + \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} + 2 \frac{\Lambda^2}{4} \right)$$

Le résultat de [45] donne une correction polaronique deux fois plus faible au premier ordre :

$$E_{(0,+1)} = \frac{\Lambda^2}{2} + 4 \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)^{1/2} - \alpha \frac{\pi}{4}$$

En réalité, les énergies de ces états  $E_{(0,+1)}$  et  $E_{(0,-1)}$  représentent des bornes supérieures à l'énergie du fondamental.

Si nous utilisons la définition de la masse cyclotron polaronique pour la transition  $E_{(0,+1)} - > E_{(0,-1)}$  :

$$\frac{m_c^*}{m} = \frac{\Lambda^2}{E(0, +1) - E(0, -1)}$$

nous obtenons la bonne correction de masse effective du polaron 2D strict :

$$\frac{m_c^*}{m} = \frac{1}{1 - \frac{\alpha\pi}{8}}$$

### 5.7.3 Couplage fort

Nous pouvons obtenir des expressions analytiques dans des cas asymptotiques, pour le point  $2D$ , et comparer avec d'autres méthodes, telle la méthode variationnelle de Landau-Pekar [46].

Nous obtenons, pour l'état fondamental :  $F_{00}(a) \rightarrow -\alpha\sqrt{\frac{\pi}{2}}a$ .

- $\alpha \gg \Omega, \Lambda : a = \frac{\alpha}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}$

$$E_{(00)} = -\frac{\alpha^2\pi}{8} + \frac{8}{\alpha^2\pi} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)$$

Nous obtenons l'énergie propre du polaron  $2D$  usuelle en couplage fort.

- $\Lambda \gg \alpha, \Omega : a = \frac{\Lambda}{2}$

$$E_{(00)} = \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{4\Omega^4}{\Lambda^2} - \alpha\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\Lambda}{2}$$

L'électron se comporte comme un électron dans le premier niveau de Landau avec une correction polaronique en  $(\alpha\Lambda)$ .

- $\Omega \gg \Lambda, \alpha : a = \Omega$

$$E_{(00)} = 2\Omega^2 + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^2} - \alpha\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Omega$$

Nous retrouvons l'énergie de l'oscillateur harmonique  $2D$  corrigé par l'effet polaronique en  $(\alpha\Omega)$ .

Dans l'expression obtenue à partir de l'état  $(0, -1)$  du spectre modèle, dans cette limite à droite de la singularité,  $F_{0,-1}(a) \rightarrow -\frac{11}{16}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\alpha a$ .

- $\alpha \gg \Omega, \Lambda : a = \frac{11}{64}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\alpha$

$$E_{0,-1} \rightarrow -\frac{363\alpha^2\pi}{8192} + \frac{16384}{121\alpha^2\pi} \left( \Omega^4 + \frac{\Lambda^4}{16} \right)$$

- $\Lambda \gg \alpha, \Omega : a = \frac{\Lambda}{2}$  (si  $\beta^4 > 2\gamma^2$ )

$$E_{0,-1} \rightarrow \frac{\Lambda^2}{2} + \frac{4\Omega^4}{\Lambda^2} - \alpha\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{11\Lambda}{32}$$

$$\Delta E = \frac{5}{16}\alpha\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{\Lambda^2}{2}$$

- $\Omega \gg \Lambda, \alpha : a = \Omega$

$$\begin{aligned}
 E_{0-1} &\rightarrow 4\Omega^2 + \frac{\Lambda^4}{8\Omega^2} - \frac{11}{16}\alpha\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Omega \\
 \Delta E &= 2\Omega^2 + \frac{\Lambda^4}{16\Omega^2} + \frac{5}{16}\alpha\sqrt{\frac{\pi}{2}}\Omega
 \end{aligned}$$

La correction polaronique est plus faible dans le premier état excité qu'à l'état fondamental.

## 5.8 Conclusion

Il apparaît qu'en présence de couplage électron-phonons, les niveaux de Landau d'un électron non perturbé dans un champ magnétique uniforme se trouvent déplacés par l'énergie propre du polaron et s'incurvent vers les énergies supérieures quand le champ augmente. Sous champ magnétique fort, le magnétopolaron se trouve fortement localisé en deux dimensions, et donc devient un système  $1D$  dans lequel les effets de la polarisation sont accentués.

