HAL
open science

Simulation Monte Carlo du transport quantique dans les composants nanométriques. Application à l'étude de lasers à cascade quantique térahertz

Olivier Bonno

To cite this version:

Olivier Bonno. Simulation Monte Carlo du transport quantique dans les composants nanométriques. Application à l'étude de lasers à cascade quantique térahertz. Micro et nanotechnologies/Microélectronique. Université des Sciences et Technologie de Lille - Lille I, 2004. Français. NNT : . tel-00009033

HAL Id: tel-00009033

https://theses.hal.science/tel-00009033v1

Submitted on 15 Apr 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DE LILLE I
— UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE LILLE —

Numéro d'ordre : 3542

THÈSE

présentée en vue d'obtenir le titre de
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ
en Électronique

par

Olivier BONNO

Simulation Monte Carlo du transport quantique dans les composants nanométriques. Application à l'étude de lasers à cascade quantique térahertz

Soutenue le 13 Décembre 2004 devant la commission d'examen.

Membres du Jury

M. Didier LIPPENS	Président
M. Jean–Luc THOBEL	Directeur de thèse
M. Carlo SIRTORI	Rapporteur
M. Luca VARANI	Rapporteur
M. Didier DECOSTER	Examinateur
M. Renaud FAUQUEMBERGUE	Examinateur
M. Paolo LUGLI	Examinateur

« Si le monde était clair, l'art ne serait pas »
Albert Camus, *Le mythe de Sisyphe*

À ma famille,
à mes ami(e)s.

Remerciements

Ce travail à été réalisé à l'Institut d'Électronique, de Microélectronique et de Nanotechnologies (I.E.M.N.), dirigé par M. le Professeur A. Cappy.

Je remercie Monsieur D. Lippens, Professeur à l'Université des Sciences et Technologies de Lille, de me faire l'honneur de présider la commission d'examen.

Je voudrais témoigner ma profonde reconnaissance à Monsieur J.-L. Thobel, Chargé de Recherches CNRS à l'I.E.M.N., qui a assuré la direction de ce travail. Je tiens à lui témoigner ma profonde gratitude de m'avoir fait bénéficier de ses connaissances scientifiques et de son expérience. Je lui suis reconnaissant de la générosité et de la gentillesse dont il a fait preuve dans la direction quotidienne de ce travail.

Je remercie sincèrement Monsieur C. Sirtori, Professeur à l'Université Paris 7, et Monsieur L. Varani, Chargé de Recherches CNRS au CEM2 de l'Université de Montpellier II, qui me font l'honneur de juger ce travail et d'en être les rapporteurs.

Monsieur P. Lugli, Professeur à l'Université de Munich, me fait l'honneur d'apporter son jugement sur ce mémoire en tant qu'examinateur. J'y suis particulièrement sensible et je lui présente mes plus sincères remerciements.

Je suis très reconnaissant à Monsieur R. Fauquembergue, Professeur émérite à l'Université des Sciences et Technologies de Lille, et à Monsieur D. Decoster, Professeur à l'Université des Sciences et Technologies de Lille, qui ont accepté de participer à ce jury en tant qu'examinateur.

Je n'oublie pas de remercier également, les autres membres de l'équipe, MM. Baudry et Dessenne, qui ont favorisé la progression de ce travail. Qu'ils recoivent ici l'expression de ma profonde gratitude.

Enfin, je n'oublierais pas d'associer à ce travail certaines personnes : ma famille, mes camarades de promo (Olivier H., Olivier F., Estelle, Olivier C.S., Aurore, Olivier M., Laurent, ...) et tous ceux que j'ai pu oublier ...

Table des matières

Introduction générale **1**

I Introduction aux dispositifs optoélectroniques en infrarouge **5**

Introduction de la partie I **7**

1 Sources optiques dans l'infrarouge **9**
Introduction 9
1.1 Motivations de l'étude de l'infrarouge 9
1.1.1 Position du problème 9
1.1.2 Les domaines d'utilisation 11
1.2 Les différentes méthodes de génération d'ondes électromagnétiques dans l'infrarouge 13
1.2.1 Génération directe 13
1.2.2 Génération indirecte 16
1.2.3 Résumé 16
1.3 Introduction aux lasers à cascade quantique 17
1.3.1 Motivations 17
1.3.2 Quelques rappels et notations 20
1.4 Historique des dispositifs laser 21
1.4.1 Des premiers lasers à gaz vers les lasers à semi–conducteurs 21
1.4.2 Vers les lasers semi–conducteurs à transitions inter-sous–bandes 23
1.5 Principe de fonctionnement des lasers à cascade quantique 24
1.5.1 La région active 25
1.5.2 L'injecteur/collecteur 25
1.5.3 Nature du transport 26
1.5.4 Historique des différentes conceptions 26
1.6 Lasers à cascade quantique émettant dans l'infrarouge lointain 29
1.6.1 Position du problème 29
1.6.2 Difficultés liées au guide d'onde 30
1.6.3 Les différentes structures proposées 31
1.7 Autres exemples de lasers à cascade quantique 36
1.7.1 Lasers à cascade quantique Si/SiGe en bande de valence 36
1.7.2 Lasers à cascade de Type II 36
1.7.3 Lasers à cascade quantique en InAs/AlSb et GaN/AlGaN 36

1.7.4 Utilisation d'un champ magnétique 38
1.7.5 Génération d'harmoniques supérieures 38
Conclusion 38

2 Les formalismes du transport quantique 39
Introduction 39
2.1 La méthode de Monte Carlo 39
2.1.1 Introduction 39
2.1.2 Principe général de la méthode 40
2.2 Généralités sur le transport quantique 41
2.2.1 Introduction 41
2.2.2 Transport quantique : équation de Liouville–Von Neumann 42
2.2.3 Position du problème : Hamiltonien d'un système non isolé 43
2.3 Les différents formalismes du transport quantique 44
2.3.1 Formalisme de Keldysh et Kadanoff–Baym 45
2.3.2 Fonctions de Wigner 46
2.3.3 Hiérarchie cinétique quantique de matrices densité 46
2.3.4 Équation Maîtresse de Pauli 47
2.3.5 Équations de bilan 47
Conclusion 48

II Appareil théorique du transport électronique quantique 49

Introduction de la partie II 51

3 Généralités sur le simulateur Monte Carlo 53
Introduction 53
3.1 Détermination des états électroniques 53
3.1.1 États quantiques tridimensionnels 54
3.1.2 Formalisme de la fonction enveloppe dans les hétérostructures 55
3.1.3 Aspects numériques 60
3.2 Traitement des mécanismes d'interaction dans la méthode de Monte Carlo . . . 63
3.2.1 Formalisme utilisé 64
3.2.2 Les interactions considérées 66
3.3 Principe de la méthode de périodisation 68
3.3.1 Détermination des états électroniques en tenant compte de la périodicité 68
3.3.2 Transport dans les structures périodiques 70
Conclusion 71

4 Traitement de l'interaction électron–électron par la méthode de Monte Carlo 73
Introduction 73
4.1 Probabilité d'interaction électron–électron pour un gaz bidimensionnel 73
4.1.1 Équation de Boltzmann 73
4.1.2 Probabilité d'interaction 75
4.2 Mise en œuvre de l'interaction électron–électron dans le simulateur Monte Carlo 77

4.2.1 Méthodes employées dans la littérature 77
4.2.2 Inclusion du terme d'interférence de spin 79
4.2.3 Inclusion de l'interaction électron–électron dans la simulation Monte Carlo 80
Conclusion 83

5 Écrantage bidimensionnel dans les hétérostructures 85
Introduction 85
5.1 Tenseur diélectrique bidimensionnel 85
5.1.1 Définition de la fonction diélectrique macroscopique $\kappa(\mathbf{q}, \omega)$ 85
5.1.2 Quelques généralités sur l'écrantage bidimensionnel 86
5.1.3 Hypothèse d'écrantage statique 88
5.2 Calcul des éléments de matrice du potentiel coulombien non écranté 89
5.2.1 Définition 89
5.2.2 Décomposition en série de Fourier 89
5.3 Modélisation de la polarisabilité $\Pi(\mathbf{Q})$ 91
5.3.1 Modèle de la faible déviation 92
5.3.2 Formule de Maldague 95
5.3.3 Modèle de polarisabilité de Fetter et Walecka 98
5.3.4 Influence de la non–parabolicité 99
5.3.5 Bilan sur le modèle de la polarisabilité retenu 102
5.4 Écrantage multi-sous–bandes 102
5.4.1 Position du problème 102
5.4.2 Les modèles de la littérature 103
5.4.3 Le modèle adopté pour résoudre l'équation de l'écrantage 104
5.4.4 Un premier exemple 105
5.5 Écrantage hors d'équilibre dans les lasers à cascade quantique 110
5.5.1 Position du problème 110
5.5.2 Principe de la méthode 111
Conclusion 112

III Simulation Monte Carlo de lasers à cascade quantique 113

Introduction de la partie III 115

6 Premiers exemples de lasers à cascade quantique 117
Introduction 117
6.1 Étude d'un laser à cascade quantique à superréseaux en infrarouge moyen . . . 117
6.1.1 Structure de la bande de conduction et fonctions d'onde 117
6.1.2 Résultats des simulations Monte Carlo 119
6.2 Étude d'un laser à cascade quantique à superréseaux à pas variable térahertz . 122
6.2.1 Structure de la bande de conduction et fonctions d'onde 122
6.2.2 Paramètres des simulations Monte Carlo 125
6.2.3 Influence de l'interaction électron–électron 125
Conclusion 128

7 Laser à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon 131
Introduction . . . 131
7.1 Présentation de la structure . . . 131
7.2 Influence de l'interaction électron–électron . . . 134
7.2.1 Paramètres des simulations Monte Carlo . . . 134
7.2.2 Probabilités d'interaction dans le LCQ à DPRP à $\theta = 44$ K . . . 135
7.2.3 Détail des réjections dans le traitement de l'interaction électron–électron 137
7.2.4 Caractéristiques du LCQ à $\theta = 44$ K . . . 138
7.2.5 Les fonctions de distribution . . . 140
7.2.6 Température électronique de sous–bande . . . 142
7.3 Influence de la modélisation de l'interaction électron–électron . . . 143
7.4 Étude du comportement en fonction de la température et du champ électrique . 145
7.4.1 Influence du champ électrique . . . 145
7.4.2 Influence de la température de réseau . . . 148
Conclusion . . . 155

8 Variantes de la structure à dépopulation par résonance de phonon 157
Introduction . . . 157
8.1 Émission à 1,4 THz dans le laser à cascade quantique à DPRP . . . 157
8.1.1 Présentation de la suggestion de S.C. Lee et A. Wacker . . . 157
8.1.2 Résultats Monte Carlo . . . 160
8.1.3 Conclusion . . . 164
8.2 Laser à cascade quantique à DPRP émettant à 1 THz . . . 165
8.2.1 Simulation de la structure à DPRP émettant à 2,1 THz . . . 165
8.2.2 Modifications de la structure : vers les très basses fréquences . . . 166
8.2.3 Évolution avec le champ électrique du LCQ à 32 % d'aluminium . . . 169
Conclusion . . . 171

Conclusion générale 173

Annexes 175

A Interaction avec les phonons optiques polaires 177

B Probabilité d'interaction électron–électron pour un gaz bidimensionnel 179
B.1 Dérivation de la probabilité d'interaction électron–électron . . . 179
B.1.1 Élément de matrice . . . 180
B.1.2 Hypothèse de bandes paraboliques . . . 180
B.2 Terme d'échange de spin . . . 181

C Fonction diélectrique d'un gaz électronique bidimensionnel 183
C.1 Théorie de l'écrantage bidimensionnel . . . 183
C.2 Formulaire . . . 185

D Aspects numériques du calcul des facteurs de forme électron–électron 187
D.1 Expression mathématique 187
D.2 Aspects numériques 188
D.2.1 Gain en temps calcul 188
D.2.2 Calcul des coefficients de Fourier 188

E Température électronique de sous–bande 193
E.1 Rappel sur les éléments de matrice de la polarisabilité 193
E.2 Température de sous–bande déterminée à l'aide de l'élargissement énergétique de la distribution 194
E.3 Température de sous–bande déterminée à l'aide de l'énergie cinétique 195
E.4 Cas des matériaux non–paraboliques 196

F Modélisation de la non–parabolicité dans l'interaction électron–électron 197
Introduction 197
F.1 Inclusion de la non–parabolicité dans la modélisation de l'interaction électron–électron 197
F.1.1 Position du problème 197
F.1.2 État de l'art 198
F.1.3 Principe de la méthode 198
F.2 Premiers exemples 202
F.2.1 Premiers tests dans le GaAs 202
F.2.2 Laser à cascade quantique à DPRP à 3,4 THz 204
Conclusion 206

Symboles utilisés 207

Table des figures 213

Liste des tableaux 219

Bibliographie 221

Introduction générale

Depuis quatre décennies, l'industrie des semi–conducteurs, par un effort soutenu de recherche et de développement, a fait progresser l'ensemble des composants électroniques de manière spectaculaire. Aujourd'hui, l'ordre de grandeur des épaisseurs des couches semi–conductrices manipulées est le nanomètre. À ces échelles, les phénomènes quantiques ne peuvent plus être négligés et leur compréhension est nécessaire à l'étude des nanocomposants. Parfois pénalisants, car ils dégradent les performances des dispositifs (c'est le cas, par exemple, de l'effet tunnel à travers la grille des transistors), les phénomènes quantiques ont révolutionné l'électronique et permis la création de nouveaux composants qui exploitent les étonnantes propriétés de la mécanique quantique. Un des exemples les plus connus est la diode à effet tunnel résonnant, qui fonctionne à des fréquences très élevées de plusieurs centaines de gigahertz. Citons également d'autres phénomènes quantiques plus exploratoires, comme les oscillations de Bloch dans les superréseaux, les phénomènes d'interférences d'électrons, les ondes plasmoniques, *etc.*

Parmi les nouveaux domaines profitant des progrès technologiques, l'optoélectronique a vu l'apparition de nouveaux composants exploitant la quantification de la structure de bandes pour concevoir des dispositifs laser[1] innovants. Un exemple d'une telle structure est le *laser à cascade quantique*.[2] Il se distingue des autres lasers à semi–conducteurs par le fait que seuls les états quantifiés d'une même bande interviennent : on parle alors de laser à transitions inter-sous–bandes. Si l'idée originelle de ces composants remonte aux travaux de Kazarinov et Suris dans les années 1970 [1], la faisabilité de ces dispositifs n'a été démontrée qu'en 1994, par J. Faist des Bell Laboratories [2]. Dès lors, la recherche sur les lasers à cascade quantique connaît un vif engouement et est l'objet d'un grand nombre de publications tant expérimentales que théoriques. Les lasers à cascade quantique semblent être aujourd'hui une des voies les plus prometteuses pour réaliser des sources cohérentes à l'état solide émettant dans le domaine de l'infrarouge, i.e., dans la plage fréquentielle s'étendant entre 300 GHz et 30 THz. Cependant, actuellement l'infrarouge lointain reste difficilement accessible et c'est pour cette raison qu'une intense activité de recherche se concentre sur les LCQ rayonnant dans cette région spectrale. L'infrarouge lointain est particulièrement intéressant, car de nombreux phénomènes physiques ont des fréquences caractéristiques dans cette partie du spectre. Les débouchés sont extrêmement variés et couvrent un large éventail d'applications possibles, par exemple, dans le domaine de l'imagerie médicale, de la spectroscopie, dans les télécommunications du futur, *etc.*

Face aux difficultés technologiques que représentent la mise au point d'un nouveau composant, les outils de simulations numériques occupent une place centrale dans la chaîne de

[1] Acronyme anglais pour *Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation*, c'est–à–dire littéralement amplification de lumière par émission stimulée de rayonnement.

[2] Traduction de l'anglais *Quantum Cascade Laser*, abrégé par l'acronyme LCQ dans la suite de ce mémoire.

développement et constituent un domaine de recherche qui connaît un vif intérêt. Aujourd'hui, les outils de modélisation restent nécessaires, d'une part, pour proposer des pistes d'amélioration des structures à moindre coût et, d'autre part, pour tenter de comprendre l'ensemble des phénomènes physiques sous–jacents. Pour étudier ces composants de très petites dimensions, de nombreux formalismes sont proposés, allant de modèles macroscopiques, comme ceux basés sur les équations de bilan, aux modèles microscopiques plus complexes basés sur un formalisme purement quantique (fonctions de Wigner, théorie des fonctions de Green, *etc*). Parmi les modèles microscopiques les plus complets, figurent les simulations basées sur la méthode de Monte Carlo. Dans le domaine de l'électronique, ces simulations permettent d'étudier finement les propriétés de transport, mais également un grand nombre de phénomènes physiques. Les résultats obtenus par la simulation sont confrontés, autant que faire se peut, aux données expérimentales de la littérature, afin de discuter les hypothèses et la pertinence du modèle théorique. En cela une simulation de Monte Carlo peut-être vue, dans une certaine mesure, comme une « expérience numérique » même si elle n'a, bien entendu, pas prétention à remplacer l'expérience.

Pour des LCQ émettant aux fréquences térahertz, l'écart énergétique entre les sous–bandes devient très faible, de l'ordre de quelques milliélectron–volts. Le modèle d'étude du transport doit être donc capable de tenir compte, de manière réaliste, de tous les processus inter-sous–bandes influençant l'émission laser. C'est le cas de l'interaction électron–électron, dont l'origine est la force coulombienne s'exerçant à distance entre deux particules chargées. L'objet de ce travail est de proposer un modèle complet de l'interaction inter–porteurs dans un simulateur Monte Carlo afin d'étudier le transport quantique dans les LCQ.

Nous avons structuré ce mémoire en trois parties :

La première partie, intitulée *Introduction aux dispositifs optoélectroniques en infrarouge*, est consacrée au contexte général de nos travaux. Dans le chapitre 1, nous brossons l'état de l'art des composants émettant dans l'infrarouge. Les nombreuses applications possibles des sources optiques aux fréquences térahertz sont également présentées. Dans le reste de ce chapitre, nous caractérisons la nature du transport dans les LCQ en exposant leur principe de fonctionnement. Étant données les nombreuses problématiques soulevées par le transport quantique dans les nanocomposants, nous consacrons le chapitre 2 à la présentation des différents formalismes utilisés par la communauté scientifique. Nous justifions le choix du formalisme retenu après l'examen de la littérature.

La deuxième partie, intitulée *Appareil théorique du transport électronique quantique*, est consacrée à la description de notre modèle de transport dans les lasers à cascade quantique. Dans le chapitre 3, nous présentons la méthode de détermination des états électroniques ainsi que les principales caractéristiques de notre simulateur de Monte Carlo. Les interactions coulombiennes entre électrons jouent un grand rôle dans la dynamique des LCQ, surtout aux fréquences térahertz. L'inclusion de l'interaction électron–électron dans le simulateur Monte Carlo fait donc l'objet du chapitre 4. Afin de compléter la description des interactions coulombiennes à distance, nous terminons cette partie par la présentation, dans le chapitre 5, de l'écrantage dans le cadre d'un gaz électronique bidimensionnel. La question du temps de calcul des éléments de matrice est prépondérante dans les structures composées d'un grand nombre d'états quantiques, comme c'est le cas dans les LCQ. Afin d'accélérer significativement le calcul des éléments de matrice électron–électron, nous présentons un ensemble de techniques destinées à optimiser la simulation des LCQ. Enfin, nous développons un modèle simplifié d'écrantage multi-sous–bandes apte à décrire les phénomènes complexes des LCQ et nous testons la validité des approximations faites sur un premier exemple. Enfin, afin de tenir

compte des phénomènes loin de l'équilibre, tels que l'inversion de population dans les LCQ, la dernière partie du chapitre 5 présente le modèle d'écrantage hors d'équilibre que nous avons développé.

Les résultats d'études de LCQ sont exposés dans une troisième partie, intitulée *Simulation Monte Carlo de lasers à cascade quantique*. Dans un premier temps, nous avons souhaité valider le modèle de détermination des niveaux quantiques dans les LCQ. Ainsi, au chapitre 6, nous présentons les résultats que nous avons obtenus pour une structure à superréseau particulièrement complexe, émettant dans l'infrarouge moyen [3]. Nous poursuivons cette phase de validation du modèle en discutant de l'influence de l'interaction électron–électron sur les propriétés d'un LCQ à superréseaux émettant au térahertz [4]. Au chapitre 7, nous procédons à l'étude complète d'une structure de la famille des LCQ à dépopulation par résonance de phonon [5] fonctionnant à 3,4 THz. Une analyse physique du composant, pour différentes modélisations de l'interaction électron–électron, ainsi que pour différentes températures de réseau, est menée. Dans le chapitre 8, deux voies pour diminuer la fréquence d'émission sont examinées en détails. Tout d'abord, nous étudions la suggestion émise par S.-C. Lee *et al.* [6] d'utiliser ce LCQ dans un régime plus basse fréquence à 1,4 THz. À cette occasion, nous discutons de l'influence de l'interaction électron–électron sur les performances des LCQ dont la fréquence d'émission se rapproche de 1 THz. Nous terminons ce chapitre en envisageant une autre voie afin d'obtenir une fréquence proche de 1 THz. À cette fin, nous modifions de manière judicieuse la séquence épitaxiale d'un LCQ à dépopulation par résonance de phonon, conçu initialement pour émettre à 2,1 THz [7].

La modélisation complète de l'interaction électron–électron repose sur un appareil mathématique assez conséquent. Pour ne pas alourdir exagérément la lecture, nous avons renvoyé en annexes les parties les plus techniques. On y trouvera également une discussion concernant l'influence de la non–parabolicité dans l'interaction inter–porteurs.

Première partie

Introduction aux dispositifs optoélectroniques en infrarouge

Introduction de la partie I

Dans cette première partie, nous présentons le contexte scientifique qui a motivé nos travaux. Cette partie est composée de deux chapitres. Dans le chapitre 1, intitulé *Sources optiques dans l'infrarouge*, nous présenterons un bestiaire des composants électroniques émettant dans la région spectrale de l'infrarouge. Nous montrerons la richesse des applications possibles dans cette gamme de fréquences et, en particulier, en infrarouge dit lointain. Nous approfondirons tout particulièrement un des composants les plus prometteurs pour l'émission aux fréquences térahertz, à savoir le laser à cascade quantique. Ces dispositifs, qui utilisent à la fois des phénomènes quantiques et optiques, nous sont apparus comme de très intéressants « véhicules test » pour la mise au point d'une méthode de simulation du transport quantique. Nous expliquerons donc le principe de fonctionnement des LCQ et la nature du transport dans ces composants.

Dans le chapitre 2, intitulé *Les formalismes du transport quantique*, nous présenterons les différentes problématiques du transport quantique dans les nanocomposants. Nous examinerons la littérature et brosserons une description des formulations et des méthodes de résolution proposées pour étudier les phénomènes de transport. Enfin, nous préciserons les critères motivant notre choix d'un formalisme du transport dans les LCQ.

Chapitre 1

Sources optiques dans l'infrarouge

Introduction

L'objectif de ce chapitre est de passer en revue un large éventail des photo–émetteurs fonctionnant dans l'infrarouge. Dans une première section, nous présentons au lecteur le contexte scientifique de la génération d'ondes électromagnétiques dans l'infrarouge. Ensuite, quelques unes des applications possibles de ces dispositifs sont présentées, en particulier dans l'infrarouge lointain. Dans une deuxième section, les différentes sources émettant dans l'infrarouge sont passées en revue. Dans une troisième section, nous présentons en détail les lasers à cascade quantique (abrégé par l'acronyme LCQ dans la suite de ce mémoire). Nous rappelons tout d'abord les principaux avantages de ces dispositifs. Ensuite, nous procédons à un bref rappel sur l'effet laser et sur les états quantifiés dans les hétérostructures afin de fixer le vocabulaire. Après une section consacrée à l'historique des lasers, nous abordons le principe de fonctionnement des lasers à cascade quantique, leurs performances ainsi que leurs limites. En particulier, nous préciserons les performances atteintes dans le domaine de l'infrarouge lointain. Enfin, nous concluons ce chapitre en évoquant quelques dispositifs plus exploratoires.

1.1 Motivations de l'étude de l'infrarouge

1.1.1 Position du problème

L'infrarouge est une zone du spectre électromagnétique particulièrement intéressante à bien des égards. De nombreux phénomènes physiques ont en effet leur fréquence caractéristique dans cette région (par exemple les raies d'absorption de certaines molécules). Et s'il est une région de l'infrarouge qui est particulièrement intéressante, c'est celle de l'infrarouge dit *lointain*. Aujourd'hui, une intense activité de recherche s'est développée autour des sources émettant dans cette région et nous allons tâcher de décrire, dans ce paragraphe, les difficultés à concevoir de tels dispositifs.

La gamme des fréquences de l'infrarouge lointain[1] est usuellement définie comme s'étendant de 100 gigahertz à 10 térahertz (ce qui correspond à des longueurs d'onde comprises entre 30 μm et 3 mm). Elle est contiguë à la région des fréquences microondes (longueurs

[1] On rencontre fréquemment dans la littérature l'acronyme anglais de *T-Ray* comme abréviation de *Terahertz waves*. Dans ce chapitre, nous emploierons parfois, par raccourci, l'expression « d'ondes térahertz » ou de « fréquences térahertz » pour référer à l'infrarouge lointain.

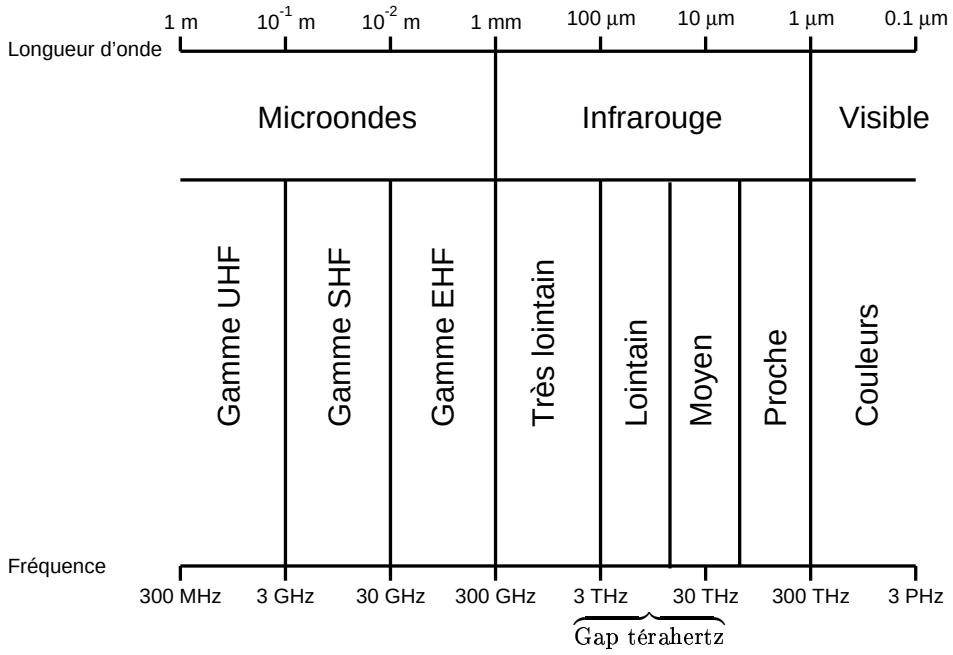


FIG. 1.1 – Représentation du spectre électromagnétique voisin de la région de l'infrarouge moyen et lointain.

d'ondes millimétriques et centimétriques $\lambda \lesssim 30$ cm) et à ce qu'il est convenu d'appeler l'infrarouge moyen (c'est–à–dire $\lambda \simeq 10$ μm). Pour émettre à une fréquence se situant dans ces deux régions, i.e., dans les microondes et l'infrarouge moyen, on dispose aujourd'hui de dispositifs performants. Par contre dans l'infrarouge lointain, il existe actuellement peu de sources cohérentes et à faible coût, d'où la dénomination de *Gap térahertz*. La figure 1.1 détaille schématiquement les différentes segmentations de cette partie du spectre.

L'obtention de sources à l'état solide d'ondes électromagnétiques térahertz est une vraie difficulté technologique,[2] car les limites de fonctionnement des composants des régions attenantes, précédemment évoquées, ne peuvent pas être indéfiniment repoussées. En effet, les composants électroniques fonctionnant dans le domaine microonde n'opèrent plus au–delà de quelques centaines de GHz. De plus, nombre de composants photoniques ne peuvent fonctionner aux longueurs d'ondes submillimétriques. Par exemple, les diodes lasers constituent des sources de grande qualité et qui permettent d'obtenir des puissances élevées dans le domaine du « visible » ou du proche infrarouge. Par contre, par manque de matériau adéquat, il ne leur est pas possible d'atteindre la gamme des fréquences térahertz.

De nouveaux composants doivent donc prendre le relais et de nouvelles technologies être développées, ce qui représente, à tous points de vue, un défi technologique de premier ordre. Précisons quelques ordres de grandeurs propres aux ondes électromagnétiques térahertz afin de cerner la problématique. Par exemple, le temps de « transit » des porteurs est de l'ordre de la fréquence de radiation, c'est–à–dire que les durées de vie en infrarouge lointain sont inférieures à la picoseconde. Les écarts énergétiques mis en jeu sont très faibles (en effet 1 THz $\simeq$ 4 meV) et sont donc sensibles à un grand nombre de phénomènes indésirables pouvant

[2]Nous n'en parlerons pas dans ce mémoire, mais la réalisation de *récepteurs* d'ondes électromagnétiques térahertz est également une difficulté tout aussi grande.

modifier fortement la fréquence d'émission. Nombre de problèmes, inhérents aux longueurs d'onde submillimétriques, rendent la technologie térahertz très épineuse comme, par exemple, ceux liés au guidage de l'onde électromagnétique, à l'absorption sur porteurs libres ou à la température.[3]

1.1.2 Les domaines d'utilisation

Actuellement, de plus en plus de débouchés se dessinent pour les sources fonctionnant dans l'infrarouge moyen et lointain. Dans ce paragraphe, nous allons citer seulement quelques exemples parmi ceux qui nous semblent les plus intéressants. Notons que, de par le large spectre de ses applications, l'étude de l'infrarouge est un domaine de recherche ouvert et interdisciplinaire.

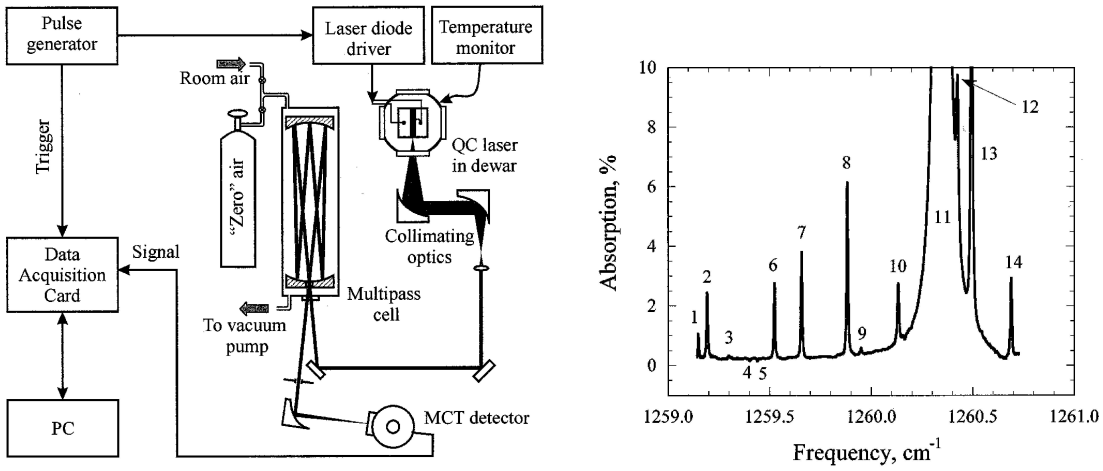
- **Physique**
  La physique du solide et des semi–conducteurs est tout particulièrement intéressée par des sources émettant dans l'infrarouge afin d'étudier, entre autres, les modes rotationnels des molécules, les ondes plasmoniques, la résonance cyclotron, la supraconduction, *etc.*
- **Imagerie médicale**
  Une des qualités essentielles des ondes électromagnétiques térahertz est la faible énergie des photons, de l'ordre de $E_{\mathrm{THz}} \simeq 4$ meV. Comparativement, les rayons X sont un million de fois plus énergétiques ($\nu_{\mathrm{X}} = 10^{18}$ Hz, soit $E_{\mathrm{X}} \simeq 4$ keV). L'idée est de développer des systèmes d'imagerie térahertz sans dommage pour les patients, car l'observation des tissus se réaliserait sans risque de destruction des cellules sensibles. En outre, les tissus présentent des spectres d'absorption, ainsi que des indices de réfraction, différents aux ondes électromagnétiques térahertz, permettant de les distinguer [8]. C'est ainsi que la première démonstration d'imagerie par ondes térahertz a été publiée par Hu *et al.* en 1995 [9].
  À noter que des applications industrielles dans le domaine du contrôle non destructif des matériaux sont également en cours de développement.
- **Sécurité**
  De nombreux diélectriques (vêtements, emballages, ...) sont transparents aux ondes électromagnétiques térahertz, alors que les porteurs libres des métaux les absorbent. Un des débouchés aux sources térahertz est donc la conception de détecteurs d'armes à feu. Actuellement le besoin de tels dispositifs se fait grandement ressentir et représente un marché colossal (aéroports, grands stades de sport, gares, *etc.*). Pour se convaincre de l'importance de cette thématique, mentionnons qu'un colloque, intitulé *Terahertz for Military and Security Applications* et organisé par *The International Society for Optical Engineering*, se déroule depuis 2003.[4]
- **Astronomie**
  D'après les astrophysiciens, 98 % des photons émis depuis le Big Bang sont dans la gamme des ondes submillimétriques et de l'infrarouge lointain. Il est donc évident que le développement de la technologie térahertz est d'une importance cruciale pour ce domaine d'application.
  Par ailleurs, la planétologie a besoin de sources térahertz afin d'étudier la composition

[3] On rappelle que l'élargissement thermique $k_B\theta$, où k_B est la constante de Boltzmann ($8{,}62 \times 10^{-5}$ eV K^{-1}) et θ la température, vaut ~ 26 meV à température ambiante. Ainsi 1 THz correspond à un élargissement de 50 K.

[4] Cette première édition a fait l'objet d'actes sous la référence [10].

de l'atmosphère terrestre et des planètes du système solaire. En effet, un grand nombre de molécules ont une raie d'absorption dans l'infrarouge moyen et lointain (plage 3–17 μm). Les agences spatiales mondiales ont une demande pressante de composants térahertz à usage embarqué. Par exemple, une des thématiques actuelles est la recherche du radical OH afin d'étudier l'appauvrissement de la couche d'ozone. Ces applications font également l'objet d'un colloque régulier, intitulé *International Symposium Space TeraHertz Technology*, dont la quatorzième édition s'est tenue en 2003.

- **Autres applications**
  Les sources émettant au térahertz trouveront également de nombreux débouchés commerciaux dans les systèmes de communications haut–débit (liaisons point–à–point, ...), l'échantillonnage électro–optique (analyse de composants), la spectroscopie appliquée à la physico–chimie, *etc.*
  De nombreux résultats récemment publiés montrent que ces applications ne sont plus du domaine de la prospective. Donnons des exemples de résultats expérimentaux concernant les lasers à cascade quantique, composants que nous étudierons dans le détail dans la suite de ce mémoire. Ainsi, Martini *et al.* ont réussi à transmettre un signal de télévision sur une distance de 70 m, dans les conditions de laboratoire, à l'aide d'un laser à cascade quantique refroidi par l'azote liquide [11]. En 2002, Faist *et al.* ont démontré une transmission optique en espace libre à 300 MHz entre deux bâtiments espacés d'environ 100 mètres [12].
  Enfin Kosterev et Tittel, dans la référence [13], annoncent la conception et la fabrication de capteurs chimiques basés sur des lasers à cascade quantique. La figure 1.2 représente le dispositif expérimental ainsi que le spectre d'absorption obtenu à température ambiante.



(a) Procédé expérimental.

(b) Exemple de spectre d'absorption : 1, 11, 13 → H_2O ; 2, 3, 10 → N_2O ; *etc.*

FIG. 1.2 – Laser à cascade quantique utilisé comme capteur chimique. D'après [13] : Kosterev *et al.*, *IEEE Journ. Quant. Electron.*, **38**, p. 582 (2002).

Maintenant que les applications possibles sont mieux cernées, nous allons à présent détailler les différents moyens de générer des ondes électromagnétiques térahertz.

1.2 Les différentes méthodes de génération d'ondes électromagnétiques dans l'infrarouge

Nous verrons, dans cette section, que l'Institut d'Électronique de Microélectronique et de Nanotechnologie a une activité de recherche importante dans l'étude de l'infrarouge selon différentes approches [14–16].

Les sources émettant dans l'infrarouge peuvent être classées en deux catégories : les sources à génération *directe* et celles à génération *indirecte*. Cette classification n'est qu'une possibilité parmi de nombreuses autres. En effet, les sources pourraient être triées selon différents angles : par exemple, on peut séparer les composants à émission cohérente de ceux à émission incohérente, ou bien les dispositifs photoniques d'une part et ceux électroniques d'autre part. Voyons plus en détails les principaux dispositifs en commençant par la génération directe.

1.2.1 Génération directe

Dans un premier temps, nous étudions les composants électroniques bien connus que sont les diodes Gunn, IMPATT[5] et à effet tunnel résonnant. Nous donnerons les limites fréquentielles atteintes aujourd'hui par ces dispositifs, afin de les mettre en perspective par rapport aux autres dispositifs et, en particulier, aux lasers à cascade quantique.

Diodes

Les diodes Gunn sont utilisées surtout dans les gammes millimétrique et submillimétrique et leurs performances semblent limitées aux fréquences inférieures à 150 GHz, pour des puissances de quelques dizaines de milliwatts [17]. Utilisant la génération d'harmoniques de second ordre, on peut augmenter les fréquences de fonctionnement et atteindre, par exemple, 290 GHz avec une puissance de sortie de 0,3 mW [18].

Les diodes IMPATT sont également limitées dans leur montée en fréquence, puisque leur état de l'art se situe à des fréquences de fonctionnement voisines de 170 GHz, pour une puissance de 100 mW [19].

Utilisant des effets quantiques, les diodes à effet tunnel résonnant ont repoussé les limites fréquentielles des composants évoqués ci–dessus. L'état de l'art des fréquences de fonctionnement pour ces diodes est d'environ 700 GHz pour une puissance de 0,3 μW [20].

Émission par ondes de plasma dans les transistors sub–microniques

Récemment, une émission électromagnétique térahertz, accordable entre 0,4 et 1 THz, a été obtenue par Knap *et al.* [21], à l'aide de transistors H.E.M.T.[6] en InGaAs à faible longueur de grille (voir figure 1.3). La puissance a été mesurée à quelques nanowatts. Cette émission a été attribuée aux ondes électroniques de types « plasmons », c'est–à–dire aux oscillations collectives du gaz électronique bidimensionnel à l'intérieur du transistor qui agit alors, en quelque sorte, comme une cavité résonnante. La fréquence plasmon des gaz bidimensionnels étant proportionnelle à l'inverse de la longueur de grille L_g, elle peut donc être réglée dans l'infrarouge lointain si on diminue suffisamment L_g. L'idée de l'émission térahertz dans les transistors date des travaux de Dyakonov *et al.* [22]. Ils ont prédit que la fréquence atteindrait

[5] Acronyme anglais *IMPact Avalanche Transit Time*, signifiant diode à avalanche et à temps de transit.
[6] Acronyme de l'anglais *High Electron Mobility Transistor*, signifiant transistor à mobilité électronique élevée.

le domaine térahertz avec des longueurs de grille inférieures à 100 nm. En outre, l'émission pourrait théoriquement être observée à température plus élevée, car la fréquence plasmon est indépendante de la température.

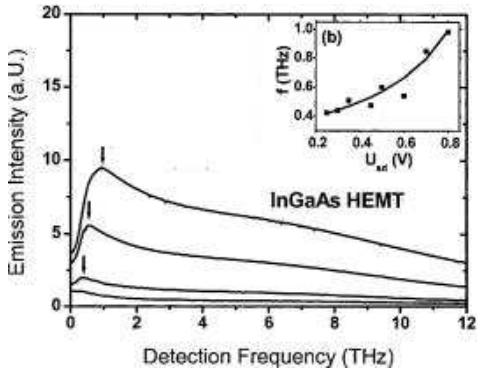


FIG. 1.3 – Spectre d'émission d'un HEMT InGaAs pour trois tensions source/drain U_{sd}. Les trois flèches représentent des émissions à 0,42 THz, 0,56 THz et 1 THz respectivement. La courbe du médaillon montre la fréquence de résonance f en fonction de U_{sd}. D'après [21] : Knap *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **84**, p. 2331 (2004).

Génération par techniques impulsionnelles

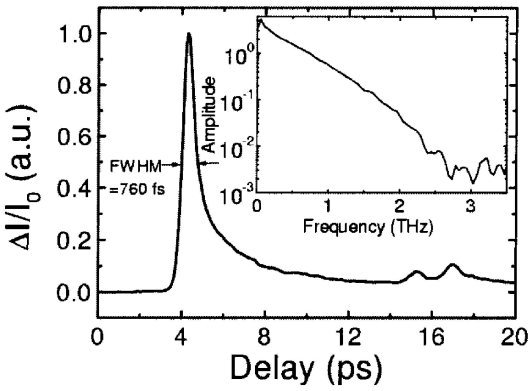


FIG. 1.4 – Allure typique d'une impulsion térahertz. D'après [23] : Desplanque *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **84**, p. 2049 (2004).

Une équipe de l'I.E.M.N. utilise l'effet de Franz–Keldysh afin de générer et détecter des ondes électromagnétiques dans la gamme térahertz [16, 23]. Sans rentrer dans les détails, un laser femtoseconde génère une impulsion optique dans le semi–conducteur et crée des paires électrons-trous qui rendent celui–ci conducteur. Étant soumis à une différence de potentiel, une impulsion de courant est alors générée dans l'antenne qui rayonne une impulsion électromagnétique puissante jusque dans la gamme des fréquences térahertz. La figure 1.4 représente l'allure typique des impulsions générées.

Lasers à cascade quantique (LCQ)

Ces dispositifs sont basés sur des transitions entre états quantifiés d'une même bande dans une hétérostructure à multi–puits quantiques. Ils sont l'objet de l'étude théorique présentée dans ce mémoire. Un des avantages du laser à cascade quantique est que la fréquence d'émission peut être réglée dans une large gamme, en ajustant précisément la séquence épitaxiale et l'épaisseur des couches de semi–conducteurs. Même si nous revenons en détail sur ces composants dans la section 1.3, donnons quelques ordres de grandeur des performances actuellement atteintes. Des températures maximales de fonctionnement et des puissances très intéressantes ont été obtenues dans la gamme 7,5–13 μm, avec par exemple une puissance de 3,5 W à 300 K annoncée par Slivken *et al.* [24]. Pour la gamme de l'infrarouge lointain, Kumer *et al.* font état de la réalisation d'un LCQ à $\lambda = 94$ μm fonctionnant en CW[7] jusqu'à 93 K [25].

Génération térahertz par effet de « Streaming Motion »

Il est possible d'obtenir une radiation térahertz dans certains semi–conducteurs en utilisant un effet de conductivité différentielle dynamique négative afin d'amplifier des ondes électromagnétiques. Les dispositifs utilisant cet effet opèrent de manière semblable à ceux employant l'effet laser, puisque la génération s'obtient dans une région active. C'est pourquoi on rencontre parfois la dénomination de *MASER*[8] *de porteurs chauds*. Le phénomène physique, à la base de cette amplification, est le mouvement quasi–périodique des porteurs dans l'espace des phases dû à l'interaction sur phonon optique polaire. En effet, dans les semi–conducteurs III–V et sous certaines conditions, les porteurs peuvent répéter le cycle composé des deux phases suivantes : une accélération balistique sous l'effet du champ électrique, puis l'émission d'un phonon optique polaire. En réglant le champ électrique, on peut ajuster la fréquence du cycle. Des études effectuées par l'équipe de Montpellier au CEM2 ont mis en évidence une possible émission dans la gamme 0,5–1,5 THz dans des semi–conducteurs à base de Nitrures [26–28].

Autres dispositifs

- Les lasers à électrons libres (LEL) :
  Ces lasers sont théoriquement accordables dans un large spectre s'étendant de l'infrarouge aux rayons à courtes longueurs d'onde (rayons UV et X). Ils fonctionnent par le regroupement de paquets d'électrons circulant dans un accélérateur linéaire ou circulaire. Ils permettent d'atteindre de très hautes puissances et sont accordables en modifiant l'énergie des électrons. De telles installations ont nécessairement un coût excessivement prohibitif, qui les limite essentiellement aux applications en recherche fondamentale (projet SOLEIL par exemple).
  De même, les rayonnements synchrotrons permettent d'obtenir des longueurs d'onde très courtes avec de grandes puissances, en utilisant des électrons relativistes tournant dans un anneau de stockage.
- Les lasers pompés optiquement (OPL[9]) :
  Ces lasers connaissent actuellement une baisse sensible de leurs dimensions et de leur coût, ce qui en fait des candidats prometteurs pour l'émission dans l'infrarouge, surtout

[7] Acronyme anglais de *Continuous waves*, littéralement *Ondes continues*, i.e., mode continu.

[8] Acronyme anglais de *Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation*, se traduisant par amplification d'ondes microondes par émission stimulée de rayonnement.

[9] Acronyme anglais signifiant *Optically Pumped Lasers*.

pour les applications embarquées [29]. Ils sont constitués d'un laser de pompe, généralement un laser à CO_2 émettant dans la gamme 9–11 μm, excitant un gaz qui va susciter une émission au térahertz, par exemple le méthanol pour une émission à $\lambda = 119$ μm. L'émission térahertz provient de la désexcitation entre les niveaux rotationnels des molécules du gaz. Actuellement, ils peuvent couvrir une large gamme fréquentielle, allant de 300 GHz à 10 THz, avec des puissances de 10–100 mW. Cependant, les rendements obtenus restent relativement faibles ($\sim 10^{-4}$).

- Enfin, on citera les oscillateurs à ondes retours[10] qui, comme les LEL, restent réservés à des laboratoires de recherche ou de grosses industries car ils nécessitent des champs magnétiques très élevés ($\simeq 10$ kG) et des investissements très onéreux.

1.2.2 Génération indirecte

Dans cette catégorie, nous aborderons principalement deux méthodes permettant d'atteindre l'infrarouge lointain : la multiplication harmonique et le photomélange par battement de fréquences. Ces méthodes souffrent encore de puissances en sortie relativement faibles.

Multiplication d'harmoniques

Le but est d'utiliser une non–linéarité afin de créer des multiplicateurs fréquentiels [30]. Dans ce but, la diode Schottky fut tout d'abord utilisée, puis remplacée par le HBV[11] plus performant. Avec ces composants, Melique *et al.* ont réussi à obtenir la puissance de 10 mW à 250 GHz [31].

Pour émettre à des fréquences térahertz, l'idée est de chaîner les multiplicateurs : on peut ainsi obtenir 1 THz à partir, par exemple, d'un quintuplement de la fréquence 200 GHz, ou à l'aide d'une chaîne de tripleurs à partir de 100 GHz. Par ce biais, on a déjà obtenu une puissance de 75 μW à 1200 GHz [32], et 100 nW à 2,7 THz [33].

Cette méthode de génération est activement étudiée par la communauté Monte Carlo avec de nombreux travaux sur le bruit et la génération d'harmoniques d'ordre supérieur [34].

Le battement de fréquences

En utilisant un photomélange de deux fréquences ν_1 et ν_2, on peut obtenir, *par battement*, les fréquences $\nu_2 \pm \nu_1$. On peut alors choisir convenablement les deux fréquences ν_1 et ν_2 afin de régler $\nu_2 - \nu_1 \simeq 1$ THz. Le lecteur intéressé par de plus amples détails est invité à consulter les travaux des références [15, 35]. Typiquement la puissance obtenue est de quelques microwatts à partir d'une puissance optique $P_{\text{opt}} = 30$ mW [15].

