



Proposition de stage M2 théorique



Sujet : États localisés d'excitons dans des semi-conducteurs bi-dimensionnels en présence de l'interaction d'échange

Lieu de stage : LPMMC, Grenoble

Encadrant : Denis BASKO

Contact : denis.basko@lpmmc.cnrs.fr

Description : Un exciton est un état lié d'un électron dans la bande de conduction et d'un trou dans la bande de valence d'un semi-conducteur [1]. C'est l'excitation électronique avec l'énergie la plus basse, et c'est elle qui détermine les propriétés optiques du matériau. Un exciton peut être vu comme une particule composée, dont le mouvement est décrit par la mécanique quantique, et qui peut recombinaison en émettant un photon.

Les dichalcogénures des métaux de transition (TMDCs, tels que MoS₂, MoSe₂, WS₂, WSe₂ et autres), sont une famille de semi-conducteurs avec la structure en couches. Le progrès dans les techniques d'exfoliation qui a suivi la découverte du graphène a rendu possible d'obtenir des mono-couches TMDC qui sont des véritables semi-conducteurs bi-dimensionnels (de 3 Å d'épaisseur). Ils ont un gap optique direct d'environ 2 eV, et leurs excitons sont très bien couplés aux photons [2]. Cette découverte a provoqué une explosion d'intérêt pour les TMDCs en vue de leurs applications potentielles comme émetteurs de la lumière.

Souvent, les états excitoniques avec l'énergie la plus basse sont les états liés dans des puits de potentiel dus à des impuretés ou à des défauts de fabrication. Le but du stage est de calculer les fonctions d'onde et les énergies d'états liés des excitons dans un puits de potentiel, en tenant compte de l'interaction d'échange. Cette dernière modifie la loi de dispersion des excitons, l'énergie cinétique n'étant plus un simple $p^2/2m$, mais une loi plus compliquée [3]. Le travail à faire est donc de résoudre l'équation de Schrödinger avec cette énergie cinétique et un puits de potentiel en deux dimensions. Il sera nécessaire d'utiliser une combinaison de techniques analytiques et numériques.

Le sujet de ce stage peut être poursuivi en thèse.

Formation / compétences requises : mécanique quantique, physique des solides

Bibliographie :

[1] P. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors* (Springer, 2010).

[2] K. F. Mak et al., *Physical Review Letters* **105**, 136805 (2010).

[3] H. Yu et al., *Nature Communications* **5**, 3876 (2014).