Nous obtenons l'expression du premier état excité du système dans la limite  $K \gg \Omega$ . L'énergie propre du polaron est plus grande dans l'état fondamental que dans le premier état excité et elle est d'autant plus élevée que le couplage polaire en  $\alpha$  est fort et que les longueurs de confinement sont faibles.

L'application d'un champ magnétique dans la direction  $z$  a un effet de confinement du polaron dans le plan  $(x, y)$ . Dans l'état fondamental, sous champ magnétique suffisamment élevé, un polaron  $3D$  prend un caractère  $1D$ .

Dans le cas du magnétopolaron lié, nous retrouvons les résultats de [62] : l'énergie de liaison augmente quand la dimensionalité du système diminue, décroît quand la longueur de confinement augmente, et augmente avec le champ magnétique. En confinement faible, elle est gouvernée par le champ magnétique, tandis qu'en confinement fort, elle en est essentiellement indépendante [89, 47]. En champ magnétique fort, l'électron se trouve fortement lié dans le plan perpendiculaire à la direction du champ magnétique, et relativement peu lié dans la direction parallèle. Les états liés se situent au dessous des états de Landau de l'électron libre [91].

## CONCLUSION

Nous avons étudié l'effet de l'anisotropie d'un potentiel de confinement parabolique sur les propriétés du polaron. Notre modèle ne représente pas de façon idéale le régime de très fort confinement dans les systèmes réels. Cependant, le potentiel de confinement parabolique anisotrope est intéressant car il permet la simulation de confinements anisotropes : absence de confinement (limite de volume quand toutes les constantes de ressort tendent vers zéro), confinement selon une dimension (limite  $2D$  quand une des constantes de ressort est élevée), deux dimensions (limite  $1D$  caractérisée par deux constantes de ressort élevées) ou trois dimensions (limite du point, quand les constantes de ressort selon les trois directions sont élevées.). En outre, ce potentiel n'introduit pas d'interface abrupte donc pas de modes de phonons de surface. De ce fait, ce potentiel permet l'utilisation de l'approximation des modes de phonons de volume, pour des points assez gros ou des points dont les propriétés diélectriques sont proches de celles du matériau de la matrice. Aussi nous n'avons pas considéré l'effet du confinement sur les modes de phonons, mais utilisé l'approximation de l'interaction électron-phonons  $3D$  de type coulombien, quelle que soit la dimensionalité. Dans les systèmes réels cependant, les modes de phonons confinés peuvent jouer un rôle non négligeable quand le confinement est important.

Dans l'état fondamental, l'énergie propre augmente considérablement en valeur absolue quand le potentiel de confinement croît. Il n'est donc plus possible d'espérer que les méthodes perturbatives soient applicables, même si la constante de couplage polaire  $\alpha$  est faible, car la force de couplage effective électron-phonons semble augmenter dans les structures confinées. A partir des hamiltoniens du polaron libre et du polaron lié, l'approche de Matz et Burkey donne une borne supérieure à l'énergie de l'état fondamental pour un spectre gaussien, pour tout régime de couplage et de confinement, dans le cadre de l'approximation de Fröhlich. Cette méthode permet également l'étude des états excités polaroniques, importante pour comprendre les propriétés d'absorption de ces systèmes : les calculs sont effectués par analogie avec l'étude de l'état fondamental.

Il apparaît que le confinement renforce l'effet polaronique à l'état fondamental et dans le premier état excité. Nous obtenons les limites usuelles  $3D$  et  $2D$ , dans les cas de couplages faible et fort. Dans le cas du premier état excité, la structure de la

correction polaronique présente des singularités qui correspondent à l'instabilité de cet état par rapport à l'émission d'un phonon. L'énergie propre augmente quand la dimensionnalité diminue et quand la taille du système décroît. En régime de confinement faible, nous obtenons un premier état excité étendu de type masse effective, constitué du polaron non perturbé dans le premier état excité du potentiel de confinement du point quantique, à gauche de la singularité. En régime de confinement fort, le premier état excité est localisé, de type état excité relâché (*RES*) : ces états excités relâchés apparaissent quand le potentiel de localisation pour l'électron est dû à l'effet combiné de la polarisation du réseau et du potentiel parabolique, à droite de la singularité. En fait, pour une valeur du couplage polaire donné, la nature du premier état excité du polaron dans un point quantique dépend de la longueur de confinement : dans un gros point, il est de type masse effective, et de type *RES* dans un petit point. Pour un couplage suffisamment élevé, le premier *RES* est un état raisonnablement stable (sa durée de vie est grande devant la période d'oscillation du réseau), et l'approximation adiabatique est applicable.