1.2.3 Résumé

Pour résumer succinctement cette partie, le tableau 1.1 présente les différentes performances des principaux dispositifs émettant dans l'infrarouge.

[10] Traduction de l'anglais *Backward–Wave Oscillators*. Ce dispositif est également appelé *carcinotron*.
[11] Abréviation de l'anglais *Heterostructure Barrier Varactor*, signifiant varactor à hétérostructure de barrière.

TAB. 1.1 – Comparaison des performances des diverses méthodes de génération d'ondes électromagnétiques térahertz.

	Lasers à Cascade Quantique	Oscillateurs à ondes retour	OPL
Puissance moyenne	Plusieurs centaines de milliwatts (voire quelques watts)	10 mW	> 100 mW
Gamme fréquentielle	2,1[a]–88[b] THz	0,1–1,5 THz	0,3–10 THz
	Battement de fréquences	Génération d'harmoniques	Ondes plasmoniques
Puissance moyenne	Quelques μW	Quelques μW	~ 1 nW
Gamme fréquentielle	0,5–3 THz	1–2 THz	0,4–1 THz

[a]Référence [7].
[b]Référence [36].

1.3 Introduction aux lasers à cascade quantique

Dans cette section, nous exposons les avantages des LCQ, dispositifs laser à transitions inter-sous–bande. Enfin, nous concluons ce paragraphe par un bref rappel sur l'effet laser et les états quantifiés dans les hétérostructures.

1.3.1 Motivations

Intérêt économique des lasers à semi–conducteurs

Près de cinquante ans après leur découverte, on constate que les lasers auront été indubitablement l'une des inventions majeures du XXème siècle, couronnée par de nombreux prix Nobel. Les lasers sont présents aujourd'hui dans un grand nombre d'applications, tant dans la vie quotidienne que dans l'industrie, à l'hôpital ou dans la recherche. En particulier, les lasers à semi–conducteurs, compacts et facilement intégrés, bénéficient d'un nombre important de débouchés et représentent un marché majeur de l'électronique. Avec l'essor des transmissions par fibres optiques, ils constituent une pièce essentielle des communications haut–débit actuelles et du futur. On citera, par exemple, les diodes laser employées dans les lecteurs de CD, qui forment un très gros marché en volume : elles représentaient 28 % du marché des lasers en 1995, pour 75 % en 2000, le volume du marché passant de 1,25 milliards de dollars à 8 milliards de dollars sur la même période.

Principaux avantages des lasers à cascade quantique

La figure 1.5 présente un schéma typique de la structure de bande d'un LCQ. Celui–ci est constitué d'une séquence de couches épitaxiales, appelée *étage*, répétée un très grand nombre de fois. Ainsi conçus, les LCQ ont un certain nombre d'avantages que nous allons détailler maintenant.

- **Réglage de la fréquence d'émission**

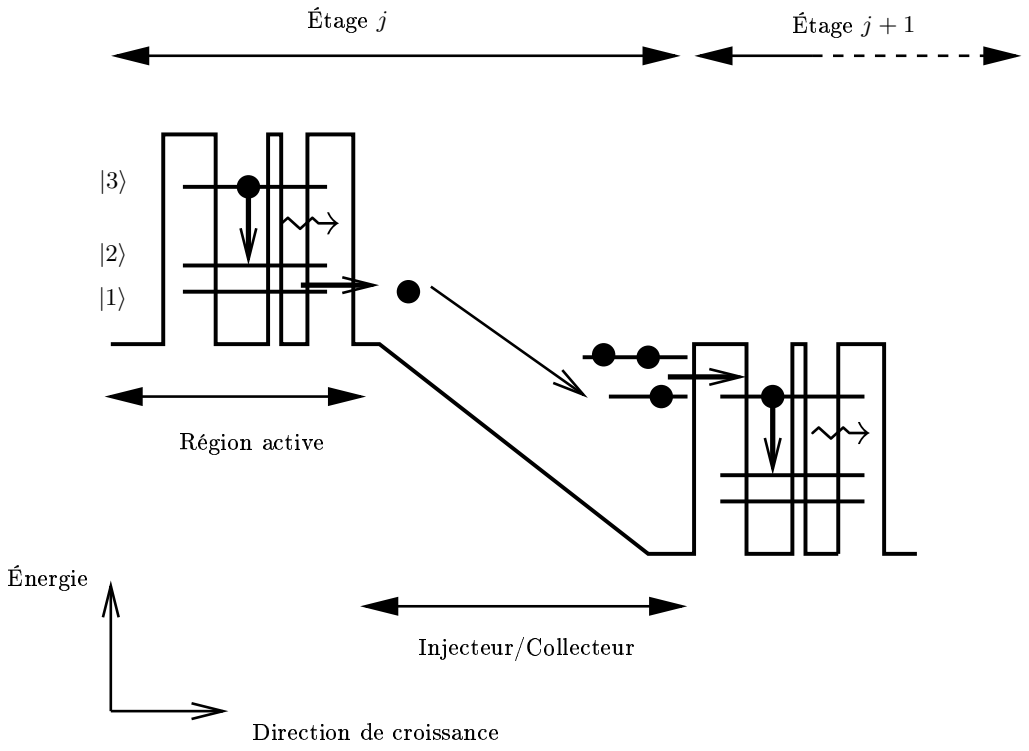


FIG. 1.5 – Représentation schématique de la bande de conduction d'un laser à cascade quantique. Chaque étage est généralement composé d'une *région active* et d'un *injecteur/collecteur*. Sur ce schéma, l'émission d'un quantum de photon, symbolisée par $\rightsquigarrow$, se produit entre les niveaux notés 2 et 3 de la région active.

En jouant sur les couches épitaxiales semi–conductrices et, dans une moindre mesure, sur les matériaux, on peut régler précisément la longueur d'onde d'émission et atteindre des fréquences difficilement accessibles par d'autres moyens. À l'heure actuelle, les lasers à cascade quantique couvrent une large gamme de longueurs d'onde allant de $\lambda = 3{,}4\ \mu$m [36] à $\lambda = 141\ \mu$m [7].

- **Unipolarité de l'émission**
  L'émission inter-sous–bandes dans les lasers à cascade quantique est plus avantageuse que celle inter–bande, à plus d'un titre. La figure 1.6 représente, pour illustrer ce point, les deux types de transitions radiatives, inter-sous–bandes et inter–bandes. On montre que, du fait de la *densité d'états joints*, les transitions inter-sous–bandes conduisent à une raie d'émission plus fine que les transitions inter–bandes électrons/trous. En outre, l'élément de dipôle, grandeur qui caractérise l'amplitude du couplage porteur–photon, peut être beaucoup plus important dans le cas d'une transition inter-sous–bandes que inter–bandes, typiquement d'un facteur 10 (voir la référence [37, page 297]). L'amplification est donc bien plus importante dans les LCQ que dans les lasers inter–bandes.
- **Phénomène de « cascade »**
  Sous réserve que les différents étages soient correctement couplés les uns aux autres et que la structure de bande soit la même dans chaque étage, on obtient théoriquement un phénomène d'inversion de population dans chacun des étages. Ainsi la puissance optique est d'autant plus importante que le nombre d'étages est grand. Au cours de sa cascade, l'électron émettra donc $N_{\text{ét}}$ photons, $N_{\text{ét}}$ étant le nombre d'étages constituant le LCQ.

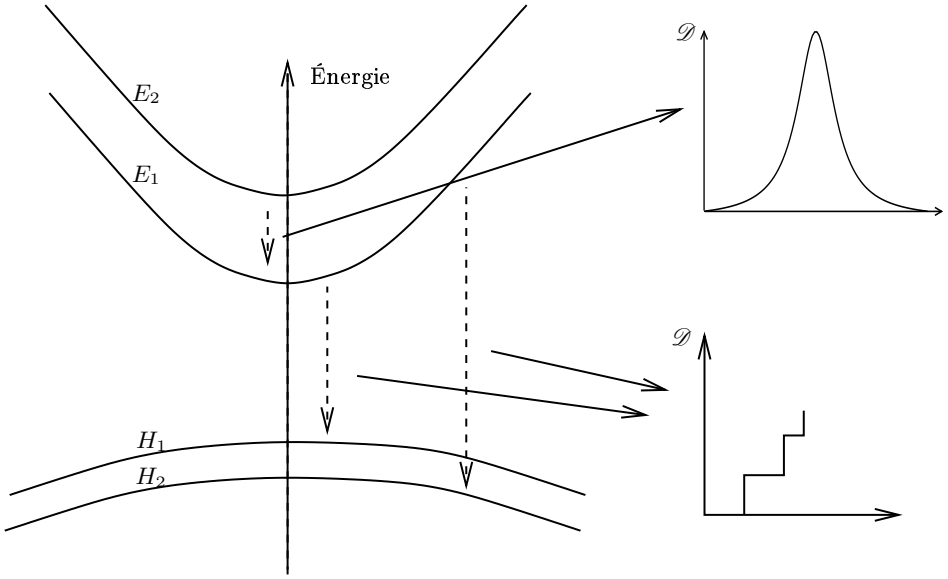


FIG. 1.6 – Comparaison schématique de la *densité d'états joints* $\mathscr{D}$ dans le cas d'une transition inter-sous–bande (entre les états électroniques E_1 et E_2) et de transitions inter–bandes ($H_1 \rightarrow E_1$ et $H_2 \rightarrow E_1$). Chaque marche de la densité d'états joints inter–bande correspond à une transition entre une sous–bande d'électrons et de trous. Par simplicité, on a supposé les bandes paraboliques. D'après [37–39].

Avant d'aborder l'historique des lasers, nous allons procéder à un bref rappel des notions essentielles concernant l'effet d'amplification des ondes électromagnétiques dans les cavités lasers et des états quantifiés dans les hétérostructures.

1.3.2 Quelques rappels et notations

L'effet laser

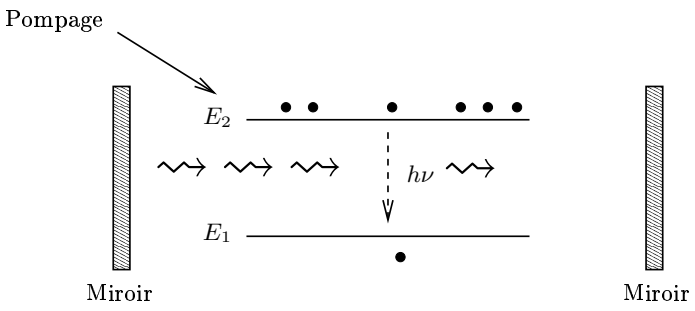


FIG. 1.7 – Représentation de l'émission stimulée de quanta de photon de fréquence $h\nu = E_2 - E_1$ (symbole $\rightsquigarrow$) entre deux niveaux placés dans une cavité délimitée par deux miroirs plan parallèles. Le pompage a pour objectif de peupler préférentiellement le niveau E_2 par rapport au niveau E_1.

Nous rappelons brièvement dans ce paragraphe le mécanisme général de fonctionnement des lasers, indépendamment des matériaux le constituant. On considère une région active placée dans une cavité (un semi–conducteur, un gaz, ...). Pour obtenir des oscillations laser, le gain du milieu amplificateur doit au moins compenser les diverses pertes de la cavité [37]. Un des moyens d'obtenir un gain optique est de réaliser une *inversion de population* entre deux niveaux notés E_1 et E_2 (on suppose que $E_2 > E_1$, voir figure 1.7). L'inversion de population consiste à remplir, par un mécanisme appelé *pompage*, le niveau excité E_2, alors qu'à l'équilibre thermodynamique, les porteurs sont plus nombreux sur l'état fondamental E_1.[12] Ce peuplement du niveau E_2 est assuré, soit par pompage des porteurs à partir des niveaux fondamentaux, soit en « désexcitant » les particules situées sur les niveaux supérieurs. Si le milieu actif est placé dans une cavité convenablement dimensionnée, le système entre alors en oscillation laser et il y a amplification des ondes électromagnétiques à la fréquence $h\nu = E_2 - E_1$, où h est la constante de Planck. Ce phénomène correspond à l'*émission stimulée*, c'est–à–dire à des transitions radiatives $2 \rightarrow 1$ activées par un photon de fréquence identique ν. Dans le but de « piéger » les photons émis, on place le système dans une cavité formée à ses extrémités de deux miroirs plan parallèles : un miroir à réflexion totale et un miroir à réflexion partielle à la longueur d'onde d'émission. Dans la suite de ce mémoire, nous dénommerons par *niveau laser bas* le niveau d'énergie E_1 et par *niveau laser haut* le niveau d'énergie E_2.

L'émission stimulée permet d'obtenir une lumière : (i) monochromatique, c'est–à–dire constituée d'une seule longueur d'onde ; (ii) cohérente dans le temps et dans l'espace ; (iii) intense car concentrée dans un faible angle solide.

Nous continuons cette partie en procédant à un rappel succinct de quelques notions sur la quantification des états électroniques dans les hétérostructures.

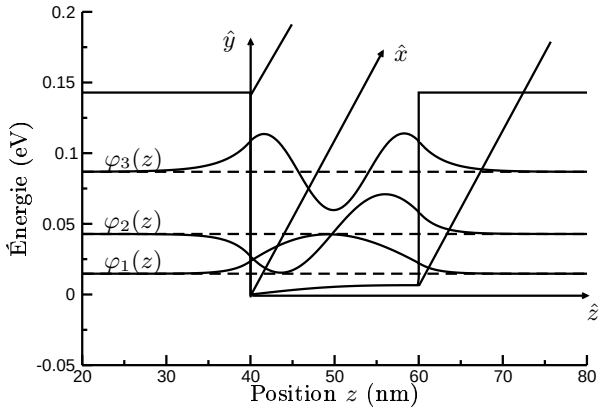


FIG. 1.8 – États quantifiés de la bande de conduction d'une double hétérostructure en GaAs/$Al_{0,18}Ga_{0,82}As$. Les traits pointillés symbolisent les énergies propres $\{E_\nu,\ \nu = 1, 2, 3\}$ correspondants aux fonctions d'onde $\varphi_\nu(z)$. L'unité des fonctions d'onde $\varphi_\nu(z)$, qui est le mètre$^{-1/2}$, n'est généralement pas indiquée, car elles sont définies à une constante de normalisation près.

Niveaux quantifiés dans les hétérostructures

Prenons le cas d'une hétérostructure relativement « simple », formée de deux barrières et d'un puits quantique (en utilisant par exemple les matériaux GaAs/AlGaAs). Une telle structure est représentée en figure 1.8. Les porteurs sont alors confinés dans le puits de potentiel formé par les discontinuités de bandes et il y a alors quantification des niveaux d'énergie selon la direction de croissance. Dans le reste de ce chapitre, nous utiliserons les notations définies par la figure 1.8 et nous dénommons par $(O\hat{z})$ l'axe de croissance, i.e., l'axe perpendiculaire aux interfaces des couches. Dans cette direction, les porteurs sont caractérisés par une fonction d'onde $\varphi_\nu(z)$ et leur énergie potentielle ne peut prendre que des valeurs discrètes, notées E_ν. Par contre, dans le plan parallèle aux interfaces des couches, le mouvement reste libre : le gaz d'électrons est dit *quasi bidimensionnel*. Nous entendrons par « localisation d'une sous–bande ν » dans une région spatiale donnée de l'hétérostructure, le fait que la densité de présence $|\varphi_\nu(z)|^2$ soit maximale dans cette région. L'expression « couplage entre deux sous–bandes » signifiera que le recouvrement spatial entre les fonctions d'onde des deux sous–bandes est élevé, permettant à l'électron de transiter d'une sous–bande à l'autre par un potentiel perturbateur que nous n'expliciterons pas pour l'instant (phonon, autre électron, *etc*). Nous reviendrons plus en détails, au chapitre 3, sur la détermination des états quantifiés des hétérostructures à multi–puits quantiques et les transitions entre ces états.

1.4 Historique des dispositifs laser

1.4.1 Des premiers lasers à gaz vers les lasers à semi–conducteurs

En 1917, Albert Einstein jetait les bases théoriques de l'effet *laser* en élaborant la théorie de l'émission *stimulée* et du rayonnement du corps noir. Le premier dispositif démontrant un

[12] On rappelle qu'à l'équilibre thermodynamique, caractérisé par la température θ, le rapport des populations des niveaux E_1 et E_2 est donné par : $N_2/N_1 = \exp[-(E_2 - E_1)/k_B\theta]$, dans l'hypothèse d'une statistique de Maxwell–Boltzmann. Ainsi, si $E_2 > E_1$ alors $N_2 < N_1$. L'inversion de population consiste donc à contrarier l'ordre « naturel » thermodynamique des populations pour avoir $N_2 > N_1$.

effet laser a été réalisé en 1960 par l'Américain Theodore H. Maiman [40], en s'appuyant sur les idées de ses compatriotes Charles H. Townes et Arthur L. Schawlow [41], soit près d'un demi–siècle après les travaux d'Einstein. C'était un laser à Rubis pompé par lampe flash et émettant à une longueur d'onde de 694 nm. Certains attribuent même la naissance du concept de laser à Townes et Schawlow pour leurs travaux, dès 1951, sur l'effet MASER dans un gaz d'ammoniac. Les premiers dispositifs laser furent essentiellement basés sur des molécules de gaz (par exemple l'Hélium–Néon). Puis en 1962 furent inventés les premiers lasers à semi–conducteurs par R. Hall. Les hétérostructures semi–conductrices permettent un guidage aisé de l'onde électromagnétique. En effet, la différence d'indices optiques entre les matériaux est utilisée pour le guidage de l'onde et la propagation du mode parallèlement au plan des couches, les deux miroirs de la cavité étant formés par les facettes clivées du semi–conducteur. Le clivage suit théoriquement un plan cristallin, ce qui assure une planéité « miroir ». Dans une double hétérostructure, le matériau de la barrière de potentiel a un gap supérieur au matériau constituant le puits quantique : on en déduit alors que ce dernier présente un indice optique supérieur confinant le mode électromagnétique dans le puits de potentiel, où les porteurs ont également leur maximum de localisation [37].

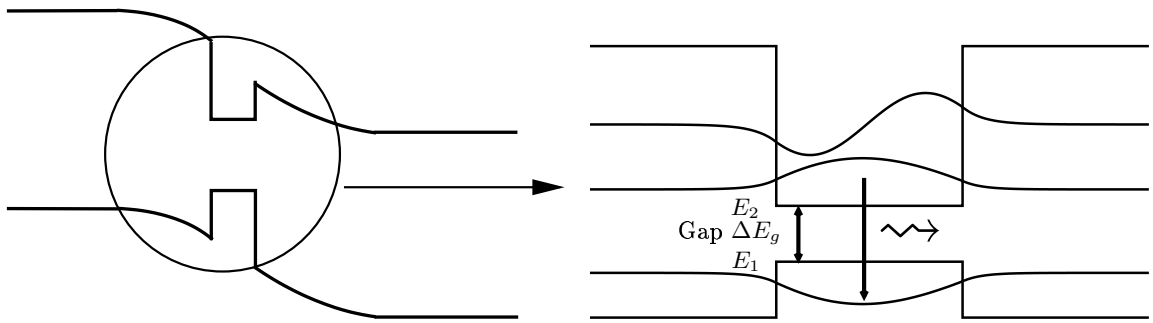


FIG. 1.9 – Représentation des niveaux laser (une sous–bande de la bande de conduction et une de la bande de valence) dans un laser à puits quantique inter–bandes.
L'émission est majoritairement déterminée par l'écart énergétique du gap ΔE_g du système de matériaux utilisé.

Par la suite, la notion de confinement quantique a permis l'amélioration des dispositifs lasers à semi–conducteurs. Rappelons succinctement le principe de fonctionnement des lasers à confinement quantique inter–bandes (voir schéma de la figure 1.9). Dans ces dispositifs, les niveaux radiatifs laser sont formés par une sous–bande des bandes de conduction et de valence. On polarise alors la jonction p–n afin d'injecter les électrons dans le puits quantique sur le niveau E_2 (i.e. la sous–bande de la bande de conduction). C'est alors la recombinaison d'une paire électron/trou qui conduit à l'émission de lumière. En ajustant la largeur du puits quantique, on peut régler les niveaux énergétiques des bandes « portant » les porteurs confinés et ainsi jouer sur le gap « effectif » du puits. Cependant, il n'en reste pas moins que la fréquence d'émission de la transition inter–bande est essentiellement déterminée par le gap d'énergie.[13] Le tableau 1.2 résume les fréquences atteintes par les diodes laser pour différents systèmes de matériaux.

[13] D'où la dénomination de laser inter–bandes, c'est–à–dire entre bande de conduction et bande de valence, même si les porteurs sont quantifiés sur chaque bande.

TAB. 1.2 – Plages de longueurs d'onde atteintes par les diodes laser en fonction des matériaux semi–conducteurs utilisés.

Matériaux	Gap ΔE_g (eV)	Constante de maille (Å)	Longueur d'onde (nm)
GaAs/AlGaAs	1,42–2,1	5,65	850
InGaAs/GaAs	0,8	5,87	980
InGaSb/InAs/GaSb	0,3–0,8	~ 6	3000–4000

1.4.2 Vers les lasers semi–conducteurs à transitions inter-sous–bandes

Reprenons le fil de l'histoire. En 1960, B. Lax propose un laser entre niveaux de Landau dans un solide soumis à un champ magnétique (laser cyclotron) [42]. En 1963, furent inventés les premiers lasers à double hétérostructure par Kroemer. À la fin des années 1960, la technologie d'épitaxie par jets moléculaires a réalisé de nombreux progrès dans la fabrication d'hétérostructures de matériaux III–V et est à l'origine de l'essor de l'optoélectronique à l'aide de structures à puits quantiques dans ces matériaux. Dans les années 1970, de nombreux groupes travaillent sur les propriétés des systèmes confinés à période artificielle, appelés *superréseaux*. On citera à cet égard les travaux pionniers de L. Esaki et R. Tsu, réalisés au centre de recherche IBM de T. J. Watson à New York, sur la structure de bandes et les propriétés de résistance différentielle négative des superréseaux [43]. Ces chercheurs ont suggéré que l'on pouvait créer des *mini–bandes* d'énergie en faisant croître une alternance périodique de couches semi–conductrices. En 1971, deux chercheurs russes, R. F. Kazarinov et R. A. Suris de l'Institut Ioffe de Leningrad (actuellement St. Petersbourg), ont alors proposé d'utiliser ces structures afin d'amplifier des ondes électromagnétiques de l'infrarouge [1]. Ils imaginent une émission se produisant entre les états quantifiés des mini–bandes et se répétant autant de fois qu'il y a de périodes dans le superréseau : c'est la naissance conceptuelle des lasers à cascade quantique.

Cependant, pendant une vingtaine d'années, la recherche va buter sur les difficultés technologiques à réaliser l'épitaxie de centaines de couches de quelques mailles atomiques, afin de réaliser les structures suggérées par Kazarinov *et al.* En outre, les chercheurs ont rencontré de nombreux problèmes expérimentaux à observer la luminescence dans des structures à multi–puits quantiques, car l'émission spontanée entre sous–bandes est très rapide (typiquement de l'ordre de la picoseconde). En 1974 a lieu la démonstration, aux Bell Laboratories, de l'existence de niveaux discrets dans des puits quantiques. Puis, vint en 1975 l'invention du laser à puits quantique par Dingle et Henry. Dans ces dispositifs, le pompage est réalisé électriquement et les porteurs sont injectés dans les états confinés d'un puits quantique. En 1976, le premier spectre d'émission inter-sous–bandes dans un gaz d'électrons bidimensionnel a été démontré par Gornik et Tsui, dans une couche d'inversion Si/SiO_2. En 1983, Sollner *et al.* démontrent l'effet tunnel résonnant à des fréquences térahertz [44]. En 1985, West et Eglash réalisent la première démonstration de transitions[14] optiques entre deux sous–bandes d'un puits quantique en GaAs [45]. Puis en 1986, F. Capasso et ses collaborateurs font état d'expériences d'effet tunnel séquentiel dans des superréseaux [46].

Ce n'est qu'en 1994, après tout ce long cheminement expérimental et technologique, que la

[14] Appelées QWEST, acronyme anglais pour *Quantum Well Envelope State Transitions.*

fabrication du tout premier laser à cascade quantique a été réalisée par Faist *et al.* de l'équipe des Bell Laboratories dirigée par F. Capasso et A. Cho [2]. La longueur d'onde d'émission était de 4,3 μm pour des températures cryogéniques. Depuis cette première réalisation, la recherche sur les LCQ a connu un vif engouement se traduisant par un très grand nombre de publications et de brevets d'exploitation. Aujourd'hui, les lasers à cascade quantique sont même commercialisés,[15] par exemple, pour des applications de détection des gaz CO et NO. On se rend ainsi compte des progrès effectués en une trentaine d'années, tant dans la conception et la fabrication de couches épitaxiales, que dans l'intégration et dans la conception de toute la partie guidage optique. Dans le paragraphe suivant, nous rentrons dans les détails du fonctionnement d'un laser à cascade quantique.

1.5 Principe de fonctionnement des lasers à cascade quantique

Nous avons déjà signalé, que la fabrication d'un LCQ par Faist *et al.* a constitué un événement majeur, car pendant de nombreuses années, il a semblé impossible d'utiliser les transitions entre sous–bandes pour réaliser un laser unipolaire. Expliquons quelles étaient les difficultés rencontrées. De très nombreux mécanismes non radiatifs inter-sous–bandes viennent concurrencer l'émission, qu'elle soit spontanée ou stimulée. Parmi les mécanismes non radiatifs les plus pénalisants, figure l'interaction sur les phonons optiques polaires dès lors que l'écart énergétique entre les sous–bandes ν et μ, $\Delta E_{\nu\mu}$, est supérieur au phonon optique polaire (noté $\hbar\omega_{\text{op}}$). Ainsi les durées de vie non–radiatives entre sous–bandes sont de l'ordre de la picoseconde si $\Delta E_{\nu\mu} \simeq \hbar\omega_{\text{op}}$ et sont typiquement 100 plus courtes que l'émission spontanée [47]. C'est pourquoi les chercheurs étudiant l'effet laser inter-sous–bandes ont pensé pendant longtemps ne pas pouvoir réaliser d'inversion de population entre sous–bandes espacées de plus de $\hbar\omega_{\text{op}}$. Cependant, on a également compris que ce mécanisme pouvait être un moyen pratique pour peupler ou dépeupler sélectivement un état, dès lors que l'écart de sous–bande était précisément réglé par rapport à l'énergie du phonon optique polaire.

Essayons de définir ce que sont les lasers à cascade quantique. Les LCQ sont des lasers *unipolaires* basés sur des transitions entre états quantifiés d'une même bande, dans un système à multi–puits quantiques. Ils sont constitués d'une séquence élémentaire de couches épitaxiales, appelée *étage*, répétée plusieurs dizaines, voire plusieurs centaines de fois. Ces nanostructures sont fabriquées par épitaxie par jets moléculaires d'un système de deux matériaux semi–conducteurs ayant sensiblement le même paramètre de maille, en faisant croître typiquement entre 100 et 1000 couches (le premier LCQ réalisé par Faist *et al.* comportait $25 \times 20 = 500$ couches [2]).

Nous allons maintenant détailler le principe général des lasers à cascade quantique, en expliquant comment des sous–bandes peuvent être utilisées pour réaliser une inversion de population. Dans les schémas et pour l'ensemble des raisonnements qui vont suivre, nous prendrons l'exemple d'un laser à cascade quantique utilisant la bande de conduction avec des électrons, mais le principe serait analogue en bande de valence avec des trous.

En simulant, par une expérience de la pensée, le parcours d'un électron d'étage en étage, voyons comment fonctionne un LCQ tel que nous l'avons schématisé sur la figure 1.5. Chaque étage est numéroté par un indice j allant de 0 à $N_{\text{ét}}$, où $N_{\text{ét}}$ est le nombre d'étages dans la structure. Pour expliquer le fonctionnement des lasers à cascade quantique, il est courant

[15] Voir, par exemple, le site internet de *Alpes Lasers* http ://www.alpeslasers.ch ainsi que le site de *Physical Sciences Inc.* http ://www.psicorp.com.

dans la littérature de subdiviser chaque étage en deux sous–modules : la *région active* et l'*injecteur/collecteur* (voir figure 1.5).

1.5.1 La région active

C'est dans cette partie de l'étage que sont localisés les deux niveaux entre lesquels se réalise l'inversion de population et qui déterminent la fréquence d'émission $h\nu = E_3 - E_2$. La séquence de couches épitaxiales de la région active et le champ externe appliqué sont réglés de manière à obtenir un fort recouvrement spatial entre les deux niveaux laser, se traduisant par un élément de dipôle $\langle z_{23} \rangle$ élevé[16] défini par [37] :

$$\langle z_{23} \rangle = \langle \varphi_2 | \hat{z} | \varphi_3 \rangle. \tag{1.1}$$

L'élément de dipôle $\langle z_{\mu\nu} \rangle$ permet de caractériser l'amplitude $g_{\nu\mu}$ de l'émission stimulée entre deux niveaux :

$$g_{\mu\nu} \propto \langle z_{\mu\nu} \rangle^2 (n_\mu - n_\nu), \tag{1.2}$$

où n_μ est la densité électronique surfacique de la sous–bande μ. Selon que les états laser haut et bas sont localisés dans le même puits ou pas, la transition est dite *verticale* ou *diagonale*. Dans ce dernier cas, le spectre d'émission est beaucoup plus élargi, principalement à cause de la rugosité des interfaces [38].

Dans le but d'obtenir un dépeuplement efficace du niveau laser bas, les sous–bandes 1 et 2 (voir figure 1.5) sont *anti–croisées*[17] et l'écart énergétique les séparant réglé de manière à ce qu'elles soient espacées d'un phonon optique polaire, c'est–à–dire $\Delta E_{21} \approx \hbar\omega_{\mathrm{op}}$. C'est par ce biais, que les chercheurs ont utilisé le phonon optique polaire qui leur posait tant de problèmes, en concurrençant l'émission stimulée. En ajustant $\Delta E_{21} \approx \hbar\omega_{\mathrm{op}}$, il existe une très forte probabilité d'interaction sur phonon optique polaire entre les niveaux 2 et 1, avec un moment échangé relativement faible et un recouvrement spatial optimal grâce à l'anti–croisement des sous–bandes.

1.5.2 L'injecteur/collecteur

Le rôle des états localisés dans ce sous–module est d'extraire les électrons du niveau laser bas de l'étage j et de les faire transiter dans l'état laser haut de l'étage suivant $j+1$ (étage dit *adjacent*). Pour être plus précis, la sous–bande 1 de l'étage j est fortement couplée avec la sous–bande d'énergie la plus élevée de l'injecteur–collecteur. À l'intérieur de l'injecteur–collecteur, l'électron subit de nombreuses interactions qui l'amènent à la sous–bande d'énergie la plus basse. Cette dernière est fortement couplée avec le niveau radiatif haut 3 de l'étage $j+1$. L'électron change ainsi d'étage et débute un nouveau cycle. C'est donc par interactions que les porteurs circulent de sous–bandes en sous–bandes dans la structure (ce type de transport est parfois dénommé *effet tunnel assisté par interactions*). En général, les premières conceptions d'injecteur/collecteur étaient toujours à superréseaux afin d'obtenir une mini–bande d'énergie. Celle–ci est réglée précisément dans le but d'empêcher le couplage direct du niveau laser haut avec l'injecteur–collecteur et d'extraire rapidement les électrons du niveau laser bas. Nous

[16] Par simplicité, nous n'abordons pas ici la question de la non–parabolicité dans la définition précise de l'élément de matrice dipolaire. Nous renvoyons par exemple le lecteur à la référence [48].

[17] Selon le champ perpendiculaire F appliqué à la structure, l'écart énergétique ΔE_{12} passe par un minimum appelé, dans la suite de ce travail, seuil d'anti–croisement.

verrons que d'autres conceptions d'injecteur/collecteur sont possibles. Au regard de ce qui vient d'être exposé, la dénomination adoptée pour cette partie de l'étage se comprend alors aisément : *injecteur* car il s'agit d'assurer le peuplement du niveau laser haut de l'étage $j+1$, et *collecteur* car il s'agit de vider le niveau laser bas de l'étage j.

1.5.3 Nature du transport

En résumé, nous venons de voir que le « chemin » idéal d'un électron est le suivant :

$$\forall j \in [0, N_{\text{ét}}],\ 3_j \xrightarrow{\nearrow h\nu} 2_j \xrightarrow{\nearrow \hbar\omega_{\text{op}}} 1_j \rightarrow A^{\text{IC}} \rightarrow B^{\text{IC}} \rightarrow 3_{j+1} \xrightarrow{\nearrow h\nu} \cdots , \tag{1.3}$$

où A^{IC} (resp. B^{IC}) représente la sous–bande d'énergie la plus élevée (resp. la plus basse) de l'injecteur–collecteur. Ce cycle est assuré, tant par le champ externe appliqué aux deux étages extrêmes de la structure par des contacts, que par la conception précise de la structure de bande de l'étage. C'est la tension de polarisation qui permet la circulation des électrons, et l'inversion de population : le pompage est donc dit *électrique*. De par ce flux de porteurs entre les étages, un courant circule dans le composant « perpendiculairement » selon la direction de quantification : le transport dans les LCQ est donc de nature *quantique*.

En général, le cycle (1.3) n'est pas réalisé pour tous les électrons dans chaque étage. Il existe un certain nombre de transitions « parasites » le rompant et dégradant le phénomène d'inversion de population. Par exemple, celles qui dépeuplent ou empêchent le peuplement de l'état radiatif haut, comme le couplage de la sous–bande 3 avec les états du continuum « au–dessus » des barrières par effet thermo–ionique, ou les transitions directes entre les sous–bandes de l'injecteur et l'état laser bas, *etc.*

1.5.4 Historique des différentes conceptions

Nous procédons, dans ce paragraphe, à un historique des différentes conceptions de lasers à cascade quantique, en montrant comment sont reliées les améliorations apportées aux performances avec celles réalisées sur la structure de bande. Partant de l'infrarouge moyen au milieu des années 1990, les chercheurs ont d'abord cherché à améliorer les performances (température de fonctionnement, puissance, ...) dans cette gamme puis, une fois les dispositifs bien maîtrisés, à émettre dans l'infrarouge lointain. Le lecteur intéressé par un historique complet pourra consulter l'article de synthèse de C. Gmachl [49] ou celui de F. Capasso [50], ainsi que la bibliographie qu'ils contiennent.

Au fil des années, c'est essentiellement la région active qui a connu différentes conceptions, même si la plupart des idées avancées dans le premier laser à cascade quantique de Faist *et al.* ont en fait été conservées et améliorées. Dans cette première structure, la région active était formée d'un triple puits quantique avec une transition radiative diagonale [2]. La localisation des fonctions d'onde des états laser haut et bas, dans des puits distincts, permettait de diminuer leur recouvrement spatial et d'augmenter ainsi la durée de vie du niveau laser haut. En contrepartie, cette conception souffrait d'un élément de dipôle relativement faible ($z_{32} \leq 1$ nm) et d'un élargissement spectral important. Afin d'améliorer les performances, on a utilisé une transition verticale ainsi qu'un substrat InP comme miroir du guide d'onde. Ces modifications ont permis la démonstration de l'effet laser en mode pulsé à température ambiante en 1996 [51].

En 1997, les premiers LCQ utilisant un superréseau comme région active furent fabriqués. Dans ces structures, l'émission se produit entre sous–bandes appartenant à deux mini–bandes

séparées par un mini–gap d'énergie. Grâce aux mini–bandes, on reproduit, en quelque sorte, le principe de fonctionnement des lasers inter–bandes, le gap entre bande de conduction et de valence étant remplacé par un mini–gap « artificiel ». Un des avantages de l'usage de ces superréseaux est de « délocaliser » les fonctions d'onde des niveaux laser afin d'atteindre des éléments de dipôle plus élevés et donc des couplages optiques importants. Avec les LCQ à superréseaux, on a obtenu des puissances très importantes, comme par exemple $\sim$ 800 mW pour le LCQ de la référence [52] à $\theta = 80$ K. Ainsi conçus, les LCQ bénéficient d'éléments dipolaires environ deux fois supérieurs à ceux obtenus dans les LCQ émettant à une longueur d'onde identique mais sans superréseaux.

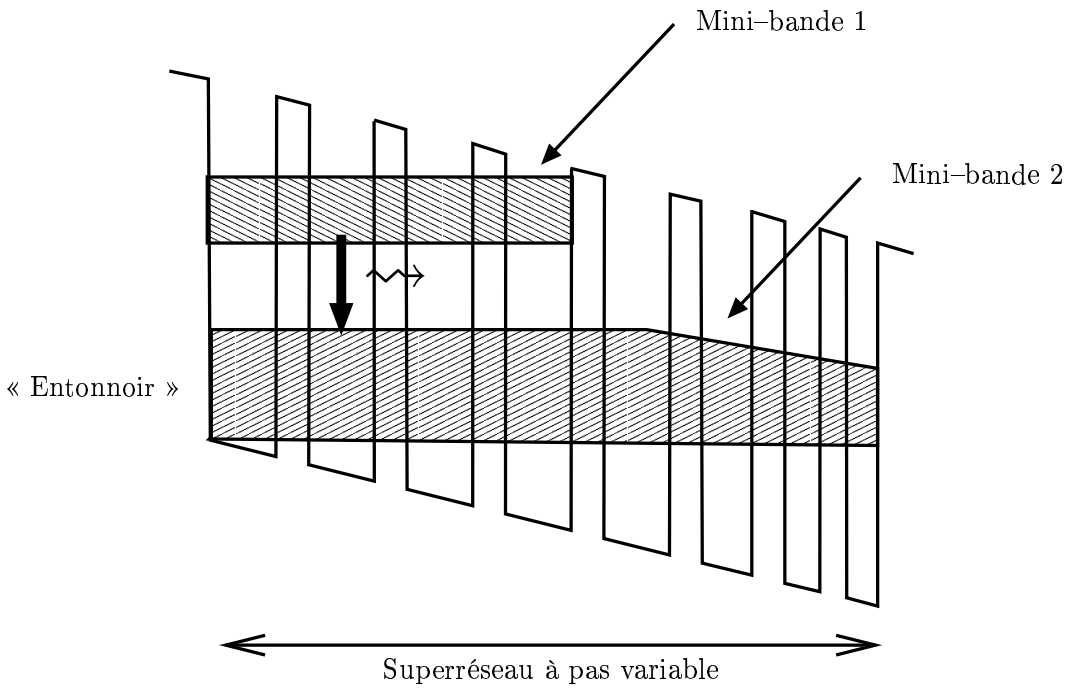
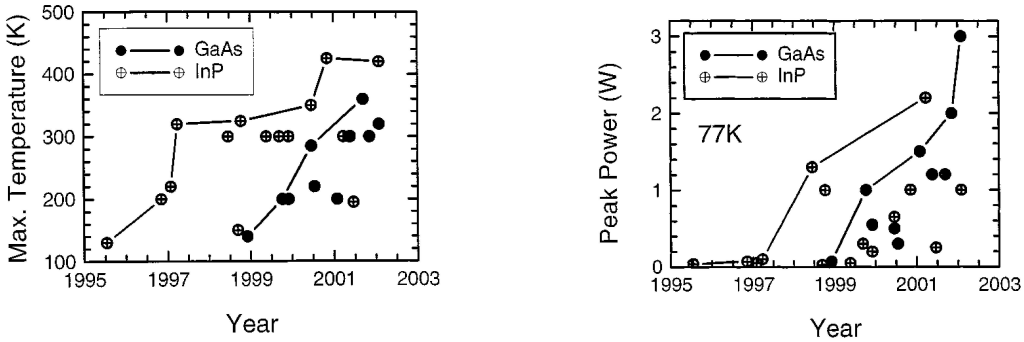


FIG. 1.10 – Schématisation des énergies propres dans le cas d'une région active à superréseau à pas variable. Les régions énergétiques permises, formant des quasi–continuum appelées mini–bandes, ont été grisées.

En 1998, ce concept de superréseaux fut amélioré par Tredicucci *et al.* par le biais d'une région active dite à *superréseau à pas variable*,[18] i.e., d'un superréseau dont la largeur des puits diminue d'un puits à l'autre [53]. La figure 1.10 schématise un superréseau à pas variable. Dans les premiers lasers à cascade quantique à superréseaux, la région active était dopée afin d'obtenir des mini–bandes « plates » et ainsi écranter l'effet du champ appliqué. Cela se traduisait, certes par une puissance de fonctionnement importante, mais avait comme inconvénient majeur un courant de seuil élevé ainsi qu'un large étalement spectral. Effectivement, à cause du niveau de dopage important, les pertes par absorption sont élevées dans les LCQ à superréseaux. Si on reprend l'exemple du LCQ de Scamarcio *et al.*, le dopage était de 6 à 7×10^{16} cm^{-3} et l'élargissement spectral de l'émission de $\sim$ 30 meV pour $\lambda = 8$ μm [52]. L'utilisation d'un superréseau à pas variable permet de conserver les avantages de la conception type superrésau (i.e. les bandes plates) tout en diminuant le niveau de dopage. On obtient ainsi des seuils de courant beaucoup plus bas (5,2 kA cm^{-2} à 295 K en mode pulsé [53]), des températures maxi-

[18]Traduction de l'anglais *Chirped Superlattice*.

males en CW plus élevées et des puissances en mode pulsé à température ambiante beaucoup plus importantes. En 1999, Gmachl *et al.* ont ainsi fait état d'une température maximale de fonctionnement en CW de 175 K pour une puissance de 20 mW [54]. D'après la littérature, l'usage d'une mini–bande permet de « guider » les électrons et d'éviter les transitions parasites (à cet égard, on évoque fréquemment la comparaison avec un « entonnoir énergétique »). Les courants de seuil sont donc plus faibles.



(a) Température maximale en mode pulsé.

(b) Puissance à 77 K.

FIG. 1.11 – Performances comparées des LCQ sur substrat InP et GaAs aux longueurs d'ondes dans la gamme 7,5–13 μm. D'après [55] : Sirtori *et al.*, *IEEE Journ. Quant. Electron.*, **38**, p. 547 (2002).

En 1998, fut aussi démontré le premier LCQ basé sur le système de matériaux GaAs/AlGaAs sur substrat GaAs à $\lambda \simeq 9$ μm [56]. On peut remarquer qu'il a fallut quatre années pour démontrer la faisabilité d'un LCQ sur GaAs/AlGaAs, alors que cette technologie est bien maîtrisée et que les LCQ sont basés sur des transitions inter-sous–bandes, théoriquement réalisables dans différents systèmes de matériaux (éventuellement avec une autre conception de la région active, des dopages et de la valeur du champ électrique). En ce qui concerne leurs performances respectives, les LCQ sur substrat InP bénéficient de températures maximales de fonctionnement supérieures à celles des LCQ sur substrat GaAs, mais ont une puissance inférieure [voir figures 1.11(a) et 1.11(b)]. En outre, les LCQ sur GaAs semblent être les candidats retenus pour émettre dans l'infrarouge lointain.

Pour terminer ce paragraphe, nous en venons à trois conceptions récentes de structure de bande ayant permis une amélioration significative des performances. Les deux premières ont été développées par J. Faist et ses collaborateurs de l'Université de Neuchâtel et ont pour but d'augmenter la température de fonctionnement : (i) une conception de la région active dite « à double résonance de phonon », qui a permis la première réalisation, par Beck *et al.*, d'un laser à cascade quantique fonctionnant à température ambiante en CW [57] ; (ii) le concept d'inversion de population « entre une sous–bande localisée et les états du continuum[19] » (abrégée par transition BTC dans la suite du texte). Ce dernier concept a permis d'atteindre également des performances à températures élevées remarquables, comme par exemple une température maximale de 150 °C avec une puissance de 90 mW en mode pulsé [58] ; (iii) la

[19]Traduction de l'anglais *Bound–To–Continuum.*

troisième innovation, présentée en 2003 par Williams *et al.*, est le laser à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon, qui a permis d'atteindre la fréquence d'émission la plus basse à ce jour, sans l'utilisation de champ magnétique, de 2,1 THz [7]. Nous reportons à une prochaine section, entièrement dévolue aux LCQ de l'infrarouge lointain, la présentation de cette famille. Le tableau 1.3 résume de manière synthétique les principales évolutions des lasers à cascade quantique, partant des travaux pionniers de Esaki *et al.*, pour aboutir aux dispositifs térahertz que nous allons maintenant aborder en détails.

TAB. 1.3 – Résumé de l'évolution et de la chronologie des différentes conceptions des lasers à cascade quantique avec les principaux faits marquants.

Année	Auteur et références	Région active	Commentaires
1970	Esaki *et al.* [43]	Superréseau	Structure de bande et résistance différentielle négative
1972	Kazarinov *et al.* [1]	Superréseau	Cascade d'électrons par passage par effet tunnel
1994	Faist *et al.* [2]	TPQ[a]	Première réalisation du laser à cascade quantique
1997	Scamarcio *et al.* [52]	Superréseau	Région active avec un superrésau
1998	Tredicucci *et al.* [53]	Superrésau	Naissance des régions actives à l'aide d'un superréseau à pas variable
1998	Sirtori *et al.* [56]	TPQ[a]	Première réalisation dans le système de matériaux GaAs/AlGaAs
1998	Rochat *et al.* [59]	Superrésau	Première observation de la luminescence térahertz dans les LCQ
2002	Références [4, 60]	Superréseau	Première réalisation d'un LCQ térahertz
2004	Williams *et al.* [7]	DPRP[b]	Plus petite fréquence de 2,1 THz

[a]Acronyme signifiant Triple Puits Quantique.
[b]Acronyme signifiant Dépopulation Par Résonance de Phonon.

1.6 Lasers à cascade quantique émettant dans l'infrarouge lointain

1.6.1 Position du problème

Mettons temporairement de côté les problèmes liés au guidage des ondes électromagnétiques, pour y revenir au prochain paragraphe et concentrons nous sur la structure de bande.

Il a été longtemps admis que l'obtention d'un laser à cascade quantique émettant à une fréquence térahertz ν serait plus aisée de par le fait que $h\nu < \hbar\omega_{\mathrm{op}}$. En effet, il est établi que la probabilité d'émission d'un phonon optique polaire se réduit considérablement dès lors que l'écart énergétique entre les sous–bandes est inférieur à $\hbar\omega_{\mathrm{op}}$. Ce faisant, la durée de vie du niveau laser haut s'accroît, ce qui est *a priori* favorable au maintien de l'inversion de population. Cependant, c'était sans compter sur les autres mécanismes non radiatifs, comme l'interaction électron–électron ou l'interaction sur phonons acoustiques, qui deviennent les interactions limitant les performances au térahertz, lorsque $h\nu < \hbar\omega_{\mathrm{op}}$. Or, l'interaction électron–électron n'est pas aisément contrôlable avec la température comme peut l'être l'interaction avec les phonons. Elle dépend de nombreux paramètres, comme la densité électronique, et des multiples recouvrements spatiaux. Nous verrons que sa modélisation est délicate dans les LCQ, car elle soulève de nombreux problèmes numériques de par le grand nombre d'états et de configurations à traiter. Ajoutée à la conception du guide d'onde, la réalisation d'un laser à cascade quantique térahertz s'est révélée un défi plus délicat encore que celui des LCQ en l'infrarouge moyen. Ainsi, la démonstration d'un LCQ en infrarouge lointain n'a pas encore été faite à température ambiante.

Reprenons succinctement le fil historique des LCQ térahertz. En 1998, Rochat *et al.* réalisent un premier pas en annonçant des mesures d'électroluminescence dans l'infrarouge lointain à $\lambda = 88$ μm [59]. Ce n'est cependant qu'en 2002 qu'ont été obtenues les premières structures émettant au térahertz. Deux articles prennent date en communiquant, pour l'un, une émission à $\lambda = 66$ μm jusqu'à $\theta = 44$ K [60] et, pour l'autre, une émission à $\lambda = 71$ μm jusqu'à $\theta = 50$ K [4]. Ces premières structures, de conception à superréseaux, étaient basées sur le système de matériaux GaAs/$\mathrm{Al_{0,15}Ga_{0,85}As}$, car les lasers à cascade quantique sur AlInAs/GaInAs avaient montré leurs limites de montée en longueur d'onde, en obtenant une longueur d'onde maximale de 24 μm.