Au total, pour le polaron libre, à l'état fondamental et dans le premier état excité, l'énergie propre est d'autant plus importante que la dimensionnalité du système est réduite. Nous avons montré qu'un confinement harmonique anisotrope a pour effet d'augmenter l'énergie propre du polaron libre. Les résultats numériques indiquent que cette augmentation est d'autant plus importante que la longueur de confinement devient inférieure au rayon du polaron. D'autre part, elle est plus forte pour un confinement  $2D$  que pour un confinement  $1D$ . Nous avons mis en évidence qu'un confinement a pour effet d'augmenter l'énergie propre du polaron et qu'un confinement anisotrope est encore plus efficace qu'un confinement isotrope.

Dans le cas du fil, pour un confinement selon  $z$  fixé, la longueur de confinement effective dans la direction  $z$  diminue quand la force du confinement transverse dans le plan  $(x, y)$  augmente, c'est à dire que l'effet de confinement en  $z$  est renforcé par le potentiel de confinement en  $(x, y)$ . La force du potentiel de confinement du fil est ainsi équivalente à une augmentation du couplage effectif électron-phonon. Dans un point  $2D$ , l'énergie propre est supérieure à celle obtenue dans un point  $3D$ , d'autant plus que  $\alpha$  est fort. Quand la longueur de confinement augmente, l'énergie propre tend vers sa limite  $3D$ . Quand la longueur de confinement diminue, l'énergie propre de l'état excité augmente très rapidement, comme celle de l'état fondamental : dans les petits points, l'interaction électron-phonon a un effet prononcé aussi bien dans l'état fondamental que dans le premier état excité.

Dans un point, la différence des corrections polaroniques entre l'état excité et l'état fondamental est suffisamment élevée pour avoir des répercussions sur les propriétés d'absorption des points quantiques. Le facteur de renforcement de l'effet polaronique



$RPE$  est une fonction de la taille du système quelle que soit la dimension, en couplage faible. En couplage fort, il devient plus sensible à la dimensionalité quand la taille diminue. Contrairement à la valeur absolue de l'énergie propre, le facteur  $RPE$  en  $2D$  s'avère inférieur au facteur  $RPE$  en  $3D$ .

Nous avons appliqué la théorie de Matz et Burkey au polaron lié à un défaut ponctuel situé au centre du point, en approximant le potentiel coulombien par un potentiel harmonique. Une des quantités physiques observables est l'énergie de liaison. L'énergie de liaison avec et en l'absence de couplage électron-phonon a le même type de comportement ; elle diminue rapidement quand la longueur de confinement augmente, vers la limite  $3D$ . La correction polaronique à l'énergie de liaison apparaît moins importante que la correction correspondante à l'énergie de l'état fondamental. De fait, elle est principalement déterminée par la force du couplage  $\alpha$ . Ainsi, pour  $\alpha \ll 1$ , comme dans GaAs, la contribution de l'interaction polaire à l'énergie de liaison est trop faible pour être observable. La correction polaronique à l'énergie de liaison est une fonction croissante de la longueur de confinement, ce qui est tout à fait opposé à la correction polaire à l'énergie de l'état. Pour un couplage coulombien faible, nous obtenons un état excité de type masse effective. Un couplage coulombien fort donne lieu à un état excité de type polaron centré. L'énergie de liaison dans les structures à dimensions réduites est forte du fait de l'augmentation du couplage coulombien créée par l'effet de localisation dans la nanostructure. Nous montrons que des couplages polaire et coulombien élevés provoquent un effet de localisation assez semblables. Il ressort que le couplage coulombien induit une localisation, aussi bien dans la direction  $z$  que dans le plan  $(x, y)$ , et ceci pour tout couplage  $\alpha$ .