1.6.2 Difficultés liées au guide d'onde

Revenons brièvement sur les problèmes posés par la conception et la réalisation d'un guide d'ondes électromagnétiques térahertz, même si ces problématiques ne sont pas l'essence même de ce travail. Ces dernières années, de très grandes améliorations technologiques portant sur le guide d'onde ont été réalisées pour augmenter la longueur d'onde de fonctionnement. Un guide d'onde doit combiner trois qualités majeures : (i) un fort confinement optique ; (ii) une dimension relativement réduite pour conserver une épitaxie qui ne soit pas inutilement complexe ainsi qu'une dissipation efficace de la chaleur ; (iii) des pertes modérées.

La difficulté est particulièrement grande pour les longueurs d'onde de l'infrarouge lointain ($\lambda \geq 20$ μm) pour deux raisons principales. La première concerne les pertes par porteurs libres car elles augmentent en λ^{α}, $\alpha \sim 2$. La deuxième est liée au possible couplage entre le mode laser et le mode de plasmon situé à l'interface entre le contact métallique et le semi–conducteur. Pour résoudre cette dernière difficulté, Sirtori *et al.* ont proposé l'utilisation d'un guide d'onde « découplant le mode plasmon » [61]. Ces auteurs ont conçus un laser à cascade quantique sur système AlInAs/GaInAs, utilisant une couche de GaInAs fortement dopée n^{++} (à 7×10^{18} cm^{-3}), de manière à obtenir une fréquence plasmon proche de la fréquence d'émission mais inférieure. Ils utilisent ainsi l'« anomalie » du comportement de l'indice optique qui, à la fréquence plasmon, diminue vers des valeurs proches ou inférieures à 1 [62]. Ce schéma a été aisément transposé en infrarouge lointain, dans l'autre système de matériaux GaAs/AlGaAs, en utilisant une couche n^{+} de GaAs [4].

Récemment, d'autres améliorations dans le confinement optique ont été réalisées par Dhillon *et al.* qui ont annoncé un LCQ à 2,9 THz fonctionnant en mode continu jusqu'à 77 K [63]. L'innovation présentée ici est un confinement optique réalisé par un guide d'onde double plasmon bidimensionnel à l'interface métal/semi–conducteur, diminuant le confinement latéral avec l'air.

1.6.3 Les différentes structures proposées

Suivant la conception de la structure de bande, quatre « familles » de lasers à cascade quantique ont démontré une émission aux fréquences térahertz : (i) les LCQ à dépopulation par résonance de phonon ; (ii) les LCQ à superréseau ; (iii) les LCQ à transition BTC ; (iv) les LCQ à cascade entrelacée de phonon et photon, cette dernière catégorie étant une synthèse des deux premières (i) et (ii). Dans la suite de cette partie, nous synthétisons l'état de l'art de ces LCQ et expliquons leur fonctionnement.

Lasers à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon

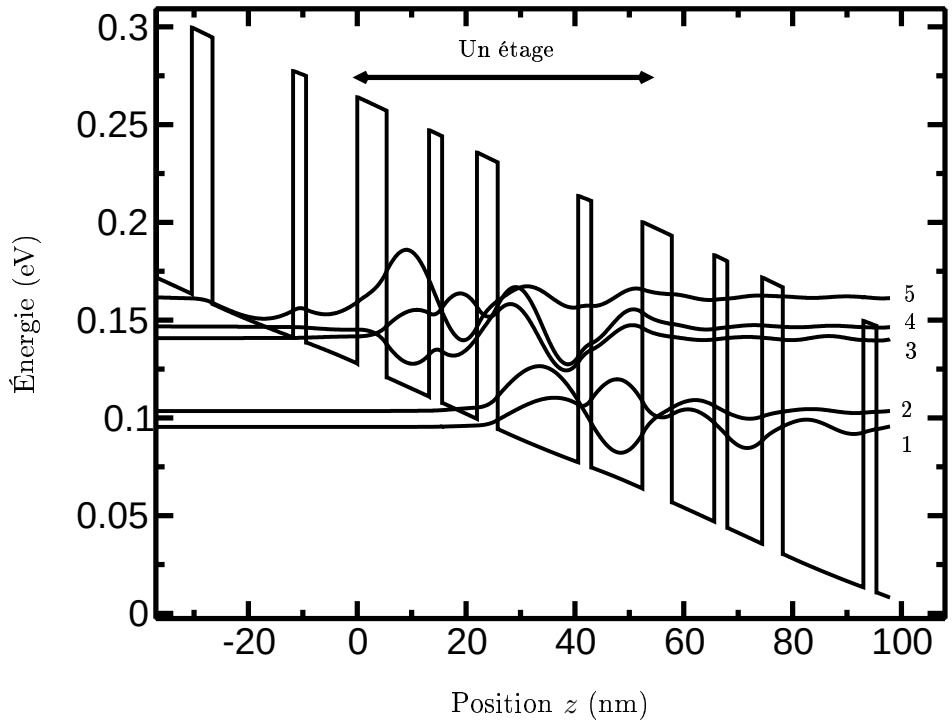


FIG. 1.12 – Potentiel et principales fonctions d'onde d'un étage du laser à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon décrit dans la référence [5].

Cette conception a été initialement proposée en 2003 par B. S. Williams et ses collaborateurs du Massachusetts Institute of Technology, avec une première structure émettant à $\lambda \approx 87$ μm (i.e. $\nu = 3{,}3$ THz), jusqu'à une température de 65 K en mode pulsé [5]. Ce laser est basé sur l'hétérostructure $GaAs/Al_{0,15}Ga_{0,85}As$ et la figure 1.12 représente les états électroniques d'un étage de ce LCQ obtenus par la résolution des équations de Schrödinger et

Poisson. La structure épitaxiale d'un étage est la suivante (en Å) : 54/78/24/64/38/148/24/94, et le puits de 148 Å est dopé à $1{,}9 \times 10^{16}$ cm^{-3}, pour une densité surfacique totale de $N_s = 2{,}8 \times 10^{14}$ m^{-2} par étage. La structure fabriquée par Williams *et al.* comporte 175 de ces étages, et le champ externe appliqué est $F = 12{,}2$ kV cm^{-1}.

Cette structure a l'avantage d'être relativement simple, puisque seulement composée de quatre puits et quatre barrières. Cela se traduit par le fait que seulement cinq sous–bandes permettent de décrire le transport de ce LCQ. En effet, la région active et l'injecteur–collecteur ont été réduits à leur plus simple expression, en utilisant, dans les deux cas, une structure à double puits quantiques. L'inversion de population, correspondant à celle publiée par Williams *et al.*, se produit entre les sous–bandes 5 et 4, à une fréquence $\nu = 3{,}4$ THz ($\Delta E_{54} = 14$ meV). L'élément de dipôle est proche des structures utilisant une région active à superréseau, puisqu'il s'élève à $\langle z_{45} \rangle = 5{,}4$ nm. Le champ électrique est réglé de manière à obtenir l'anti–croisement des niveaux 3 et 4 ($\Delta E_{43} \simeq 6$ meV) et un écart énergétique ΔE_{32} proche de l'énergie de phonon optique polaire ($\Delta E_{32} = 37$ meV). Le dépeuplement du niveau laser bas est alors assuré par l'interaction sur phonon optique polaire, d'où l'appellation de dépopulation par résonance de phonon. Le couplage entre les étages est obtenu par un recouvrement important entre le niveau 1 de l'étage j et le niveau $5'$ de l'étage $j+1$, ainsi que par le faible écart énergétique inter–étage, qui s'élève à $\Delta E_{15'} \approx 5$ meV.

De nombreuses améliorations ont été apportées à ce concept initial de manière à augmenter la longueur d'onde d'émission et la température de fonctionnement en mode pulsé et CW [25, 64, 65]. Des innovations ont été également réalisées concernant la fabrication du guide d'onde, avec une conception appelée « guide métal » [66]. Récemment, B. S. Williams *et al.* ont fabriqué le laser à cascade quantique émettant à la plus grande longueur d'onde à ce jour ($\lambda = 141$ μm) sans l'utilisation d'un champ magnétique, jusqu'à une température de 40 K [7]. D'autres performances très intéressantes ont été également obtenues dernièrement par Kumar *et al.* qui ont démontré un fonctionnement en CW jusqu'à $\theta = 93$ K (voir le tableau récapitulatif 1.4).

Cependant, les courants de seuils élevés sont le défaut majeur des LCQ de cette famille. Ils sont la contrepartie d'un des atouts de la structure, à savoir, l'utilisation d'un injecteur à double puits quantique et le fait que les états soient « trop peu localisés ». Cela induit des couplages souvent indus entre les sous–bandes d'étages adjacents, créant ainsi un courant « parasite » d'électrons qui ne participent pas à l'inversion de population [67, 68].

Lasers à cascade quantique à superréseaux

Historiquement, les structures type superrésaux ont démontré les premières un fonctionnement dans la gamme térahertz [4, 60, 69]. Un exemple d'une telle structure est présentée en figure 1.13, avec le détail de la structure de bande et les principaux états électroniques d'un étage de ce LCQ obtenus par la résolution des équations de Schrödinger et Poisson. La transition radiative, symbolisée par une flèche sur la figure 1.13, correspond à un écart énergétique $\hbar\omega_{87} \simeq 19$ meV (i.e. $\nu = 4{,}6$ THz). Dans cette structure, la région active est un triple puits quantique et l'utilisation d'un injecteur–collecteur en superréseau permet, nous l'avons déjà signalé, d'obtenir un élément de matrice dipolaire très élevé avec $\langle z_{87} \rangle = 6{,}9$ nm. La séquence épitaxiale d'un étage est beaucoup plus complexe que celle de la structure présentée par la figure 1.12 : 43/188/8/158/6/117/25/103/29/102/30/108/33/99 (en Å) où le puits de 102 Å est dopé à 4×10^{16} cm^{-3}, pour une densité surfacique totale $N_s \simeq 4{,}1 \times 10^{14}$ m^{-2} et un champ électrique de 3,5 kV cm^{-1}. Grâce à sa structure en superréseaux, « canalisant le transport »,

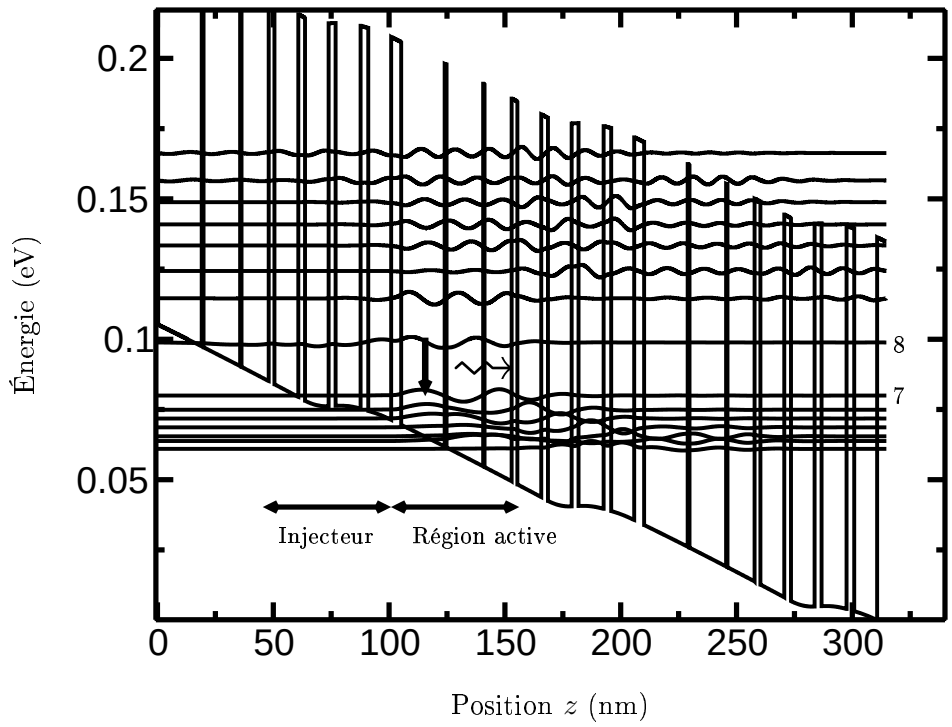


FIG. 1.13 – Potentiel et principales fonctions d'onde d'un étage du laser à cascade quantique à superréseaux décrit dans la référence [4].

ce LCQ a atteint des courants de seuil relativement faibles. Köhler *et al.* ont publié récemment les seuils en courant les plus faibles de l'infrarouge lointain, avec 95 et 115 A cm^{-2}, respectivement en mode pulsé et en CW [70].

D'autres conceptions basées sur des superréseaux ont été proposées. Nous signalerons, en particulier, les LCQ basés sur une transition type « BTC ». Ils diffèrent des structures à superréseaux par le fait que le niveau radiatif haut n'est plus délocalisé sur l'ensemble de la région active (par exemple sur trois puits, comme sur le LCQ de la figure 1.13), mais essentiellement lié à un puits, d'où l'usage de *Bound*. La dépopulation du niveau laser bas est, quant à elle, toujours réalisée par l'intermédiaire d'un injecteur–collecteur type superrésau (l'usage du vocable *Continuum* rappelle que le niveau laser bas appartient à une mini–bande). Suivant ce concept, Scalari *et al.* ont obtenu des performances remarquables, dès 2003, avec des températures de fonctionnement en CW et des puissances très importantes [71]. Cependant, à cause d'une transition radiative diagonale, cette conception souffre d'un élargissement spectral important et d'un élément dipolaire faible.

Lasers à cascade quantique à cascade entrelacée de phonons et de photons

Nous concluons ce paragraphe par une conception très récente. Köhler *et al.* ont synthétisé les idées des structures à résonance de phonon et à superréseaux en proposant un LCQ à cascade entrelacée de phonons et photons [72]. Un exemple d'une telle structure est présenté en figure 1.14, où les états électroniques d'un étage ont été uniquement représentés. Les deux mini–bandes d'énergie intervenant dans le transport sont conçues de manière à alterner un

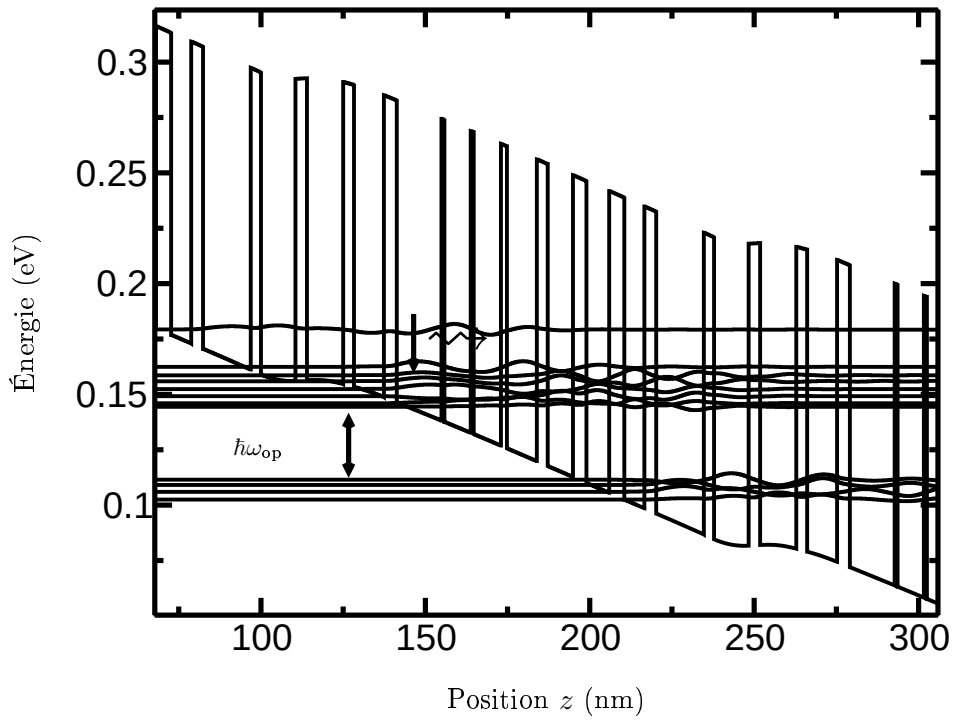


FIG. 1.14 – Potentiel et principales fonctions d'onde d'un étage du LCQ à cascade entrelacée de photons et phonons décrit dans la référence [72].

transport par émission de phonon et de photon. L'écart énergétique correspondant à l'émission est de 17 meV, pour un élément de dipôle $\langle z \rangle = 6{,}2$ nm. D'après la référence [72], cette conception combine les avantages d'une extraction efficace du niveau laser bas par résonance sur phonon optique polaire et d'un contrôle du courant plus « facile » que dans la structure de Williams *et al.*.

Référence	Longueur d'onde (μm)	Famille	Température maximale en mode pulsé (K)	Température maximale en CW (K)	Puissance (mW)	Courant de seuil (A cm^{-2})
					à 12 K en mode pulsé	
Rochat *et al.* [60]	66	S	44	NC	4	210
					à 8 K en mode pulsé	
Köhler *et al.* [4]	71	S	50	NC	2	290
					à 10 K en CW	
Ajili *et al.* [69]	66	S	58	35	0,41	227
					à 5 K en mode pulsé	
Williams *et al.* [5]	87,2	DRP	65	NC	2,5	840
					à 78 K en mode pulsé	
Williams *et al.* [64]	88	DRP	87	NC	1	904
					à 5 K en mode pulsé	
Williams *et al.* [66]	100	DRP	77	NC	0,1	1100
					à 5 K en mode pulsé	
Williams *et al.* [65]	79	DRP	137	NC	NC	625
					à 10 K en CW	
Köhler *et al.* [73]	67	S	74	48	4	210
					à 10 K en CW	
Scalari *et al.* [71]	87	BTC	90	55	15	260
					à 10 K en mode pulsé	
Köhler *et al.* [72]	80	SCE	95	30	~ 10	280
					à 17 K en CW	
Williams *et al.* [7]	141	DRP	72	40	1,2	576
					à 78 K en CW	
Kumar *et al.* [25]	94	DRP	129	93	0,4	552

TAB. 1.4 – Récapitulatif des performances de quelques lasers à cascade quantique dans le domaine de l'infrarouge lointain. L'acronyme NC signifie « Non Communiqué ». Les autres abréviations utilisées sont les suivantes : DRP : Dépopulation par Résonance de Phonon ; S : Superréseau ; SCE : Superrésau à Cascade Entrelacée ; BTC : Bound–To–Continuum.

1.7 Autres exemples de lasers à cascade quantique

Nous avons souligné que de nombreuses recherches sont menées afin d'accroître les performances des LCQ (température, puissance, longueur d'onde, ...). Cependant la communauté scientifique s'intéresse également à d'autres structures plus exploratoires, ou à des « phénomènes » innovants dans les LCQ. Ce sont ces structures que nous présentons succinctement dans cette section pour conclure ce chapitre.

1.7.1 Lasers à cascade quantique Si/SiGe en bande de valence

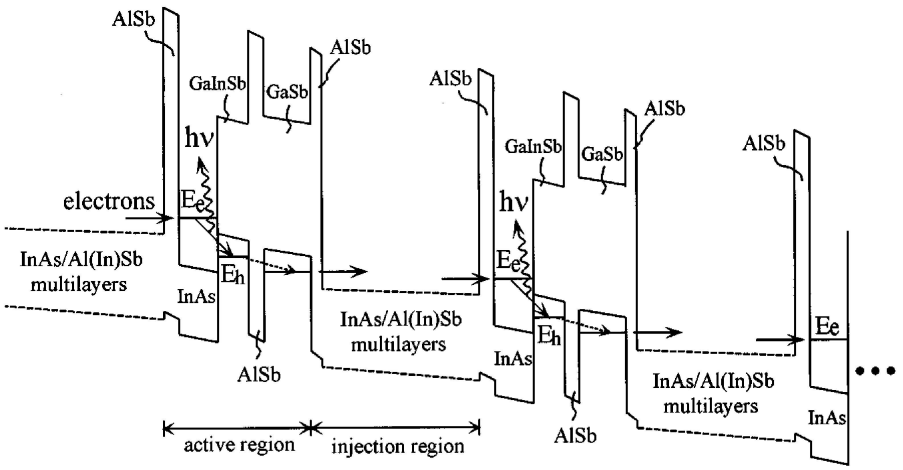
De nombreux travaux sont actuellement menés afin de concevoir un LCQ à base de trous dans le système de matériaux Si/SiGe. Depuis les premières structures proposées par Friedman *et al.* [74, 75], de nombreuses expériences de luminescence dans l'infrarouge moyen et lointain ont été communiquées, jusqu'à des longueurs d'onde de 250 μm (i.e. 1,2 THz) [76, 77]. Cependant, l'effet laser n'a pas encore été observé. Un des avantages des LCQ à base de trous est que les transitions radiatives entre sous–bandes de trous peuvent être activées par des polarisations de la lumière parallèlement ou perpendiculairement aux plans des couches [37], permettant ainsi la réalisation de lasers inter-sous–bandes émettant par la surface.

1.7.2 Lasers à cascade de Type II

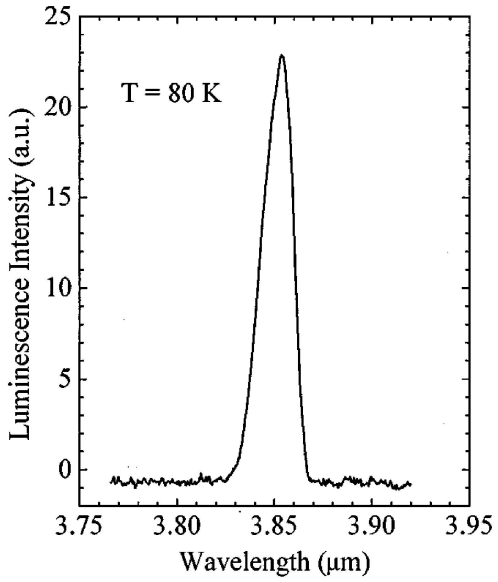
En utilisant des composés à base d'antimoine et le gap « croisé » entre les matériaux Ga(In)Sb et InAs, des lasers à cascade inter–bandes ont été réalisés sur le système de matériaux InAs/GaInSb/AlSb. La structure de bandes d'un LCQ de type II est présentée en figure 1.15(a). Le LCQ a démontré une émission à $\lambda = 9$ μm par Yang *et al.* [78]. Le fonctionnement dans ces dispositifs est relativement compliqué car il combine émission inter–bandes et passage par effet tunnel de la bande de valence vers la bande de conduction (gap de type II entre l'InAs et le GaInSb).

1.7.3 Lasers à cascade quantique en InAs/AlSb et GaN/AlGaN

Outre les couples de matériaux GaAs/AlGaAs et InGaAs/AlInAs, d'autres systèmes sont étudiés comme par exemple l'InAs/AlSb avec lesquels des LCQ ont été fabriqués [79, 80]. Les avantages de ce système de matériaux sont une masse effective des électrons faible de par le faible gap et une discontinuité entre les bandes de conduction très élevée. La faible masse effective permet d'augmenter les éléments de dipôle et donc le gain optique [81]. Quant à la grande discontinuité de bande de conduction, elle permet d'obtenir des écarts énergétiques entre sous–bandes plus importants et donc de diminuer la longueur d'onde. En ce qui concerne le GaN/AlGaN, actuellement seules des expériences de luminescence ont été communiquées, par exemple par Gmachl *et al.* [82, 83]. Ce système de matériaux semble prometteur à cause de la large valeur du phonon optique polaire $\hbar\omega_{\mathrm{op}} \approx 90$ meV et l'utilisation du champ de polarisation, permettant ainsi d'atteindre facilement les fréquences entre 30 et 40 μm qui sont difficilement atteignables dans l'AlGaAs ou l'InGaAs (on rappelle que $\hbar\omega_{\mathrm{op}} \simeq 36$ meV dans le GaAs et $\hbar\omega_{\mathrm{op}} \simeq 34$ meV dans l'InGaAs).



(a) Structure de bande.



(b) Spectre d'émission à 80 K.

FIG. 1.15 – Exemple d'un laser à cascade de type II. D'après [78] : Yang *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **71**, p. 2409 (1997).

1.7.4 Utilisation d'un champ magnétique

Récemment, Alton *et al.* ont étudié la structure térahertz de Köhler *et al.* soumise à un champ magnétique selon la direction de croissance [84]. Le champ magnétique est réglé de manière à induire un confinement quantique dans le plan parallèle aux interfaces des couches (niveaux de *Landau*). En modulant le champ magnétique, ils observent une réduction du courant de seuil de 290 A cm^{-2} à 0 T jusqu'à 160 A cm^{-2} à 4,3 T. Cette diminution est liée, selon eux, à la modification de la durée de vie du niveau laser haut par les recombinaisons additionnelles entre états quantifiés de Landau. Il est donc naturellement envisagé d'accorder l'émission grâce au champ magnétique.

1.7.5 Génération d'harmoniques supérieures

Les LCQ peuvent être utilisés comme oscillateurs non–linéaires et permettre la conversion de fréquences car ils possèdent des susceptibilités optiques géantes. Quelques études sur la génération d'harmoniques de rang 2 dans des LCQ ont été publiées récemment par le groupe des Bell Laboratories [85]. Ils utilisent le principe suivant : deux LCQ émettant à des fréquences différentes sont juxtaposés à un ensemble de puits quantiques possédant une susceptibilité de second d'ordre élevée. Ce faisant, Gmachl *et al.* ont démontré la génération d'harmoniques jusqu'à 250 K à $\lambda = 7$ μm, pour des puissances non linéaires de ~ 1 μW à 10 K [86].

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons vu la grande richesse d'applications possibles pour les sources optiques émettant dans l'infrarouge. Se basant sur des critères de coût et de performances, nous avons pu voir que les lasers à cascade quantique étaient très prometteurs, en particulier dans l'infrarouge lointain. Peu de dispositifs allient, comme les lasers à cascade quantique, les avantages d'une technologie des semi–conducteurs maîtrisée, une remarquable capacité d'intégration et des puissances de sortie tout à fait compétitives.

Nous avons expliqué le fonctionnement des lasers à cascade quantique, en mettant en évidence leurs avantages. Nous avons retracé la brève histoire des LCQ, en montrant comment les améliorations des performances ont été réalisées. La diminution des fréquences vers celles de l'infrarouge lointain, jusqu'à 1 THz, semble envisageable dans un avenir très proche. Pour les LCQ émettant dans cette gamme, nous avons également procédé à une première présentation, en détaillant les différentes conceptions développées actuellement. Les LCQ basés sur le concept de dépopulation par résonance de phonon permettent d'obtenir, aujourd'hui, les meilleures performances. Enfin, nous avons terminé ce chapitre en évoquant les systèmes de matériaux encore peu développés, mais offrant des perspectives très prometteuses.

Dans le prochain chapitre, nous allons présenter les différents formalismes permettant de traiter le transport perpendiculaire dans des dispositifs tels que les LCQ.

Chapitre 2

Les formalismes du transport quantique

Introduction

Ce chapitre a pour objectif de brosser l'état de l'art de la modélisation du transport quantique dans les composants de dimensions nanométriques. Nous commençons par rappeler, dans la section 2.1, le principe de la méthode de Monte Carlo qui nous servira de base dans la suite. Dans la section 2.2, nous présentons les problèmes liés à la modélisation du transport quantique dans les systèmes échangeant des particules avec l'extérieur. Enfin, dans la section 2.3, nous décrivons les différents formalismes utilisés dans la littérature pour modéliser les nanocomposants et, en particulier, les lasers à cascade quantique.

2.1 La méthode de Monte Carlo

2.1.1 Introduction

La *méthode de Monte Carlo* est utilisée dans un très grand nombre de domaines de la physique tant appliquée que fondamentale. Cette méthode statistique fait appel à des suites de nombres pseudo–aléatoires afin de résoudre des problèmes très variés. On l'utilise ainsi en économie pour simuler l'évolution des événements boursiers, en physique nucléaire, en mathématique statistique, *etc.* Depuis une cinquantaine d'années, la méthode de Monte Carlo s'est imposée comme une des méthodes les plus pertinentes pour l'étude du transport dans les semi–conducteurs.

Dans ce domaine, elle est utilisée pour résoudre numériquement l'équation de transport de Boltzmann [87]. Dans ces simulations, on étudie l'évolution au cours du temps de super–particules représentant l'ensemble des porteurs présents dans le composant. Cette méthode a été largement utilisée pour étudier le transport parallèle dans les composants comme le H.E.M.T., qui peuvent être modélisés de manière semi–classique. Ces simulations ont ainsi permis d'étudier un grand nombre de composants de filières différentes et un vaste ensemble de phénomènes physiques (diffusion, bruit, *etc*). L'I.E.M.N. a une expertise de premier plan dans la méthode de Monte Carlo appliquée aux dispositifs électroniques à semi–conducteurs. Pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur à la littérature disponible [88–93].

2.1.2 Principe général de la méthode

En général, on étudie l'évolution au cours du temps d'un gaz de porteurs de charge $q = \pm e$, dans l'espace réciproque. Dans la plupart des cas, c'est le transport des électrons que l'on examine, donc $q = -e$. La fonction de distribution $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$, qui décrit la probabilité de trouver un électron dans l'état quantique $|\mathbf{k}\rangle$, à la position $\mathbf{r}$, au temps t, suit la célèbre équation d'évolution de Boltzmann :

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{k}) \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) + \frac{\mathbf{F}}{\hbar} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = \left[\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)}{\partial t}\right]_{\text{collisions}}, \tag{2.1}$$

où $\hbar$ est la constante de Planck réduite, $\mathbf{v}$ est la vitesse, $\mathbf{F}$ est la force de Lorentz et le second membre de cette équation décrit les collisions de l'électron avec le réseau. Ce terme est à l'origine de la dissipation et de l'irréversibilité dans l'équation de Boltzmann [94]. Il peut s'écrire à l'aide de taux de transition entre états :

$$\left[\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t}\right]_{\text{coll}} = \sum_{\eta} \sum_{\mathbf{k}'} \{\lambda^{\eta}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{k})[1 - f(\mathbf{k}')] - \lambda^{\eta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}')[1 - f(\mathbf{k})]\}, \tag{2.2}$$

où les termes $\lambda^{\eta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ décrivent la transition de l'état $|\mathbf{k}\rangle$ à l'état $|\mathbf{k}'\rangle$ par un mécanisme d'interaction indicé par η.

La méthode de Monte Carlo permet de résoudre l'équation de transport de Boltzmann de manière numérique. Le mouvement des porteurs est décrit par une succession de *vols libres*, durant lesquels les électrons subissent l'effet de la force $\mathbf{F}$, interrompus par des interactions, supposées instantanées, modifiant l'état quantique $|\mathbf{k}\rangle$.

L'équation de Boltzmann est *semi–classique*, car sa forme est identique à celle valable en mécanique statistique classique. Cependant, les états $|\mathbf{k}\rangle$ peuvent être des états quantiques discrets et les probabilités de transition $\lambda(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ sont calculés à partir d'une théorie quantique. Durant la phase de vol libre, l'évolution de l'électron est déterministe :

$$\begin{aligned} \hbar \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{\mathrm{d}t} &= \mathbf{F}, \\ &= -e\mathbf{E} - e[\mathbf{v} \times \mathbf{B}], \end{aligned} \tag{2.3}$$

où $\mathbf{E}$ (resp. $\mathbf{B}$) est le champ électrique (resp. le champ magnétique).

Les simulations de Monte Carlo à pas constant procèdent en général comme suit. Le transport des électrons dans le composant est simulé durant un temps t_{sim}, découpé en intervalles de durée constante Δt. À chaque pas de temps, on effectue une boucle sur tous les électrons modélisés. Chaque électron, dans l'état $|\mathbf{k}\rangle$, est caractérisé par une probabilité totale d'interaction $\Gamma(\mathbf{k})$ qui tient compte de tous les mécanismes de collision η. À l'aide de nombres aléatoires, on détermine si l'électron subit ou non une interaction et, le cas échéant, par quel mécanisme. Dans ce cas, d'autres nombres aléatoires nous permettent de correctement représenter les distributions statistiques qui régissent les collisions et la distribution des états finaux de l'électron. Dans le prochain chapitre, nous présenterons le formalisme permettant de calculer les états quantiques $|\mathbf{k}\rangle$, les probabilités d'interaction $\lambda^{\eta}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ et de déterminer l'état final $|\mathbf{k}'\rangle$.

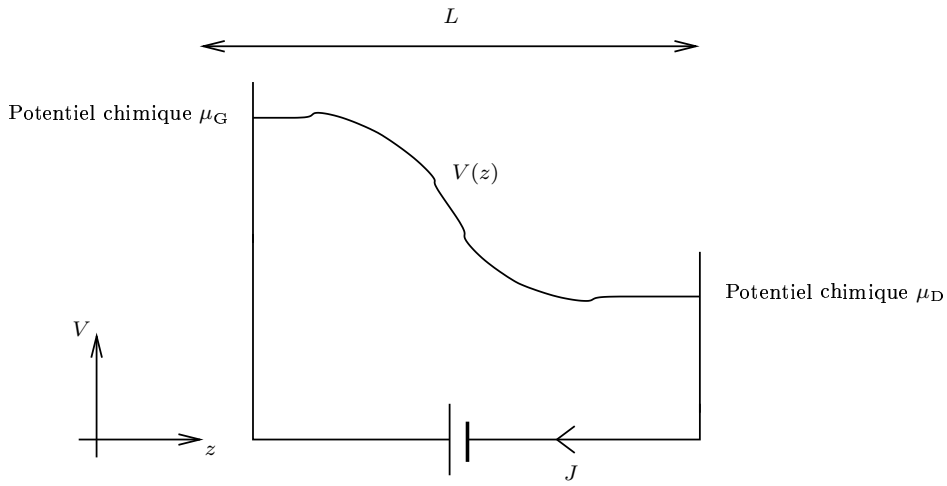


FIG. 2.1 – Exemple d'un profil de potentiel d'un composant, à géométrie unidimensionnelle, soumis à l'action de deux contacts extérieurs à l'origine d'un courant J selon la direction de quantification.

2.2 Généralités sur le transport quantique

2.2.1 Introduction

Nous limitons notre discussion aux composants à géométrie unidimensionnelle, pour lesquels le mouvement des particules est libre dans toutes les directions sauf dans la direction z, selon laquelle il est régi par le potentiel $V(z)$. On considère que ce composant, de longueur L, est placé entre deux contacts afin de faire circuler un flux d'électrons et donc un courant dit *perpendiculaire*, car il se fait selon la direction de quantification, perpendiculairement aux interfaces des couches semi–conductrices (voir figure 2.1). Afin de caractériser la nature du transport, on distingue habituellement trois longueurs d'onde : la longueur d'onde de *De Broglie*[1] λ_{DB}, la longueur d'onde de *cohérence de phase*[2] λ_ϕ et *le libre parcours moyen*[3] l_{m}.

En toute généralité, l'étude des phénomènes de transport a pour objectif de décrire le mouvement des particules chargées au cours du temps. Or, la nature du transport est profondément reliée aux degrés de liberté offerts aux particules. La privation de certains degrés de liberté a un impact profond sur le type de transport et on peut parler de *transport quantique*, dès que les électrons en sont privés d'un ou plusieurs. De manière simplifiée, trois « régimes » de transport peuvent être dégagés. Pour une discussion plus approfondie de ces phénomènes, nous renvoyons le lecteur aux articles de M. V. Fischetti [94, 95].

(i) Lorsque $L < l_{\mathrm{m}}$, on se trouve en régime dit *balistique* et l'électron peut parcourir le composant sans subir d'interaction ;

(ii) Lorsque la longueur L du composant devient inférieure à la longueur d'onde de De Broglie λ_{DB}, les phénomènes de quantification dus au potentiel de confinement $V(z)$,

[1]Elle est relative à l'énergie cinétique de la particule. À température nulle, on peut raisonnablement considérer que l'énergie cinétique moyenne E_{th} est l'énergie de Fermi E_F. D'où $\lambda_{\mathrm{DB}} \approx 2\pi/k_F = (2\pi/N_s)^{1/2}$. Pour une densité de 10^{15} m^{-2}, la longueur d'onde de De Broglie vaut $\lambda_{\mathrm{DB}} \sim 800$ Å.

[2]Traduction de l'anglais *Dephasing Length*. C'est la distance moyenne entre deux collisions détruisant la phase. Cette notion est intrinsèque et il est difficile de la définir, autrement qu'expérimentalement.

[3]La distance l_{m} est ici conçu comme la distance moyenne parcourue par une particule entre deux interactions modifiant significativement son moment $\mathbf{k}$.

ne peuvent plus être négligés. La résolution de l'équation de Schrödinger permet d'obtenir les niveaux quantiques. Pour des composants à base d'hétérojonctions, nous avons exposé, au chapitre précédent, la notion de sous–bande, d'énergie quantifiée E_n et de fonctions d'onde $\varphi_n(z)$. Le courant perpendiculaire résulte alors d'une succession d'interactions, faisant passer les électrons d'états quantifiés en états quantifiés ;

(iii) Par contre, lorsque L devient du même ordre de grandeur que λ_ϕ, alors les phénomènes de *cohérence quantique* sont déterminants dans le transport. Dans ce cas, non seulement l'équation de Schrödinger doit être résolue, ce qui détermine les niveaux quantiques $|n\rangle$, mais l'évolution de la phase des porteurs au cours du temps ne peut plus être négligée.

2.2.2 Transport quantique : équation de Liouville–Von Neumann

Le transport des particules dans un composant est formalisé de la manière suivante. On associe aux particules un espace de Hilbert et la dynamique du système dans cet espace est caractérisé par l'Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$. L'objet mathématique associé à l'état quantique du système est l'*opérateur densité*, noté $\hat{\rho}$. Ce formalisme intègre l'incertitude statistique et l'incertitude quantique dans un cadre formel très puissant. Il permet de décrire l'ensemble des porteurs pouvant chacun prendre un état quantique $|\Psi\rangle$ parmi une base particulière d'états $\{|\Psi_n\rangle\}$. De manière analogue à la fonction de distribution $f(\mathbf{k})$, l'opérateur densité prend tout son sens lorsqu'on s'intéresse à la valeur moyenne d'un opérateur $\hat{\mathcal{O}}$:

$$\langle\Psi|\hat{\mathcal{O}}|\Psi\rangle = \langle\hat{\mathcal{O}}\rangle = \sum_{nn'}\langle\Psi|n\rangle\langle n'|\hat{\mathcal{O}}|n\rangle\langle n'|\Psi\rangle. \tag{2.4}$$

En prenant la moyenne statistique de cette équation, symbolisée par une barre, on obtient :

$$\overline{\langle\hat{\mathcal{O}}\rangle} = \mathrm{Tr}(\hat{\mathcal{O}}\hat{\rho}), \tag{2.5}$$

où $\mathrm{Tr}(\cdot)$ signifie la trace.

L'opérateur densité $\hat{\rho}$ peut être vu comme une généralisation quantique de la fonction de distribution en mécanique classique. Par exemple, les éléments diagonaux de $\hat{\rho}$, dans la base des états $\{|\mathbf{k}\rangle\}$, correspondent exactement aux termes $f(\mathbf{k})$, c'est–à–dire $\hat{\rho}_{\mathbf{kk}} = f(\mathbf{k})$. L'équation fondamentale du transport quantique est l'équation de *Liouville–Von Neumann*, qui régit l'évolution temporelle de $\hat{\rho}$ (voir l'article pionnier de Kohn et Luttinger sur le transport quantique [96]). Pour un système isolé, elle s'écrit :

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\rho}(t)], \tag{2.6}$$

où le commutateur $[\ldots]$ est l'équivalent quantique des crochets de Poisson en mécanique classique. Cette équation est à la base de toutes les formulations du transport quantique dans les composants. Elle représente la version quantique de l'équation de Boltzmann (2.1) en mécanique classique.

Généralement, on sait diagonaliser une partie plus ou moins grande du Hamiltonien total, notée $\hat{\mathcal{H}}_0$, i.e., $[\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{\rho}]_{nn'} = (\varepsilon_{n'} - \varepsilon_n)\hat{\rho}_{nn'}$, où ε_n est l'énergie propre associée à l'état $|n\rangle$. Ainsi, il est plus pratique d'écrire l'équation de Liouville–Von Neumann en représentation d'interaction, caractérisée par l'Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}$ ($\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}} \equiv \hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{H}}_0$) :

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}^{(I)}(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{int}}(t), \hat{\rho}^{(I)}(t)]. \tag{2.7}$$

Le Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$ tient compte de toutes les interactions que le système peut subir. Ces interactions sont en général traitées selon la théorie des perturbations au premier ordre, c'est–à–dire en considérant que les éléments de matrice du Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$ sont faibles comparés à ceux du Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_0$ et que $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$ induit simplement des transitions entre les états propres $|n\rangle$.

En intégrant formellement l'équation (2.7) entre t_0 et t, on aboutit au développement suivant [97] :

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^{(\mathrm{I})}(t) = \hat{\rho}^{(\mathrm{I})}(t_0) \quad &+ \quad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}\tau_1 [\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}(\tau_1), \hat{\rho}^{(\mathrm{I})}(\tau_1)] \\ &+ \quad \frac{1}{(\mathrm{i}\hbar)^2}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}\tau_1 \int_{t_0}^{\tau_1} \mathrm{d}\tau_2 [\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}(\tau_1), [\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}(\tau_2), \hat{\rho}^{(I)}(\tau_2)]] + \cdots, \end{aligned} \tag{2.8}$$

C'est–à–dire, sous une forme plus compacte, à un développement perturbatif infini [98] :

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^0 + \Delta\hat{\rho}^1 + \Delta\hat{\rho}^2 + \cdots \tag{2.9}$$

Chaque terme $\Delta\hat{\rho}^j$ du développement fait intervenir des combinaisons de j Hamiltoniens $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$. Par exemple, pour le terme d'ordre 2 :

$$\Delta\hat{\rho}^2 = \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}\hat{\rho} + \hat{\rho}\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} + \cdots, \tag{2.10}$$

où les intégrales n'ont pas été représentées par souci de lisibilité. Ce type de développement est fréquemment symbolisé à l'aide de diagrammes de Feynmann dans la littérature [98]. À ce stade, il convient de fermer ce développement infini, en tronquant à un certain ordre les perturbations.

Brunetti *et al.* ont montré que la méthode de Monte Carlo permettait de résoudre l'équation (2.9) [97]. Leur étude se limite aux termes diagonaux de la matrice densité, dans le cas d'un gaz électronique tridimensionnel. La simulation n'inclut que la probabilité sur phonon optique polaire. L'idée pour résoudre numériquement l'équation (2.9) est la suivante. Considérons un intervalle de temps entre t_j et $t_j + \Delta t$. (i) On choisit l'ordre $\Delta\hat{\rho}^m$ de la perturbation dans le développement de Liouville–Von Neumann par un tirage aléatoire. (ii) Les différents temps τ_i [Éq. (2.8)] menant de t_j à $t_j + \Delta t$ sont également déterminés à l'aide de tirages aléatoires. (iii) Pour chacune des m interactions, on choisit aléatoirement s'il s'agit d'une émission ou d'une absorption de phonon. (iv) Les points (i), (ii) et (iii) sont itérés jusqu'à la fin de la simulation.

Dans la pratique, la géométrie du composant conduit à considérer des échanges de particules avec le reste du circuit (voir figure 2.1). Voyons quelles sont les difficultés soulevées par la modélisation de ce type de système.

2.2.3 Position du problème : Hamiltonien d'un système non isolé

En toute généralité, la définition du système étudié et de son Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}$ constitue une vraie problématique. Dans la pratique, dès lors que la géométrie est unidimensionnelle, les composants étudiés échangent des particules avec le reste du circuit, échange à l'origine du courant circulant entre les extrémités du dispositif. À partir de là, on définit des contacts, ou, de manière plus formelle, un Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_{\text{cont}}$ décrivant les échanges avec l'extérieur du système.

Le choix du système est une étape cruciale. Prenons l'exemple pour lequel on aurait choisi comme système les électrons avec les phonons. Dans ce cas, le Hamiltonien de Frölich électron–phonon n'est pas, *stricto sensu*, un Hamiltonien d'interaction. Il ne peut l'être que si on prend, soit les électrons, soit les phonons, comme système. Cependant, on ne peut pas choisir un système d'étude trop « volumineux », car on ne saurait pas diagonaliser $\hat{\mathcal{H}}_0$ et trouver les états propres d'un tel système. Par exemple, dans le cas des électrons et des phonons, on suppose généralement que l'on peut découpler les deux systèmes et que les phonons sont à l'équilibre, caractérisé par une température de réseau θ.

Si on choisit comme système un électron placé dans un composant, alors le Hamiltonien total $\hat{\mathcal{H}}$ peut être séparé en trois contributions :

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_{\text{int}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{cont}}, \tag{2.11}$$

où, on rappelle que, $\hat{\mathcal{H}}_0$ est l'Hamiltonien du système dont on connaît les états propres $\{|n\rangle\}$, $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$ est l'Hamiltonien décrivant l'ensemble des interactions et $\hat{\mathcal{H}}_{\text{cont}}$ est analogue à un Hamiltonien décrivant le couplage du système avec l'extérieur.

Plus précisément, le Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_{\text{cont}}$ est propre aux systèmes non isolés ou *ouverts*. Les couplages avec les réservoirs modifient formellement l'équation de Liouville–Von Neumann (2.7) en ajoutant un terme de contact :

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}^{(I)}(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}, \hat{\rho}^{(I)}(t)] + \mathrm{i}\hbar\left(\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}^{(I)}(t)}{\mathrm{d}t}\right)_{\text{cont}}. \tag{2.12}$$

Ce terme supplémentaire peut aussi s'écrire formellement $[\hat{\mathcal{H}}_{\text{cont}}(t), \hat{\rho}^{(I)}(t)]$. Avec les contacts, la modélisation devient plus ardue, car on ne sait pas traiter le deuxième terme du membre de droite de l'équation (2.12), qui ne se prête plus à un développement perturbatif, du type de l'équation (2.9). Beaucoup de travaux théoriques ont été menés sur la modélisation des contacts et leur influence sur le transport. Cependant, les travaux que l'on peut trouver dans la littérature sont principalement purement théoriques. On sait, d'après les travaux de Rossi *et al.* [99–101], que les conditions initiales en $t = 0$ sur la frontière du composant (i.e. la zone séparant le système du reste du circuit) sont primordiales pour le transport. Néanmoins, la modélisation des contacts est problématique car ils sont à l'origine d'effets « mémoire » et non–locaux.

De nombreuses questions restent en suspens : comment injecter les particules dans le composant ? Comment caractériser l'influence mutuelle des contacts ? Comment évolue l'injection des porteurs au cours du temps ? Le lecteur intéressé par la problématique des contacts pourra consulter, par exemple, le livre de S. Datta [102] ainsi que les références [103–106]. Généralement, ce point est contourné, soit par l'emploi de paramètres phénoménologiques modélisant la « sortie » ou l'« arrivée » de particules dans le système, soit en utilisant certaines propriétés du composant (par exemple, les lasers à cascade quantique sont idéalisés en supposant qu'ils sont parfaitement périodiques).

2.3 Les différents formalismes du transport quantique

Dans cette partie, nous présentons les différents formalismes du transport quantique dans les nanostructures. Même si ces formalismes sont tous dérivés de l'équation de Liouville–Von Neumann pour l'opérateur densité, chaque représentation a ses particularités et est adaptée

à l'étude de certains régimes de transport. En outre, nous verrons que seules quelques unes peuvent être traitées à l'aide de la méthode de Monte Carlo.

2.3.1 Formalisme de Keldysh et Kadanoff–Baym

Dans ce paragraphe, nous allons brièvement exposer la modélisation du transport à l'aide du formalisme de Keldysh et Kadanoff–Baym (KKB), basé sur les fonctions de Green. Il existe de nombreux ouvrages et articles de revues consacrés à la théorie des fonctions de Green appliquée au transport dans les semi–conducteurs [102, 106–109]. Le lecteur intéressé par l'ensemble de la théorie pourra se reporter par exemple au livre de G. Mahan [110] ainsi qu'à la bibliographie qu'il contient.

Cette théorie, qui est utilisée dans de nombreux domaines de la physique (physique des particules, physique quantique des champs ...) a été appliquée à l'étude du transport de charge dans les semi–conducteurs par R. Lake et S. Datta, en commençant par les diodes à effet tunnel résonnant [107, 111, 112]. Récemment, les fonctions de Green ont été utilisées avec succès pour modéliser les LCQ [6, 113, 114].

Les fonctions de Green sont une généralisation de l'opérateur densité, avec deux variables de temps et d'espace (voir thèse de S. Sadri [108] pour de plus amples détails). Dans le formalisme KKB, le système est représenté par deux fonctions de Green, à savoir la fonction de Green retardée $\mathbf{G}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$ et la fonction de corrélation $\mathbf{G}^<(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$. En général, le problème est simplifié en supposant que seule la différence de temps $t - t'$ intervient et, dans ce cas, on retrouve l'opérateur densité $\hat{\rho}(\mathbf{r}, t)$ précédemment défini, i.e. $\mathbf{G}(\mathbf{r}, t_0; \mathbf{r}, t) = \hat{\rho}(\mathbf{r}, t)$. Les modèles basés sur le formalisme KKB font appel à la résolution auto–cohérente des équations de Dyson, qui sont l'équivalent formel de l'équation de Liouville–Von Neumann, afin de déterminer $\mathbf{G}(E)$ et $\mathbf{G}^<(E)$, transformées de Fourier des grandeurs dépendantes du temps $\mathbf{G}(t)$ et $\mathbf{G}^<(t)$. Sans rentrer dans les détails théoriques, les équations de Dyson s'écrivent, d'une manière simplifiée [106] :

$$\mathbf{G}(E) = \left(E\mathbf{I} - \hat{\mathcal{H}}_0 - \mathbf{\Sigma}\right)^{-1}, \tag{2.13}$$

où $\mathbf{\Sigma}$ est la *self–énergie* représentant le couplage avec les contacts et les mécanismes d'interaction, c'est–à–dire l'influence des Hamiltoniens $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$ et $\hat{\mathcal{H}}_{\text{cont}}$. La fonction de corrélation $\mathbf{G}^<(E)$ est donnée par :

$$\mathbf{G}^<(E) = \mathbf{G}(E)\mathbf{\Sigma}^<(E)\mathbf{G}^\dagger(E). \tag{2.14}$$

Les self–énergies $\mathbf{\Sigma}$ et $\mathbf{\Sigma}^<$ tiennent compte de l'influence des Hamiltoniens d'interaction et de réservoirs. Par exemple, $\mathbf{\Sigma}^<(E)$ a pour expression dans l'approximation de Born [107] :

$$\mathbf{\Sigma}^<_\eta(E) = \int \mathrm{d}E' \mathbf{G}^<(E - E')\langle\hat{\mathcal{H}}_\eta(\mathbf{r}, t)\hat{\mathcal{H}}_\eta(\mathbf{r}', t')\rangle(E'), \tag{2.15}$$

où $\hat{\mathcal{H}}_\eta$ est soit $\hat{\mathcal{H}}_{\text{int}}$, soit $\hat{\mathcal{H}}_{\text{cont}}$. La self–énergie retardée $\mathbf{\Sigma}(E)$ s'obtient par une équation semblable avec le changement $\mathbf{G}^< \to \mathbf{G}$.

Ces équations sont résolues de manière auto–cohérente, en calculant d'abord les self–énergies puis en les injectant dans les équations (2.13) et (2.14) donnant les fonctions de Green, jusqu'à la convergence. La puissance du formalisme des fonctions de Green est que les couplages avec les réservoirs apparaissent formellement comme une interaction supplémentaire, caractérisée par une self–énergie $\mathbf{\Sigma}_{\text{cont}}$, au même niveau, par exemple, que l'interaction avec le bain de phonons. À noter que ces équations sont matricielles et projetées sur la base

des états quantiques du Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_0$. On voit donc que l'algorithme numérique à mettre en œuvre est d'une rare complexité et peut être très gourmand en terme de ressources informatiques dès lors qu'un très grand nombre d'états est considéré, comme c'est le cas dans les LCQ. D'ailleurs, certaines approximations sont généralement adoptées afin de modéliser les contacts et l'interaction électron–électron, le lecteur étant renvoyé à la référence [113] pour de plus amples détails.

2.3.2 Fonctions de Wigner

La fonction de Wigner f_W a été introduite en 1932 par E. P. Wigner [115]. Elle peut être vue comme une généralisation quantique de la fonction de distribution semi–classique. Elle s'obtient en effectuant une transformation de Weyl–Wigner sur l'opérateur densité, afin d'obtenir un objet mathématique dépendant des coordonnées de l'espace réciproque $\mathbf{k}$ et $\mathbf{r}$. Ce formalisme est particulièrement intéressant pour expliciter les conditions aux limites [99–101]. En appliquant à l'équation de Liouville–Von Neumann une transformation de Weyl–Wigner, il est possible d'obtenir une équation intégro–différentielle pour f_W :

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial}{\partial t} \quad + \quad \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}}\right) f_W(\mathbf{r},\mathbf{k},t) &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathcal{E}(\{n_q\}) - \mathcal{E}(\{n'_q\})] f_W(\mathbf{r},\mathbf{k},t) \\ + \quad \int \mathrm{d}\mathbf{k}' \mathcal{V}_W(\mathbf{r},\mathbf{k}'-\mathbf{k}) f_W(\mathbf{r},\mathbf{k}',t) &+ \Xi(\mathbf{r},\mathbf{k},t). \end{aligned} \tag{2.16}$$

Pour de plus amples détails sur les expressions de $\mathcal{E}$, $\mathcal{V}_W$ et Ξ, nous renvoyons le lecteur à l'article [116] et aux références bibliographiques qu'il contient.

L'équipe de Modène a consacré un nombre important d'articles à la fonction de Wigner appliquée à l'étude du transport dans les semi–conducteurs [116–124], ainsi que d'autres auteurs comme Buot et Jensen [125–127]. Une des spécificités de la méthode utilisée par le groupe de Modène est de résoudre l'équation de Wigner par un algorithme de Monte Carlo à l'aide de la notion de *Chemins de Wigner*[4] et d'un développement perturbatif semblable à celui de l'opérateur densité [Éq. (2.9)]. D'autres groupes se sont intéressés à des points plus spécifiques, comme la non–parabolicité [128–130]. En ce qui concerne les dispositifs unidimensionnels, les groupes de recherche, et en particulier celui de F. Rossi, ont essentiellement travaillé sur la modélisation des doubles barrières (diode à effet tunnel résonnant) [99–101].

2.3.3 Hiérarchie cinétique quantique de matrices densité

À partir de l'équation (2.6) de Liouville Von–Neumann, il est possible d'obtenir une hiérarchie infinie mettant en jeu un nombre croissant de matrices densité [131]. Les termes de la matrice densité sont de deux types. Les termes diagonaux, $\hat{\rho}_{\alpha\alpha}$, sont les homologues des populations caractérisées par la fonction de distribution $f(\alpha)$. Les termes non–diagonaux $\hat{\rho}_{\alpha\alpha'}$ représentent le degré de cohérence quantique entre les niveaux α et α' [132]. F. Rossi a montré que la phase quantique des particules était tributaire du choix de la base et d'un choix de jauge [133]. En effet, ce qui est diagonal dans une base ne l'est forcément pas dans une autre. Partant de l'équation de Liouville–Von Neumann, on peut obtenir les équations d'évolution des termes $\hat{\rho}_{\alpha\alpha'}$ [132] :

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}_{\alpha\alpha'}}{\mathrm{d}t} = (\varepsilon_\alpha - \varepsilon_{\alpha'})\hat{\rho}_{\alpha\alpha'} + \sum_{\beta\beta'}[\mathscr{Q}(\alpha,\alpha';\beta,\beta')\hat{\rho}_{\beta\beta'} - \mathscr{Q}(\beta,\beta';\alpha,\alpha')\hat{\rho}_{\alpha\alpha'}], \tag{2.17}$$

[4]Traduction de l'anglais *Wigner Paths*.

où les termes $\mathscr{Q}(\alpha,\alpha;\beta,\beta')$ représentent une généralisation des taux de transition $\lambda(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ pour des transitions entre éléments non–diagonaux. Ces équations sont souvent appelées *équations de Bloch pour les semi–conducteurs.*[5] Rossi *et al.* [133–136] ont cherché à résoudre ces équations en tronquant convenablement la hiérarchie infinie et en faisant certaines hypothèse sur le système. Ils ont ainsi montré que les équations pouvaient être séparées en une partie cohérente et une partie incohérente, cette dernière s'écrivant sous la forme d'un terme de « type Boltzmann ». Ainsi, ce terme peut être résolu par une méthode de Monte Carlo généralisée qui est couplée avec l'intégration directe de la partie cohérente [134].

Ce formalisme a été utilisé pour modéliser le transport dans les LCQ par R. C. Iotti *et al.* [137–139]. L'objectif de la référence [137] était de savoir si le transport dans les LCQ était de nature cohérente. Il a été argué que l'utilisation d'un modèle entièrement cohérent n'était pas nécessaire et, qu'en première approximation, les termes non–diagonaux de l'opérateur densité $\hat{\rho}$ pouvaient être négligés, au moins dans le régime stationnaire.

Récemment, des expériences de cohérence quantique ont été menées dans les LCQ par Eickemeyer *et al.* [140–144]. Ces auteurs ont étudié la dynamique du transport des électrons par des excitations optiques ultra–rapides. Ils ont mis en évidence un comportement oscillatoire, sur une durée de quelques femtosecondes, dénotant le caractère quantique du passage de l'électron de l'injecteur à la région active. Cependant, ces résultats microscopiques ne sont pas en contradiction avec les résultats de Iotti *et al.*, puisque c'est en se basant sur la caractéristique macroscopique courant–tension, que Iotti *et al.* ont montré que le modèle semi–classique était suffisant. Or, dans un résultat aussi global que le courant, Eickemeyer *et al.* arguent que les phénomènes de cohérence quantique entre l'injecteur et la région active sont trop « moyennés » pour être détectés.

2.3.4 Équation Maîtresse de Pauli

Si on s'en tient uniquement aux éléments diagonaux, l'équation (2.17) devient [94, 95] :

$$\frac{\partial\hat{\rho}_{\nu\nu}(t)}{\partial t} = \sum_{\eta}\sum_{\mu}\left\{\lambda^{\eta}_{\mu\nu}\hat{\rho}_{\nu\nu}(t)[1-\hat{\rho}_{\mu\mu}(t)] - \lambda^{\eta}_{\nu\mu}\hat{\rho}_{\mu\mu}(t)[1-\hat{\rho}_{\nu\nu}(t)]\right\} + \left(\frac{\partial\hat{\rho}_{\nu\nu}(t)}{\partial t}\right)_{\text{cont}}, \quad (2.18)$$

où les termes $\lambda^{\eta}_{\mu\nu}$ sont les taux de transitions de l'état $|\mu\rangle$ vers l'état $|\nu\rangle$ par le mécanisme d'interaction η et le dernier terme décrit le couplage avec le Hamiltonien des contacts $\hat{\mathcal{H}}_{\text{cont}}$.

Cette équation de type Boltzmann — pour un gaz électronique bidimensionnel, les termes $\hat{\rho}_{\nu\nu}$ sont en fait les fonctions de distribution $f(|\nu\rangle)$ — se prête parfaitement à une résolution par une méthode de Monte Carlo [95], du type de celle présentée dans la section 2.1. C'est ce formalisme que nous avons retenu car, outre qu'il permet de décrire dans le détail les phénomènes physiques du transport dans les LCQ, notre équipe est « par culture » à l'aise avec les simulations de Monte Carlo. Nous verrons dans le prochain chapitre, comment, dans le cas spécifique des LCQ, nous pouvons traiter le terme des contacts.

2.3.5 Équations de bilan

Le formalisme des équations de bilan repose sur le système d'équations couplées suivant [145] :

$$\forall\nu\in 0,\ldots,N_{\text{sb}},\quad \frac{\mathrm{d}n_{\nu}(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_{\eta}\sum_{\mu\neq\nu}\frac{n_{\mu}(t)}{\tau^{\eta}_{\mu\to\nu}} - \frac{n_{\nu}(t)}{\tau^{\eta}_{\nu\to\mu}}, \quad (2.19)$$

[5] Traduction de l'anglais *Semiconductor Bloch Equations.*

où $\tau^{\eta}_{\mu\to\nu}$ représente le temps entre deux interactions de type η de la sous–bande μ à la sous–bande ν. C'est en quelque sorte la version « intégrée » sur l'espace des $\mathbf{k}$ de l'équation de Boltzmann [Éq. (2.1)]. En effet les termes $\tau^{\eta}_{\mu\to\nu}$ ont pour expression :

$$\frac{1}{\tau^{\eta}_{\mu\to\nu}} = \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k})\lambda^{\eta}_{\mu\to\nu}(\mathbf{k}). \tag{2.20}$$

La fonction de distribution, qui est l'inconnue du problème, est nécessaire pour mener à bien le calcul des $\tau^{\eta}_{\mu\to\nu}$. Ceci conduit à se donner, approximation critiquable, une modélisation des fonctions de distribution en général commune à toutes les sous–bandes.

En ce qui concerne l'application à l'étude des LCQ, le formalisme des équations de bilan a été essentiellement utilisé par l'équipe de Harrison à Leeds [145–159].

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons d'abord rappelé le principe de la méthode de Monte Carlo appliquée dans un cadre semi–classique de transport parallèle. Nous avons ensuite présenté rapidement les principaux formalismes théoriques du transport quantique, qui sont issus de l'équation de Liouville–Von Neumann. Dans le cadre des composants LCQ considérés ici, il a été montré que les éléments non–diagonaux de l'opérateur densité pouvaient être négligés, approximation qui permet de proposer une description en termes d'Équation Maîtresse. Cette formulation a notre préférence, car elle se prête tout à fait à une résolution à l'aide de la méthode de Monte Carlo, pour laquelle notre équipe a acquis une solide expérience.

L'objectif de la prochaine partie va être de présenter la mise au point du modèle physique de ce simulateur Monte Carlo. Nous verrons comment déterminer les états quantiques dans les LCQ et comment calculer les taux de transitions pour les nombreux mécanismes d'interaction pouvant influer sur le transport.

Deuxième partie

Appareil théorique du transport électronique quantique

Introduction de la partie II

Dans la partie précédente, nous avons caractérisé le transport perpendiculaire dans les LCQ comme une série de « sauts quantiques » gouverné par une Équation Maîtresse. Cette description se prête parfaitement à la résolution par la méthode de Monte Carlo. L'objet de cette partie est de décrire en détails le simulateur que nous utiliserons. Les deux ingrédients essentiels en sont : la détermination des états électroniques et le calcul des probabilités d'interactions. Seule l'interaction électron–électron pose un réel problème et est peu documentée. Nous allons donc décrire en détails l'algorithme permettant de la traiter.

L'interaction coulombienne électron–électron est une interaction primordiale pour expliquer les propriétés des métaux et des semi–conducteurs. Dans les années 1950, d'importants travaux théoriques ont été effectués afin de mieux cerner l'importance des phénomènes coulombiens à distance dans les solides. Mentionnons ici les articles pionniers de D. Pines et D. Bohm qui contribuèrent à jeter les bases théoriques de la description des interactions à plusieurs corps entre particules chargées [160, 161]. En particulier, nous leur devons la séparation de l'interaction électron–électron en deux contributions : un effet mutuel à *courte distance* entre deux particules et les *excitations collectives à longue distance*, appelées plasmons [162].

Aujourd'hui, avec la miniaturisation constante des composants, les effets dûs à l'interaction électron–électron ne peuvent plus être négligés [163, 164]. De nombreux composants optoélectroniques, surtout lorsqu'ils utilisent des transitions inter-sous–bandes au térahertz, ne peuvent être modélisés qu'avec l'inclusion de l'interaction inter–porteurs à courte distance [165–167]. Cependant, sa modélisation dans le cadre d'un gaz de porteurs bidimensionnel est très ardue, surtout pour des raisons matérielles liées au grand nombre d'états quantiques considérés. Dans cette partie, nous formulerons des hypothèses raisonnables afin de diminuer sensiblement le temps calcul. En outre, le traitement de l'interaction inter–porteur dans une simulation de Monte Carlo est une difficulté supplémentaire car cette interaction « entre deux corps » dépend de l'état instantané du gaz de porteurs et contre–réagit sur celui–ci.

Cette partie se compose de trois chapitres. Dans le chapitre 3, intitulé *Généralités sur le simulateur Monte Carlo*, nous présentons notre méthode de détermination des états électroniques dans les hétérostructures à multi–puits quantiques. Nous exposons les expressions mathématiques des probabilités d'interaction entre sous–bandes. Enfin, nous terminons en décrivant les adaptations rendues nécessaires pour simuler les structures périodiques, comme les LCQ.

Dans le chapitre 4, intitulé *Traitement de l'interaction électron–électron par la méthode de Monte Carlo*, nous détaillons l'algorithme Monte Carlo de l'interaction inter–porteurs que nous avons développé. La méthode est basée sur des techniques de majoration/réjection, avec un soin particulier pour choisir le majorant afin de ne pas augmenter déraisonnablement la charge informatique.

Dans le chapitre 5, intitulé *Écrantage bidimensionnel dans les hétérostructures*, nous étu-

dierons la modélisation des phénomènes d'écrantage dans les gaz électroniques bidimensionnels, effets indissociables des interactions coulombiennes. Le calcul des éléments de matrice du potentiel coulombien non–écranté est une étape de la simulation qui peut devenir limitante dans les systèmes mettant en jeu un très grand nombre de sous–bandes. Nous exposons donc une méthode permettant de réduire de manière significative l'évaluation de ces éléments de matrice. Ensuite, nous présenterons les différentes formulations de l'écrantage de la littérature afin d'en cerner les limites. Nous exposerons alors le modèle que nous avons utilisé, qui bien que simplifié, va au–delà des approximations usuellement employées. Enfin, dans une dernière section, nous montrerons comment la nature « loin de l'équilibre » du transport est prise en compte de façon auto–cohérente.

Chapitre 3

Généralités sur le simulateur Monte Carlo

Introduction

L'objectif de la section 3.1 est de décrire la détermination des états électroniques, grâce à la résolution des équations couplées de Schrödinger et Poisson. Pour ce faire, nous procédons tout d'abord à un bref rappel du formalisme de la fonction enveloppe et de l'équation de BenDaniel–Duke. Nous précisons les hypothèses permettant un calcul rapide, mais précis, des états électroniques en tenant compte de la non–parabolicité par une méthode dite aux valeurs propres itérées. Ensuite, nous comparons cette méthode avec celle de la matrice de transmission sur un exemple typique de laser à cascade quantique. Dans la section 3.2, nous expliquons les expressions mathématiques permettant de calculer les probabilités d'interaction par les différents mécanismes d'interaction inclus dans le modèle. Nous rappelons également comment déterminer l'état final après interaction dans une simulation de Monte Carlo. Enfin, nous concluons ce chapitre en exposant, dans la section 3.3, la technique de périodisation utilisée pour modéliser le transport dans les structures périodiques comme les LCQ.

3.1 Détermination des états électroniques

Les progrès constants de l'épitaxie par jets moléculaires permettent de réaliser des composants toujours plus complexes utilisant la quantification. En effet, la technologie de croissance de semi–conducteurs est aujourd'hui bien maîtrisée : elle permet de juxtaposer deux matériaux semi–conducteurs en réalisant une transition quasi–abrupte. Les dimensions des couches sont de plus en plus faibles et il devient alors nécessaire de considérer les phénomènes de quantification du mouvement des porteurs, la mécanique classique n'étant pas suffisante pour décrire correctement leur comportement. Dans la direction de confinement, la position exacte des particules n'est pas connue et les porteurs sont alors caractérisés par une *probabilité de présence* donnée par leur fonction d'onde. Pour déterminer toutes ces grandeurs, il faut résoudre la célèbre équation de Schrödinger. L'objectif de cette première section est justement de préciser le formalisme ainsi que les aspects numériques conduisant à l'obtention des états quantifiés dans les hétérostructures à multi–puits quantiques. Cette étape est un préalable indispensable à la simulation de Monte Carlo, car la relation de dispersion, ainsi que les fonctions d'onde, interviennent en de nombreuses étapes au cours de la simulation, en particulier lors du calcul

des taux de transitions entre les sous–bandes.

Nous commencerons cette partie par un bref rappel sur les états électroniques des matériaux en volume et les fonctions de Bloch. Puis, nous aborderons la quantification dans les hétérostructures et nous préciserons le formalisme de la fonction enveloppe utilisé pour décrire ces états.

3.1.1 États quantiques tridimensionnels

Avant d'aborder la détermination des états électroniques dans les structures confinées, nous allons faire quelques rappels sur les états quantifiés des gaz de porteurs tridimensionnels dans les cristaux semi–conducteurs. Un cristal semi–conducteur « en volume » est constitué d'une maille d'atomes, répétée de manière périodique un très grand nombre de fois. Pour les matériaux semi–conducteurs binaires que nous étudions, la structure sera généralement celle du zinc blende. La description du mouvement des particules (en très grand nombre $N \simeq 10^{23}$!) dans un tel réseau est une tâche très complexe et *a priori* impossible.

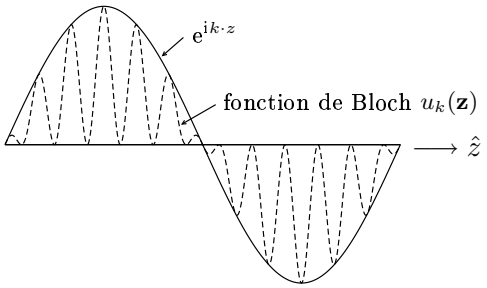


FIG. 3.1 – Représentation schématique [dans une seule direction $(O\hat{z})$] de la modulation des fonctions de Bloch par un terme exponentiel plus lent, appelé terme enveloppe.

Le problème étant non soluble dans son ensemble, on essaie alors de trouver des hypothèses raisonnables permettant de mener, malgré la complexité des systèmes étudiés, des calculs précis. En général, on se limite à une bande et on se place dans les conditions permettant d'appliquer le théorème de Bloch [37]. Dans ce cas, les fonctions d'onde $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ se mettent sous la forme : $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \propto e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, où les fonctions de Bloch $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ont la même périodicité que celle du cristal. Cette écriture traduit la séparation des fonctions d'ondes en un terme $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ à variation rapide modulé par une onde plane $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, de vecteur d'onde[1] $\mathbf{k}$, à variation plus lente. La figure 3.1 représente schématiquement ce principe de séparation entre le terme à variation rapide et le terme *enveloppe* variant plus lentement.

Une autre conséquence, due à la mécanique quantique, est l'apparition de bandes d'énergie dans les semi–conducteurs. En effet, les cristaux semi–conducteurs sont caractérisés par des plages d'énergie interdites aux électrons du cristal et toutes les fonctions d'onde d'énergie E ne peuvent pas être transmises par le réseau. La loi de dispersion $E(\mathbf{k})$ peut être obtenue par différentes méthodes, nécessitant en général des ressources numériques prohibitives. C'est pourquoi on leur substitue souvent des approximations et des modèles simplifiés, ce que nous allons expliquer dans le prochain paragraphe.

[1] Dans les cristaux, les valeurs du nombre quantique $\mathbf{k}$ forment un quasi–continuum du fait de la longueur certes très grande mais finie de l'échantillon (conditions aux limites dites de « Born–Von Karman »).

3.1.2 Formalisme de la fonction enveloppe dans les hétérostructures

Dans le paragraphe qui suit, nous rappelons brièvement quelles sont les hypothèses du formalisme de la fonction enveloppe dans les hétérostructures. Nous nous intéresserons, en particulier, aux améliorations rendues nécessaires pour traiter convenablement les matériaux à bandes non–paraboliques. La théorie de la fonction enveloppe que nous allons utiliser reprend l'idée de la séparation entre les variations lente et rapide exposée au paragraphe précédent. Il s'agit de découpler la contribution du potentiel de confinement, qui est supposé varier lentement à l'échelle de la maille atomique, du reste du potentiel cristallin.

Le lecteur intéressé par un développement complet de la théorie se reportera aux ouvrages de E. Rosencher et B. Vinter [37], ainsi qu'à la monographie détaillée de G. Bastard [168] et aux références incluses dans leurs bibliographies respectives.

Équation de BenDaniel–Duke

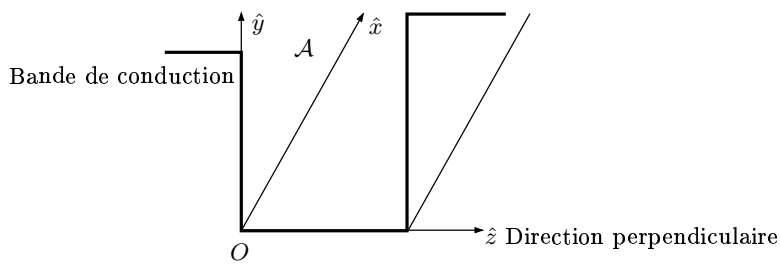


FIG. 3.2 – Système de coordonnées adapté au découplage des mouvements des porteurs dans le plan transverse (x, y), où le système conserve sa périodicité et l'axe de quantification $(O\hat{z})$, qui est l'axe de croissance des couches.

Dans cette partie, nous utilisons les notations introduites au chapitre 1 et complétées par celles de la figure 3.2. Nous allons rappeler le formalisme permettant de déterminer les états stationnaires $|\nu\rangle$ solutions de l'équation de Schrödinger :

$$\hat{\mathcal{H}}_0|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle, \tag{3.1}$$

le Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_0$ s'écrivant [88, 93, 169, 170] :

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = -\frac{\hbar^2}{2}\nabla_{\mathbf{r}}\left(\frac{1}{m^*(\mathbf{r})}\nabla_{\mathbf{r}}\right) + V(\mathbf{r}), \tag{3.2}$$

où $-\mathrm{i}\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$ est l'opérateur impulsion, $m^*(\mathbf{r})$ est la masse effective et $V(\mathbf{r})$ le potentiel cristallin. Dans les hétérostructures, les électrons sont piégés par le potentiel formé par les discontinuités de bande de conduction entre les différents matériaux et le mouvement dans la direction de croissance n'est plus libre. Leur vecteur d'onde selon cette direction (noté k_z) est quantifié et prend des valeurs discrètes correspondant aux énergies propres $\{E_\mu\}$. Les électrons de la bande de conduction sont confinés sur des *sous–bandes*. Dans le plan parallèle aux interfaces des couches (appelé plan transverse), le mouvement des électrons reste libre et, par conséquent, la composante $\mathbf{K}$ du vecteur d'onde dans ce plan est quasi–continue. Afin de distinguer les vecteurs bidimensionnels des vecteurs tridimensionnels, ces derniers sont notés en minuscule et les premiers en majuscule. Le gaz électronique est dit bidimensionnel car il conserve deux

degrés de liberté dans ce plan. On suppose alors que l'on peut découpler la direction de quantification ($O\hat{z}$) de celle du mouvement libre dans le plan transverse. La fonction d'onde $\Psi_{\mu\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ de l'électron dans l'état $|\nu\rangle \equiv |\mu\mathbf{K}\rangle$ s'exprime à l'aide des fonctions de Bloch des différentes bandes [93, 171] :

$$\begin{aligned}\Psi_{\mu\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \sum_{n=1}^{N_\mathrm{b}} \Phi_{n\mu\mathbf{K}}(\mathbf{r}) u_{n,\mathbf{k}=\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}), \\ &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{A}}} \sum_{n=1}^{N_\mathrm{b}} \varphi_{n\mu\mathbf{K}}(z) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} u_{n,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}),\end{aligned} \tag{3.3}$$

où n est l'indice de bande, μ est l'indice de sous–bande, $\mathbf{R}$ est la composante transverse du vecteur position $\mathbf{r}$, $\mathcal{A}$ est l'aire de l'échantillon dans le plan transverse, $\varphi_{n\mu\mathbf{K}}(z)$ est la *fonction d'onde enveloppe* de la sous–bande μ, $u_{n,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$ est la fonction de Bloch de la bande n au point $\mathbf{k}_0$ de la zone de Brillouin et N_b est le nombre de bandes considérées. En toute généralité, l'équation de Schrödinger est donc un système matriciel de dimension $N_\mathrm{b} \times N_\mathrm{b}$, dont la résolution complète requiert de lourds calculs numériques. Si l'on cherche uniquement à déterminer les états électroniques de la bande de conduction, il est possible de s'affranchir, moyennant certaines approximations, des bandes de valence. Leurs couplages avec la bande de conduction peuvent alors être pris en compte par l'intermédiaire d'une masse effective dépendante de l'énergie $m^*(z, \varepsilon)$.

Dans ce mémoire, nous avons considéré un modèle simplifié de vallées introduit par Littlejohn *et al.* [172]. Il se caractérise par trois vallées (notées Γ, L et X). En ce qui concerne la masse effective, nous avons adopté le modèle dit *de Kane* [48] :

$$m^*(z, \varepsilon) = m^*(z, \varepsilon = 0) \times (1 + \alpha(z)[\varepsilon - V(z)]), \tag{3.4}$$

où $m^*(z, \varepsilon = 0)$ est la masse effective du bas de bande de la vallée considérée (notée $m_0^*(z)$ dans la suite de cette partie), $V(z)$ est le potentiel de confinement et α le coefficient de non–parabolicité du matériau. L'équation pour la composante bande de conduction de la fonction enveloppe, obtenue à partir de l'équation de Schrödinger, est appelée équation de BenDaniel–Duke[2] et s'écrit [88, 171, 173] :

$$\hat{\mathcal{H}}_\mathrm{B}[E_\mu(\mathbf{K}), \mathbf{K}, z]\varphi_{\mu\mathbf{K}}(z) = E_\mu(\mathbf{K})\varphi_{\mu\mathbf{K}}(z), \tag{3.5a}$$

où le Hamiltonien de BenDaniel–Duke $\hat{\mathcal{H}}_\mathrm{B}$ est défini par :

$$\hat{\mathcal{H}}_\mathrm{B}[\varepsilon, \mathbf{K}, z] = -\frac{\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial z}\frac{1}{m^*(z,\varepsilon)}\frac{\partial}{\partial z} + V(z) + \frac{\hbar^2\mathbf{K}^2}{2m^*(z,\varepsilon)}. \tag{3.5b}$$

Dans cette équation, $V(z)$ est le potentiel de quantification résultant de quatre contributions :

$$V(z) = e\phi(z) + v_\mathrm{d}(z) + v_\mathrm{im}(z) + v_\mathrm{echg}(z), \tag{3.6}$$

où $\phi(z)$ est le potentiel électrostatique, $v_\mathrm{d}(z)$ le potentiel dû aux discontinuités de la bande de conduction, $v_\mathrm{im}(z)$ est le potentiel « image » dû aux discontinuités de constantes diélectriques

[2]Étant donné que nous étudierons uniquement les états de la bande de conduction, la notation $n = c$ sera omise dans la suite de ce mémoire. En outre, bien que nous considérions plusieurs vallées, l'indice les numérotant est également omis pour ne pas surcharger les écritures.

aux interfaces [174] et $v_{\text{echg}}(z)$ est le potentiel d'« échange–corrélation » dû aux effets multi–corps électron–électron [175–177]. Ce terme est particulièrement ardu à traiter, car il s'exprime comme une fonctionnelle de la densité électronique $n(z)$, où $n(z)$ représente le membre de droite de l'équation (3.7). Ce terme est justement l'inconnue de l'équation de Poisson. Dans ce travail, seuls les deux premiers termes, $\phi(z)$ et $v_{\text{d}}(z)$, seront considérés. Le terme électrostatique $\phi(z)$ est obtenu par la résolution de l'équation de Poisson :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\left[\kappa(z)\frac{\mathrm{d}\phi(z)}{\mathrm{d}z}\right] = e\left\{-\frac{2(\text{spin})}{\mathcal{A}}\sum_{\mu,\mathbf{K}} f_\mu(\mathbf{K})|\varphi_{\mu\mathbf{K}}(z)|^2 + N_{\text{D}}(z) - N_{\text{A}}(z)\right\}, \tag{3.7}$$

où $N_{\text{D}}(z)$ (resp. $N_{\text{A}}(z)$) est la densité de donneurs (resp. d'accepteurs) ionisés, $f_\mu(\mathbf{K})$ est la fonction de distribution de l'état $|\mu\mathbf{K}\rangle$ et $\kappa(z)$ est la constante diélectrique, supposée uniforme pour toute la structure ($\kappa \equiv \kappa_0\kappa_r$, κ_0 étant la permittivité du vide et κ_r la constante diélectrique du matériau).

Méthode « aux valeurs propres itérées »

En principe, l'équation de BenDaniel–Duke (3.5a) doit être résolue pour chaque valeur du vecteur d'onde bidimensionnel $\mathbf{K}$, afin d'obtenir la relation de dispersion $E_\mu(\mathbf{K})$ et les fonctions d'onde $\varphi_{\mu\mathbf{K}}(z)$. Une telle résolution est tout à fait envisageable d'un point de vue numérique, mais ne peut être totalement exploitée dans la simulation de Monte Carlo. Par exemple, le calcul des probabilités d'interactions est problématique lorsque les fonctions d'onde dépendent du vecteur d'onde $\mathbf{K}$. C'est pourquoi, on considère généralement que les fonctions d'onde sont peu dépendantes de $\mathbf{K}$, i.e., $\varphi_{\mu\mathbf{K}}(z) \simeq \varphi_{\mu\mathbf{K}=\mathbf{0}}(z)$. Avec cette approximation, l'équation de Poisson (3.7) devient :

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi(z)}{\mathrm{d}z^2} = \frac{e}{\kappa_0\kappa_r}\left\{-\sum_\mu n_\mu|\varphi_\mu(z)|^2 + N_{\text{D}}(z) - N_{\text{A}}(z)\right\}, \tag{3.8}$$

avec :

$$n_\mu = \frac{2(\text{spin})}{\mathcal{A}}\sum_{\mathbf{K}} f_\mu(\mathbf{K}). \tag{3.9}$$

Dans cette équation, $\varphi_\mu(z)$ est une écriture allégée de $\varphi_{\mu\mathbf{K}=\mathbf{0}}(z)$. Le terme n_μ représente la population de la sous–bande μ et dépend de la relation de dispersion[3] adoptée ainsi que de la fonction de distribution $f_\mu(\mathbf{K})$ considérée.

L'équation de BenDaniel–Duke peut être mise formellement sous la forme suivante [171, 178] :

$$\hat{\mathcal{H}}_{\text{B}}(E)\varphi(z) = E\varphi(z). \tag{3.10}$$

Cette formulation laisse apparaître un problème plus complexe qu'une « simple » recherche de valeurs propres, car l'énergie intervient dans les deux membres de l'équation. Néanmoins,

[3]Celle–ci est définie comme la différence entre l'énergie totale $E_\mu(\mathbf{K})$ et l'énergie potentielle de fond de sous–bande $E_\mu(\mathbf{K}=\mathbf{0})$:

$$\varepsilon_\mu(\mathbf{K}) \equiv E_\mu(\mathbf{K}) - E_\mu(\mathbf{K}=\mathbf{0}).$$

On appelle énergie propre du μ–ième état lié (ou énergie de fond de sous–bande) l'énergie $E_\mu(\mathbf{K}=\mathbf{0})$ et on la note simplement E_μ. Dans la littérature, l'expression « relation de dispersion » réfère indistinctement à l'énergie totale $E_\mu(\mathbf{K})$ ou à l'énergie cinétique $\varepsilon_\mu(\mathbf{K})$.

la propriété d'hermiticité du Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{B}}(E)$ est conservée pour toutes les valeurs de E. Ainsi, fixant E dans le premier membre, on retrouve une équation aux valeurs propres que l'on peut calculer par des méthodes usuelles de diagonalisation. Pour chaque valeur de E, on évalue donc l'ensemble des valeurs propres $\{\xi_\mu(E)\}$ solution de :

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{B}}(E)\varphi_\mu(z) = \xi_\mu(E)\varphi_\mu(z). \tag{3.11}$$

Le μ–ième niveau d'énergie propre E_μ s'obtient alors en résolvant l'équation :

$$\xi_\mu(E) = E. \tag{3.12}$$

Nous verrons au paragraphe 3.1.3 comment résoudre numériquement cette équation.

Relation de dispersion $\varepsilon_\mu(\mathbf{K})$

Dans la littérature, il existe plusieurs méthodes afin d'obtenir la relation de dispersion $\varepsilon_\mu(\mathbf{K})$: calcul purement numérique sur un maillage de l'espace des phases, calcul de quelques valeurs puis interpolation, approximations analytiques, *etc* [179]. Nous utiliserons le plus souvent une interpolation par un polynôme de degré deux. Une méthode alternative, qui donne généralement des résultats similaires, consiste à traiter l'énergie cinétique comme une perturbation du Hamiltonien de BenDaniel–Duke, en supposant que l'on reste au voisinage du fond de sous–bande.

Dans le cas parabolique, on suppose qu'une bonne approximation de la relation de dispersion est :

$$E_\mu(\mathbf{K}) \simeq E_\mu + \frac{\hbar^2\mathbf{K}^2}{2m^*_\mu}, \tag{3.13}$$

où la masse effective m^*_μ de la sous–bande μ est définie à partir des fonctions enveloppes $\varphi_\mu(z)$:

$$\left\langle \frac{1}{m^*_0} \right\rangle_\mu = \int_0^L \frac{|\varphi_\mu(z)|^2}{m^*_0(z)} \mathrm{d}z \equiv \frac{1}{m^*_\mu}. \tag{3.14}$$

Dans la suite de cette partie, les grandeurs entre « brakets » $\langle \cdots \rangle_\mu$ ont la signification suivante :

$$\langle g \rangle_\mu \equiv \int_0^L g(z)|\varphi_\mu(z)|^2 \mathrm{d}z. \tag{3.15}$$

Dans le cas de bandes non–paraboliques, pour lesquelles le Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{B}}$ dépend de l'énergie $E_\mu(\mathbf{K})$ [voir équation (3.5b)], on considère que le vecteur $\mathbf{K}$ ne s'éloigne pas trop du fond de sous–bande. On peut alors séparer $\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{B}}$ en deux contributions :

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{B}} = \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{K=0}} + \delta\hat{\mathcal{H}}, \tag{3.16}$$

où $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{K=0}}$ correspond à l'équation de BenDaniel–Duke (3.5a) écrite pour $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ et $\delta\hat{\mathcal{H}}$ est le Hamiltonien de perturbation induit par l'énergie cinétique $\varepsilon_\mu(\mathbf{K})$. On peut alors montrer, en utilisant la théorie des perturbations au premier ordre en α sur ce terme, que l'énergie cinétique ε_μ et $\mathbf{K}^2$ sont reliés par un polynôme γ_μ de degré deux [88, 171, 173] :

$$\frac{\hbar^2\mathbf{K}^2}{2m^*_\mu} = \varepsilon_\mu(\langle\alpha\rangle_\mu\varepsilon_\mu + \mathcal{Q}_\mu) \equiv \gamma_\mu(\varepsilon_\mu), \tag{3.17}$$

où l'expression de $\mathcal{Q}_\mu$ peut être trouvée dans les références [88, 173].

En utilisant cette relation et en supposant que la fonction de distribution $f_\mu(\mathbf{K})$ suit une statistique de Fermi–Dirac, la population électronique n_μ, intervenant dans l'équation de Poisson (3.8), s'écrit :

$$n_\mu = \rho_\mu k_B \theta [\mathcal{Q}_\mu \mathcal{F}_0(\eta_\mu) + 2\langle\alpha\rangle_\mu k_B \theta \mathcal{F}_1(\eta_\mu)], \tag{3.18a}$$

avec

$$\eta_\mu \equiv \frac{E_F - E_\mu}{k_B \theta}, \tag{3.18b}$$

où θ est la température, ρ_μ est la densité d'états $\rho_\mu \equiv m_\mu^*/(\pi\hbar^2)$, E_F le niveau de Fermi[4] et $\mathcal{F}_\zeta(\eta)$ est la fonction de Fermi d'ordre ζ [88, annexe 1] :

$$\mathcal{F}_\zeta(\eta) = \frac{1}{\Gamma(\zeta+1)} \int_0^\infty \frac{v^\zeta}{1+\exp(v-\eta)} \mathrm{d}v, \tag{3.19}$$

où Γ est la fonction d'Euler, qui pour un entier positif p vaut : $\Gamma(p) = (p-1)!$.

On constate que le potentiel électrostatique $\phi(z)$, ainsi que les fonctions enveloppes $\varphi_\mu(z)$, interviennent à la fois dans l'équation de BenDaniel–Duke (3.5) et dans l'équation de Poisson (3.8). Les deux équations sont donc couplées et la détermination des états électroniques s'obtient en les résolvant de manière *auto–cohérente*. Nous allons voir, dans le prochain paragraphe, quel est l'algorithme employé.

Procédure auto–cohérente de résolution des équations de BenDaniel–Duke et de Poisson

On suppose qu'initialement tous les électrons sont dans la vallée Γ. Nous numéroterons par l'indice j les itérations Schrödinger/Poisson. L'algorithme procède comme suit :

1. Chargement des fichiers de données : ils permettent de définir précisément l'épaisseur des couches, la composition des différents matériaux, les niveaux de dopage, *etc* ;
2. Initialisation du potentiel $V_{j=0}(z)$, par exemple par un modèle Thomas–Fermi [62] ;
3. Résolution de l'équation de BenDaniel–Duke à partir du potentiel $V_j(z)$:
   (a) Résolution de l'équation (3.10) en $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ et obtention des fonctions enveloppes $\varphi_\mu(z)$ et des énergies propres $\{E_\mu\}$;
   (b) Évaluation du nouveau niveau de Fermi. Les fonctions enveloppes interviennent dans ce calcul par l'intermédiaire des quantités m_μ^*, $\mathcal{Q}_\mu$, $\langle\alpha\rangle_\mu$ et n_μ [équation (3.18a)] ;
4. À partir des populations n_μ et du terme[5] $n_j(z)$, on résout l'équation de Poisson afin d'obtenir le potentiel $V_{j+1}(z)$ dans toutes les vallées. On effectue un test sur la convergence du potentiel entre l'itération j et $j+1$. Si le critère n'est pas satisfait, on reprend au point 3 jusqu'à obtenir la convergence.

[4] Pour être plus précis, on devrait utiliser l'expression de « quasi–niveau de Fermi ».

[5] Rappelons que $n_j(z)$ est la quantité

$$n(z) = e\left\{-\sum_\mu n_\mu |\varphi_\mu(z)|^2 + N_\mathrm{D}(z) - N_\mathrm{A}(z)\right\},$$

pour la j–ième itération de la boucle Schrödinger/Poisson.

3.1.3 Aspects numériques

Détails de la résolution

Les équations différentielles de Poisson et de BenDaniel–Duke sont résolues à l'aide de différences finies. Pour ce faire, le composant, de longueur L, est « découpé » en N intervalles réguliers $[z_n; z_{n+1}]$, espacés d'un pas constant Δz. En ce qui concerne les conditions aux limites, nous imposons l'annulation des fonctions d'onde aux extrémités du composant, c'est–à–dire $\forall\mu$, $\varphi_\mu(z=0) = \varphi_\mu(z=L) = 0$. On considère également que la continuité de $\varphi_\mu(z)$, ainsi que de $[1/m^*(z)]\partial\varphi_\mu(z)/\partial z$, est vérifiée à la traversée de chaque hétérojonction.

Dans les méthodes usuelles de résolution de l'équation de Schrödinger, les valeurs propres sont obtenues en cherchant les racines du polynôme caractéristique, résolution convenablement menée par une méthode de bissection. La méthode aux valeurs propres itérées permet de garder cette procédure de diagonalisation qui reste très efficace dans le cas présent. Voyons comment nous procédons. On repart de l'équation de BenDaniel–Duke :

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{B}}(E)\varphi_\mu(z) = \xi_\mu(E)\varphi_\mu(z). \tag{3.20}$$

Pour chaque valeur de E, on détermine l'ensemble des valeurs propres $\{\xi_\mu(E)\}$ et on cherche celles satisfaisant à :

$$\xi_\mu(E) = E. \tag{3.21}$$

Cette équation, du type $F(x) = 0$, se prête tout à fait à une résolution par une méthode de dichotomie afin de déterminer l'énergie du niveau lié E_μ.

Nous avons retenu un « double critère » de convergence de la résolution des équations de Schrödinger et Poisson. Il porte sur l'obtention d'une précision donnée, soit sur le calcul du niveau de Fermi entre deux itérations successives, ou soit sur le maximum de l'écart entre deux itérations du potentiel de confinement $V(z)$. À noter qu'un facteur accélérateur ζ est utilisé entre deux résolutions de l'équation de Poisson de manière à optimiser la convergence : $V(z) = \zeta V_j(z) + (1-\zeta)V_{j-1}(z)$.

Comparaison avec la méthode de la matrice de transmission

Dans la littérature, on trouve de nombreuses méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger afin d'obtenir le spectre des énergies propres [180–186]. Une des méthodes les plus utilisées est la méthode de la *matrice de transmission* [187–189]. Nous donnons maintenant les bases de cette méthode, puis nous comparerons les deux techniques sur une structure typique de LCQ.

À l'intérieur d'un intervalle $z_n < z < z_n + \Delta z$, on suppose que la fonction enveloppe $\varphi_\mu(z)$ peut s'écrire comme une combinaison linéaire de deux ondes planes de vecteur d'onde k_n, une se dirigeant vers la droite et l'autre vers la gauche, i.e., $\varphi_\mu(z) = A_n \exp[\mathrm{i}k_n(z-z_n)] + B_n \exp[-\mathrm{i}k_n(z-z_n)]$, l'indice μ étant volontairement omis sur A_n, B_n et k_n pour ne pas surcharger les notations. Le vecteur d'onde k_n a pour définition :

$$k_n^2(E_\mu) = \frac{2m^*(z_n, E_\mu)}{\hbar^2}[E_\mu - V(z_n)]. \tag{3.22}$$

Il peut donc être complexe ou réel suivant que l'énergie E_μ est plus petite ou plus grande que la marche de potentiel $V(z_n)$. La matrice de transmission $\overline{\mathsf{M}}$ de la structure est alors définie

par :

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = \prod_{n=0}^{N-1} \overline{\mathsf{M}}_n(E_\mu) \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \equiv \overline{\mathsf{M}}(E_\mu) \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \tag{3.23}$$

où $\overline{\mathsf{M}}_n(E_\mu)$ est la matrice de transmission définissant le franchissement de la marche de potentiel en $z = z_n$, obtenue en supposant la continuité de $\varphi_\mu(z)$, ainsi que de $[1/m^*(z)]\partial\varphi_\mu(z)/\partial z$, hypothèses déjà évoquées au paragraphe précédent [109,113]. Dans ce formalisme, les énergies liées E_μ correspondent aux maxima du coefficient de transmission $T(E_\mu)$ (on parle souvent de maximum de *transparence*). Pour les obtenir, on discrétise la plage d'énergie étudiée en intervalles $[E_i; E_i + \Delta E]$ et, pour chaque énergie E_i, on calcule le coefficient de transmission $T(E_i)$. Lorsqu'on observe un « pic » de transmission, une procédure de dichotomie est alors enclenchée afin d'affiner la détermination de la valeur propre.

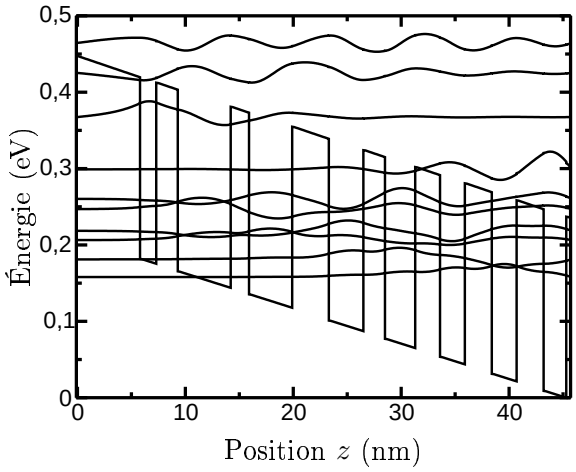
TAB. 3.1 – Comparaison des énergies liées obtenues par la méthode aux valeurs propres itérées (VPI) et par la matrice de transmission. La structure est celle des figures 3.3(a) et 3.3(b).