Finalement, nous nous sommes intéressés au magnétopolaron dans un point quantique anisotrope. L'application d'un champ magnétique modifie la symétrie du mouvement du porteur et la nature de sa fonction d'onde. De plus les effets de quantification causés par le champ magnétique et par le confinement spatial sur le porteur se juxtaposent, d'où des structures d'énergie plus compliquées. Il est connu que les niveaux de Landau d'un électron non perturbé dans un champ magnétique uniforme perdent leur linéarité en  $\omega_c$  en présence de l'interaction électron-phonon. Ils se trouvent déplacés du montant de l'énergie propre du polaron et courbés vers le haut quand le champ appliqué augmente. Sous champ magnétique fort, le magnétopolaron se trouve fortement localisé en deux dimensions, et donc devient un système  $1D$  dans lequel les effets de la polarisation sont accentués. L'application d'un champ magnétique dans la direction  $z$  a un effet de confinement du polaron dans le plan  $(x, y)$ . Dans l'état fondamental, sous champ magnétique suffisamment élevé, un polaron  $3D$  prend un caractère  $1D$ . Il apparaît que l'énergie propre est augmentée sous champ magnétique d'autant plus que le couplage polaire ( $\alpha$ ) est fort. Ceci

résulte de l'effet de localisation dû au champ. Le couplage polaire et le champ magnétique contribuent à localiser le polaron en accentuant l'effet du confinement dans la direction  $z$ . Dans le cas du polaron lié en présence d'un champ magnétique, l'effet de localisation est dû au couplage coulombien et au couplage polaire en l'absence de champ magnétique, puis accru par l'application du champ.

Ainsi, nous avons obtenu une image de l'effet de l'anisotropie du confinement sur les propriétés du polaron libre, du polaron lié et du magnétopolaron. Notre étude montre que l'approche de Matz et Burkey est valide pour toutes les valeurs du paramètre de couplage polaire et permet de faire un bilan du comportement polaronique entre les situations de couplage asymptotique. De plus, l'approche de Matz et Burkey nous a permis de distinguer, au moyen d'un même formalisme, les différents types d'états excités et d'explorer de façon unifiée les cas de confinement selon trois dimensions (polaron dans un point), deux dimensions (cas  $1D$ ) et selon une dimension (cas  $2D$ ) en plus du cas de volume en l'absence de confinement. Il apparaît que l'effet de l'interaction électron-phonons est généralement renforcé par le confinement, comme le montrent certaines études expérimentales (voir par exemple [10, 11, 12, 13, 14, 15]), ce qui rend inadéquate la théorie des perturbations.

Une prochaine étape serait l'introduction des modes de phonons modifiés par l'effet du confinement. L'électron confiné interagit en effet avec les modes de phonons optiques de volume confinés, mais également des modes de phonons optiques de surface. Dans le cas du polaron libre, le terme d'interaction de Fröhlich doit alors comprendre plusieurs contributions. Il serait intéressant de pouvoir ainsi évaluer l'importance respective des différents modes de phonons optiques dans l'interaction polaire, en fonction du type de confinement. Dans le cas du polaron lié, la transformation de Platzman peut être appliquée à un système sphérique notamment, tenant compte des modes de phonons confinés [66, 94]. La contribution des modes de phonon  $LO$  sur l'énergie de liaison d'un défaut de type hydrogénoïde peut être assez importante selon la force du couplage électron-phonons, et selon la position du défaut par rapport au centre du point. Les modes de phonons optiques de surface ne se couplent pas à la fonction d'onde électronique quand le défaut est situé au centre, mais leur effet augmente au fur et à mesure que le défaut s'en éloigne. En fait, les modes de phonons optiques de surface interviennent dans les cas de systèmes asymétriques.

## REMERCIEMENTS

Cette thèse a été dirigée par le Professeur Yves Lépine, avec le financement du Conseil de Recherche de Recherches en Sciences Naturelles et en Génie du Canada (CRSNG), des Fonds pour La Formation De Chercheurs et l'aide à la Recherche, l'Université de Montréal, et le groupe GCM.

Merci à Daniel Lefèvre, Francine Senez, Michèle Grenier, de la Bibliothèque du Département de Physique.

Merci à Louise Lafortune, Louise Grégoire, Michèle Bustière, Christine Hervieu, Louis Lemay, du Secrétariat du Département de Physique.