μ–ième sous–bande	Énergie propre E_μ (eV) (méthode VPI)	Énergie propre E_μ (eV) (matrice de transmission)	Écart (%)
1	0,1579	0,1581	0,13
2	0,1811	0,181	0,06
3	0,2063	0,2069	0,3
4	0,2184	0,219	0,3
5	0,2469	0,2475	0,2
6	0,2603	0,26	~ 0
7	0,299	0,296	1
8	0,3675	0,367	0,1
9	0,4253	0,424	0,3

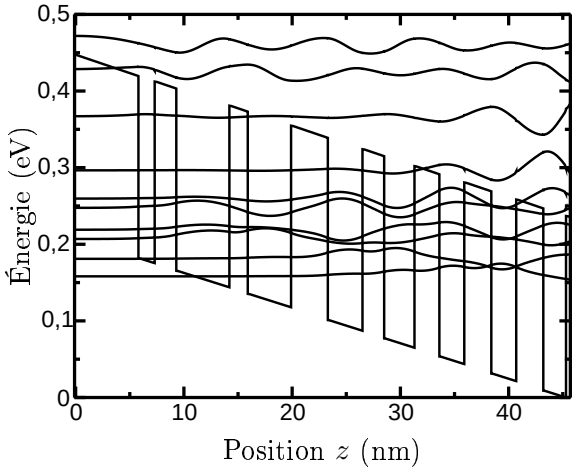
TAB. 3.2 – Performances comparées entre la méthode aux valeurs propres itérées (VPI) et la méthode de la matrice de transmission. Le maillage de l'espace des énergies propres est identique dans les deux cas : $\Delta E = 10^{-6}$ eV. La machine utilisée possède un processeur Intel Pentium IV à 3,2 GHz avec 2 Go de mémoire vive. Lorsque nous référerons, dans la suite de ce mémoire, à une configuration informatique, c'est cette configuration qui aura été utilisée.

	Méthode aux VPI	Méthode de la matrice de transmission
Temps calcul	< 1 min	~ 10 min
Espace mémoire	~ 10 Mo	~ 50 Mo

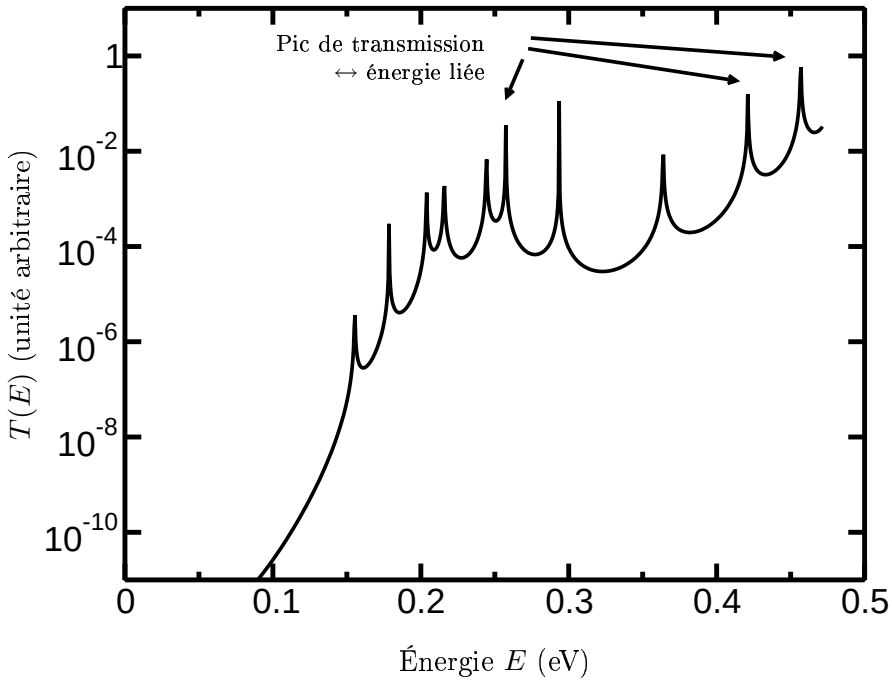
Pour terminer cette partie, nous allons comparer la méthode aux valeurs propres itérées (VPI) avec celle de la matrice de transmission, sur une structure de laser à cascade quantique.



(a) Méthode aux VPI.



(b) Méthode de la matrice de transmission.



(c) Coefficient de transmission en fonction de l'énergie E. Le pas en énergie est $\Delta E = 10^{-6}$ eV. L'échelle est semi–logarithmique.

FIG. 3.3 – Comparaison des énergies propres et fonctions d'onde obtenues par la méthode aux valeurs propres itérées (VPI) et par la méthode de la matrice de transmission. Les paramètres de la structure de bande de ce LCQ sont décrits dans la référence [56]. La densité électronique est $N_s = 3{,}9 \times 10^{15}$ m^{-2}, le champ externe appliqué $F = 10$ kV cm^{-1} et $\theta = 77$ K. La structure est discrétisée en 457 pas de 1 Å.

À titre d'exemple, nous avons choisi la structure publiée par Sirtori *et al.* qui fonctionne à une longueur d'onde de 9,4 μm [56]. Pour ce LCQ, nous avons opté pour un maillage spatial avec $\Delta z = 1$ Å, valeur qui permet d'obtenir une précision raisonnable sans entraîner de surcharge, tant en temps de calcul qu'en place mémoire. Les figures 3.3(a) et 3.3(b) représentent les fonctions d'onde et le potentiel obtenus par la méthode VPI d'une part, et la matrice de transmission d'autre part. Les valeurs des énergies propres correspondantes sont données dans le tableau 3.1. Les valeurs obtenues par la méthode de la matrice de transmission correspondent aux pics de transmission représentés par la figure 3.3(c). On constate un accord raisonnable entre les deux méthodes pour la plupart des énergies propres E_μ. L'accord entre les fonctions d'onde n'est pas exactement réalisé car les deux méthodes utilisent des conditions aux limites différentes.

Afin d'aller un peu plus loin dans la comparaison, nous donnons au tableau 3.2 quelques éléments des performances informatiques pour les deux méthodes, qui mettent en évidence la relative lenteur de la méthode de la matrice de transmission par rapport à la méthode VPI. En effet, l'inconvénient majeur de la méthode de la matrice de transmission est lié au comportement des termes $\exp[\pm \mathrm{i} k_n(E)\Delta z]$, où $k_n(E)$ peut être complexe (typiquement dans les barrières). D'autre part, l'erreur induite par ce type de terme est difficilement contrôlable et une légère variation d'énergie peut conduire à « rater » la fenêtre de transparence d'une énergie liée. En outre, comme la matrice de transmission est complexe, le stockage mémoire est beaucoup plus conséquent. Par ailleurs, on peut rencontrer des difficultés numériques à évaluer certains éléments de la matrice de transmission pour certaines énergies. L'inconvénient de travailler avec des vecteurs d'onde complexes s'atténue lorsqu'on cherche les énergies propres quasi–liées ou itinérantes au–dessus de la structure. Dans ce cas, la méthode de la matrice de transmission semble tout aussi efficace que la méthode aux VPI.

En conséquence, compte tenu de la vitesse d'exécution et de la précision obtenue, la résolution auto–cohérente des équations de BenDaniel–Duke et de Poisson sera menée par la méthode aux valeurs propres itérées dans la suite de ce travail.

3.2 Traitement des mécanismes d'interaction dans la méthode de Monte Carlo

Les probabilités d'interaction sont l'ingrédient indispensable de toute simulation de Monte Carlo. Ce sont elles qui régissent les phénomènes de transport dans les composants et qui, en général, fixent les performances.[6] Si l'on veut décrire de manière fine le transport et l'ensemble des phénomènes physiques sous–jacents, un nombre important de mécanismes d'interaction doit être considéré. Dans cette section, nous précisons le formalisme utilisé pour le calcul des probabilités d'interaction. Nous verrons comment les interactions sont calculées à partir des fonctions d'onde et des relations de dispersion. Nous préciserons le déroulement d'un processus d'interaction dans la simulation de Monte Carlo. Nous énumérerons ensuite les différentes

[6] Qu'on songe ici à la formule simplifiée, mais parlante, donnant la mobilité μ (à ne pas confondre avec l'indice de sous–bande) :

$$\mu = \frac{e\tau}{m^*},$$

où τ est le temps de libre parcours moyen de l'électron, c'est–à–dire le temps moyen entre deux interactions. Plus ce temps est grand, i.e., moins il y a de collisions, plus la mobilité et donc la vitesse des porteurs est grande.

interactions incluses dans la simulation, les améliorations effectuées ainsi que les références des travaux explicitant leur modélisation.

3.2.1 Formalisme utilisé

On suppose les taux d'interactions indépendants du champ électrique appliqué. On se place dans l'hypothèse de la règle d'or de Fermi et de l'approximation de Born. Dans ce cadre, la densité de probabilité $\lambda^{\eta}_{\mu\nu}(\mathbf{K})$ de transition par unité de temps dt de l'état $|\mu\mathbf{K}\rangle$ vers l'état $|\nu\mathbf{K}'\rangle$, par l'intermédiaire du mécanisme de collision indicé par η, a pour expression [87] :

$$\lambda^{\eta}_{\mu\nu}(\mathbf{K}) = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{2(\text{spin})}{\mathcal{A}}\sum_{\mathbf{K}'}\left|\langle\mu\mathbf{K}|V^{\eta}_{\text{int}}(\mathbf{r})|\nu\mathbf{K}'\rangle\right|^2\delta\{E_{\mu}(\mathbf{K}) - E_{\nu}(\mathbf{K}')[\pm\hbar\omega(\mathbf{q})]\}, \tag{3.24}$$

où $V_{\text{int}}(\mathbf{r})$ est le potentiel perturbateur caractérisant le mécanisme d'interaction considéré (l'indice η sera volontairement omis par la suite) et le terme « Dirac » δ traduit la conservation de l'énergie totale de l'électron. L'interaction peut ainsi être élastique ou inélastique et, dans ce dernier cas, un quantum d'énergie est échangé avec le réseau cristallin. C'est pour cette raison que l'on fait apparaître l'échange possible d'un phonon d'énergie $\hbar\omega(\mathbf{q})$, où $\mathbf{q}$ est le vecteur d'onde du phonon échangé (voir paragraphe 3.2.2).

Calcul des éléments de matrice du potentiel perturbateur

La non–parabolicité intervient doublement dans cette expression : (i) par la densité d'états $\gamma'_{\nu}(\mathbf{K}')$ lors de l'intégration sur tous les états finaux possibles $\mathbf{K}'$; (ii) par l'intermédiaire de l'élément de matrice du potentiel perturbateur $V_{\text{int}}(\mathbf{r})$ et du recouvrement des fonctions de Bloch des différentes bandes de conduction et de valence. Dans la référence [171], il a été montré qu'il était possible,[7] moyennant certaines approximations, de trouver un terme homologue au facteur de recouvrement de Bloch des probabilités intervenants pour le transport tridimensionnel (voir la thèse de A. Kaszynski [190]). L'élément de matrice s'écrit alors :

$$|\langle\mu\mathbf{K}|V_{\text{int}}(\mathbf{r})|\nu\mathbf{K}'\rangle|^2 = |M_{\mu\nu}(\mathbf{Q})|^2\mathcal{G}_{\mu\nu}(\mathbf{K},\mathbf{K}'), \tag{3.25}$$

où $\mathbf{Q} = \mathbf{K} - \mathbf{K}'$ est le vecteur d'onde échangé et $M_{\mu\nu}(\mathbf{Q})$ est l'élément de matrice du recouvrement spatial du potentiel perturbateur selon $(O\hat{z})$, qui ne fait intervenir que les fonctions d'onde $\varphi_{\mu}(z)$, $\varphi_{\nu}(z)$ et la transformée de Fourier du potentiel perturbateur $V_{\text{int}}(\mathbf{Q}, z)$:

$$M_{\mu\nu}(\mathbf{Q}) = \int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_{\mu}(z)\varphi^*_{\nu}(z)V_{\text{int}}(\mathbf{Q}, z)\mathrm{d}z, \tag{3.26}$$

où $\varphi^*_{\nu}(z)$ est le complexe conjugué de $\varphi_{\nu}(z)$. Le terme $\mathcal{G}_{\mu\nu}(\mathbf{K},\mathbf{K}')$ est le facteur de recouvrement des fonctions de Bloch $u_{n\nu\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ des différentes bandes. Ce facteur fait intervenir les énergies $E_{\mu}(\mathbf{K})$, $E_{\nu}(\mathbf{K}')$ et l'angle β de déviation, i.e., $\beta = (\widehat{\mathbf{K},\mathbf{K}'})$ [171]. Nous verrons dans les paragraphes qui suivent comment notre simulateur le traite.

Les interactions sont calculées pour tous les types de transitions $|\mu\mathbf{K}\rangle \rightarrow |\nu\mathbf{K}'\rangle$. C'est pourquoi le nombre de transitions augmente avec N^2_{sb}, où N_{sb} est le nombre de sous–bandes

[7] L'hypothèse principale sous–jacente à ce calcul est la séparation de la dépendance en $\mathbf{K}$ et en z des fonctions d'onde $\varphi_{\mu\mathbf{K}}(z)$ [171, 178].

considérées. Ainsi, la tabulation de toutes les interactions requiert un nombre d'opérations évoluant selon :

$$N_{\text{opérations}} \propto N_{\text{sb}}^2 \times N_{\mathbf{K}}^2, \tag{3.27}$$

où $N_{\mathbf{K}}$ est le nombre de mailles de l'espace des phases nécessaires au calcul des probabilités d'interaction. En discrétisant raisonnablement les différentes grandeurs, on atteint rapidement un nombre d'opérations excessivement grand, voire prohibitif, de l'ordre de 10^8–10^9. Nous verrons, dans la suite de ce mémoire, que le calcul des probabilités d'interaction est en fait encore plus onéreux en terme de ressources informatiques car la probabilité d'interaction mutuelle électron–électron induit des calculs augmentant en N_{sb}^4.

Nous allons maintenant aborder le traitement des interactions par l'algorithme de Monte Carlo.

Choix du mécanisme d'interaction

Durant l'intervalle de temps $[t_j; t_j + \Delta t]$, on considère un électron dans l'état $|\mu\mathbf{K}\rangle$. À l'issue de la phase de vol libre, on évalue la quantité $\Gamma_\mu(\mathbf{K})$ définie par :

$$\Gamma_\mu(\mathbf{K}) = \sum_{\eta,\nu} \lambda_{\mu\nu}^{\eta}(\mathbf{K})\Delta t. \tag{3.28}$$

On choisit le pas Δt de manière à ce que $\Gamma_\mu(\mathbf{K}) \ll 1$. Puis on effectue le tirage aléatoire d'un nombre r uniformément distribué entre 0 et 1. Si $r \geq \Gamma_\mu(\mathbf{K})$, l'électron ne subit pas d'interaction. Dans le cas contraire, il y a interaction, et l'algorithme va déterminer la nature de l'interaction (indice η) et l'état final $\mathbf{K}'$ de la particule. Lorsque $\Gamma_\mu(\mathbf{K})$ dépasse un certain seuil, une procédure automatique de réduction dichotomique du pas de temps est enclenchée. Pour être plus précis, le vol libre précédent est repris avec un pas de temps divisé par deux : $\Delta t \to \Delta t/2$. La procédure est répétée un certain nombre de fois p, tant que la somme (3.28) reste supérieure au seuil fixé. Ensuite, on complète le pas de temps avec un nouveau vol libre sur la fraction de pas temps restant à traiter.

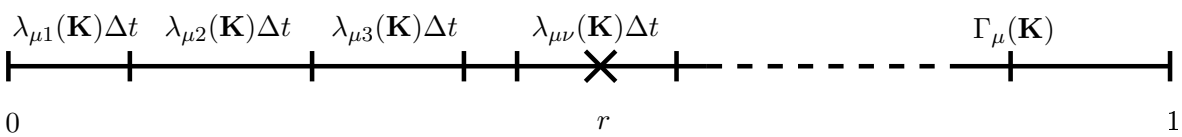


FIG. 3.4 – Détermination du type de la probabilité par tirage d'un nombre aléatoire r uniformément distribué entre 0 et 1. Si r appartient à l'intervalle $[\Gamma_\mu(\mathbf{K}); 1]$ alors le vol libre n'est pas interrompu par une collision.

Ensuite, la nature de l'interaction est déterminée par une méthode cumulative : les probabilités $\lambda_{\mu\nu}^{\eta}(\mathbf{K})$ sont rangées comme le montre la figure 3.4. Le nombre aléatoire r précédemment utilisé permet alors de spécifier le mécanisme d'interaction tiré selon l'intervalle dans lequel il se situe. Une fois connu le mécanisme d'interaction et la sous–bande d'arrivée ν, on détermine le module K' du vecteur d'onde final par la loi de conservation de l'énergie.

Pour terminer le traitement des interactions dans les simulations de Monte Carlo, nous devons finir de déterminer l'angle β de déviation, ce qui va être décrit au paragraphe suivant.

Détermination de l'angle de déviation $\beta = \left(\widehat{\mathbf{K},\mathbf{K}'}\right)$

En tenant compte de la conservation de l'énergie, la probabilité $\lambda_{\mu\nu}(\mathbf{K})$ peut se mettre sous la forme :

$$\lambda_{\mu\nu}(\mathbf{K}) = \int_0^{2\pi} \mathcal{P}_{\mu\nu}(\beta)\mathrm{d}\beta, \tag{3.29}$$

où $\mathcal{P}_{\mu\nu}(\beta)$ est la distribution de l'angle de déviation. L'angle de déviation β doit suivre la distribution normalisée, ce qui revient à résoudre :

$$r = \frac{\displaystyle\int_0^{\beta} \mathcal{P}_{\mu\nu}(\beta_0)\mathrm{d}\beta_0}{\displaystyle\int_0^{2\pi} \mathcal{P}_{\mu\nu}(\beta_0)\mathrm{d}\beta_0}, \tag{3.30}$$

où r est un nombre aléatoire uniformément distribué entre 0 et 1. Pour la majeure partie des interactions, l'équation (3.30) n'a pas de solution analytique et on lui substitue alors une méthode numérique dite *technique de Von–Neumann* [87].

Principe de Pauli et facteur de Bloch

Le principe d'exclusion de Pauli nécessite de calculer l'équation (3.24) avec le « terme bloquant » de l'état final $[1 - f_\nu(\mathbf{K}')]$. Or la fonction de distribution $f_\nu(\mathbf{K}')$ est l'« inconnue » de la simulation de Monte Carlo. On ne peut donc pas calculer exactement (3.24), à moins de présupposer une certaine statistique, ou d'utiliser un calcul auto–cohérent des probabilités à chaque pas de temps, procédure qui n'est pas envisageable de par la charge numérique qui en découle.

Pour résoudre ce problème, on utilise une technique de réjection. La méthode que nous utilisons s'inspire des travaux pionniers effectués par Lugli *et al.* et Bosi et Jacoboni [191,192]. Le détail complet de la procédure peut être trouvé dans les références [88,93,193–195]. Nous en donnons ici seulement les grandes lignes. On suppose que le gaz électronique est non dégénéré, c'est–à–dire que $1 - f_\nu(\mathbf{K}') \approx 1$. Grâce à cette hypothèse, on peut évaluer l'équation (3.24) sans postuler un type de distribution *a priori*. Lorsqu'une interaction est choisie et l'état final $|\nu\mathbf{K}'\rangle$ déterminé, on effectue une réjection sur le terme $[1 - f_\nu(\mathbf{K}')]$. Pour ce faire, tout au long de la simulation, on enregistre le nombre d'électrons $N_{\mu\mathbf{K}}$ dans chaque cellule de l'espace des phases. On tire au hasard un nombre r selon une distribution uniforme entre 0 et 1. Le nombre r est comparé au taux d'occupation $\mathcal{T}_{\nu\mathbf{K}'}$ de la cellule contenant l'état final, avec $\mathcal{T}_{\nu\mathbf{K}'} \equiv N_{\nu\mathbf{K}}/N_{\max}$, où $N_{\max}$ est le nombre maximal de super–particules pouvant être reçu par une maille de l'espace des phases. Si $r \leq \mathcal{T}_{\nu\mathbf{K}'}$ alors l'interaction est rejetée.

Le terme de Bloch $\mathcal{G}_{\mu\nu}(\mathbf{K},\mathbf{K}')$ est également traité par une méthode de réjection [171]. Ce facteur étant par construction inférieur à 1, à l'issue de la transition $|\mu\mathbf{K}\rangle \rightarrow |\nu\mathbf{K}'\rangle$, on évalue $\mathcal{G}_{\mu\nu}(\mathbf{K},\mathbf{K}')$ et l'interaction est rejetée si $r > \mathcal{G}_{\mu\nu}(\mathbf{K},\mathbf{K}')$, où r est un nombre aléatoire uniformément distribué entre 0 et 1.

3.2.2 Les interactions considérées

Dans cette sous–section, les différents mécanismes d'interaction inclus dans le modèle sont énumérés. Nous essaierons, autant que faire se peut, de préciser les hypothèses permettant de modéliser les diverses interactions.

Interaction avec le réseau : les phonons

Les phonons sont des ondes vibrationnelles du réseau cristallin. Suivant la branche de dispersion, on parle de phonon optique ($\hbar\omega(\mathbf{q}) = \hbar\omega_0$) ou acoustique ($\hbar\omega(\mathbf{q}) = \hbar v_s q$, où v_s est la vitesse du son dans le matériau). Par ailleurs, si la vibration est créée par le déplacement de deux ions voisins de charge opposée, la perturbation phononique est de nature électrostatique. C'est ce qui se passe typiquement dans les matériaux semi–conducteurs polaires. Dans le cas du phonon optique (respectivement acoustique), l'interaction est dite sur phonon optique polaire (resp. piézoélectrique). S'il s'agit juste d'une déformation du potentiel du cristal, le phonon est dit optique non polaire ou acoustique de déformation.

Nous reprenons la modélisation des phonons initiée dans les références [88, 196], en modifiant le calcul du facteur de recouvrement $M_{\mu\nu}(\mathbf{Q})$, afin de substituer un traitement purement numérique aux approximations analytiques antérieures, qui ne sont plus pertinentes dans les LCQ. Le lecteur intéressé par les expressions mathématiques de la probabilité d'interaction sur phonon optique polaire consultera l'annexe A. Dans ce simulateur, nous incluons l'interaction sur les phonons optiques polaires, optiques non–polaires et acoustiques. Un certain nombre d'hypothèses ont été effectuées dans ce travail afin de garder une modélisation raisonnable de l'interaction sur phonon, c'est–à–dire physiquement réaliste et n'induisant pas un temps calcul prohibitif :

- On considère que l'interaction sur phonon n'est pas écrantée. Le problème de l'écrantage des phonons est épineux et a fait l'objet de nombreux travaux [197,198]. En toute rigueur, l'interaction sur phonon devrait être écranté statiquement (c'est–à–dire en fonction du vecteur d'onde échangé dans l'interaction). Dans certains cas, comme par exemple pour l'interaction sur phonon acoustique,[8] l'écrantage devrait être également de nature dynamique (c'est–à–dire en fonction de l'énergie échangée). Cependant, l'écrantage dynamique est une question très compliquée qui dépasse le cadre de cette thèse et que nous ne traiterons pas ici.
- Du fait de la présence de nombreuses hétérojonctions, les modes de phonons sont quantifiés et, par exemple, des modes de phonons dits d'*interfaces* apparaissent [200, 201]. En fait, les atomes de chaque couche tendent à vibrer à la fréquence du matériau la constituant. Cependant, ces modes ne seront pas pris en compte dans ce travail et nous considérons uniquement l'interaction sur des modes de phonons en volume. Cette approximation est relativement sévère, certains auteurs ayant démontré que l'approximation des modes de phonons en volume restait valable tant que la largeur des puits restait supérieure à 40 Å [202, 203]. Elle permet néanmoins de considérablement limiter le volume des calculs, ce qui est d'autant plus salutaire que le nombre de sous–bandes est important [voir équation (3.27)].
- On considère que le phonon acoustique de déformation a une énergie négligeable comparée à celle des électrons. L'interaction sur phonon acoustique est donc traitée de manière élastique. Cette approximation peut être critique dans la mesure où, à basse température, les phonons acoustiques constituent en général l'unique moyen des électrons d'échanger de l'énergie avec le réseau cristallin.
- On suppose que le bain de phonons est thermalisé et que la distribution de phonons suit

[8] Prenons le cas de figure d'une interaction intra-sous–bande acoustique. Le vecteur d'onde échangé $\mathbf{Q}$ par l'électron est faible et la fréquence plasmon correspondante également car $\hbar\omega(\mathbf{Q}) \to 0$. Or dans ce cas, Fischetti *et al.* ont montré que l'énergie de phonon acoustique était supérieure à l'énergie de plasmon, rendant un calcul dynamique nécessaire [199].

une statistique de Bose Einstein à la température de réseau θ_{res} :

$$N_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\exp\left(\dfrac{\hbar\omega(\mathbf{q})}{k_B\theta_{\text{res}}}\right) - 1}. \tag{3.31}$$

Interaction avec les imperfections du réseau

Stricto sensu, un cristal parfait sans aucun défaut n'existe pas. De nombreuses imperfections résiduelles existent et vont interagir avec les porteurs. En général, elles dégradent le transport et limitent les performances. Les interactions coulombiennes à distance sont de celles–là et sont majoritairement dues aux impuretés ionisées provenant du dopage des matériaux semi–conducteurs. Cependant, la présence des impuretés est rendue nécessaire dans la mesure où elle permet d'augmenter les densités mises en jeu. La modélisation des interactions coulombiennes a fait l'objet d'une étude théorique menée dans la thèse de L. Baudry [88] et c'est ce formalisme que nous reprenons dans ce travail.

D'autres imperfections existent dans les réseaux : (i) interaction d'alliage due à la substitution d'atomes dans les matériaux ternaire [204] ; (ii) interaction sur agrégats ; (iii) interaction sur rugosité d'interface ; *etc.* L'interaction sur rugosité d'interface provient de la non planéité dans la direction transverse des interfaces des différentes hétérojonctions [205]. Elle est relativement délicate à modéliser car elle requiert un certain nombre de paramètres (distribution des défauts d'interfaces, longueur de rugosité ...) qu'il est difficile d'estimer. Ces paramètres varient d'un composant à l'autre et à l'intérieur même des structures, car elles dépendent des conditions de l'épitaxie. Il est ainsi peu aisé de décrire de manière globale la rugosité d'interface par des paramètres autres que phénoménologiques. C'est pour cette raison que, dans ce travail, seules l'interaction sur impuretés ionisées et l'interaction d'alliage seront incluses.

Interaction entre porteurs

De même que pour l'interaction avec les impuretés, l'origine des collisions entre porteurs est la force d'attraction (électron–trou) ou de répulsion (électron–électron, trou–trou) coulombienne. Ce mécanisme est essentiel pour déterminer les propriétés du gaz électronique et est d'autant plus important que la température et la densité électronique sont grandes. La modélisation de cette interaction ainsi que de l'écrantage multi-sous–bandes fait l'objet des prochains chapitres.

3.3 Principe de la méthode de périodisation

Dans cette section, nous détaillons la procédure de détermination des états électroniques dans les lasers à cascade quantique. Nous nous intéressons successivement à l'adaptation nécessaire de la résolution des équations de Schrödinger et Poisson et à celle effectuée sur la simulation de Monte Carlo.

3.3.1 Détermination des états électroniques en tenant compte de la périodicité

Le principe même de la détermination des énergies propres en tenant compte de la non–parabolicité reste inchangé et identique à celle exposée au début de ce chapitre. Néanmoins,

après chaque itération Schrödinger/Poisson, on procède à une étape de périodisation des états électroniques.

Dans un premier temps, il est nécessaire de définir précisément la période D de la structure LCQ.[9] Ensuite, on fait l'hypothèse que la structure est composée d'une infinité de périodes, même si on n'étudie qu'un nombre reduit d'étages (noté $2p+1$). L'objectif fixé est la détermination des états électroniques dans l'étage dit *central* (voir figure 3.5) en tenant compte du couplage avec les états adjacents, qui peuvent être les étages voisins immédiats ou des étages plus lointains, tout dépend du degré de complexité souhaité. On résout alors les équations de Schrödinger et Poisson sur les $2p+1$ étages, l'indice j numérotant les étages. Voilà comment l'algorithme procède [206] :

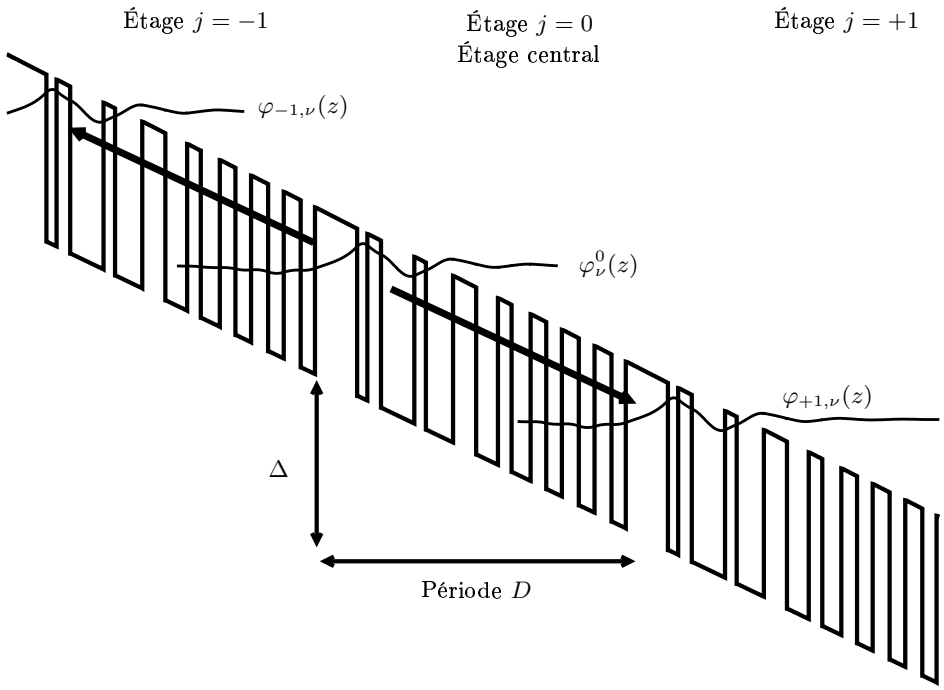


FIG. 3.5 – Représentation schématique de la périodisation des états électroniques localisés dans l'étage central afin de déterminer ceux des étages adjacents (dans cet exemple $2p+1=3$).

1. On détermine les énergies propres et les fonctions d'onde sur la structure complète, i.e., sur les $2p+1$ étages, à l'aide de la méthode aux valeurs propres itérées exposée à la sous–section 3.1.2 ;
2. On affecte chaque fonction d'onde $\varphi_\nu(z)$ à un étage j selon le maximum de probabilité de présence $|\varphi_\nu(z)|^2$ par étage, sachant que la fonction d'onde est normalisée sur l'ensemble des $2p+1$ étages ;
3. Les fonctions d'ondes et les énergies propres des étages adjacents sont obtenues par périodisation des sous–bandes se trouvant dans l'étage central, c'est–à–dire en les décalant

[9] Qui peut être la période élémentaire de la structure, c'est–à–dire la plus petite séquence de couches épitaxiales permettant de reconstituer le laser à cascade quantique ou toute période multiple de celle–ci.

en énergie et en position (avec les notations de la figure 3.5) :

$$\begin{aligned} E_{j,\nu} &= E_\nu^0 - j\Delta, \\ \varphi_{j,\nu}(z) &= \varphi_\nu^0(z - jD), \end{aligned} \tag{3.32}$$

où Δ est la « chute de potentiel » par étage et E_ν^0 (respectivement $\varphi_\nu^0(z)$) l'énergie propre (respectivement la fonction d'onde) de la ν–ième sous–bande de l'étage central ;

4. L'équation de Poisson est résolue sur l'étage central en supposant qu'il y a conservation de la charge électronique dans chaque étage. Ceci permet de définir convenablement un niveau de Fermi local propre à chaque étage. Après évaluation des différents critères de convergence (voir sous–section 3.1.2), on recommence, si nécessaire, une nouvelle résolution de l'équation de Schrödinger (étape 1).

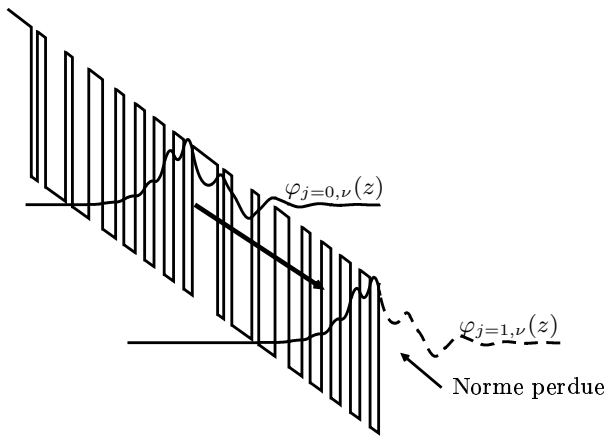


FIG. 3.6 – Exemple d'une fonction d'onde $\varphi_{j=1,\nu}(z)$ obtenue par périodisation, mais ayant « perdu » de la norme de par le décalage d'un étage.

Après décalage, les fonctions d'onde sont tronquées de la partie sortant de la zone de calcul (voir figure 3.6). Cela peut conduire à des problèmes, ne serait–ce que parce que leur norme est inférieure à 1. Dans la pratique, nous corrigeons les différents coefficients pour tenir compte de la périodicité (comme par exemple les quantités $\langle\alpha\rangle_\nu$).

3.3.2 Transport dans les structures périodiques

Dans les lasers à cascade quantique, le transport des électrons repose sur une succession d'interactions inter-sous–bandes afin de passer d'étage en étage. Cette circulation des électrons est à l'origine d'un *courant perpendiculaire*[10] de nature purement quantique. Dans cette partie, nous allons décrire la méthode que nous avons utilisée et qui s'inspire de celle de Iotti *et al.* [206].

On rappelle que le second membre de l'équation de Boltzmann fait intervenir un terme de couplage avec le Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_{\text{cont}}$ des contacts [104, 105] :

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\rho_{\mu\mu}, \hat{\mathcal{H}}_{\text{cont}}] \equiv \left(\frac{\mathrm{d}\rho_{\mu\mu}}{\mathrm{d}t}\right)_{\text{cont}}. \tag{3.33}$$

[10]En toute rigueur nous devrions parler d'une *densité de courant surfacique*, mais par raccourci nous emploierons fréquemment le terme de courant.

Ce terme décrit en quelque sorte l'injection et l'extraction des électrons dans le composant et donc le courant perpendiculaire le traversant.[11] Dans ce travail, nous nous sommes intéressés uniquement au cas d'un étage quelconque, pris si l'on peut ainsi dire, au « milieu » du LCQ et suffisamment éloigné des deux contacts afin que leur influence puisse être négligée. Seuls les étages adjacents sont donc pris en compte de la façon suivante. Dans la simulation de Monte Carlo, on considère toutes les interactions à partir de l'étage central, qu'elles soient intra– ou inter–étages. Lorsqu'un électron dans la sous–bande μ subit une interaction inter–étage $|j = 0, \mu\mathbf{K}\rangle \rightarrow |j, \mu'\mathbf{K}'\rangle$, c'est–à–dire qui l'affecterait à une sous–bande μ' d'un étage adjacent, dans ce cas, l'électron est réintroduit dans la sous–bande correspondante[12] de l'étage central. De plus, on enregistre les événements inter–étages afin d'évaluer le courant J. Ainsi, par exemple, on décompte une charge élémentaire $-e$ lorsqu'une transition $j = 0 \rightarrow j = 1$ a lieu.

Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre comment obtenir les états électroniques dans les hétérostructures à multi–puits quantiques par le formalisme de la fonction enveloppe. Le modèle présenté est très général et peut être utilisé pour calculer les énergies propres et les fonctions d'onde dans des hétérostructures basées sur des systèmes de matériaux différents. En particulier, il est tout à fait adapté aux matériaux à bandes fortement non–paraboliques.

Nous avons également exposé le calcul des probabilités de transition entre sous–bandes pour de nombreux mécanismes d'interaction. La détermination de l'état final après interaction dans la simulation de Monte Carlo, en tenant compte du principe de Pauli et des facteurs de Bloch, a été également expliquée. Nous avons opté pour un calcul totalement numérique de la probabilité sur phonon optique polaire, mécanisme d'interaction d'une importance cruciale dans le fonctionnement de nombreux lasers à cascade quantique, comme nous avons pu le voir au chapitre 1.

Enfin, nous avons conclu ce chapitre en expliquant les modifications apportées à la méthode de détermination des états électroniques et à la simulation de Monte Carlo, afin de modéliser convenablement les structures périodiques comme les LCQ.

Nous allons maintenant aborder la modélisation d'un autre mécanisme d'interaction très important dans les LCQ, surtout lorsque les sous–bandes sont très resserrées en énergie : l'interaction électron–électron.

[11] Mentionnons ici que l'équation Maîtresse de Pauli peut violer la continuité du courant mais ce problème dépasse de très loin le cadre de ce travail. Le lecteur intéressé par ces discussions est invité à consulter les travaux de M. V. Fischetti [94, 95] et W. R. Frensley [103].

[12] C'est–à–dire la sous–bande μ'' de l'étage central dont μ' est la réplique par périodisation.

Chapitre 4

Traitement de l'interaction électron–électron par la méthode de Monte Carlo

Introduction

Dans la section 4.1, nous rappelons la formule de la probabilité d'interaction électron–électron pour un gaz électronique bidimensionnel. Pour limiter la charge informatique, la non–parabolicité n'a pas été prise en compte dans nos calculs. Dans la section 4.2, nous présentons la mise en œuvre de cette interaction dans le cadre d'un simulateur de Monte Carlo. À cet effet, il nous a semblé pertinent de présenter, dans un premier temps, un état de l'art des méthodes de la littérature, puis d'expliciter les spécificités de notre approche. Nous présentons ensuite l'algorithme de Monte Carlo que nous avons développé et qui repose sur des techniques de majoration/réjection.

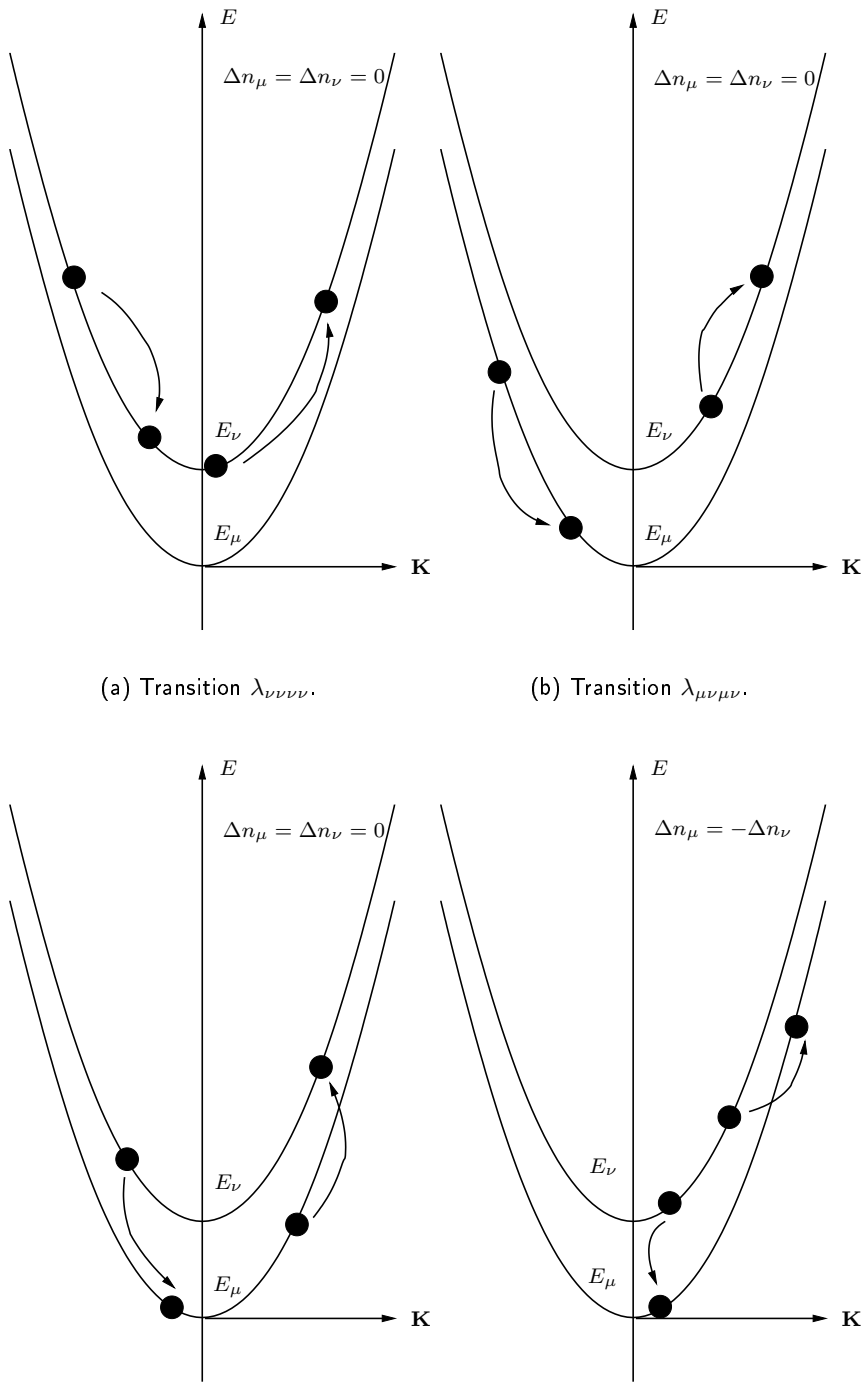
4.1 Probabilité d'interaction électron–électron pour un gaz bidimensionnel

4.1.1 Équation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann, en tenant compte de l'interaction électron–électron à deux corps, s'écrit[1] [208] :

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial t} &= \sum_{\mathbf{k}} \left\{\lambda(\mathbf{k}',\mathbf{k})f(\mathbf{k}')[1-f(\mathbf{k})] - \lambda(\mathbf{k},\mathbf{k}')f(\mathbf{k})[1-f(\mathbf{k}')]\right\} \\ &+ \sum_{\mathbf{k}',\mathbf{p},\mathbf{p}'} \left\{f(\mathbf{k}')f(\mathbf{p})\lambda^{\mathrm{ee}}(\mathbf{k}',\mathbf{p}\to\mathbf{k},\mathbf{p}')[1-f(\mathbf{k})][1-f(\mathbf{p}')]\right. \\ &- \left. f(\mathbf{k})f(\mathbf{p}')\lambda^{\mathrm{ee}}(\mathbf{k},\mathbf{p}\to\mathbf{k}',\mathbf{p}')[1-f(\mathbf{k}')][1-f(\mathbf{p}')]\right\}, \qquad (4.1)\end{aligned}$$

[1] Afin d'alléger l'écriture, les indices de sous–bande et de dégénérescence de spin sont omis, ainsi que la dépendance de la fonction de distribution f des variables de position $\mathbf{r}$ et de temps t. De même, le terme dû au champ parallèle, $-e/\hbar\mathbf{E}\cdot\nabla_{\mathbf{k}}f(\mathbf{k})$, ne figure pas, car nous étudions le transport perpendiculaire.



(a) Transition $\lambda_{\nu\nu\nu\nu}$.

(b) Transition $\lambda_{\mu\nu\mu\nu}$.

(c) Transition $\lambda_{\mu\nu\nu\mu}$.

(d) Transition $\lambda_{\mu\mu\nu\nu}$.

FIG. 4.1 – Différentes « classes » de transitions par interaction coulombienne mutuelle mettant en jeu uniquement deux sous–bandes ν et μ. Compte tenu de l'indiscernabilité des particules, les cas (b) et (c) représentent la même situation. D'après [207] : S.-C. Lee *et al.*, *Phys. Rev. B*, **59**(24), p. 15796 (1999).

où $\lambda^{\mathrm{ee}}(\mathbf{k},\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{k}',\mathbf{p}')$ est la densité de probabilité par unité de temps d'interaction électron–électron des états initiaux $(\mathbf{k},\mathbf{p})$ aux états finaux $(\mathbf{k}',\mathbf{p}')$.

Dans le cas des hétérostructures et des gaz électroniques bidimensionnels, le vecteur d'onde $|\mathbf{k}\rangle$ s'écrit en fait $|\mu\mathbf{K}\rangle$ et la probabilité d'interaction met en jeu quatre sous–bandes. Parmi toutes les possibilités pour ce quadruplet de sous–bandes, on distingue quatre grands types d'interactions électron–électron lorsque deux sous–bandes sont uniquement mises en jeu. Elles ont été schématisées par la figure 4.1 :

- Les transitions ne conduisant pas à une variation du nombre de particules par sous–bande [représentées par les figures 4.1(a), 4.1(b) et 4.1(c)]. La transition « intra-sous–bande pure » de la figure 4.1(a) a pour effet de répartir l'énergie à l'intérieur de la sous–bande entre les deux électrons. Les transitions entre sous–bandes [figures 4.1(b) et 4.1(c)] induisent quant à elles un échange possible d'énergie entre les deux sous–bandes ;
- La transition représentée par la figure 4.1(d) montre un exemple contribuant à une variation de la population des sous–bandes ;

Les interactions de la figure 4.1 sont généralement les plus fréquentes. Ensuite, il y a toutes les autres possibilités, mettant en jeu plus de deux sous–bandes. De ce point de vue, l'interaction électron–électron est très riche car de nombreuses combinaisons sont possibles. En contrepartie, l'interprétation des résultats est très délicate à mener.

Le but de cette partie est, dans un premier temps, de présenter les hypothèses permettant d'obtenir le taux de transition par interaction électron–électron. Ensuite, nous expliquerons comment l'inclure dans notre simulateur de Monte Carlo et les spécificités de ce mécanisme d'interaction.

4.1.2 Probabilité d'interaction

Nous nous plaçons dans les mêmes hypothèses que pour les autres mécanismes d'interaction, c'est–à–dire dans l'*approximation de Born*, et nous utilisons la *règle d'or de Fermi*. La simplification majeure de cette partie est que les bandes sont considérées comme paraboliques. Cette hypothèse est commode car elle permet d'obtenir une formulation analytique de la loi de conservation de l'énergie et de limiter la charge informatique. En pratique, elle se révèle acceptable pour le système de matériaux GaAs/AlGaAs à faible coefficient de non–parabolicité, mais plus délicate à justifier pour les matériaux à base d'antimoniures par exemple. C'est pourquoi nous verrons dans l'annexe F une méthode numérique permettant de prendre en compte la densité d'états de bandes non–paraboliques.

Dans ce travail, les effets de correction induits par le caractère répulsif de l'interaction électron–électron ne seront pas inclus [209]. Pour fixer les notations, on considère un électron *principal* dans l'état initial $|\mu\mathbf{K}\rangle$ d'énergie $E_\mu(\mathbf{K})$, subissant une interaction coulombienne avec un électron *partenaire*[2] $|\nu\mathbf{P}\rangle$. Les états finaux pour ces deux électrons sont, respectivement, $|\mu'\mathbf{K}'\rangle$ et $|\nu'\mathbf{P}'\rangle$. La figure 4.2 résume les notations adoptées tout au long de ce chapitre et du mémoire.

Selon la même démarche que pour les autres mécanismes d'interaction, l'élément de matrice du potentiel perturbateur coulombien $|\langle\mathbf{K},\mu,\mathbf{P},\nu|\hat{V}_{\mathrm{e/e}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')|\nu',\mathbf{P}',\mu',\mathbf{K}'\rangle|$ est calculé par la règle d'or de Fermi. Le potentiel coulombien dépend de la distance $|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ entre les deux

[2] Cette distinction entre les deux électrons est indue car contraire au principe d'*indiscernabilité* des particules dont l'origine est d'ordre purement quantique. Mais force est de constater qu'elle facilite la discussion. Nous y reviendrons dans ce chapitre quand nous aborderons le terme d'échange de spin.

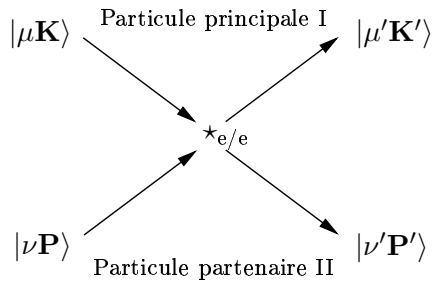


FIG. 4.2 – Notations utilisées pour décrire l'interaction coulombienne électron–électron par le potentiel coulombien $\hat{V}_{\mathrm{e/e}}$. Le prime désigne l'état final.

particules :

$$\hat{V}_{\mathrm{e/e}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = \frac{e^2}{4\pi\kappa_0\kappa_r}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \tag{4.2}$$

En sommant sur tous les états possibles $|\nu\mathbf{P}\rangle$ et $|\nu'\mathbf{P}'\rangle$ de l'électron partenaire, on montre (voir annexe B) que la densité de probabilité de transition électron–électron $|\mu\mathbf{K}\rangle \to |\mu'\mathbf{K}'\rangle$ par unité de temps a pour expression [210] :

$$\lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) = \frac{m_{\mathrm{e}}^*}{4\pi\hbar^3\mathcal{A}}\sum_{\nu,\nu',\mathbf{P}} f_\nu(\mathbf{P})\int_0^{2\pi}|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q,\psi,\omega_{\mathrm{d}})|^2\mathrm{d}\psi. \tag{4.3}$$

où m_{e}^* est la masse effective, $M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q,\psi,\omega_{\mathrm{d}})$ l'élément de transition, ψ l'angle entre $\mathbf{G} = \mathbf{P}-\mathbf{K}$ et $\mathbf{G}' = \mathbf{P}'-\mathbf{K}'$ et $\hbar\omega_{\mathrm{d}} \equiv E_\mu(\mathbf{K})-E_{\mu'}(\mathbf{K}')$ l'énergie échangée par la particule principale. La formule (4.3) diffère du facteur d'unité $(e^2/2\kappa_0\kappa_r)^2$ par rapport à la référence [210, équation (5)]. Nous faisons figurer la variable ω_{d} pour rappeler, qu'en toute généralité, l'élément de matrice de la transition est écranté dynamiquement. La conservation de l'énergie et du moment transverse s'écrit à l'aide des vecteurs d'onde relatifs $\mathbf{G}$ et $\mathbf{G}'$:

$$\mathbf{G}'^2 = \mathbf{G}^2 + \Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'}, \tag{4.4}$$

où l'on a défini la différence d'énergie potentielle par :

$$\Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'} = \frac{4m_{\mathrm{e}}^*}{\hbar^2}(E_\mu + E_\nu - E_{\mu'} - E_{\nu'}). \tag{4.5}$$

À l'aide de l'équation (4.4), on peut exprimer le vecteur d'onde échangé $\mathbf{Q}$ uniquement avec $\mathbf{G}$. On part de sa définition :

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{2}(\mathbf{G}-\mathbf{G}'), \tag{4.6a}$$

on injecte l'expression de G' pour aboutir à :

$$Q = \frac{1}{2}\left[2\mathbf{G}^2 + \Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'} - 2G\left(\mathbf{G}^2 + \Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'}\right)^{1/2}\cos\psi\right]^{1/2}. \tag{4.6b}$$

L'équation (4.3) est non–linéaire car elle contient la fonction de distribution de l'électron partenaire. Suivant la méthode de simulation utilisée, elle peut être calculée différemment. Dans la prochaine sous–section, nous allons voir comment la traiter par une méthode de Monte Carlo.

4.2 Mise en œuvre de l'interaction électron–électron dans le simulateur Monte Carlo

Le calcul de la probabilité électron–électron donnée par l'équation (4.3) est rendu difficile par le fait qu'elle fait intervenir la fonction de distribution de l'électron partenaire, qui est, rappelons le, l'inconnue de la simulation de Monte Carlo. En fait, la fonction de distribution intervient doublement dans l'interaction inter–porteurs : (i) par la fonction de distribution de l'électron partenaire $f_\nu(\mathbf{P})$; (ii) par l'intermédiaire du tenseur de polarisabilité, que nous introduirons dans le prochain chapitre. Pour l'instant, nous allons uniquement nous concentrer sur le problème posé par le point (i).

Dans ce paragraphe, nous décrivons tout d'abord les méthodes usuellement utilisées dans la littérature pour résoudre cette difficulté. Ensuite, nous précisons l'algorithme que nous avons effectivement développé.

4.2.1 Méthodes employées dans la littérature

Méthode analytique

S'inspirant des travaux de Takenaka *et al.* [211], Hess *et al.* ont calculé le taux d'interaction électron–électron pour un régime d'électrons chauds [212]. Ils font ainsi l'hypothèse d'une distribution de Maxwell–Boltzmann[3] dans l'équation (4.3), c'est–à–dire $f_\nu(\mathbf{K}) \simeq \exp\{[E_F - E_\nu(\mathbf{K})]/(k_B\theta_\nu)\}$, ce qui leur permet de continuer le calcul analytiquement. Cependant, cette méthode n'est pas générale et peut conduire à des résultats erronés lorsque la fonction de distribution s'écarte sensiblement de la distribution d'un gaz non–dégénéré. Cela peut être typiquement le cas lorsque des densités électroniques élevées sont considérées. En outre, il convient de définir avec soin la température électronique θ_ν employée pour définir la fonction Maxwellienne : doit–on utiliser la température de réseau ? Une température égale pour toutes les sous–bandes ? Autant de questions que nous discuterons lorsque nous aborderons le problème de l'écrantage hors d'équilibre dans un prochain chapitre.

Méthode auto–cohérente

La méthode de calcul des probabilités d'interaction inter–porteurs de manière auto–cohérente a été employée essentiellement dans les études des phénomènes transitoires de relaxation de porteurs photo–excités en volume [214]. Nous rappelons, tout d'abord, la façon de calculer la moyenne d'ensemble d'une grandeur $\mathcal{L}(\mathbf{K})$:

$$\langle \mathcal{L}(\mathbf{K}) \rangle = \mathcal{V} \int \mathrm{d}^p\mathbf{K}\mathcal{L}(\mathbf{K}) f(\mathbf{K}) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \mathcal{L}(K_i), \tag{4.7}$$

où l'indice i numérote les électrons et $\mathcal{V}$ est le volume de normalisation qui peut se réduire à une aire suivant la dimensionnalité p du gaz. Les probabilités d'interaction électron–électron peuvent donc être calculées à chaque pas de temps, en utilisant la *distribution* connue des

[3] Éventuellement on peut considérer une distribution Maxwellienne « déplacée » en définissant une vitesse moyenne de dérive v_D [213].

porteurs partenaires au pas de temps précédent [163] :

$$\lambda_{\mu\mu'}(K) = \frac{m_{\mathrm{e}}^*}{4\pi\hbar^3}\frac{1}{(2\pi)^2}\sum_{\nu,\nu'}\frac{1}{N_\nu}\sum_{i_\nu=1}^{N_\nu}\int_0^{2\pi}|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{K},\mathbf{P}_{i_\nu})|^2\mathrm{d}\psi, \tag{4.8}$$

où N_ν est le nombre de particules dans la sous–bande ν. Outre que le nombre de particules simulées doit être relativement grand, de manière à représenter correctement la distribution à tout instant, une telle implémentation n'est envisageable que dans un nombre limité de situations tant les ressources informatiques sont sollicitées. Utilisée dans les systèmes bidimensionnels, cette méthode entraîne un accroissement démesuré du temps de calcul lorsqu'on considère plusieurs dizaines de sous–bandes. C'est la raison pour laquelle nous nous sommes intéressés aux autres techniques basées sur des techniques de majoration/réjection.

Méthode de réjection

En 1988, Goodnick *et al.* [215], s'inspirant des travaux de Brunetti *et al.* [216], présentent une méthode de réjection/majoration pour inclure l'interaction électron–électron dans une simulation Monte Carlo. Leur méthode repose sur le choix adéquat d'un majorant de l'équation (4.3) et l'utilisation d'une technique de réjection, afin de prendre en compte la fonction de distribution de l'électron partenaire réellement rencontrée. Ils cherchent un maximum du terme $|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q,\psi)|^2$ de l'équation (4.3) qui soit *indépendant de* $\mathbf{P}$. Ainsi, la sommation de $f_\nu(\mathbf{P})$ sur $\mathbf{P}$ est remplacée par la densité électronique de sous–bande n_ν, elle même majorée par la densité électronique totale N_s. Pour obtenir le majorant de $|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q,\psi)|^2$, ils se placent dans le cas simplifié où seule la sous–bande fondamentale (notée I) contribue à l'écrantage du gaz. L'élément de matrice du potentiel écranté s'écrit alors :

$$V_{\mu\mu\mu\mu}^{\mathrm{ecr}}(Q) = \frac{e^2}{2\kappa_0\kappa_r}\frac{F_{\mu\mu\mu\mu}(Q)}{Q + S_{\mathrm{I}}F_{\mathrm{IIII}}(Q)}, \tag{4.9}$$

où S_{I} est le facteur d'écran et $F_{\mu\mu\mu\mu}(Q)$ le facteur de forme provenant du recouvrement spatial des fonctions d'onde selon $(O\hat{z})$. Ce terme étant majoré par 1, un majorant trivial de l'équation (4.9) est [215] :

$$V_{\mu\mu\mu\mu}^{\mathrm{ecr}}(Q) \leq \frac{e^2}{2\kappa_0\kappa_r S_{\mathrm{I}}}, \tag{4.10}$$

d'où le majorant pour l'interaction intra-sous–bande[4] :

$$\lambda_{\mu\mu}(\mathbf{K}) \leq \Lambda_\mu \equiv \frac{m_{\mathrm{e}}^* e^4}{16\hbar^3\kappa_0^2\kappa_r^2 S_{\mathrm{I}}^2}N_s. \tag{4.11}$$

Pour les interactions inter-sous–bandes $\lambda_{\mu\nu}(\mathbf{K})$, Goodnick *et al.* proposent une formule similaire. Cependant, ce choix de majorants n'est pas général et se révèle peu pratique pour trois raisons : (i) il dépend d'une formulation de l'écrantage et n'est pas adapté à l'écrantage multi-sous–bandes ; (ii) il néglige la symétrisation du potentiel due à l'indiscernabilité des électrons dans la collision ; (iii) certaines majorations se révèlent très larges (on pense ici par exemple à $\forall\nu$, $n_\nu \leq N_s$ pour les sous–bandes très peu peuplées) et peuvent induire des temps de calcul prohibitifs.

Pour toutes ces raisons, nous présentons, dans le paragraphe 4.2.3, la méthode que nous avons développée afin d'améliorer la majoration ci–dessus. Mais avant cela, nous introduisons le lecteur à l'interaction électron–électron d'*échange* due aux spins 1/2 des particules.

[4] L'équation (4.3) a été divisée par deux pour tenir compte des effets dûs au spin (voir l'annexe B).

4.2.2 Inclusion du terme d'interférence de spin

Interaction entre des fermions : terme d'« échange »

Dans la première partie de ce chapitre, nous avons uniquement considéré l'élément de matrice de l'interaction électron–électron pour des électrons de spins opposés, appelé terme *direct*. Au contraire, l'interaction pour des électrons de même spin comprend un terme direct et un terme d'*échange* [179]. À cause de l'indiscernabilité des particules, on ne peut pas distinguer les états finaux $|\mu'\mathbf{K}'\rangle$ et $|\nu'\mathbf{P}'\rangle$ des électrons. Pour tenir compte de cet effet, on montre que l'élément de matrice[5] de la transition électron–électron de l'équation (4.3) s'écrit (voir l'annexe B) [210, 217–220] :

$$\begin{aligned} |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q,Q',\omega)|^2 &= \frac{1}{2}\big[|V^{\text{ecr}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q,\omega_{\text{d}})|^2 + |V^{\text{ecr}}_{\mu\nu\nu'\mu'}(Q',\omega_{\text{echge}})|^2 \\ &- V^{\text{ecr}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q,\omega_{\text{d}})V^{\text{ecr}}_{\mu\nu\nu'\mu'}(Q',\omega_{\text{echge}})\big], \end{aligned} \tag{4.12}$$

où $V^{\text{ecr}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)$ est l'élément de matrice du potentiel coulombien écranté et $\mathbf{Q}'$ a la définition suivante :

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}' &= \mathbf{K} - \mathbf{P}', \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{G} + \mathbf{G}'), \end{aligned} \tag{4.13}$$

d'où

$$Q' = \frac{1}{2}\left[2\mathbf{G}^2 + \Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'} + 2G\left(\mathbf{G}^2 + \Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'}\right)^{1/2}\cos\psi\right]^{1/2}. \tag{4.14}$$

Le terme $\hbar\omega_{\text{echge}}$ est l'énergie d'échange, défini par l'expression suivante :

$$\hbar\omega_{\text{echge}} = E_\mu(\mathbf{K}) - E_{\nu'}(\mathbf{P}'). \tag{4.15}$$

L'élément de matrice donné par l'équation (4.12) est constitué de trois contributions. Les deux éléments de matrice $|V_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)|^2$ et $V_{\mu\nu\nu'\mu'}(Q')|^2$ sont appelés terme direct et d'échange, et notés $|M_{\text{d}}|^2$, $|M_{\text{echge}}|^2$ respectivement. Le troisième terme $M_{\text{d}} \times M_{\text{echge}}$ est le terme d'interférences dû à l'anti–symétrisation des fonctions d'onde. Voyons maintenant quelle peut être l'influence de ce terme sur le taux d'interaction électron–électron.

Importance du terme d'échange

On trouve dans la littérature quelques références [215, 221–224] traitant de l'effet de l'anti–symétrisation des fonctions d'onde sur la probabilité d'interaction électron–électron. Dans le cadre du transport en volume, Snoke [221] a montré que le terme d'échange $M_{\text{d}}M_{\text{echge}}$ était négligeable dans le cas d'un écrantage faible (par exemple aux faibles densités).

Dans le cadre d'un gaz électronique bidimensionnel, le problème est beaucoup plus complexe. Goodnick *et al.* [215], en multipliant le taux d'interaction par un facteur 1/2, considèrent en fait que $|M_{\text{d}}|^2$, $|M_{\text{echge}}|^2$ et $M_{\text{d}} \times M_{\text{echge}}$ sont du même ordre de grandeur et qu'il suffit de prendre en compte seulement le terme $|M_{\text{d}}|^2$. Kalna et Moško [224] ont validé cette approximation en vérifiant numériquement que, dans le cas où $\mu' = \nu'$, les trois termes de

[5] Dans cette écriture doit intervenir, en toute généralité, les termes de recouvrement des fonctions de Bloch *directs* $\mathcal{G}_{\mu\mu'}(\mathbf{K},\mathbf{K}')$, $\mathcal{G}_{\nu\nu'}(\mathbf{P},\mathbf{P}')$ et ceux du type *échange* en facteurs multiplicatifs des potentiels écrantés correspondants. Ces termes sont ici négligés.

l'équation (4.12) sont du même ordre de grandeur. Si cette approximation reste valable pour quelques cas précis, elle est impossible à généraliser, dans un composant multi-sous–bandes, à toutes les transitions électron–électron, si ce n'est de manière indue. Selon les indices μ, ν, μ' et ν', le terme direct peut être du type inter-sous–bandes alors que le terme d'échange est de type double intra-sous–bandes : c'est le cas par exemple pour l'élément de matrice M_{1221}.

En outre, le comportement du terme d'échange est fortement influencé par la valeur de $\mathbf{G}$ et donc des vecteurs $\mathbf{Q}, \mathbf{Q}'$, qui peuvent être radicalement différents. À déviations élevées, il a été montré que l'effet du terme d'échange est peu important [209]. Par contre, le comportement en $Q \to 0$ de l'élément de matrice symétrisé est difficile à prévoir, tous les facteurs de forme n'ayant pas les mêmes limites en $Q \to 0$. Ainsi, l'influence du terme d'échange reste délicate à cerner dans le cas général, du fait du grand nombre de sous–bandes et de cas possibles.

À titre illustratif, nous avons tracé sur la figure 4.3 l'élément de matrice M_{1212} en fonction du vecteur d'onde $G = |\mathbf{P} - \mathbf{K}|$ et de ψ. L'objectif de cette figure est simplement de mettre en évidence la complexité du terme d'échange.

4.2.3 Inclusion de l'interaction électron–électron dans la simulation Monte Carlo

Dans cette sous–section, nous allons décrire la méthode que nous avons développée. Après avoir présenté le choix d'un majorant de la probabilité d'interaction électron–électron, nous expliciterons l'algorithme du simulateur Monte Carlo et la détermination des états finaux à l'aide de techniques de réjection.

Calcul d'un majorant de la probabilité d'interaction

Nous prenons comme majorant de la probabilité électron–électron l'expression suivante :

$$\Lambda^{\mathrm{e/e}}_{\mu\mu'} = \frac{m^*_{\mathrm{e}}}{2\hbar^3} \sum_{\nu,\nu'} n_\nu \mathcal{M}^2_{\mu\nu\mu'\nu'}. \tag{4.16}$$

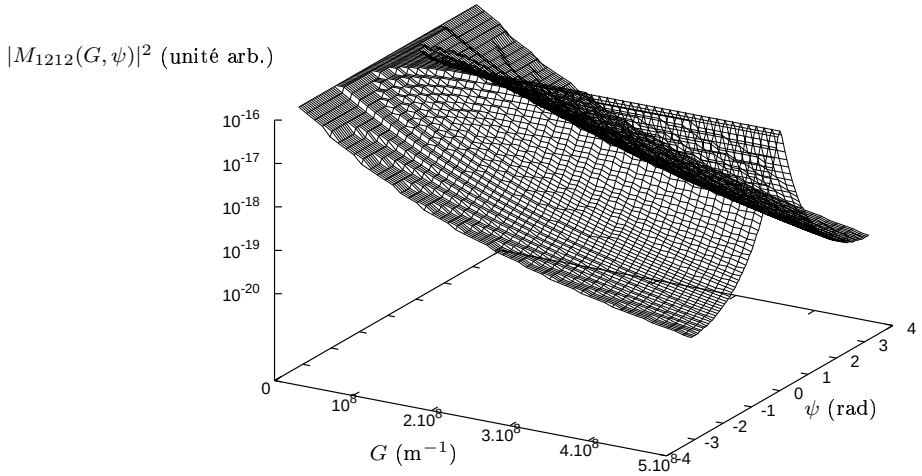
où $\mathcal{M}^2_{\mu\nu\mu'\nu'}$ est le maximum[6] du potentiel écranté défini par l'équation (4.12) et la densité électronique n_ν est donnée par l'équation (3.18a). Dans des conditions de transport hors d'équilibre, la densité électronique n_ν évolue. Pour régler ce problème, elle peut être majorée par la densité électronique totale N_s. Cependant, le majorant ainsi obtenu est très grand et conduit à de trop nombreuses réjections, coûteuses en temps de calcul. Il nous a semblé plus judicieux de réactualiser les majorants $\Lambda_{\mu\mu'}$ en cours de simulation. Nous reviendrons au paragraphe 5.4 sur l'algorithme correspondant.

La probabilité électron–électron est insérée dans le simulateur Monte Carlo décrit au chapitre 3 de manière semblable aux autres mécanismes d'interaction (voir figure 4.4).

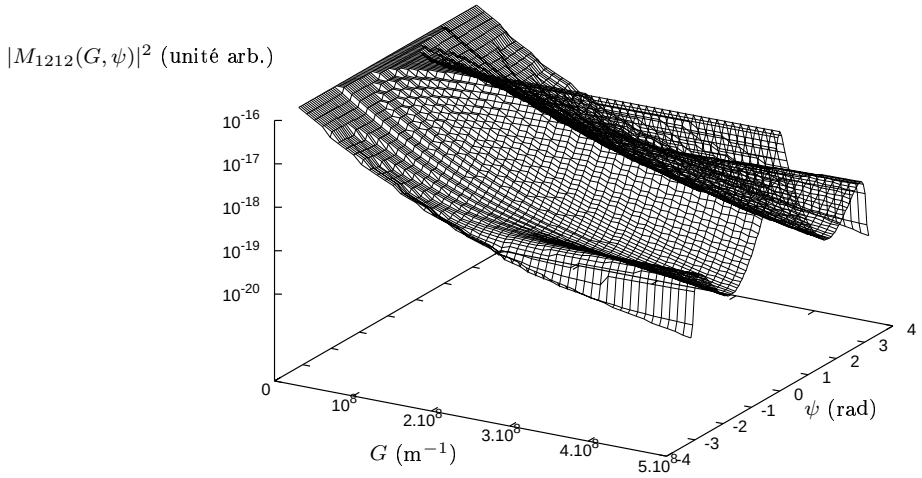
Notons pour finir que la probabilité réellement utilisée dans le programme est en fait *la moitié* de celle de l'équation (4.16). En effet, Moško *et al.* ont montré qu'on surestimait la probabilité d'un facteur deux, si on ne procédait pas de la sorte dans une simulation de Monte

[6] Si $\mathcal{V}_{\mu\nu\mu'\nu'}$ est le maximum de l'élément de matrice $|V^{\mathrm{ecr}}_{\mu\nu\mu'\nu'}|$, alors on peut prendre comme maximum de l'élément de transition symétrisé $|M_{\mu\nu\mu'\nu'}|^2$:

$$\mathcal{M}^2_{\mu\nu\mu'\nu'} = \frac{1}{2}\left[\mathcal{V}^2_{\mu\nu\mu'\nu'} + \mathcal{V}^2_{\mu\nu\nu'\mu'} + |\mathcal{V}_{\mu\nu\mu'\nu'}\mathcal{V}_{\mu\nu\nu'\mu'}|\right].$$



(a) Élément de matrice M_{1212} sans terme d'interférences (i.e. hypothèse de Goodnick *et al.* [215]).



(b) Élément de matrice M_{1212} donné par l'équation (4.12).

FIG. 4.3 – Tracé de l'élément de matrice $|M_{1212}(G,\psi)|^2$ avec et sans facteur d'échange. Ces calculs ont été réalisés dans un puits de GaAs de 300 Å, pour une densité électronique de $N_s = 10^{15}$ m^{-2} et une température $\theta = 77$ K. On suppose que seule la sous–bande fondamentale écrante les interactions coulombiennes et on considère la polarisabilité en $Q \to 0$.

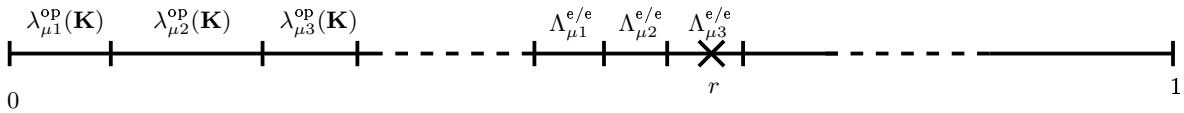


FIG. 4.4 – Détermination de la nature de l'interaction d'un électron dans l'état $|\mu\mathbf{K}\rangle$ par l'intermédiaire du tirage aléatoire d'un nombre r. L'inclusion des majorants de la probabilité électron–électron $\Lambda_{\mu\mu'}$ se fait de manière similaire aux autres probabilités (l'exposant *op* signifie Optique Polaire). La multiplication de chacune des probabilités par le pas de temps Δt n'est pas figurée par souci de clarté.

Carlo [213]. La raison en est que, l'électron partenaire dans la collision subit également une interaction électron–électron selon le majorant $\Lambda_{\mu\mu'}$, le facteur $1/2$ supplémentaire permettant alors d'éviter un « double comptage » des interactions.

Présentation de l'algorithme de Monte Carlo de l'interaction électron–électron

Procédons à l'« expérience par la pensée » d'une interaction électron–électron et voyons comment elle est mise en œuvre dans une simulation de Monte Carlo.

Imaginons donc que le programme ait tiré une interaction électron–électron pour une particule dans l'état $|\mu\mathbf{K}\rangle$ et d'énergie $E_\mu(\mathbf{K})$ suivant le taux $\Lambda_{\mu\mu'}$ donné précédemment. À ce stade, nous connaissons donc la sous–bande finale μ' de l'électron principal. Il reste donc à déterminer son vecteur d'onde final $\mathbf{K'}$ et l'angle de déviation $\beta = (\widehat{\mathbf{K},\mathbf{K'}})$. Il reste aussi et surtout à déterminer l'électron partenaire dans la collision, son état initial $|\nu\mathbf{P}\rangle$ et final $|\nu'\mathbf{P'}\rangle$. Voici alors l'enchaînement de l'algorithme :

1. L'électron principal subit l'effet du champ $\mathbf{E}$ durant la phase de vol libre, ce qui conduit à modifier son vecteur d'onde selon :

$$\Delta\mathbf{K} = -\frac{e}{\hbar}\mathbf{E}\Delta t. \tag{4.17}$$

   Ainsi, même si l'interaction électron–électron est refusée, cette translation dans l'espace des $\mathbf{K}$ modifiera son énergie, sa vitesse et sa position. Cette phase n'a pas lieu dans les lasers à cascade quantique, car le transport s'y fait dans la direction perpendiculaire.

2. On tire au hasard l'électron partenaire dans l'ensemble des particules représentatives du gaz d'électrons. Ce tirage aléatoire permet en fait de simuler la fonction de distribution de la particule partenaire $f_\nu(\mathbf{P})$ intervenant dans la probabilité électron–électron [Éq. (4.3)] ;

3. L'état initial $|\nu,\mathbf{P}\rangle$ de l'électron partenaire étant connu, on détermine la sous–bande finale ν' de cet électron, à l'aide d'un tirage aléatoire selon le « poids » relatif de chaque terme $\mathcal{M}^2_{\mu\nu\mu'\nu'}$ dans la somme (4.16). Ensuite, on évalue la quantité $\mathbf{G}^2 + \Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'}$. Si ce terme est négatif alors l'interaction est refusée. Cette vérification correspond à la conservation de l'énergie et du moment.

4. On détermine Q, Q' à l'aide des formules (4.6b) et (4.14). Ensuite, on tire de manière aléatoire un angle $\psi = (\widehat{\mathbf{G},\mathbf{G'}})$ uniformément entre 0 et 2π. On procède alors à la réjection sur l'intégrande $|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q,Q')|^2$ que nous avons majoré par $\mathcal{M}^2_{\mu\nu\mu'\nu'}$. Pour cela, on tire un nombre aléatoire r uniformément distribué entre 0 et 1. La probabilité

est rejetée[7] si la condition suivante n'est pas vérifiée :

$$r \times \mathcal{M}^2_{\mu\nu\mu'\nu'} < |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q, Q')|^2. \tag{4.18}$$

5. Supposons que le probabilité soit acceptée. En utilisant la loi de conservation de l'énergie [équation (4.4)] et l'angle ψ, on détermine le vecteur d'onde relatif $\mathbf{G}'$. De là, on utilise les deux relations vectorielles suivantes pour déterminer les vecteurs d'onde finaux des deux électrons :

$$\mathbf{K}' = (\mathbf{K} + \mathbf{P} - \mathbf{G}')/2, \tag{4.19a}$$

$$\mathbf{P}' = \mathbf{G}' + \mathbf{K}'. \tag{4.19b}$$

   Ces deux équations nous permettent également de déterminer les angles de déviations des deux électrons β et β' ;

6. On déduit de $\mathbf{K}'$, $\mathbf{P}'$, les énergies finales pour les deux électrons $E_{\mu'}(\mathbf{K}')$ et $E_{\nu'}(\mathbf{P}')$. Ces variations d'énergie induisent une modification de la vitesse et de la position parallèle, même si ces données ne sont pas utilisées dans le cas du transport perpendiculaire ;

7. Ayant la pleine connaissance des cases quantiques finales des deux électrons, on procède au principe d'exclusion de Pauli tel qu'il a déjà été présenté au paragraphe 3.2.1 par une méthode « type Lugli–Ferry » [192]. On rappelle que cette réjection correspond à l'hypothèse de non dégénérescence faite lors de l'évaluation de la probabilité : $f_{\mu'}(\mathbf{K}') \simeq 0$, $f_{\nu'}(\mathbf{P}') \simeq 0$.

La figure 4.5 résume l'algorithme qui vient d'être décrit sous la forme d'un organigramme.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exposé l'algorithme permettant d'inclure l'interaction électron–électron dans le simulateur Monte Carlo. Notre méthode, basée sur une technique de majoration/réjection, améliore les algorithmes de la littérature car elle ne fait aucune hypothèse sur le modèle d'écrantage. En outre, elle permet d'inclure le terme d'échange dû aux spins des électrons.

Dans le prochain chapitre, nous allons maintenant aborder un phénomène, intimement lié à l'interaction coulombienne, à savoir l'écrantage.

[7] Dans la littérature, l'électron principal subit ce qui est communément dénommé par l'expression de *self–scattering*, ou *auto–interaction*, c'est–à–dire pas d'interaction en fait.

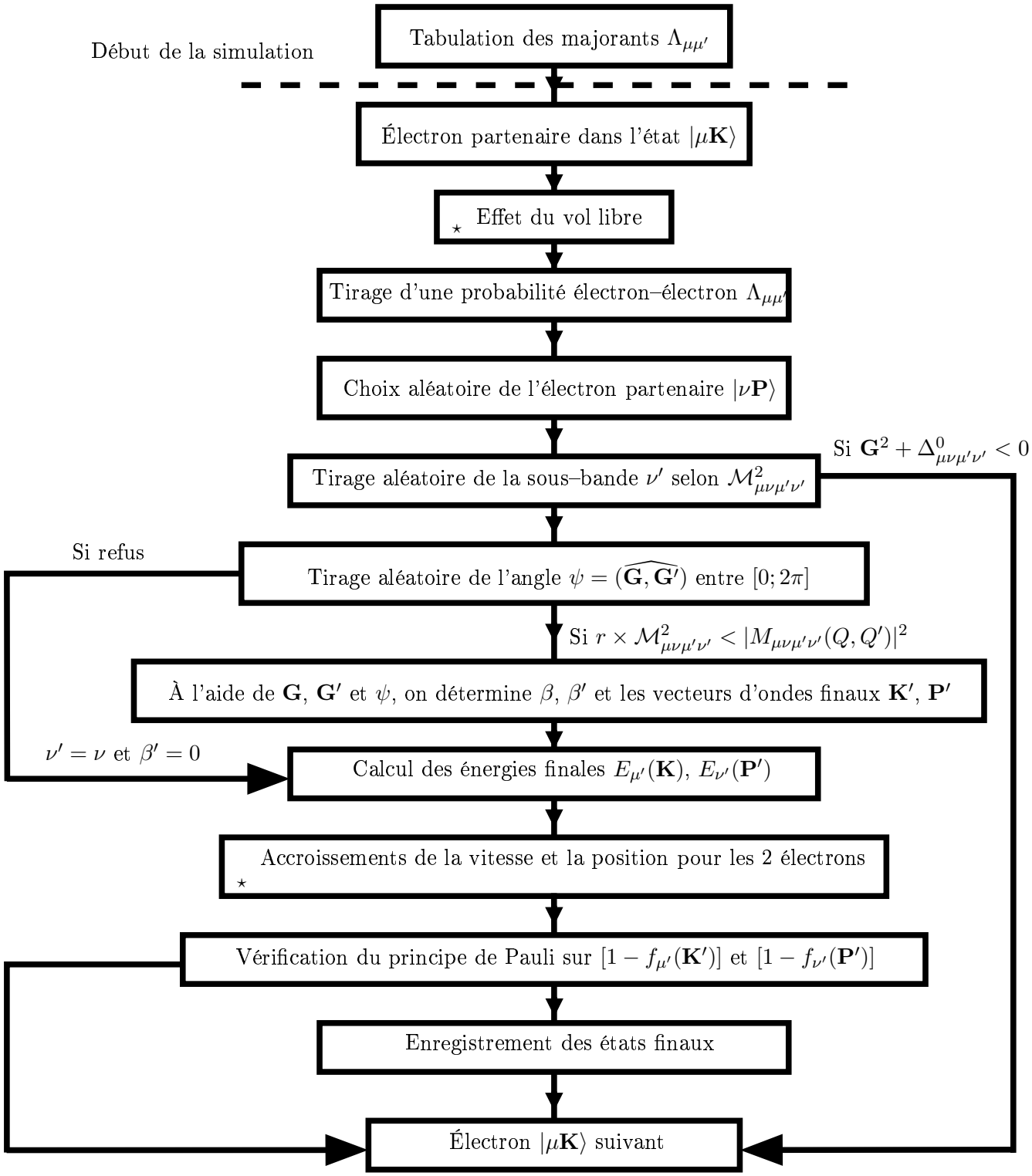


FIG. 4.5 – Organigramme de l'algorithme de l'interaction électron–électron dans la simulation de Monte Carlo. Les cases marquées du symbole ⋆ sont propres au transport parallèle et ne sont pas effectuées dans le cas du transport perpendiculaire dans les LCQ.

Chapitre 5

Écrantage bidimensionnel dans les hétérostructures

Introduction

Dans ce chapitre, nous introduisons le lecteur à la théorie de l'écrantage dans les gaz électroniques bidimensionnels. Nous procédons, tout d'abord, dans la section 5.1, à un rappel sur la notion de fonction diélectrique. Ensuite, la théorie de l'écrantage pour un gaz électronique bidimensionnel dans l'approximation de la phase aléatoire est exposée. Dans cette section, nous justifions également l'hypothèse retenue d'écrantage statique. Dans la section 5.2, nous présentons le calcul des éléments de matrice du potentiel nu. Leur évaluation peut–être très pénalisante en temps calcul, c'est pourquoi nous proposons une méthode plus « économe », basée sur l'utilisation de séries de Fourier. Dans la section 5.3, nous passons en revue les différents modèles de la littérature utilisés pour la polarisabilité, en nous attachant à bien en cerner les hypothèses et les domaines d'application. Afin de modéliser les interactions coulombiennes de manière complète, nous présentons, dans la section 5.4, le modèle d'écrantage multi-sous–bandes que nous avons développé. Celui–ci est appliqué sur un premier « véhicule test » pour valider les approximations retenues et le comparer aux modèles usuels de la littérature. Enfin, dans la section 5.5, nous concluons ce chapitre par la modélisation du tenseur de polarisabilité dans des conditions de transport hors d'équilibre.

5.1 Tenseur diélectrique bidimensionnel

5.1.1 Définition de la fonction diélectrique macroscopique $\kappa(\mathbf{q}, \omega)$

Rappel du cadre statique

La constante diélectrique $\kappa \equiv \kappa_r \kappa_0$ est une grandeur bien connue intervenant dans la description des phénomènes électrostatiques dans les matériaux. Elle permet de relier le champ électrique $\mathbf{E}$ au vecteur déplacement $\mathbf{D}$, qui traduit la redistribution des charges électriques à l'intérieur du matériau sous l'effet du champ électrique externe $\mathbf{E}$. L'unité de κ est le Farad/Mètre. L'équation suivante permet d'en préciser la définition :

$$\mathbf{D} = \underbrace{\kappa_0 \mathbf{E}}_{\mathrm{I}} + \underbrace{\mathbf{P}}_{\mathrm{II}} = \kappa_0 (1 + \chi) \mathbf{E} \equiv \kappa_0 \kappa_r \mathbf{E}. \tag{5.1}$$

Explicitons ces deux termes. Le champ électrique total résulte du champ électrique externe (terme I) et du champ électrique de réponse induit par le champ externe (terme II). Ce champ de réponse est caractérisé par la susceptibilité χ du matériau. Elle est obtenue en écrivant que la polarisation $\mathbf{P}$ résulte d'une réorientation microscopique des dipôles selon $\mathbf{E}$.

Cette équation appelle deux commentaires : (i) on remarque que la grandeur macroscopique κ_r dérive d'un phénomène microscopique supposé s'additionner de manière *linéaire*, qui est l'alignement des dipôles selon le champ appliqué ; (ii) la constante diélectrique κ_r représente la réponse des charges électriques $\mathbf{P}$ afin de s'opposer à l'action du potentiel externe[1] $\mathbf{E}$, considéré ici comme une perturbation du système. C'est cette formulation en terme de « réponse linéaire » que nous retrouverons par la suite, même dans le cas plus complexe où les états quantifiés interviennent dans l'écrantage.

Cadre général

L'expression de la constante diélectrique, telle qu'elle a été décrite au paragraphe précédent, repose sur l'hypothèse que les charges électriques du matériau considéré sont statiques. Or ce n'est généralement pas le cas et ce cadre électrostatique néglige de fait la mobilité du nuage de porteurs chargés, caractérisés par une pulsation ω et un moment $\mathbf{q}$. On généralise alors la constante diélectrique κ_r en une fonction diélectrique $\kappa(\mathbf{q},\omega)$ dans l'espace des coordonnées réciproques [62].

Nous rappelons maintenant les formules, largement détaillées dans la littérature [88, 90], définissant la fonction diélectrique $\kappa(\mathbf{q},\omega)$, ainsi que la fonction polarisabilité $\pi(\mathbf{q},\omega)$ à l'aide des transformées de Fourier de $\mathbf{D}$, $\mathbf{P}$ et $\mathbf{E}$:

$$\mathbf{D}(\mathbf{q},\omega) = \kappa(\mathbf{q},\omega)\cdot\mathbf{E}(\mathbf{q},\omega), \tag{5.2a}$$

$$\mathbf{P}(\mathbf{q},\omega) = \pi(\mathbf{q},\omega)\cdot\mathbf{E}(\mathbf{q},\omega). \tag{5.2b}$$

On peut aussi exprimer $\kappa(\mathbf{q},\omega)$ en fonction du potentiel total V_{tot}, du potentiel externe V_{ext} et du potentiel induit V_{ind} par cette perturbation. De manière analogue aux termes I et II de l'équation (5.1), le potentiel V_{tot} s'obtient comme la somme de V_{ind} et V_{ext}. L'utilisation de l'équation de Poisson fournit alors le résultat :

$$\kappa(\mathbf{q},\omega) = \frac{V_{\text{ext}}(\mathbf{q},\omega)}{V_{\text{tot}}(\mathbf{q},\omega)} = \frac{V_{\text{ext}}(\mathbf{q},\omega)}{V_{\text{ext}}(\mathbf{q},\omega)+V_{\text{ind}}(\mathbf{q},\omega)}. \tag{5.3}$$

Nous allons poursuivre ce chapitre en détaillant la fonction diélectrique $\kappa(\mathbf{q},\omega)$ pour un gaz électronique bidimensionnel. Nous verrons que le recouvrement des fonctions d'onde selon la direction de quantification intervient dans la formulation de l'écrantage. Nous essaierons de proposer des approximations raisonnables afin d'obtenir un modèle d'écrantage qui n'induit pas un temps calcul prohibitif, tout en conservant l'essentiel des caractéristiques physiques du problème.

5.1.2 Quelques généralités sur l'écrantage bidimensionnel

On considère le potentiel perturbatif externe, $\delta\hat{V}^{\text{ext}}$, dû à une interaction coulombienne, comme par exemple l'interaction électron–électron. Nous supposons que les porteurs peuvent

[1] Dans la suite de ce chapitre, nous utilisons indifféremment les notions de potentiel et champ reliées par l'équation $\mathbf{E} = -\mathbf{grad}\ V$

occuper un ensemble d'états quantiques $|\mu\mathbf{K}\rangle$, niveaux électroniques solutions de l'équation de BenDaniel–Duke (voir chapitre 3).

L'objectif est d'exprimer V^{ind} en fonction de δV^{ext} afin d'obtenir la relation entre V^{tot} et δV^{ext}, qui définit $\kappa(\mathbf{Q},\omega)$ [Éq. (5.3)]. Afin de mener ces calculs, on se place dans l'*approximation de la phase aléatoire* et on utilise la théorie des perturbations du premier ordre pour calculer les états quantiques du système perturbé $\hat{\mathcal{H}}_{\text{B}} + \delta\hat{V}^{\text{ext}}$. On peut ainsi montrer (voir annexe C) que le potentiel total V^{tot} est relié au potentiel perturbateur $\delta\hat{V}^{\text{ext}}$ par l'équation tensorielle suivante [161, 207, 223, 225–229] :

$$V^{\text{tot}}_{\nu\mu\nu'\mu'}(\mathbf{Q},\omega) = \delta V^{\text{ext}}_{\nu\mu\nu'\mu'}(\mathbf{Q}) + \sum_{\xi\xi'} \delta V^{\text{ext}}_{\nu\xi\nu'\xi'}(\mathbf{Q})\Pi_{\xi\xi'}(\mathbf{Q},\omega)V^{\text{tot}}_{\xi\mu\xi'\mu'}(\mathbf{Q},\omega). \tag{5.4}$$

Dans la suite de ce chapitre, pour reprendre les expressions usuellement utilisées dans la littérature, les notations seront ainsi modifiées : le potentiel total V^{tot} sera appelé *potentiel écranté* (noté V^{ecr}) et le potentiel extérieur δV^{ext} donnant naissance au phénomène de redistribution de charges sera dénommé *potentiel non écranté* ou *nu* (noté V^{nu}). L'analogue du terme de polarisation $\pi(\mathbf{q},\omega)$ de l'équation (5.2) est le tenseur de polarisabilité $\overline{\mathbf{\Pi}}(\mathbf{Q},\omega)$ caractérisant la réponse du système. Son expression est la suivante[2] [229] :

$$\Pi_{\xi\xi'}(\mathbf{Q},\omega) = -\frac{1}{\mathcal{A}}\sum_{\mathbf{K}} \frac{g_\xi f_\xi(\mathbf{K}) - g_{\xi'} f_{\xi'}(\mathbf{K}+\mathbf{Q})}{E_\xi(\mathbf{K}) - E_{\xi'}(\mathbf{K}+\mathbf{Q}) + \hbar\omega + \mathrm{i}0^+}, \tag{5.5}$$

où g_ξ est la dégénérescence de la sous–bande ξ. En réécrivant l'équation (5.4) sous la forme $\overline{\boldsymbol{V}}^{\text{ecr}} = [\overline{\boldsymbol{\kappa}}]^{-1}\,\overline{\boldsymbol{V}}^{\text{nu}}$, on obtient l'expression suivante pour le tenseur diélectrique d'un gaz électronique bidimensionnel :

$$\overline{\boldsymbol{\kappa}}(\mathbf{Q},\omega) = \overline{\mathbf{1}} - \overline{\boldsymbol{V}}^{\text{nu}}(\mathbf{Q},\omega)\cdot\overline{\mathbf{\Pi}}(\mathbf{Q},\omega), \tag{5.6}$$

où $\overline{\mathbf{1}}$ est le tenseur identité. Typiquement, afin d'obtenir le potentiel écranté $\overline{\boldsymbol{V}}^{\text{ecr}}$, une structure composée de dix sous–bandes requiert l'inversion d'une matrice diélectrique de dimension $10^4\times10^4$ pour tous les points du maillage $(\mathbf{Q},\omega)$. Le problème conduit, dans toute sa généralité, à des calculs excessivement lourds et longs, c'est pourquoi on cherche à le simplifier par des approximations raisonnables.[3]

Le reste de ce chapitre est organisé de manière à suivre les trois étapes logiques du calcul aboutissant à l'inversion du tenseur diélectrique [Éq. (5.6)] : dans un premier temps, nous expliciterons la méthode que nous développée afin de calculer rapidement les éléments de matrice du potentiel non–écranté. Puis, nous verrons les différents modèles de la polarisabilité utilisés dans la littérature. Enfin, dans une dernière section, nous aborderons l'inversion de la matrice diélectrique. Cependant avant cela, nous allons discuter rapidement l'hypothèse d'écrantage statique que nous avons adoptée.

[2]Pour simplifier l'écriture, on a supposé que le recouvrement des fonctions de Bloch pouvait être négligé. Dans le cas contraire il faudrait multiplier le second membre de l'équation (5.5) par le produit scalaire des fonctions de Bloch $\langle u_{\xi\mathbf{K}}|u_{\xi'\mathbf{K}+\mathbf{Q}}\rangle$ correspondant aux sous–bandes ξ et ξ'. On ferait alors apparaître un facteur de Bloch $\mathcal{G}_{\xi\xi'}(\mathbf{K},\mathbf{K}+\mathbf{Q})$.

[3]Il est à noter que lorsque le nombre de sous–bandes dépasse la soixantaine, les calculs sont « impossibles », car, ne serait–ce qu'à cause de l'allocation des éléments non–écrantés, la gestion de trop grandes plages de mémoire est irréalisable sur la plupart de nos ordinateurs.

5.1.3 Hypothèse d'écrantage statique

Dans ce travail, nous nous sommes uniquement intéressés à l'écrantage statique, i.e. en considérant l'expression (5.5) pour $\omega = 0$. L'écrantage dynamique est un problème particulièrement ardu, car la détermination de la polarisabilité $\Pi(Q, \omega)$ devient délicate à cause des pôles du dénominateur correspondants à des fréquences d'excitations collectives du gaz électronique, appelées *plasmons*. En général, l'évaluation de la polarisabilité pour ces fréquences implique le calcul d'une intégrale dans le plan complexe. Pour savoir si l'écrantage dynamique est effectif, on doit avoir un ordre de grandeur de la fréquence plasmon du gaz électronique, qui dépend de la dimensionnalité du système. Tandis que pour un gaz tridimensionnel, la fréquence plasmon $\omega_{\mathrm{P}}^{3\mathrm{D}}(q)$ peut être considérée comme indépendante du vecteur d'onde échangé q [$\omega_{\mathrm{P}}^2 \approx e^2 n_{3\mathrm{D}}/(\kappa_0 \kappa_\infty m^*)$], il n'en est pas de même pour un gaz bidimensionnel pour lequel la fréquence plasmon $\omega_{\mathrm{P}}^{2\mathrm{D}}(Q)$ est, en première approximation, proportionnelle[4] à $\sqrt{Q}$:

$$\omega_{\mathrm{P}}^{2\mathrm{D}}(Q \to 0) = \sqrt{\frac{e^2 N_s Q}{2\kappa_\infty \kappa_0 m^*}}. \tag{5.7}$$

On considère que, lors d'une interaction $|\nu\mathbf{K}\rangle \to |\nu'\mathbf{K}'\rangle$ avec l'échange d'énergie $\hbar\omega_{\mathrm{ex}}(Q) \equiv E_\nu(\mathbf{K}) - E_{\nu'}(\mathbf{K}')$, le gaz électronique a le temps de suivre l'excitation si $\omega_{\mathrm{P}}(Q) \gg \omega_{\mathrm{ex}}(Q)$. Dans ce cas, l'écrantage statique est une approximation raisonnable [199]. Dans la pratique, cette hypothèse est satisfaite dans le cas d'un gaz tridimensionnel, car la fréquence plasmon est constante et supérieure à la fréquence échangée. Cependant, elle peut ne plus être valable dans les gaz bidimensionnels pour les interactions mettant en jeu des faibles échanges d'énergie (i.e. $Q \to 0$). Dans ce cas, $\omega_{\mathrm{P}}^{2\mathrm{D}}(Q)$ peut être également très faible. Une formulation dynamique de l'écrantage devient alors nécessaire et peut mettre en évidence des phénomènes d'*anti–écrantage*.[5] Fischetti *et al.* ont, par exemple, montré que pour la probabilité sur phonon acoustique, l'écrantage dynamique pouvait conduire à une variation de la mobilité de 5 à 14 % [199]. De même, Lee *et al.* ont montré, que pour les probabilités électron–électron intra-sous–bandes pures, la non prise en compte de l'émission de plasmon pouvait conduire à une sous–estimation très importante des probabilités [207]. Cependant, l'écrantage dynamique induit un tel volume de calculs numériques que ce problème dépasse le cadre de ce travail. Nous pensons que, dans une première approximation, le caractère multi-sous–bandes des structures est de nature à influencer de manière plus significative la probabilité électron–électron que les questions d'écrantage dynamique. À noter que nous ferons également l'hypothèse que les électrons ne sont pas écrantés par les trous, supposés beaucoup plus lourds que les électrons.