Je tiens à remercier mes parents et amis :

Rémy, Renée, Claude, Meul et Dayong.

Famille Aït-Ouali : Abderrahmane, Houria, Yussef, Sabrina et Massil

Anna,

Teodor, Maria et Adrian, Mourad et Olfa, Guy et Marie-Claude, Moktar, Marian et Lucia, Liviu et Laeticia, Julie, Danila, Nihan, Alexis, Malvina, Nancy,

Dale et Whitney

Véro, Sophie, Frédérique, Andrès, Christine, Marie-Laure et Benoit, Olof et Isa.



**BIBLIOGRAPHIE**

- [1] A. M. STONEHAM, (1975 ), Theory of defects in solids, Clarendon Press, Oxford.
- [2] C. G. KUPER, G. D. WHITFIELD (1962), Polarons and excitons, Scottish Universities' Summer School, Plenum Press, New York.
- [3] T. D. LEE, F. E. LOW, D. PINES (1953), Phys. Rev., **90**, 297.
- [4] R. EVRARD, E. KARTHEUSER, J. DEVREESE (1970), Phys. Stat. Sol. (b), **41**, 431.
- [5] P. ROUSSIGNOL, D. RICARD, C. FLYTZANIS, N. NEUROTH (1989), Phys. Rev. Lett., **62**, 312.
- [6] S. SCHMITT-RINK, D. A. B. MILLER, D. S. CHEMLA (1987), Phys. Rev. B, **35**, 8113.
- [7] M. C. KLEIN, F. HACHE, D. RICARD, C. FLYTZANIS (1990), Phys. Rev. B, **42**, 11123.
- [8] U. BOCKELMANN, G. BASTARD (1990), Phys. Rev. B, **42**, 8947.
- [9] C. TRALLERO, F. COMAS (1988), Phys. Rev. B, **37**, 4583.
- [10] J.P.CHENG ET AL. (1993), Phys. Rev. B, **48**, 7910.
- [11] M. HORST ET AL. (1983), Phys. Rev. Lett., **50**, 754.
- [12] M. A. BRUMMEL ET AL. (1983), Physica B, **117-118**, 753.
- [13] M. A. ODNOLYUDOV ET AL. (1999), Phys. Rev. Lett., **83**, 4884.
- [14] M. L. REDIGOLO ET AL. (1999), Semicond. Sci. Technol., **14**, 58.
- [15] R. HEITZ ET AL. (1999), Phys. Rev. Lett., **83**, 4654.
- [16] J. T. DEVREESE (1999), Phys. Stat. Sol. (b), **215**, 465.
- [17] J. T. DEVREESE (1985), Polarons in Ionic Crystals and Polar Semiconductors, Amsterdam : North Holland, 1-40.
- [18] W. XIAO, B.-Q. SUN, J.-L. XIAO (1996), J. Phys.: Condens. Matter, **8**, 535.
- [19] B. GAGNON, Y. LÉPINE (1988), J. Phys.: Condens. Matter, **21**, 887.