Voyons maintenant la détermination des éléments de matrice du potentiel coulombien non–écranté et comment nous avons optimisé cette étape du calcul.

[4] L'expression proposée ici est valable dans le cas où une seule sous–bande est peuplée. Dans le cas contraire, la relation de dispersion de la fréquence plasmon se complique [229].

[5] En général l'élément écranté est inférieur à l'élément non–écranté. L'anti–écrantage donne lieu au phénomène inverse, c'est–à–dire à $V^{\mathrm{ecr}} > V^{\mathrm{nu}}$. Comme il se produit seulement pour certains vecteurs d'onde Q, la courbe présente des « pics », du fait principalement de l'émission de plasmons.

5.2 Calcul des éléments de matrice du potentiel coulombien non écranté

5.2.1 Définition

Dans le cadre de l'interaction électron–électron, le potentiel nu a pour expression [207] :

$$V^{\mathrm{nu}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q) = \frac{e^2}{2\kappa_0\kappa_r}\frac{F_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)}{Q}, \tag{5.8}$$

où $F_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)$ est le facteur de recouvrement spatial entre les quatre fonctions d'onde. Il s'écrit [215] :

$$F_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q) = \int_0^L \mathrm{d}z \int_0^L \mathrm{d}z' \varphi_\mu(z)\varphi_\nu(z')\mathrm{e}^{-Q|z-z'|}\varphi^*_{\mu'}(z)\varphi^*_{\nu'}(z'). \tag{5.9}$$

À titre d'exemple, ce facteur de recouvrement est représenté en figure 5.1 pour différents indices de sous–bandes. Ces calculs ont été effectués dans un puits de 300 Å de GaAs entre deux barrières de 500 Å d'$Al_{0,3}Ga_{0,7}As$. Essayons de classer les facteurs de forme selon leur amplitude, ainsi nous aurons une idée des transitions électron–électron les plus fréquentes :

- Les facteurs de recouvrement des transitions *intra-sous–bandes pures*, par exemple F_{1111}, valent 1 en $Q = 0$ car les fonctions d'onde sont normées ;
- Viennent ensuite les facteurs de recouvrement *double intra-sous–bandes*, type $F_{\mu\nu\mu\nu}$, pour lesquels les deux électrons restent dans leurs sous–bandes initiales. Ces éléments de matrice non–écranté correspondent à des interactions électron–électron pour lesquelles les populations des sous–bandes μ et ν restent inchangées. Ces facteurs de forme valent aussi 1 en $Q = 0$. Ces éléments double intra-sous–bandes sont voisins des éléments intra-sous–bandes purs et d'un ordre de grandeur supérieurs par rapport aux plus importants des autres facteurs de forme ;
- Par ordre décroissant, on trouve ensuite les facteurs de forme du type $F_{\mu\nu\nu\mu}$ pour lesquels les électrons échangent leur sous–bande, la variation de population par sous–bande restant nulle.[6] Cependant, ces facteurs de forme s'annulent en $Q = 0$ et les transitions correspondantes sont donc moins fréquentes ;
- L'ensemble des autres facteurs n'a pas de comportement remarquable : ils s'annulent tous en $Q = 0$ de par l'orthogonalité des fonctions d'onde. À cause de l'« éloignement » des fonctions ou d'effets d'interférences de phase, certains facteurs de recouvrement sont négligeables, voire même peuvent prendre des valeurs négatives (voir figure 5.8). En outre, ces facteurs de forme correspondent à des transitions pour lesquelles un échange d'énergie potentielle en énergie cinétique (terme $\mathbf{G}^2 + \Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'}$) rend la probabilité beaucoup moins élevée avec, en outre, des facteurs de forme différant de plus de trois ordres de grandeur par rapport à ceux des intra-sous–bandes purs.

5.2.2 Décomposition en série de Fourier

Le calcul des éléments nus par l'équation (5.9) implique une intégrale double sur l'espace, dont l'évaluation directe est coûteuse. Comme elle doit être répétée de nombreuses fois, il est

[6] Pour ces transitions, le terme $\Delta^0_{\mu\nu\mu\nu}$ est également nul. Rappelons qu'il intervient au dénominateur du potentiel nu [Éq. (5.8)] et donc qu'il est susceptible de diminuer la probabilité électron–électron.

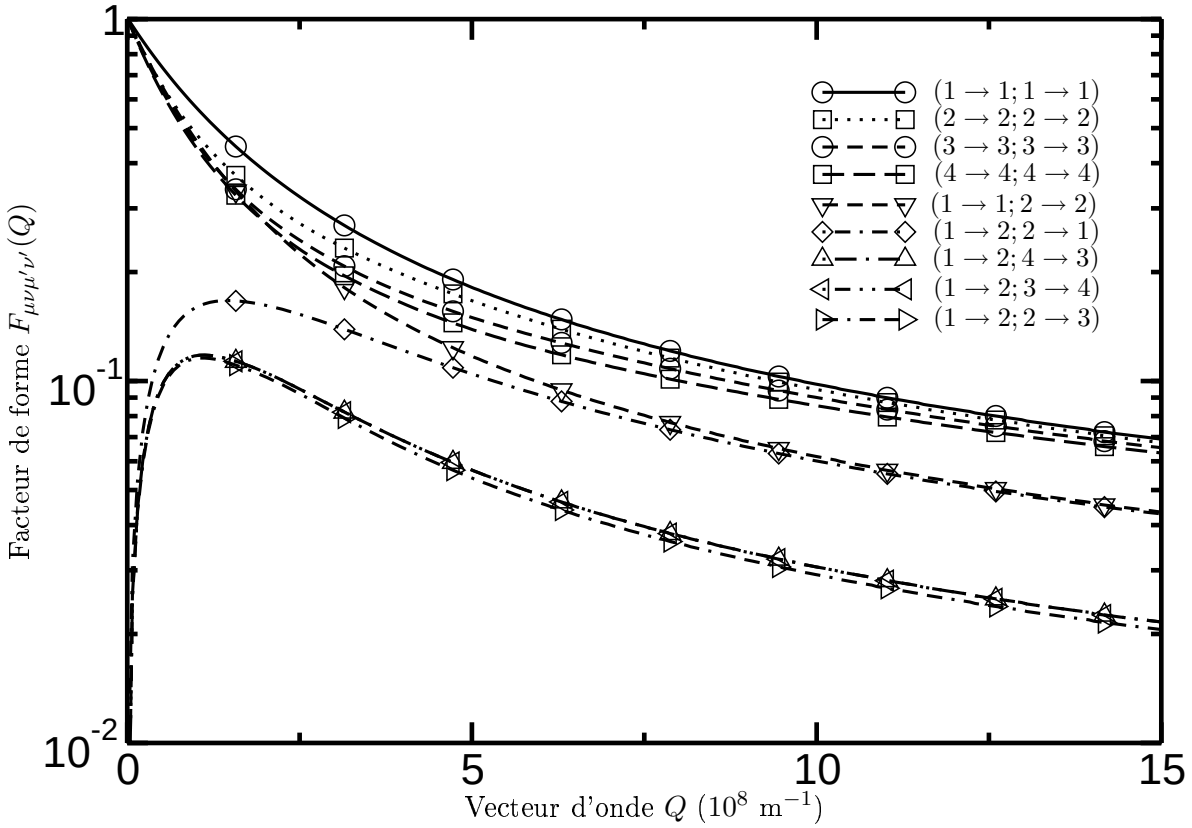


FIG. 5.1 – Facteurs de recouvrement électron–électron en fonction du vecteur d'onde échangé Q en échelle semi–logarithmique.
La structure utilisée pour ces calculs est un puits de 300 Å de GaAs entre deux barrière de 500 Å d'$Al_{0,3}Ga_{0,7}As$.

nécessaire d'accélérer significativement cette évaluation. Dans ce but, nous décomposons les *produits de fonctions d'onde* $\Xi_{\mu\mu'}(z) = \varphi_\mu(z)\varphi^*_{\mu'}(z)$ en série de Fourier :

$$\Xi_{\mu\mu'}(z) \simeq \sum_{\sigma=-N_{\mathrm{H}}}^{N_{\mathrm{H}}} \gamma_\sigma^{\mu\mu'} \exp(\mathrm{i}\sigma k_0 z), \tag{5.10}$$

où N_{H} est le nombre d'harmoniques retenues, $\gamma_\sigma^{\mu\mu'}$ le σ–ième coefficient de Fourier et $k_0 = 2\pi/L$. Réécrivant $F_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)$ [Éq. (5.9)] à l'aide de la décomposition en séries de Fourier de $\Xi_{\mu\mu'}(z)$ et $\Xi_{\nu\nu'}(z)$, on montre (voir annexe D) que le calcul du potentiel nu peut se réduire à l'évaluation de cinq simples sommes S_j sur l'indice d'harmonique σ :

$$V^{\mathrm{nu}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q) \simeq \frac{e^2}{2\kappa_0\kappa_r Q}\left[S_1^{\mu\nu\mu'\nu'} + (\mathrm{e}^{-QL}-1)(S_2^{\mu\mu'}S_2^{\nu\nu'} + S_3^{\mu\mu'}S_3^{\nu\nu'})\right], \tag{5.11}$$

Grâce à cette méthode, le temps calcul nécessaire à la détermination de l'ensemble des éléments non–écrantés reste raisonnable, même s'il est en général dix à cent fois plus important que celui nécessaire à la résolution des équations de Schrödinger et Poisson. Le lecteur intéressé par le gain espéré, ainsi que par les détails numériques sur la décomposition en séries de Fourier, pourra consulter l'annexe D. En particulier, nous montrons que pour une structure typique de laser à cascade quantique, le gain obtenu par notre méthode pour le calcul d'un facteur $F_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)$ s'établit aux alentours de 10^4.

5.3 Modélisation de la polarisabilité $\Pi(\mathbf{Q})$

La deuxième étape, après le calcul des éléments non–écrantés, est l'évaluation de tout ou partie du tenseur de polarisabilité $\overline{\mathbf{\Pi}}(Q)$. Le calcul complet des éléments de ce tenseur [Éq. (5.5)], en tenant compte de la densité d'états de bandes non–paraboliques, nécessite d'évaluer la double intégrale suivante :

$$\Pi_{\nu\nu'}(\mathbf{Q}) = -\frac{1}{2\pi^2}\frac{m^*_\nu}{\hbar^2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\Upsilon\int_0^\infty \gamma'_\nu(\varepsilon)\frac{f_\nu(\varepsilon)-f_{\nu'}(\varepsilon')}{E_\nu+\varepsilon-E_{\nu'}-\varepsilon'}\mathrm{d}\varepsilon, \tag{5.12}$$

où Υ est l'angle entre $\mathbf{K}$ et $\mathbf{Q}$. Le terme ε' s'exprime en fonction de $\mathbf{Q}$ et Υ. Avec la relation de dispersion $\gamma_\nu(\varepsilon)$ donnée par l'équation (3.17), on a :

$$\begin{aligned}\varepsilon'(\mathcal{Q}_{\nu'} + \langle\alpha\rangle_{\nu'}\varepsilon') &= \frac{\hbar^2(\mathbf{K}+\mathbf{Q})^2}{2m^*_{\nu'}},\\ &= \frac{m^*_\nu}{m^*_{\nu'}}[\varepsilon(\mathcal{Q}_\nu + \langle\alpha\rangle_\nu\varepsilon)] + \frac{\hbar^2\mathbf{Q}^2}{2m^*_{\nu'}}\\ &+ \frac{\hbar\sqrt{2m^*_\nu}}{m^*_{\nu'}}[\varepsilon(\mathcal{Q}_\nu + \langle\alpha\rangle_\nu\varepsilon)]^{1/2}Q\cos\Upsilon.\end{aligned} \tag{5.13}$$

Dans la suite de cette partie, lorsque nous ferons référence à un calcul numérique du tenseur de polarisabilité, nous supposerons que la fonction de distribution suit une statistique de Fermi–Dirac :

$$f_\nu(\varepsilon) = \frac{1}{1+\exp\left(\dfrac{E_\nu+\varepsilon-E_F}{k_B\theta_\nu}\right)}. \tag{5.14}$$

où θ_ν est la température électronique de la sous–bande ν. Pour correctement discrétiser l'espace des phases, nous avons pris un maillage de 200 points en Υ et d'au moins 1000 points en énergie ε. Le calcul de $\overline{\mathbf{\Pi}}(Q)$ est relativement coûteux en temps CPU car il nécessite l'évaluation d'une double intégrale, c'est–à–dire une sommation menée sur un double maillage ε et Υ et ce pour tous les triplets (Q, ν, ν').

Dans ce paragraphe, nous allons étudier et comparer les différents modèles de la polarisabilité fréquemment utilisés dans la littérature. À cette occasion, nous discuterons également de l'influence de la non–parabolicité.

5.3.1 Modèle de la faible déviation

Cas des éléments diagonaux

Cette hypothèse consiste à considérer les faibles déviations et donc à étudier l'écrantage[7] lorsque $Q \to 0$. On peut alors faire les approximations suivantes (voir l'annexe E et la référence [88]) :

$$f_\nu(\mathbf{K}+\mathbf{Q}) - f_\nu(\mathbf{K}) \simeq \mathbf{Q}\cdot\nabla E_\nu(\mathbf{K})\frac{\partial f_\nu}{\partial E_\nu}, \tag{5.15a}$$

$$E_\nu(\mathbf{K}+\mathbf{Q}) - E_\nu(\mathbf{K}) \simeq \mathbf{Q}\cdot\nabla E_\nu(\mathbf{K}). \tag{5.15b}$$

Ainsi, l'élément diagonal de la polarisabilité a pour expression :

$$\begin{aligned}\Pi_{\nu\nu}(Q\to 0) &\simeq -\frac{\partial n_\nu}{\partial E_\nu},\\ &= \rho_\nu[\mathcal{Q}_\nu\mathcal{F}_{-1}(\eta_\nu) + 2\langle\alpha\rangle_\nu k_B\theta_\nu\mathcal{F}_0(\eta_\nu)],\\ &= \frac{n_\nu}{k_B\theta_\nu}\frac{\mathcal{Q}_\nu\mathcal{F}_{-1}(\eta_\nu) + 2\langle\alpha\rangle_\nu k_B\theta_\nu\mathcal{F}_0(\eta_\nu)}{\mathcal{Q}_\nu\mathcal{F}_0(\eta_\nu) + 2\langle\alpha\rangle_\nu k_B\theta_\nu\mathcal{F}_1(\eta_\nu)}.\end{aligned} \tag{5.16}$$

Dans la littérature sur l'écrantage, $\Pi_{\nu\nu}$ est appelé *facteur d'écran* et noté S_ν [230]. Le facteur d'écran dépend des paramètres n_ν, θ_ν et η_ν décrivant la fonction de distribution du gaz électronique de la sous–bande ν. Les cas extrêmes de gaz dégénéré et non dégénéré, où les fonctions de Fermi $\mathcal{F}_\lambda$ ont des simplifications bien connues, permettent de dégager deux types d'approximations fréquemment utilisées dans la littérature : (i) l'approximation de *Debye–Hückel* pour les gaz non dégénérés ; (ii) l'approximation de *Thomas–Fermi* pour les gaz dégénérés. Bien que, dans les lasers à cascade quantique, le gaz électronique soit le plus souvent non dégénéré, dans un désir de généralité, nous donnons également le cas extrême de gaz dégénéré.

(i) Dans l'hypothèse de Debye–Hückel, correspondant au gaz non dégénéré, le facteur d'écran a pour expression :

$$S_\nu \simeq \frac{n_\nu}{k_B\theta_\nu}. \tag{5.17}$$

Cette expression est valable que les bandes soient paraboliques ou non. C'est donc un régime particulièrement intéressant qui, moyennant une définition convenable de θ_ν, est relativement aisé à décrire.

(ii) Dans l'hypothèse de Thomas–Fermi, correspondant au gaz dégénéré, S_ν s'écrit :

$$S_\nu \simeq \rho_\nu\left(\mathcal{Q}_\nu^2 + \frac{4\langle\alpha\rangle_\nu n_\nu}{\rho_\nu}\right)^{1/2}. \tag{5.18}$$

[7] Par analogie avec le cas classique, cela consiste à se placer « loin » du centre diffuseur (impureté ou électron), i.e., à considérer que la distance entre les deux charges $\mathbf{r}\to\infty$.

Dans le cas où le matériau est à bandes paraboliques ($\langle\alpha\rangle_\nu = 0$), on constate que le facteur d'écran S_ν des sous–bandes peuplées est *constant* et indépendant de la température ainsi que de la densité électronique. Ceci est compréhensible car, dans le cas de forte dégénérescence, les particules occupent toute la « sphère de Fermi » et donc l'équation (5.16) se réduit simplement à $S_\nu = \rho_\nu$. La non–parabolicité introduit une petite correction et augmente (en valeur absolue) l'effet de l'écrantage.

Par ailleurs, il est remarquable de constater, qu'au facteur $e^2/2\kappa_0\kappa_r$ près,[8] on retrouve la définition du facteur d'écran S_ν obtenue par une méthode différente, due à Stern *et al.* [88, 93, 230, 231].

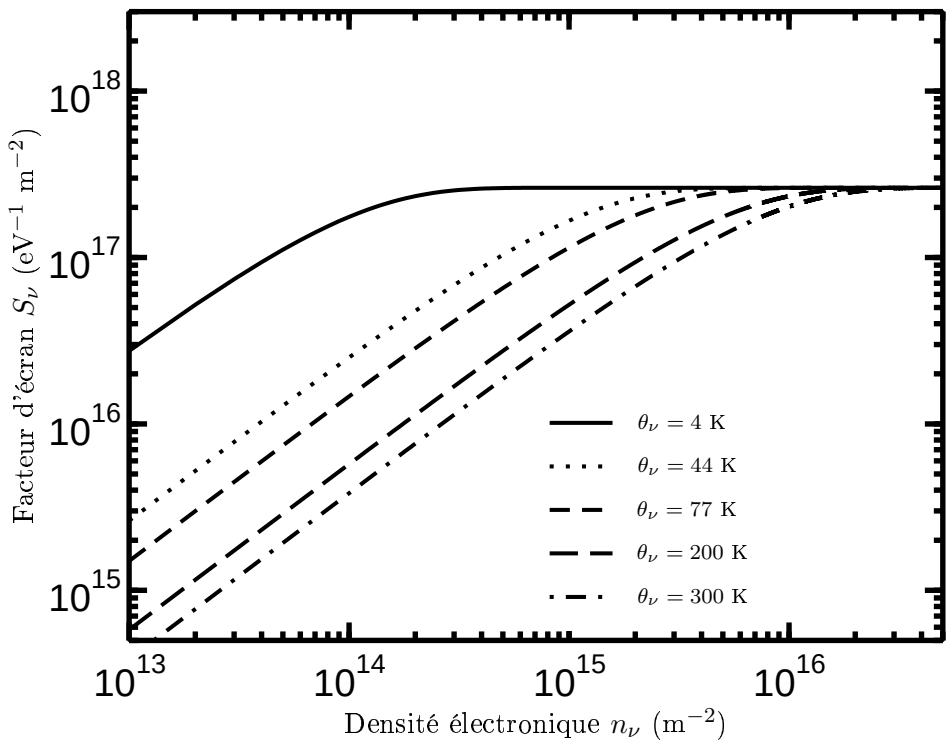


FIG. 5.2 – Tracé en échelle logarithmique du facteur d'écran en fonction de la densité pour différentes températures de sous–bande dans l'hypothèse des bandes paraboliques.
La structure est celle utilisée pour le calcul de la figure 5.1.

Le facteur S_ν est d'une grande importance, car il permet d'apprécier qualitativement l'influence de l'écrantage sur les interactions coulombiennes en fonction des différents paramètres, notamment selon la température et la densité électronique. Son tracé, en fonction de la densité électronique et pour différentes températures de sous–bande, est reporté en figure 5.2 dans l'hypothèse de bandes paraboliques. On remarque que, pour les densités électroniques $\gtrsim 10^{16}$ m^{-2}, le facteur d'écran tend à saturer. On constate également l'influence de la température pour les faibles densités électroniques, inférieures ou voisines de 5×10^{14} m^{-2} : par exemple pour une densité électronique de 10^{14} m^{-2}, le facteur d'écran évolue fortement entre 4 K et 300 K, passant de $\simeq 1{,}8 \times 10^{17}$ eV^{-1} m^{-2} à $3{,}8 \times 10^{15}$ eV^{-1} m^{-2}. Or, ce terme inter-

[8] Par ce biais on obtient une grandeur homogène à un vecteur d'onde, i.e., ayant comme unité le m^{-1}. Dans la suite de ce chapitre, on indiquera à l'aide d'un tilde $\widetilde{\Pi}$ lorsqu'on multiplie Π par la constante $e^2/2\kappa$.

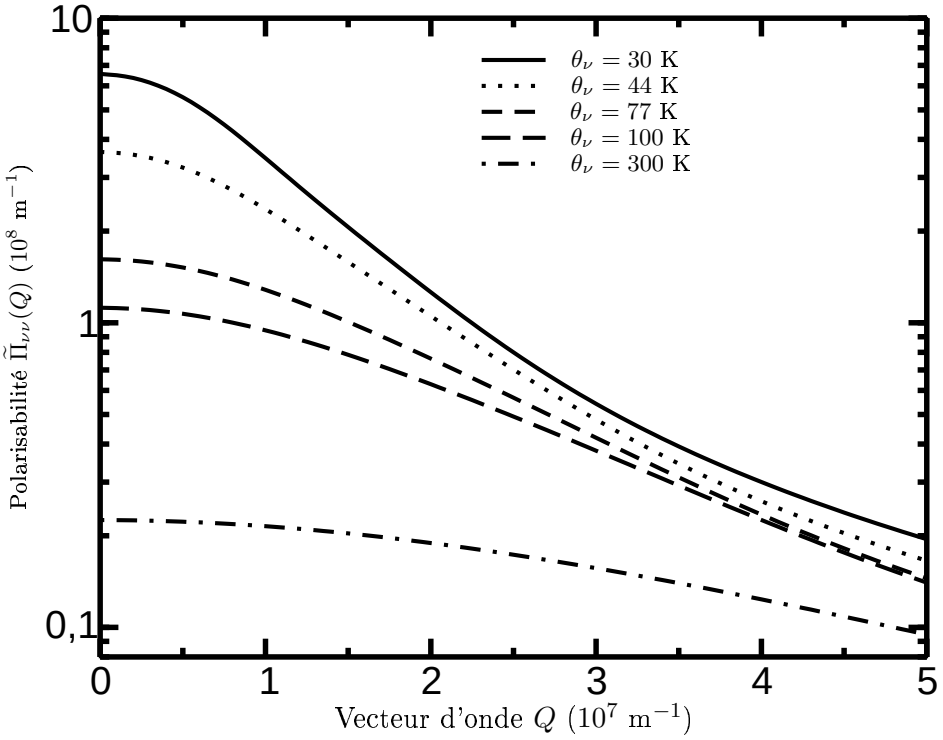


FIG. 5.3 – Tracé en échelle semi-logarithmique de la polarisabilité $\widetilde{\Pi}_{\nu\nu}$ obtenue par un calcul numérique en fonction du vecteur Q pour différentes températures de sous–bande θ_ν.
La densité surfacique est $N_s = 10^{14}$ m^{-2}. La structure est celle utilisée pour le calcul de la figure 5.1.

vient par son carré au dénominateur des probabilités électron–électron, ce qui rend celles–ci très sensibles à la température pour cette gamme de densités.

Pour visualiser ce phénomène, nous présentons sur la figure 5.3 un élément diagonal du tenseur de polarisabilité en fonction du vecteur d'onde Q pour différentes températures et pour une densité surfacique de $N_s = 10^{14}$ m^{-2}. Comme pour le tracé des facteurs de forme, la structure considérée ici est un puits de 300 Å entouré de deux barrières de $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$ de 500 Å. On constate clairement l'évolution d'un facteur ~ 50 entre 30 K et 300 K. Bien entendu, cette évolution a des répercussions importantes sur le pas de temps des simulations, puisque le total des probabilités doit rester inférieur à un certain seuil.

Dans le but de vérifier la pertinence des approximations de Debye–Hückel et de Thomas–Fermi, on a représenté en figure 5.4 les facteurs d'écran obtenus sous ces deux hypothèses ainsi que le tenseur calculé de manière numérique pour différentes températures et pour une densité surfacique de $N_s = 10^{15}$ m^{-2}. Dans les quatre cas, on vérifie que le facteur d'écran obtenu dans l'hypothèse des faibles déviations « tangente » en $Q \to 0$ celui obtenu par un calcul purement numérique. Comme attendu, l'hypothèse de gaz dégénéré est bien vérifiée à basse température pour $\theta = 10$ K, puisque c'est l'approximation de Thomas–Fermi qui est la plus pertinente. À cette température, il y a un facteur quatre entre les facteurs d'écran obtenus par Debye–Hückel et par Thomas Fermi. Par contre à température plus élevée, c'est l'approximation de Debye–Hückel qui se révèle être la plus adéquate.

Cas des éléments non–diagonaux

Dans le cas de bandes paraboliques et en supposant que la fonction de distribution est à symétrie cylindrique, les éléments non–diagonaux du tenseur de polarisabilité ont pour expression [207] :

$$\Pi_{\nu\mu}(Q \to 0) = \frac{n_\mu - n_\nu}{E_\nu - E_\mu}. \tag{5.19}$$

5.3.2 Formule de Maldague

P. Maldague [232] a montré que l'on pouvait déduire de la polarisabilité à température nulle, la polarisabilité pour toute température θ_ν, en utilisant une écriture sous forme intégrale de la fonction de Fermi–Dirac :

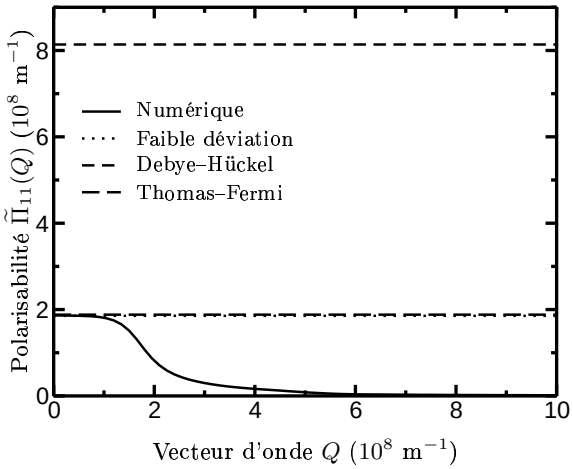
$$\Pi_{\nu\nu}(Q, \theta_\nu) = \int_0^\infty \frac{\Pi^0_{\nu\nu}(Q, \theta_\nu = 0, \mu_F)}{4k_B\theta_\nu \cosh^2[(E_F - E_\nu - \mu_F)/2k_B\theta_\nu]} \mathrm{d}\mu_F. \tag{5.20}$$

La polarisabilité $\Pi^0_{\nu\nu}$ à température nulle a une expression analytique en bandes paraboliques, quelque soit la dimensionnalité du gaz. Pour un gaz de porteurs bidimensionnels, elle s'écrit [233] :

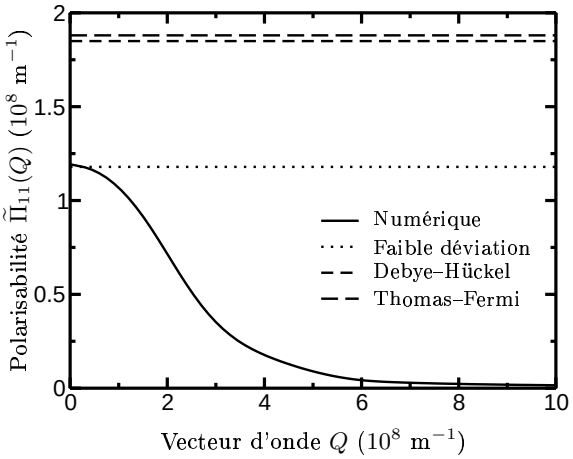
$$\Pi^0_{\nu\nu}(Q, 0, \mu_F) = \rho_\nu \left[1 - \Theta(Q - 2K_F)\sqrt{1 - \left(\frac{2K_F}{Q}\right)^2} \right], \tag{5.21}$$

où K_F est le vecteur d'onde de Fermi et Θ la fonction de Heaviside. À notre connaissance, il n'existe pas d'expression faisant intervenir la non–parabolicité. Pour $\theta = 0$ K, $K_F = \sqrt{2\pi n_\nu}$, pour les autres températures K_F est défini par $\mu_F = E_\nu(\mathbf{K}_F)$.

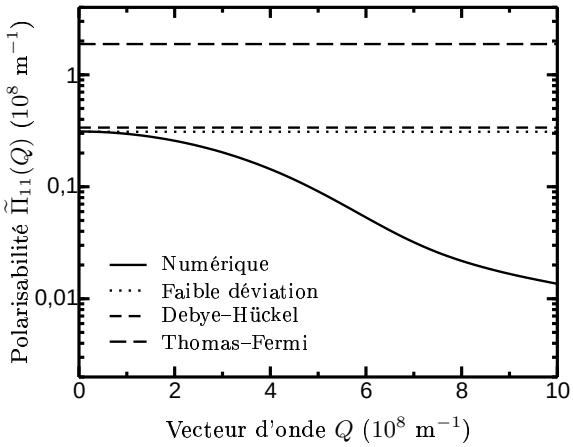
Le tenseur de polarisabilité est représenté en figure 5.5 pour différentes températures de sous–bande, en supposant une loi parabolique entre μ_F et K_F. On remarque que l'écrantage



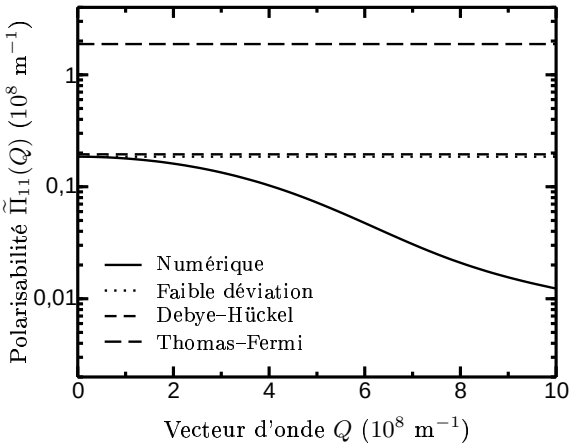
(a) Température de 10 K. Les courbes obtenues par le modèle de la faible déviation et de Thomas–Fermi sont confondues.



(b) Température de 44 K.



(c) Température de 200 K. La courbe est en échelle semi–logarithmique. Les courbes obtenues par le modèle de la faible déviation et de Debye–Hückel sont presque confondues.



(d) Température de 300 K. La courbe est en échelle semi–logarithmique. Les courbes obtenues par le modèle de la faible déviation et de Debye–Hückel sont presque confondues.

FIG. 5.4 – Comparaison pour différentes températures de la polarisabilité de la sous–bande fondamentale obtenue par intégration numérique (trait plein), sous l'hypothèse de la faible déviation (trait pointillé), par l'approximation de Debye–Hückel (trait tireté court) et celle de Thomas–Fermi (trait tireté long).
La densité électronique totale est fixée à $N_s = 10^{15}$ m^{-2}. La structure est celle utilisée pour le calcul de la figure 5.1.

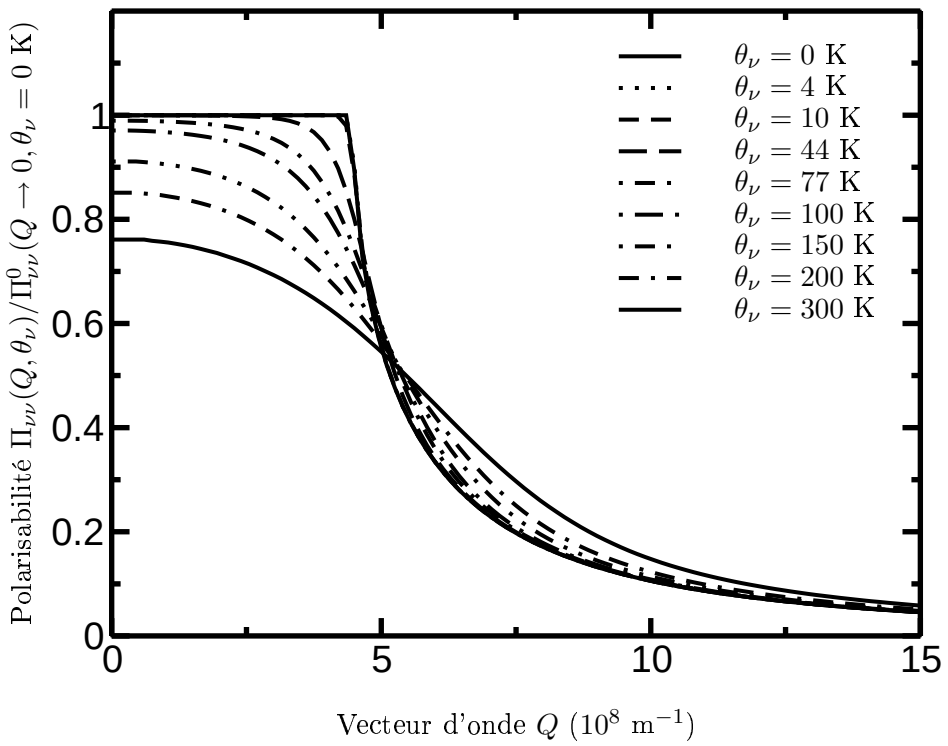


FIG. 5.5 – Application de la formule de Maldague au calcul de $\Pi_{\nu\nu}(Q, \theta_\nu)$ pour différentes températures de sous–bande θ_ν. La polarisabilité a été normalisée par rapport à $\Pi^0(Q \to 0, \theta_\nu = 0$ K).

reste actif jusqu'au vecteur d'onde $Q \simeq 2K_F$. Lorsque la température augmente, on constate que le facteur d'écran s'« étale » autour du vecteur $Q = 2K_F$. Ceci est dû au fait que la fonction de distribution f_ν à température élevée s'étale également autour de l'énergie du niveau de Fermi relatif $E_F - E_\nu$. L'écrantage n'est donc plus induit que par les électrons appartenant à la sphère de Fermi (voir le commentaire sur le facteur d'écran dans l'hypothèse de Thomas–Fermi). La dépendance en Q des éléments diagonaux de la polarisabilité est plus importante lorsque la température est basse et, dans ce cas, l'hypothèse de la faible déviation conduit à sur–écranter les interactions coulombiennes. Néanmoins, cette approximation conserve son intérêt du fait du gain en temps calcul lorsque le nombre de sous–bandes est très grand.

5.3.3 Modèle de polarisabilité de Fetter et Walecka

Ce modèle de tenseur de polarisabilité a été utilisé surtout par Fischetti *et al.* dans les conditions de hautes températures [199,209,234,235]. Ces auteurs ont en effet généralisé à toute sous–bande ν, le résultat obtenu par Fetter aux hautes températures pour les gaz de porteurs tridimensionnels [236]. Dans ce régime, Fetter a considéré que seule la « queue exponentielle » de la fonction de distribution contribuait à l'écrantage. Ainsi, pour toutes les sous–bandes on a [199] :

$$[\Pi_{\mathrm{FET}}(Q)]_{\nu\nu} = \frac{n_\nu}{k_B\theta_\nu}\frac{2\pi^{1/2}}{Q\lambda_\nu}\Phi\left(\frac{Q\lambda_\nu}{4\pi^{1/2}}\right), \tag{5.22}$$

avec

$$\lambda_\nu = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_\nu^* k_B\theta_\nu}\right)^{1/2}. \tag{5.23}$$

La fonction Φ est la *fonction de dispersion plasma* :

$$\Phi(x) = 2\mathrm{e}^{-x^2}\int_0^x \exp(y^2)\mathrm{d}y. \tag{5.24}$$

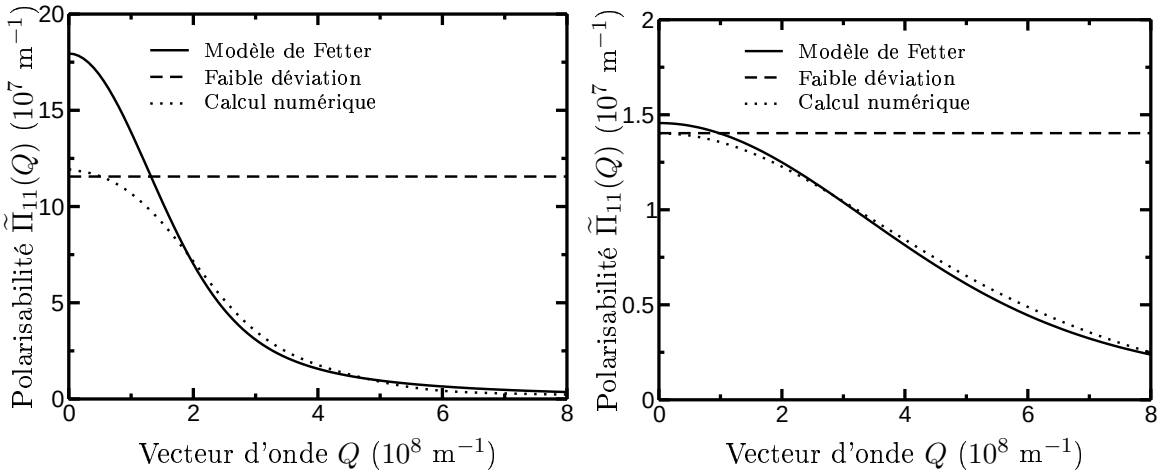
Cette fonction plasma a été abondamment étudiée dans la littérature (elle est aussi dénommée *intégrale de Dawson*) et il est aisé de trouver des algorithmes pour la calculer. À cet égard, le lecteur intéressé par ces développements numériques pourra considérer l'algorithme de la référence [237, formule (6.10.3)], ainsi que les séries entières[9] permettant de calculer $\Phi(x)$ lorsque $x \to 0$ [238, p. 260].

La figure 5.6 représente l'élément diagonal $\widetilde{\Pi}_{11}(Q)$ de la polarisabilité calculé par trois modèles, à savoir le modèle de Fetter, le modèle de la faible déviation et un calcul numérique complet. Deux températures sont étudiées : 44 K et 300 K. On constate le bon comportement du modèle de Fetter pour les hautes températures lorsque le gaz est non dégénéré, comme on pouvait s'y attendre, puisqu'il repose sur l'hypothèse de Debye–Hückel. Par contre, l'erreur est importante à température plus basse. En outre, du fait de l'utilisation de l'approximation de Debye–Hückel, la polarisabilité dans le modèle de Fetter inclut « naturellement » la non–parabolicité par l'intermédiaire de n_ν.

[9] En effet, $\Phi(x)$ peut, par exemple, s'écrire :

$$\frac{\Phi(x)}{2\mathrm{e}^{-x^2}} = \frac{1}{2}\pi^{1/2}x\gamma^*\left(\frac{1}{2};-x^2\right),$$

où γ^* est la fonction Gamma incomplète qu'on sait développer à l'aide de séries entières.



(a) Température de 44 K.

(b) Température de 300 K.

FIG. 5.6 – Comparaison entre la polarisabilité calculée par le modèle de Fetter (trait plein), le modèle de la faible déviation (trait tireté) et le modèle entièrement numérique (trait pointillé). La structure est celle utilisée pour le calcul de la figure 5.1.

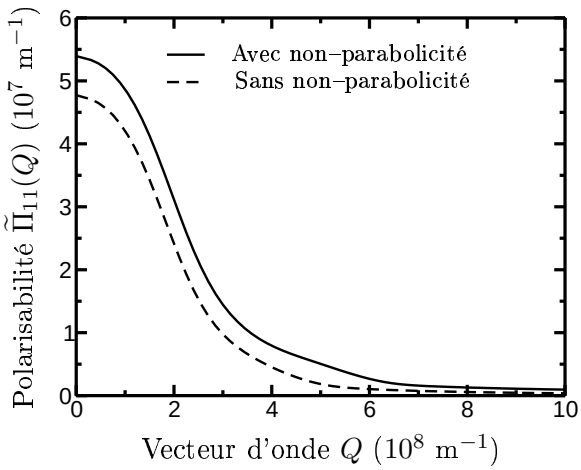
5.3.4 Influence de la non–parabolicité

Pour l'instant, nous n'avons que peu discuté de l'influence de la non–parabolicité sur l'écrantage. D'ailleurs, à notre connaissance il n'existe pas d'étude détaillée sur l'importance de cet effet. Dans ce paragraphe, à l'aide de quelques exemples pour les matériaux GaAs et InAs, nous allons essayer de cerner ce problème.

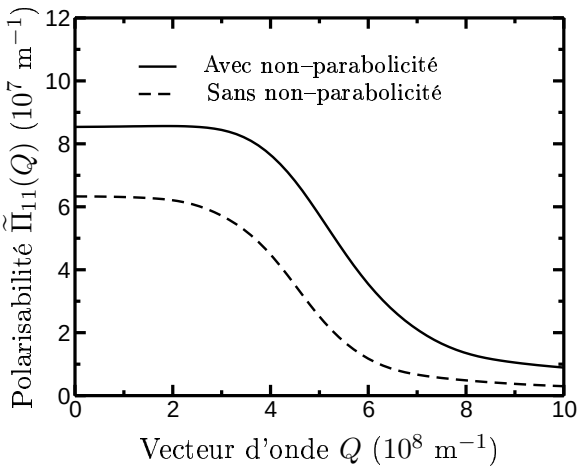
TAB. 5.1 – Influence de la non–parabolicité sur les éléments diagonaux de la polarisabilité $\widetilde{\Pi}_{\nu\nu}$ pour différents matériaux.
La densité électronique est de 10^{16} m^{-2}, pour une température de 200 K.

Sous–bande	Facteur d'écran sans la non–parabolicité (m^{-1})	Facteur d'écran avec la non–parabolicité (m^{-1})	Écart (%)
Puits en InAs de 150 Å ($\alpha \simeq 2{,}7$ eV^{-1})			
1	7×10^7	$8{,}53 \times 10^7$	22,8
2	$3{,}6 \times 10^7$	$3{,}8 \times 10^7$	6
Puits en GaAs de 150 Å ($\alpha \simeq 0{,}6$ eV^{-1})			
1	$1{,}1 \times 10^8$	$1{,}2 \times 10^8$	3,2
2	$9{,}8 \times 10^7$	$\sim 10^8$	2,2

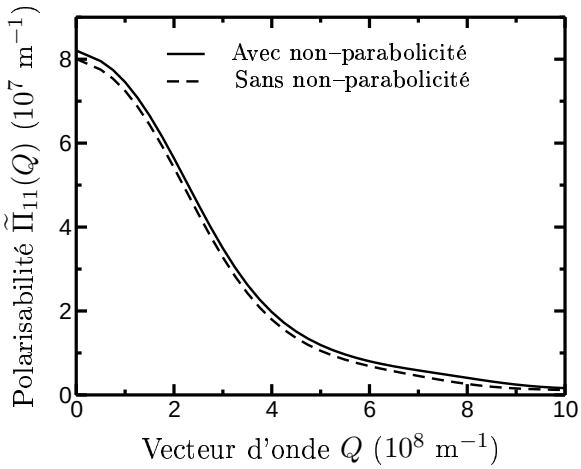
Les résultats de la table 5.1 montre que la non–parabolicité, qui n'est généralement pas



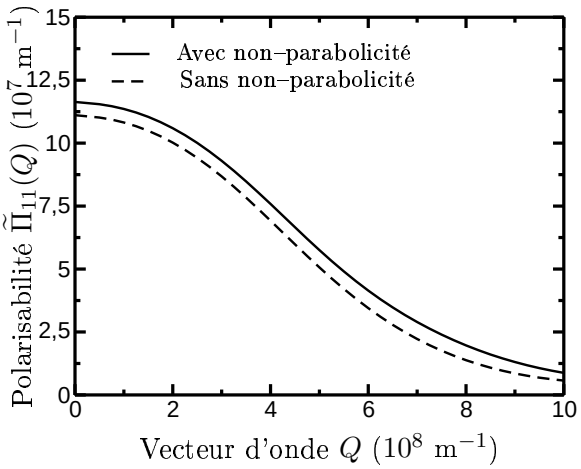
(a) Puits d'InAs. Les paramètres sont $N_s = 10^{15}$ m^{-2} et $\theta = 77$ K.



(b) Puits d'InAs. Les paramètres sont $N_s = 10^{16}$ m^{-2} et $\theta = 200$ K.



(c) Puits de GaAs. Les paramètres sont $N_s = 10^{15}$ m^{-2} et $\theta = 77$ K.



(d) Puits de GaAs. Les paramètres sont $N_s = 10^{16}$ m^{-2} et $\theta = 200$ K.

FIG. 5.7 – Influence de la non–parabolicité sur la polarisabilité de la sous–bande fondamentale pour différents matériaux et pour différentes valeurs de densités électroniques et de températures.
La structure est celle utilisée pour le calcul de la figure 5.1.

prise en compte dans la littérature, peut influencer très significativement la valeur des facteurs d'écran dans les matériaux à faible gap comme l'InAs, en augmentant la valeur de S_ν. Afin de visualiser ce phénomène, nous traçons sur la figure 5.7 l'évolution de l'élément diagonal $\widetilde{\Pi}_{11}$ en fonction du vecteur d'onde Q. Ces courbes ont été obtenues par intégration numérique avec et sans la densité d'états non–paraboliques [terme $\gamma'_\nu(\varepsilon)$ de l'équation (5.12)]. D'une manière similaire aux comportements observés sur le tableau 5.1, on constate que la non–parabolicité tend à augmenter l'écrantage, faiblement dans le cas du GaAs et très sensiblement pour l'InAs. Ainsi, la non–parabolicité conduit à une diminution des probabilités électron–électron par l'intermédiaire de la polarisabilité $\overline{\mathbf{\Pi}}$, les autres effets liés à la non–parabolicité allant dans un sens contraire (par exemple, la densité d'états de bandes non–paraboliques est plus élevée que celle des bandes paraboliques et tend à augmenter les probabilités). Enfin, on constate que l'influence de la non–parabolicité se fait surtout sentir pour les faibles déviations. Enfin, rappelons que nous négligeons ici l'effet induit par le facteur de Bloch qui pourrait également modifier les tendances relevées sur la figure 5.7.

TAB. 5.2 – Influence de la non–parabolicité sur les éléments non–diagonaux de la polarisabilité pour différents matériaux.
Le résultat avec la non–parabolicité est obtenu par intégration numérique. Le résultat sans la non–parabolicité est obtenu en utilisant l'équation (5.19). La densité électronique est de 10^{16} m^{-2} et la température de 200 K. Les grandeurs calculées sont données en valeur absolue.

(μ,ν)	$\Pi_{\nu\mu}$ sans la non–parabolicité (m^{-1})	$\Pi_{\nu\mu}$ avec la non–parabolicité (m^{-1})	Écart (%)
Puits en InAs de 150 Å			
(1,2)	$6{,}9 \times 10^7$	$7{,}7 \times 10^7$	12
Puits en InAs de 50 Å			
(1,2)	$2{,}5 \times 10^7$	$2{,}6 \times 10^7$	4
Puits en GaAs de 150 Å			
(1,2)	$1{,}62 \times 10^7$	$1{,}63 \times 10^7$	0,6
Puits en GaAs de 50 Å			
(1,2)	$1{,}3 \times 10^7$	$1{,}3 \times 10^7$	0

Le tableau 5.2 présente le calcul d'éléments non–diagonaux de la polarisabilité avec et sans la non–parabolicité. La comparaison entre les tableaux 5.1 et 5.2 met en évidence le fait que, lorsque les sous–bandes μ et ν sont relativement proches en énergies, certains éléments non–diagonaux de la polarisabilité peuvent devenir du même ordre de grandeur que les facteurs d'écran diagonaux. Or, dans la littérature, ces éléments ne sont pas pris en compte dans l'écrantage. On constate également que l'influence de la non–parabolicité est plus faible que pour les éléments diagonaux présentés dans le tableau 5.1, sûrement par le fait que, dans l'équation (5.19) intervient des différences de densités et d'énergies. Ainsi, l'approximation des bandes paraboliques est tout à fait raisonnable dans le cas du GaAs.