- [20] Y. LÉPINE, (1984), *Solid State Commun.*, **52**, 427.
- [21] D. MATZ, B. C. BURKEY (1971), *Phys. Rev. B*, **3**, 3847.
- [22] D. MATZ (1973), *Can. J. Phys.*, **51**, 1187.
- [23] D. MATZ (1975), *Can. J. Phys.*, **53**, 2665.
- [24] Y. LÉPINE, (1987), *J. Phys.: Condens. Matter*, **20**, 2209.
- [25] Y. LÉPINE, M. CHARBONNEAU (1984), *Phys. Status Solidi (b)*, **122**, 151.
- [26] A. ELMAHBOUBI, Y. LÉPINE (1993), *Solid State Commun.*, **280**, 231.
- [27] A. ELMAHBOUBI, Y. LÉPINE (1994), *Surf. Sci.*, **303**, 409.
- [28] Y. LÉPINE, D. MATZ (1976), *Can. J. Phys.*, **54**, 1979.
- [29] M. H. DEGANI, G. A. FARIAS (1990), *Phys. Rev. B*, **42**, 11950.
- [30] S. MUKHOPADHYAY, A. CHATTERJEE (1995), *Phys. Lett. A*, **204**, 411.
- [31] Y.-H. REN, Q.H. CHEN, Y.B. YU, Z.A XU, W.B. SHAO, Z.K. JIAO (1999), *Eur. Phys. J. B*, **7**, 651.
- [32] Q. CHEN, Y. REN, Z. JIAO, K. WANG (1998), *Phys. Rev. B*, **58**, 16 340.
- [33] S. N. KLIMIN, E. P. POKATILOV, V. M. FOMIN (1994), *Phys. Stat. Sol. (b)*, **184**, 373.
- [34] T. YILDIRIM, A. ERÇELEBI (1991), *J. Phys.: Condens. Matter*, **3**, 1271.
- [35] T. YILDIRIM, A. ERÇELEBI (1991), *J. Phys.: Condens. Matter*, **3**, 4357.
- [36] K-D ZHU, S-W. GU (1992), *Phys. Lett. A*, **163**, 435.
- [37] KASH (1991), *Phys. Rev. Lett.*, **67**, 1326.
- [38] B. GERLACH, J. WÜSTHOFF, M. A. SMONDYREV (1999), *Phys. Rev. B*, **60**, 16 569.
- [39] A. KUMAR, S. E. LAUX, F. STERN (1990), *Phys. Rev. B*, **42**, 5166.
- [40] E. D. RAINVILLE (1967), *Special Functions*, quatrième édition New-York : Macmillan, 198.
- [41] Q. CHEN, Y. REN, Z. JIAO, K. WANG (1999), *Phys. Lett. A*, **252**, 251.

- [42] L. WENDLER, A. V. CHAPLIK, R. HAUPT, O. HIPÓLITO (1993), *J. Phys.: Condens. Matter*, **5**, 8031.
- [43] K.-D. ZHU, S.-W. GU (1992), *J. Phys.: Condens. Matter*, **4**, 1291.
- [44] G.-Q. HAI, F. PEETERS, J. T. DEVREESE (1990), *Phys. Rev. B*, **42**, 11063.
- [45] L. WENDLER, A. V. CHAPLIK, R. HAUPT, O. HIPÓLITO (1993), *J. Phys.: Condens. Matter*, **5**, 4817.
- [46] K.-D. ZHU, T. KOBAYASHI (1994), *Phys. Lett. A*, **190**, 337.
- [47] K.-D. ZHU, T. KOBAYASHI (1995), *Solid State Commun.*, **95**, 805.
- [48] D. MATZ, B. C. BURKEY (1970), *Solid State Commun.*, **8**, 1857.
- [49] S. DAS SARMA, B. A. MASON (1985), *Ann. Phys.*, **163**, 78.
- [50] F. M. PEETERS, W. W. XIAO GUANG, J. T. DEVREESE (1986), *Phys. Rev. B*, **33**, 3926.
- [51] A. THILAGAM, J. SINGH (1994), *Phys. Rev. B*, **9**, 13 583.
- [52] S. MUKHOPADHYAY, A. CHATTERJEE (1998), *Phys. Rev. B*, **58**, 2088.
- [53] R. YUHANG, C. QINGHU, T. YABIN, J. ZHENGKUAN, W. SHAOLONG (1998), *J. Phys.: Condens. Matter*, **10**, 6565.
- [54] J. DEVREESE, R. EVRARD, E. KARTHEUSER, F. BROSENS (1982), *Solid State Commun.*, **44**, 1435.
- [55] W. J. HUYBRECHTS (1978), *Solid State Commun.*, **27**, 45.
- [56] E. O. KANE (1978), *Phys. Rev. B*, **18**, 6849.
- [57] S. A. MCGILL, K. CAO, W. B. FOWLER, G. G. DELEO (1998), *Phys. Rev. B*, **57**, 8951.
- [58] H. N. SPECTOR, J. LEE, P. MELMAN (1986), *Phys. Rev. B*, **34**, 2554.
- [59] D.-S. CHUU, W.-L. WON, J.-H. PEI (1994), *Phys. Rev. B*, **49**, 14 554.
- [60] M. H. DEGANI, O. HIPÓLITO (1987), *Phys. Rev. B*, **35**, 4507.
- [61] A. ERÇELEBI, M. TOMAK (1985), *Solid State Commun.*, **54**, 883.
- [62] J. J. VIVAS-MORENO, N. PORRAS-MONTENEGRO (1998), *Phys. Stat. Sol. (b)*, **210**, 273.

- [63] C. BOSE (1998), *J. Appl. Phys.*, **83**, 3089.
- [64] S. NOMURA, T. KOBAYASHI (1992), *Phys. Rev. B*, **45**, 1305.
- [65] B. A. MASON, S. DAS SARMA (1986), *Surf. Sci*, **170**, 556.
- [66] P. M. PLATZMAN (1962), *Phys. Rev.*, **125**, 1961.
- [67] Q. CHEN, Y. REN, Z. JIAO, K. WANG (1999), *Eur. Phys. J. B*, **11**, 59.
- [68] S. MUKHOPADHYAY, A. CHATTERJEE (1997), *Phys. Rev. B*, **55**, 9279.
- [69] O. MADELUNG (1996), *Semiconductors Basic Data*, 2nd revised edition, Springer.
- [70] G. BADER (1974), Thèse de doctorat, Université de Montréal.
- [71] R. HAUPT, L. WENDLER (1994), *Solid State Commun.*, **89**, 741.
- [72] B.-H. WEI, K. W. YU (1995), *J. Phys.: Condens. Matter*, **7**, 1059.
- [73] Y. LÉPINE, (1972), Thèse de doctorat, Université de Montréal.
- [74] J. T. DEVREESE, E. P. KARTHEUSER, R. EVRARD, A. BALDERESCHI (1973), *Phys. Status Solidi (b)*, **59**, 629.
- [75] G. LINDEMANN, R. LASSNIG, W. SEIDENBUSCH, E. GORNIK (1983), *Phys. Rev. B*, **28**, 4693.
- [76] S. DAS SARMA (1983), *Phys. Rev. B*, **27**, 2590.
- [77] W. XIAO GUANG, F. M. PEETERS, J. T. DEVREESE (1986), *Phys. Rev. B*, **34**, 8800.
- [78] X. WU, F. M. PEETERS, J. T. DEVREESE (1987), *Phys. Status Solidi (b)*, **143**, 581.
- [79] F. M. PEETERS, X.-G. WU, J. T. DEVREESE, C. J. G. M. LANGERAK, J. SINGLETON, D. J. BARNES, R. J. NICHOLAS (1992), *Phys. Rev. B*, **45**, 4296.
- [80] S. DAS SARMA (1984), *Phys. Rev. B*, **52**, 859.
- [81] D. M. LARSEN (1984), *Phys. Rev. B*, **50**, 4807.
- [82] F. M. PEETERS, J. T. DEVREESE (1985), *Phys. Rev. B*, **31**, 3689.
- [83] R. HAUPT, L. WENDLER (1994), *Ann. Phys.*, **233**, 214.



- [84] R. CHEN, D. L. LIN, M. SHUKRI, (1992), Phys. Rev. B, **46**, 13357.
- [85] H.-Y. ZHU, S.-W. GU (1994), Z. Phys. B, **95**, 317.
- [86] H.-Y. ZHU (1994), Phys. Rev. B, **50**, 17180.
- [87] E. A. KOCHETOV, H. LESCHKE, M. A. SMONDYREV (1992), Z. Phys. B, **89**, 177.
- [88] E. H. SONDHEIMER, A. H. WILSON (1952), Proc. Roy. Soc. London **A210**, 173.
- [89] T. C. AU YEUNG, S. L. KHO, S. W. GU, L.H. HONG, E. M. C. WONG (1994), J. Phys.: Condens. Matter, **6**, 6761.
- [90] M. PACHECO, Z. BARTICEVIC (1999), J. Phys.: Condens. Matter, **11**, 1079.
- [91] J. M. SHI, F. M. PEETERS, J. T. DEVREESE (1993), Phys. Rev. B, **48**, 5202.
- [92] R. CHEN, K. K. BAJAJ (1995), Phys. Rev. B, **51**, 9825.
- [93] K.-D. ZHU, T. KOBAYASHI (1994), Solid State Commun., **92**, 353.
- [94] J. C. MARINI, B. STEBE, E. KARTHEUSER (1994), Phys. Rev. B, **50**, 14 302.