Ce qui peut être plus critique, c'est la non prise en compte de la dépendance par rapport au vecteur Q, tant pour les éléments diagonaux que non–diagonaux de la polarisabilité, ce qui

conduit à supposer la polarisabilité constante donc à sur–écranter les larges déviations.

5.3.5 Bilan sur le modèle de la polarisabilité retenu

Dans cette section, nous avons tout d'abord passé en revue les différentes modélisations de la polarisabilité. Nous avons également discuté de l'influence de la non–parabolicité sur les éléments diagonaux et non diagonaux du tenseur de polarisabilité. Nous avons pu voir que la non–parabolicité augmentait essentiellement les éléments diagonaux de la polarisabilité et dans une faible mesure pour le GaAs. Nous avons également montré que les éléments non diagonaux de la polarisabilité pouvaient être du même ordre que les éléments diagonaux, alors qu'il n'est fait que très rarement mention de leur importance dans la littérature.

Par conséquent, nous avons décidé d'opter pour une modélisation complète du tenseur de polarisabilité et notamment des éléments non–diagonaux. Cette hypothèse a évidemment un coût numérique et afin de le limiter, nous avons considéré que l'hypothèse des faibles déviations était raisonnable, ce qui permet d'éviter le calcul du tenseur pour toutes les valeurs de Q.

Dans la prochaine section, nous allons voir comment adapter le modèle d'écrantage afin de prendre en compte un maximum de termes non–diagonaux de la polarisabilité et les couplages inter-sous–bandes.

5.4 Écrantage multi-sous–bandes

5.4.1 Position du problème

L'écrantage de l'interaction électron–électron dans un contexte multi-sous–bandes [Éq. (5.4)] est très délicat à traiter, car il fait intervenir un grand nombre de paramètres. *A priori*, comme nous avons pu le voir avec les éléments non–diagonaux de la polarisabilité, tous les couplages inter-sous–bandes peuvent potentiellement intervenir. Si l'on souhaite calculer le tenseur diélectrique numériquement, les ressources informatiques nécessaires, tant en espace mémoire qu'en temps de calcul, prennent rapidement des proportions prohibitives. L'inversion numérique du tenseur diélectrique ne peut donc être envisagée que dans un nombre restreint de cas, afin valider la pertinence des hypothèses permettant de simplifier l'écrantage.

Dans un premier temps, nous allons formaliser mathématiquement les comportements des facteurs de forme que nous avons introduits dans la partie 5.2. À cet effet, on effectue un développement limité du terme exponentiel $\exp(-Q|z-z'|)$ du facteur de recouvrement du potentiel nu (5.8) quand $Q \to 0$ [239] :

$$V^{\mathrm{nu}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q \to 0) \approx \frac{e^2}{2\kappa_0\kappa_r}\frac{1}{Q}(\delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'} - Q\beta^1_{\mu\nu\mu'\nu'} + \cdots), \tag{5.25}$$

où les moments $\beta^\eta_{\mu\nu\mu'\nu'}$ sont définis comme suit :

$$\beta^\eta_{\mu\nu\mu'\nu'} = \int_0^L \mathrm{d}z \int_0^L \mathrm{d}z' \varphi_\mu(z)\varphi_\nu(z')|z-z'|^\eta \varphi^*_{\mu'}(z)\varphi^*_{\nu'}(z'). \tag{5.26}$$

Pour faire apparaître le double symbole de Kronecker $\delta_{\nu\nu'}\delta_{\mu\mu'}$ dans l'équation (5.25), on a utilisé la propriété d'orthonormalité de la base des $\{\varphi_\nu\}$.

On peut alors dégager deux types de comportement : (i) les éléments de matrice intra-sous–bandes ($\mu = \mu'$ et $\nu = \nu'$) du potentiel nu *divergent* quand $Q \to 0$; (ii) les autres éléments

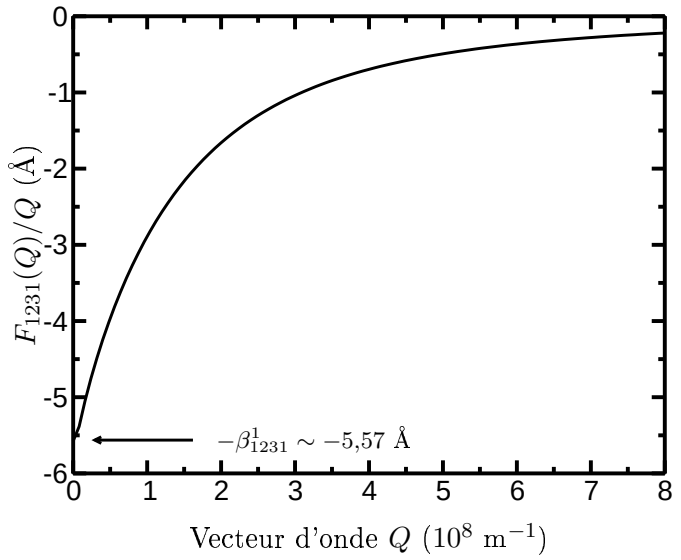


FIG. 5.8 – Exemple d'élément de matrice du potentiel nu pour les faibles déviations.

de matrice du potentiel nu ont une *valeur finie* en $Q = 0$: $V^{\mathrm{nu}}_{\nu\mu\nu'\mu'}(0) \propto -\beta^1_{\nu\mu\nu'\mu'}$ (voir la figure 5.8).

D'un point de vue numérique, l'écrantage permet d'obtenir une valeur finie pour les éléments de matrice du potentiel écranté intra-sous–bandes en $Q \to 0$ et d'éviter la divergence des éléments nus correspondants. Nous verrons dans la suite de cette partie que certains modèles ne respectent pas le point (ii) et conduisent indûment à l'annulation d'éléments de matrice inter-sous–bandes pour certaines valeurs de Q.

5.4.2 Les modèles de la littérature

Nous l'avons déjà mentionné, la matrice diélectrique doit être inversée afin de prendre en compte l'ensemble des couplages inter-sous–bandes possibles. Cependant, dès que le nombre de sous–bandes devient supérieur à dix, cette opération est une étape limitante du programme voire même complètement prohibitive. D'ailleurs dans la littérature, seul le groupe de Fischetti inverse numériquement la matrice diélectrique [199]. À côté de ce calcul exhaustif, il est possible de simplifier le problème à l'aide d'approximations plus ou moins raisonnables. Dans ce paragraphe, nous allons décrire les modèles d'écrantage multi-sous–bandes fréquemment utilisés dans la littérature, que se soit pour l'interaction sur impuretés ionisées ou pour l'interaction électron–électron.

Le modèle d'écrantage statique à une seule sous–bande[10] (que nous abrégerons par l'acronyme USSB dans la suite de ce mémoire) a été très largement utilisé dans la littérature [210, 213, 215, 240]. Dans cette approximation, on suppose que seule une sous–bande (en général la sous–bande fondamentale, que nous noterons g dans la suite) écrante les interactions coulombiennes. Dans ce cas, *tous* les éléments écrantés sont donnés par :

$$V^{\mathrm{scr}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q) \simeq \frac{V^{\mathrm{nu}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)}{\kappa_{\mathrm{g}}(Q)}, \tag{5.27}$$

[10]Traduction de l'anglais *Single Subband Static Screening*.

avec $\kappa_{\mathrm{g}}(Q) = 1 - \Pi_{\mathrm{gg}}(Q) V^{\mathrm{nu}}_{\mathrm{gggg}}(Q)$. Dans la littérature, on trouve toutes les variantes possibles du modèle USSB : approximation sur le facteur de forme $F_{\mathrm{gggg}}(Q) = 1$ ou par des formules analytiques [241], non prise en compte de la dépendance en Q de Π_{gg} [230, 231], de la non–parabolicité [88], *etc.*

Si le modèle USSB reste pertinent pour quelques structures simples (par exemple, pour les puits quantiques étroits à basse température, pour lesquels une seule sous–bande est effectivement peuplée), il est plus délicat de modéliser ainsi la plupart des autres systèmes, en particulier lorsque plusieurs sous–bandes sont significativement peuplées et que le choix de la sous–bande dite « écrantante » n'est pas évident, ou peut évoluer en cours de simulation. Par ailleurs, la formule (5.27) est totalement indépendante des indices de l'interaction électron–électron et les populations n_μ et $n_{\mu'}$ n'influent pas sur l'écrantage [207].

Quelques auteurs ont généralisé le modèle USSB au cas où plusieurs sous–bandes écrantent les interactions. Ainsi, Yokoyama *et al.* [231], dans le cadre de l'étude de l'interaction sur impuretés ionisées, ont pris en compte de manière simplifiée l'écrantage multi-sous–bandes en s'inspirant du modèle de Stern et Howard et en considérant que les fonctions d'onde sont correctement modélisées par des Dirac $\delta(z - z_i)$, ce qui simplifie l'expression des facteurs de recouvrement. En fait, ils considèrent simplement une fonction diélectrique généralisée qui serait la « trace » de la matrice diélectrique $\overline{\boldsymbol{\kappa}}(Q)$ [242] :

$$\kappa_{\mathrm{g}}(Q) = 1 + \frac{e^2}{2\kappa_0\kappa_r} \sum_j \frac{S_j}{Q}. \tag{5.28}$$

Ce modèle a été complété par L. Baudry dans sa thèse de doctorat [88] en utilisant des facteurs de forme des fonctions enveloppes évalués numériquement ou à l'aide de l'approximation du puits carré infini. Néanmoins, ces études restent limitées aux puits quantiques isolés avec un nombre relativement faible de niveaux.

En ce qui concerne l'interaction électron–électron, seuls quelques auteurs font état de leur modèle d'écrantage. Par exemple Kalna *et al.* ont, dans le même esprit que Stern *et al.* [230] pour les impuretés ionisées, bâti un modèle pouvant prendre en compte plusieurs sous–bandes et l'écrantage des trous [224, 243, 244].

Lee et Galbraith ont développé un modèle analytique d'écrantage multi-sous–bandes [207]. Ces auteurs ont montré que l'écrantage des éléments de matrice du potentiel coulombien inter-sous–bandes par un modèle USSB conduisait à des résultats erronés et à une suppression totale de l'interaction à faible vecteur d'onde. Ils ont donc inversé la matrice diélectrique dans un contexte multi-sous–bandes et d'écrantage dynamique, avec malgré tout des hypothèses assez restrictives : (i) puits quantique avec seulement deux niveaux quantiques ; (ii) approximation des énergies propres et des fonctions d'onde par celles du puits carré infini ; (iii) symétrie de la structure.

Voyons maintenant le modèle que nous proposons et les approximations sur lesquelles il repose.

5.4.3 Le modèle adopté pour résoudre l'équation de l'écrantage

Le coût calcul du traitement de l'écrantage dans les LCQ et plus généralement dans tout système avec un grand nombre de sous–bandes, nécessite certaines approximations simplificatrices. Dans le même esprit que Kalna *et al.* [243], nous proposons de garder dans l'équation de l'écrantage (5.4) un certain nombre de couples (ξ, ξ'). Nous allons plus loin que la référence [243], en conservant les couples $(\xi, \xi') = (\nu, \nu')$, (ν', ν) et (g, g), de manière à obtenir un

système d'équations pouvant être explicitement résolu. Ainsi on obtient :

$$V^{\mathrm{ecr}}_{\nu\mu\nu'\mu'}(Q) = \frac{D_{\mathrm{g}}(Q)}{D_{\nu\nu'\mathrm{g}}(Q)}\left[V^{\mathrm{nu}}_{\nu\mu\nu'\mu'}(Q) + \frac{N_{\nu\nu'\mathrm{g}}(Q)V^{\mathrm{nu}}_{\mathrm{g}\mu\mathrm{g}\mu'}(Q)}{D_{\mathrm{g}}(Q)}\right], \tag{5.29a}$$

avec

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{g}}(Q) &= 1 - V^{\mathrm{nu}}_{\mathrm{gggg}}(Q)\Pi_{\mathrm{gg}}(Q), && (5.29\mathrm{b}) \\ N_{\nu\nu'\mathrm{g}}(Q) &= V^{\mathrm{nu}}_{\nu\mathrm{g}\nu'\mathrm{g}}(Q)\Pi_{\mathrm{gg}}(Q), && (5.29\mathrm{c}) \\ D_{\nu\nu'\mathrm{g}}(Q) &= D_{\mathrm{g}}(Q) \times [1 - V^{\mathrm{nu}}_{\nu\nu\nu'\nu'}(Q)\Pi_{\nu\nu'}(Q)] - N_{\nu\nu'\mathrm{g}}(Q)V^{\mathrm{nu}}_{\mathrm{g}\nu\mathrm{g}\nu'}(Q)\Pi_{\nu\nu'}(Q). && (5.29\mathrm{d}) \end{aligned}$$

Dans le prochain paragraphe, à titre d'exemple, nous comparerons certains éléments de matrice écrantés par ce modèle avec ceux obtenus par l'inversion complète du tenseur diélectrique et avec ceux calculés par le modèle USSB. Afin d'alléger la discussion qui va suivre, le modèle d'écrantage défini par les équations (5.29) sera désigné dans la suite de ce mémoire par MSB, acronyme de Multi Sous–Bandes.

5.4.4 Un premier exemple

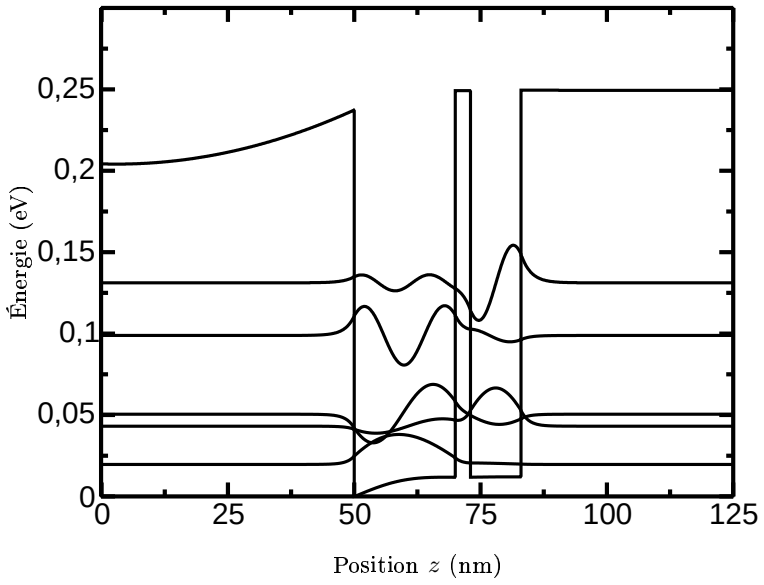
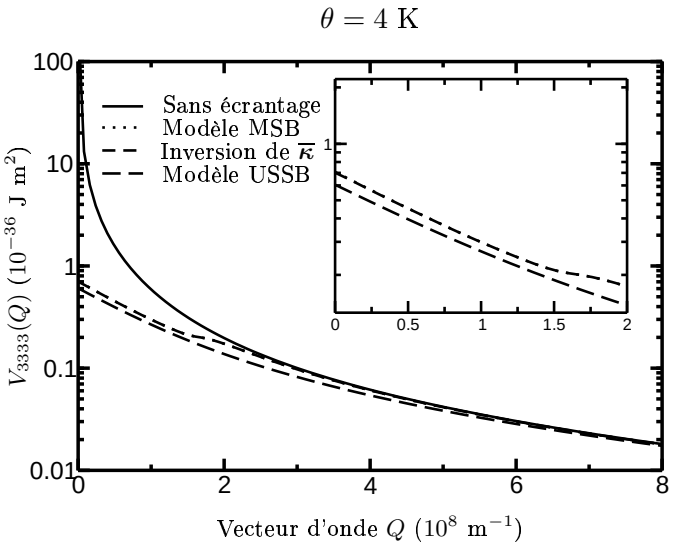


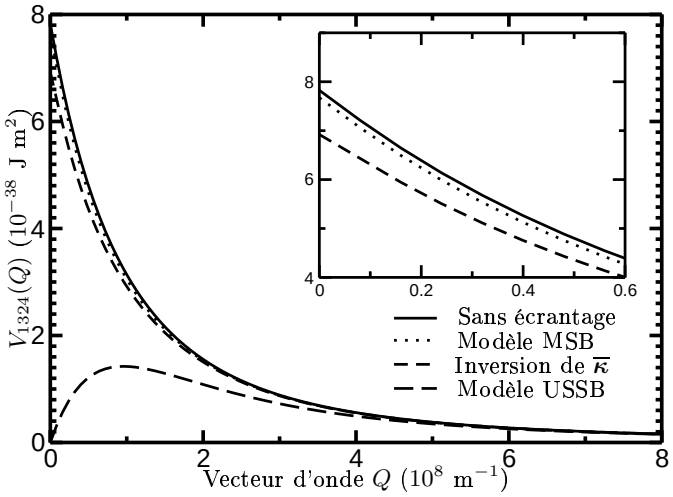
FIG. 5.9 – Structure de la bande de conduction et fonctions d'onde du « véhicule test » afin de valider notre modèle d'écrantage.
Les deux puits en GaAs ont pour épaisseur 200 Å et 100 Å respectivement. La sous–bande fondamentale (notée 1) est celle d'énergie la plus faible, les autres étant numérotées dans le sens croissant des énergies. La température est de 77 K pour une densité électronique totale de 10^{15} m^{-2}.

Dans cette sous–section, nous allons essayer de valider le modèle précédemment décrit, sur un premier véhicule test en le comparant à un modèle d'écrantage exhaustif d'inversion complète de la matrice diélectrique.

La figure 5.9 représente la structure à double puits quantique asymétrique que nous avons choisie pour comparer les modèles d'écrantage. Les épaisseurs épitaxiales sont les suivantes

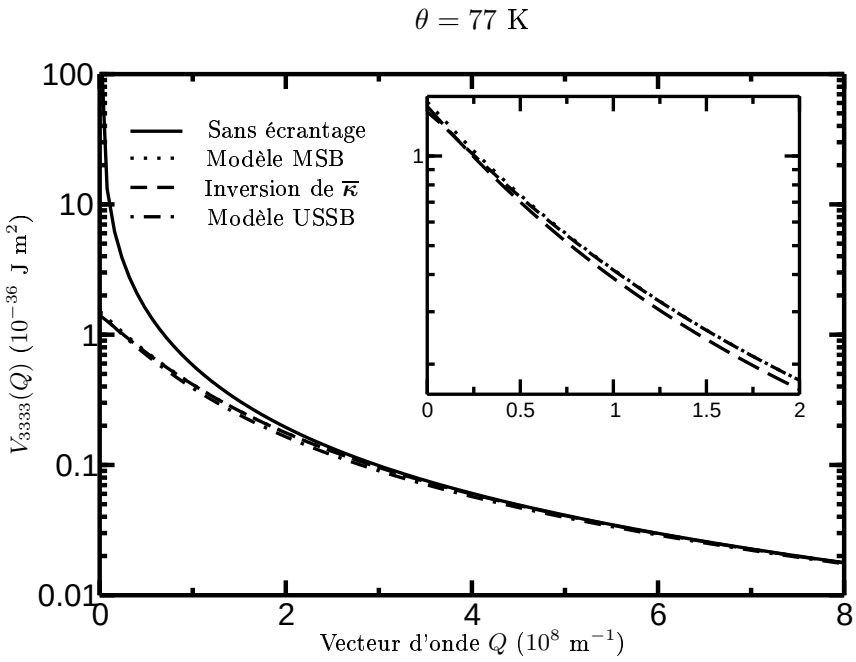


(a) Un élément intra-sous–bande pur. Les courbes obtenues avec notre modèle et par inversion du tenseur diélectrique sont complètement confondues.

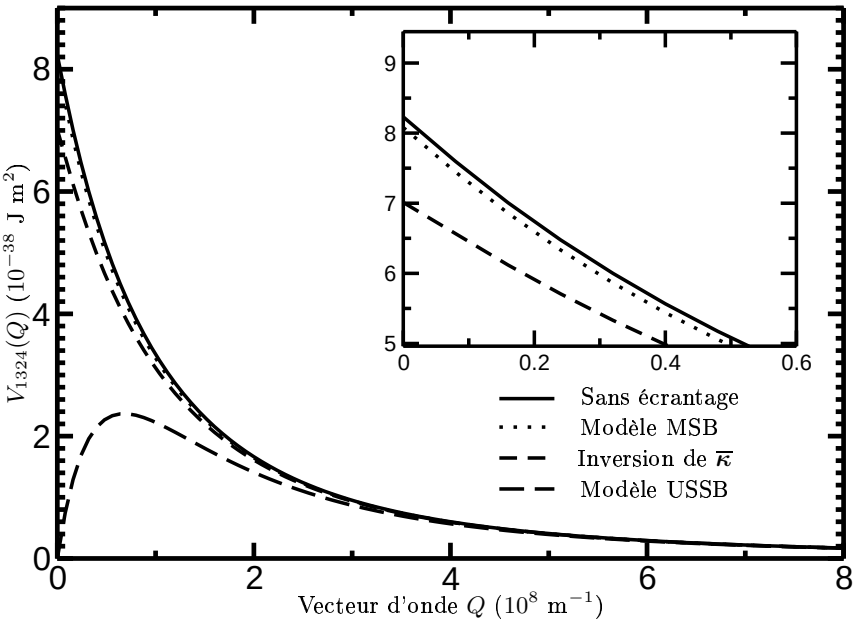


(b) Un élément inter-sous–bande.

FIG. 5.10 – Deux éléments de matrice du potentiel coulombien en fonction du vecteur d'onde échangé Q pour différents modèles d'écrantage à $\theta = 4$ K.
La structure et les fonctions d'onde sont celles de la figure 5.9 et la densité électronique est $N_s = 10^{15}$ m^{-2}. L'inversion du tenseur diélectrique inclut la détermination de la polarisabilité de manière entièrement numérique et en tenant compte de la non–parabolicité. Le modèle USSB prend en compte uniquement le facteur d'écran S_1 de la sous–bande fondamentale. En médaillon est représenté un agrandissement de la courbe pour les faibles valeurs de Q. Il permet de positionner plus nettement les courbes entre elles. L'élément de matrice $V_{3333}(Q)$ est tracé en échelle semi–logarithmique et l'élément de matrice $V_{1324}(Q)$ est tracé en échelle linéaire.

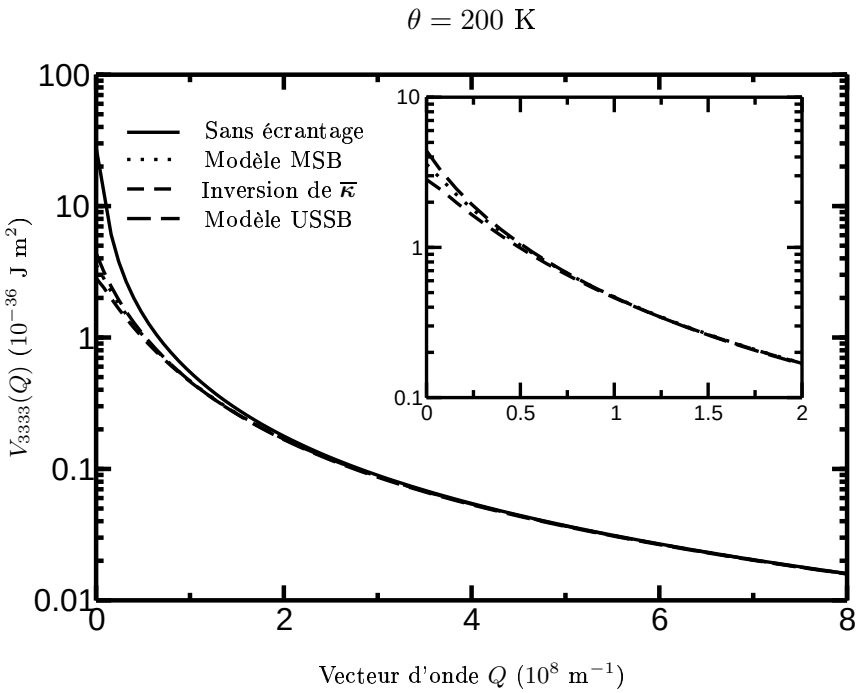


(a) Un élément intra-sous–bande pur. Les courbes obtenues avec notre modèle et par inversion du tenseur diélectrique sont complètement confondues.

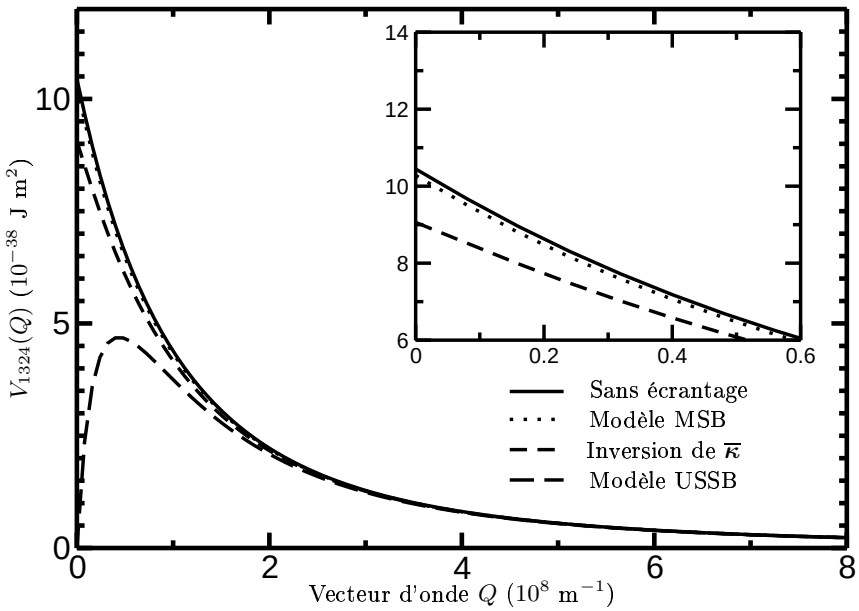


(b) Un élément inter-sous–bande.

FIG. 5.11 – Deux éléments de matrice du potentiel coulombien en fonction du vecteur d'onde échangé Q pour différents modèles d'écrantage à $\theta = 77$ K.
La structure et les fonctions d'onde sont celles de la figure 5.9 et la densité électronique est $N_s = 10^{15}$ m^{-2}.
Les modèles d'écrantage sont identiques à ceux utilisés pour la figure 5.10.



(a) Un élément intra-sous–bande pur.



(b) Un élément inter-sous–bande.

FIG. 5.12 – Deux éléments de matrice du potentiel coulombien en fonction du vecteur d'onde échangé Q pour différents modèles d'écrantage à $\theta = 200$ K.
La structure et les fonctions d'onde sont celles de la figure 5.9 et la densité électronique $N_s = 10^{15}$ m^{-2}.
Les modèles d'écrantage sont identiques à ceux utilisés pour la figure 5.10.

TAB. 5.3 – Comparaison des valeurs de $V_{3333}(Q=0)$ obtenues par les différents modèles d'écrantage pour différentes températures. Les valeurs sont extraites des courbes 5.10, 5.11 et 5.12.

Les modèles comparés	Écart entre les valeurs de $V_{3333}(0)$
Notre modèle MSB/Inversion de $\overline{\boldsymbol{\kappa}}$	< 1 % à 4 K
	8 % à 77 K
	28 % à 200 K
Modèle USSB/Inversion de $\overline{\boldsymbol{\kappa}}$	14 % à 4 K
	4,3 % à 77 K
	> 50 % à 200 K

(données en Å) : 500/**200**/30/**100**/500. Les nombres graissés représentent les puits en GaAs, les barrières étant en $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$.

Afin de voir si le modèle présenté au paragraphe précédent est une approximation raisonnable, nous présentons sur les figures 5.10, 5.11 et 5.12 deux éléments de matrice du potentiel coulombien en fonction du vecteur d'onde échangé Q. Les trois figures correspondent à des températures de 4 K, 77 K et 200 K respectivement. Trois modèles d'écrantage sont comparés : (i) notre modèle, i.e., le modèle MSB en fixant le paramètre g comme étant la sous–bande fondamentale 1 ; (ii) l'inversion de la matrice diélectrique calculée de manière entièrement numérique à l'aide de la librairie mathématique LAPACK[11] et des routines d'inversion disponibles ; (iii) le modèle USSB avec g = 1.

En ce qui concerne l'élément de matrice du potentiel coulombien intra-sous–bande pur $V^{\text{ecr}}_{3333}(Q)$, les trois modèles d'écrantage aboutissent à un résultat comparable pour les trois températures. Le tableau 5.3 reporte des comparaisons entre les valeurs $V^{\text{ecr}}_{3333}(0)$ obtenues par notre modèle MSB et par le modèle USSB par rapport au modèle « étalon » qu'est l'inversion complète de la matrice diélectrique. L'écart entre notre modèle MSB et celui avec $[\overline{\boldsymbol{\kappa}}]^{-1}$ est inférieur à 1 % à 4 K et devient proche de 28 % à 200 K. Cela semble indiquer que la répartition des populations sur l'ensemble des sous–bandes n'est pas totalement pris en compte par notre modèle. Néanmoins, cet écart reste inférieur à celui constaté avec le modèle USSB qui est supérieur à 50 % à 200 K.

Voyons maintenant le comportement de l'élément de matrice du potentiel coulombien inter-sous–bande $V^{\text{ecr}}_{1324}(Q)$, considéré à titre d'exemple. On constate sur les trois figures que le modèle USSB conduit à l'annulation de l'élément de matrice en $Q = 0$, tandis que l'élément nu a une valeur finie en ce point. Notre modèle rectifie ce comportement incorrect et présente un écart modéré pour les faibles déviations s'établissant à ~ 10 % par rapport à l'élément obtenu par l'inversion de la matrice diélectrique. Dans le cas présent de la transition $(1, 3, 2, 4)$, les déviations à faibles vecteurs d'onde échangés Q sont assez peu probables. Rappelons que le vecteur Q dépend de l'écart entre les énergies propres des différentes sous–bandes mises en jeu dans l'interaction. À cause du terme Δ^0_{1324}, qui n'est pas nul, $Q = 0$ est une valeur moins

[11] Les librairies sont téléchargeables sur le site http ://www.netlib.org/lapack.

fréquemment atteinte.[12] Nous verrons dans un prochain chapitre, le 7, que cette modification du comportement des éléments de matrice inter-sous–bandes du potentiel coulombien n'est pas sans conséquence sur le transport.

5.5 Écrantage hors d'équilibre dans les lasers à cascade quantique

Le fonctionnement des LCQ suppose un transport loin de l'équilibre, ne serait–ce que pour assurer l'inversion de population. Les évolutions des populations dans des conditions hors d'équilibre influent sur un certain nombre de paramètres, comme la polarisabilité, qui à leur tour influencent le transport même. Dans cette partie, nous décrivons une méthode permettant de prendre en compte le caractère hors d'équilibre de la polarisabilité dans l'interaction électron–électron.

En toute généralité, il serait également souhaitable de disposer d'un modèle totalement auto–cohérent, où la simulation Monte Carlo serait couplée avec la résolution des équations de Schrödinger et Poisson, afin de prendre en compte rigoureusement les effets de charge d'espace. Effectivement, les fonctions d'onde interviennent dans l'interaction électron–électron par l'intermédiaire des éléments de matrice du potentiel nu. Cependant, ce couplage auto–cohérent nécessite des temps de calculs trop longs lorsqu'on ne dispose pas de ressources informatiques massives. En particulier, et malgré l'accélération par la décomposition en séries de Fourier, la réévaluation des facteurs de forme électron–électron est une étape pénalisante, qui dure plusieurs dizaines de minutes. Ainsi, dans ce travail, nous négligerons les effets de redistribution de la charge électronique sur les fonctions d'onde et donc sur le potentiel coulombien non–écranté.

5.5.1 Position du problème

Dans un premier temps, rappelons la formule du majorant de la probabilité électron–électron proposée au chapitre 4 :

$$\Lambda_{\mu\mu'} = \frac{m_{\mathrm{e}}^*}{2\hbar^3} \sum_{\nu,\nu'} n_\nu \mathcal{M}^2_{\mu\nu\mu'\nu'}. \tag{5.30}$$

Nous l'avons déjà évoquée, l'évolution des densités électroniques $n_\nu(t)$ au cours de la simulation, qui s'écartent de leur valeur calculée à l'équilibre, impose de réévaluer fréquemment l'ensemble des majorants $\Lambda_{\mu\mu'}$. De manière plus indirecte, le potentiel coulombien écranté $V^{\mathrm{ecr}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)$ (et donc $\mathcal{M}_{\mu\nu\mu'\nu'}$) évolue également du fait de la polarisabilité hors d'équilibre. Certaines sous–bandes se peuplent et voient leur effet sur l'écrantage augmenter au détriment d'autres qui se vident. La répartition de la charge selon les différentes sous–bandes modifie le tenseur de polarisabilité. Celui–ci évolue également du fait de la modification de la distribution énergétique selon la direction parallèle [voir Éqs. (5.5) et (5.12)]. Dans un modèle

[12] À l'aide de l'équation (4.6b), on peut estimer que le vecteur d'onde de déviation minimum $Q_{\min}$ est :

$$Q_{\min} = \frac{1}{2}\left|G - \sqrt{\mathbf{G}^2 + \Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'}}\right|,$$

quantité qui dépend donc de la variation d'énergie potentielle échangée $\Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'}$.

simple de quasi–équilibre, la fonction de distribution peut encore être décrite par une distribution de Fermi–Dirac, en définissant convenablement des paramètres effectifs propres à chaque sous–bande, comme une température électronique θ_ν ou un quasi–niveau de Fermi.

Dans le prochain paragraphe, nous allons détailler notre méthode pour prendre en compte le caractère hors d'équilibre du tenseur de polarisabilité.

5.5.2 Principe de la méthode

De manière générale, l'expression (5.12) des éléments de matrice du tenseur de polarisabilité reste valide dans des conditions de transport hors d'équilibre. Néanmoins, un tel calcul effectué régulièrement en cours de simulation est très pénalisant au niveau du temps de simulation car il met en jeu une intégrale[13] et trois jeux d'indices ν, ν' et Q. En outre, il peut se révéler numériquement délicat car la fonction de distribution issue de la simulation est une grandeur très *bruitée*.

Afin de simplifier le problème et de limiter le coût calcul, nous nous plaçons dans l'hypothèse de la faible déviation. Nous faisons également l'hypothèse de bandes paraboliques. Dans ce cadre, les éléments non–diagonaux $\Pi_{\nu\mu}$ peuvent être aisément recalculés en cours de simulation à l'aide de l'équation (5.19). Seul le traitement des termes diagonaux S_ν est délicat et demande donc que nous détaillions précisément la méthode que nous avons employée. Avant cela, nous allons expliciter la technique utilisée habituellement dans la littérature.

État de l'art

En toute rigueur, le calcul de S_ν fait intervenir l'intégrale de la quantité $\partial f_\nu / \partial E_\nu$, intégrale qui est simplifiée à l'aide de la valeur de la fonction de distribution en $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ (voir annexe E). Ainsi dans la littérature, le facteur d'écran est souvent calculé de la manière suivante [210,242] :

$$S_\nu = \rho_\nu f_\nu(0). \tag{5.31}$$

Goodnick *et al.* [242], tout comme Mosko *et al.* [210], proposent de réactualiser ce facteur d'écran à l'aide de la valeur $f_\nu(0)$ issue de la simulation. Or, cette grandeur locale est numériquement bruitée et fluctue en général beaucoup, du fait du nombre nécessairement limité de particules. Il est donc souhaitable de disposer d'une valeur sujette à moins de fluctuations.

Un modèle de calcul des éléments diagonaux de la polarisabilité hors d'équilibre

Nous proposons une méthode permettant de définir une température électronique de sous–bande θ_ν qui tient compte de l'ensemble de la fonction de distribution et de son comportement à énergie élevée. De ce fait, nous obtenons une grandeur qui représente l'écrantage de l'ensemble des porteurs de la sous–bande et qui fluctue assez peu au cours de la simulation. La température électronique θ_ν intervient dans le facteur d'écran accompagnée de la grandeur Γ_ν (voir annexe E) :

$$S_\nu = \rho_\nu \frac{\Gamma_\nu}{k_B \theta_\nu}. \tag{5.32a}$$

[13] On suppose que la fonction de distribution est à symétrie cylindrique, ce qui évite d'avoir à évaluer l'intégrale sur Υ.

La température étant obtenue itérativement en résolvant :

$$\begin{aligned}\Gamma_\nu &= \int_0^\infty f_\nu(\varepsilon)[1-f_\nu(\varepsilon)]\mathrm{d}\varepsilon, \\ &= k_B\theta_\nu\left[1-\exp\left(-\frac{n_\nu}{\rho_\nu k_B\theta_\nu}\right)\right]. \end{aligned} \tag{5.32b}$$

Cette méthode a l'avantage de s'appliquer en toutes circonstances, y compris en cas de forte dégénérescence.

Condition de réévaluation des paramètres d'écrantage

Toutes les grandeurs intervenant dans l'écrantage hors d'équilibre, c'est–à–dire les populations électroniques n_ν et les fonctions de distribution $f_\nu(\mathbf{K})$, sont moyennées sur une fenêtre temporelle de quelques centaines de pas de temps afin de réduire significativement les fluctuations numériques. La polarisabilité est réactualisée (et donc les majorants du potentiel écranté $\mathcal{M}_{\mu\nu\mu'\nu'}$ ainsi que les probabilités électron–électron $\Lambda_{\mu\mu'}$) de manière périodique ou lorsque la redistribution des populations à l'intérieur des sous–bandes a dépassé un certain seuil.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit la méthode que nous avons développée afin de calculer rapidement les facteurs de forme, à l'aide d'une décomposition en séries de Fourier des fonctions d'onde.

Nous avons ensuite discuté de la pertinence des différentes modélisations de la polarisabilité et choisi le modèle aux faibles déviations permettant de calculer les éléments diagonaux et non–diagonaux de $\overline{\mathbf{\Pi}}(Q)$. Nous avons ensuite présenté un modèle d'écrantage améliorant le modèle d'écrantage à une seule sous–bande utilisé généralement pour modéliser les LCQ [245]. Nous avons montré que notre modèle décrit correctement les éléments de matrice inter-sous–bandes.

Enfin, dans une dernière partie, nous avons abordé la problématique de l'écrantage hors d'équilibre. Notre objectif était de définir un paramètre moins bruité que la fonction de distribution en un point de l'espace des phases afin de recalculer les éléments diagonaux du tenseur de polarisabilité. Dans ce but, une température électronique de sous–bande a été définie.

À ce stade du mémoire, nous avons terminé les chapitres présentant le modèle physique du simulateur Monte Carlo. Nous allons maintenant, dans la prochaine partie, présenter les résultats des simulations Monte Carlo de lasers à cascade quantique obtenus à l'aide de ce simulateur.

Troisième partie

Simulation Monte Carlo de lasers à cascade quantique

Introduction de la partie III

L'objectif de cette partie est d'appliquer le modèle microscopique précédemment décrit à l'étude du transport dans les lasers à cascade quantique. Nous avons vu au chapitre 1 qu'il existe une grande variété de LCQ, tant dans la conception de la séquence épitaxiale, que dans le large éventail de systèmes de matériaux. Dans cette partie III, nous allons étudier quelques exemples de LCQ qui sont particulièrement intéressants. Nous avons d'abord étudié un LCQ en infrarouge moyen sur le système de matériaux $Al_{0,48}In_{0,52}As/Ga_{0,47}In_{0,53}As$ qui nous a servi de « banc test ». Puis, nous nous sommes recentrés sur les composants LCQ térahertz qui sont basés sur le $GaAs/Al_{0,15}Ga_{0,85}As$.

Cette partie se compose de trois chapitres. Dans le chapitre 6, intitulé *Premiers exemples de lasers à cascade quantique*, nous étudions les performances de deux LCQ. La première structure a été conçue par Scamarcio *et al.* et émet dans l'infrarouge moyen à la fréquence de $\nu \sim 27$ THz [3]. Cet exemple se veut une première approche de la détermination des états électroniques ainsi que de la simulation Monte Carlo et des paramètres mesurables qu'elle peut fournir. Le deuxième exemple est un LCQ émettant à une fréquence plus basse, dans le domaine spectral du térahertz. Ce LCQ, conçu par Köhler *et al.*, est basé sur une structure de bande de type superréseaux à pas variable [4, 246]. Cet exemple ce veut une première introduction au transport dans les LCQ térahertz avec l'interaction inter–porteurs. Dans cette structure, nous discuterons de l'influence de l'interaction électron–électron sur le transport dans la mini–bande d'états du superréseau.

Dans le chapitre 7, intitulé *Laser à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon*, nous étudions de manière approfondie le LCQ conçu par Williams *et al.* [5] qui émet à 3,4 THz. Ce concept de dépopulation par résonance de phonon est à l'origine d'une famille de LCQ qui ont, dans une certaine mesure, fixé l'état de l'art des performances des LCQ térahertz [5, 7, 25, 64–66]. Nous étudierons l'influence de l'interaction électron–électron sur les performances attendues pour ce dispositif. Nous étudierons également la caractéristique courant/tension de ce LCQ et nous poserons la question de son utilisation à température ambiante.

Enfin, dans le chapitre 8, intitulé *Variantes de la structure à dépopulation par résonance de phonon*, nous discuterons les possibilités de réduire la fréquence d'émission. La première voie, suggérée par Lee *et al.* [6], consiste à conserver la structure conçue par Williams *et al.* et à exploiter les transitions « inter–étages ». À cette occasion, nous discuterons de l'influence de l'interaction électron–électron et du modèle physique d'écrantage. La deuxième voie consiste à réduire l'écart entre niveaux, en conservant le même mode de fonctionnement. Williams *et al.* ont ainsi obtenu des fréquences aussi basses que 2,1 THz [7]. Nous suggérerons une démarche permettant de réduire encore la fréquence laser jusqu'à 1 THz.

Chapitre 6

Premiers exemples de lasers à cascade quantique

Introduction

Nous avons présenté dans les chapitres précédents notre simulateur de Monte Carlo. L'objectif de ce chapitre est de l'étalonner sur deux LCQ différant aussi bien par la nature des matériaux de l'épitaxie que par le domaine de fréquences visées. Dans une première section, nous présentons, à titre illustratif, l'étude du LCQ conçu par Scamarcio *et al.* émettant en infrarouge moyen à $\lambda = 11$ μm. Ce LCQ a été choisi comme un « véhicule test » du solveur Schrödinger/Poisson afin de comparer nos calculs aux résultats théoriques et expérimentaux de la référence [3]. Dans la dernière section de ce chapitre, nous abordons une structure térahertz émettant à $\lambda \simeq 68$ μm et que l'on doit à Köhler *et al.* [4]. À cette occasion, nous discuterons de l'influence de l'interaction électron–électron dans les LCQ travaillant dans l'infrarouge lointain.

6.1 Étude d'un laser à cascade quantique à superréseaux en infrarouge moyen

6.1.1 Structure de la bande de conduction et fonctions d'onde

La figure 6.1 représente la bande de conduction et les principales fonctions d'onde de l'étage central du LCQ conçu par Scamarcio *et al.* [3]. Le système de matériaux utilisé est l'$Al_{0,48}In_{0,52}As/Ga_{0,47}In_{0,53}As$. Le champ électrique est $F = 25$ kV cm^{-1}, la température $\theta = 77$ K. Dans nos calculs, les équations de Schrödinger et Poisson ont été résolues sur $2p + 1 = 3$ étages en considérant 60 sous–bandes, soit 20 par étage. Cependant, par souci de lisibilité, toutes ne sont pas représentées sur la figure 6.1. Le pas spatial Δz utilisé pour calculer les fonctions d'onde a été fixé à 1 Å.

En ce qui concerne les paramètres matériaux, la masse effective du $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ a été prise égale à $m^* \simeq 0{,}044 \times m_0$, celle de l'$Al_{0,48}In_{0,52}As$ a été fixée à $m^* = 0{,}084 \times m_0$, où m_0 est la masse de l'électron libre. La discontinuité de bande de conduction entre ces deux matériaux s'élève à $\Delta E_c = 0{,}52$ eV, valeur faisant l'objet d'un consensus dans la littérature [3]. Le coefficient de non–parabolicité dans le $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ a été pris égal à $\alpha \sim 1{,}3$ eV^{-1}. L'ensemble des paramètres matériaux peut être trouvé dans la référence [91].

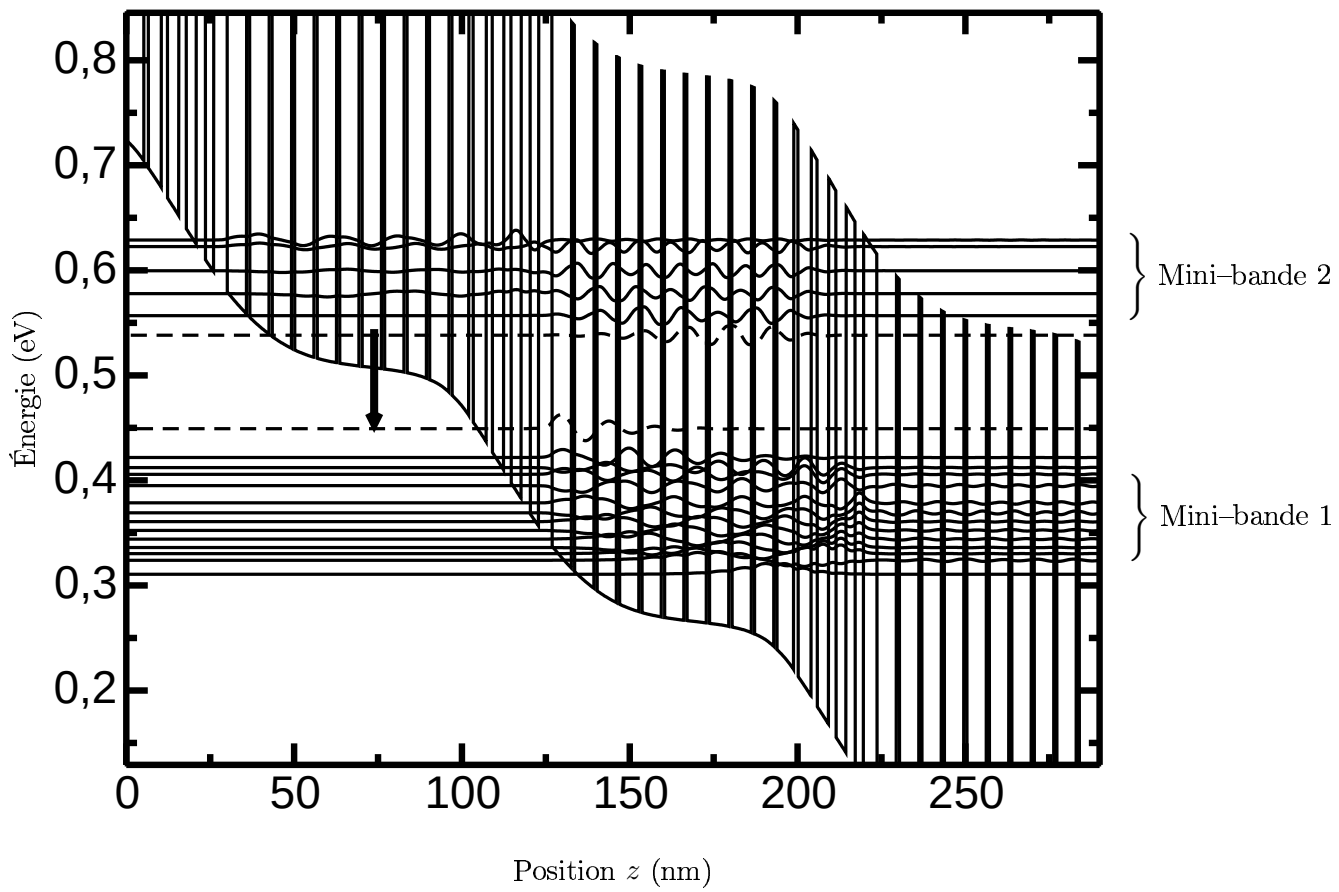


FIG. 6.1 – Structure de la bande de conduction et principales fonctions d'onde de l'étage central du LCQ conçu par Scamarcio *et al.* [3] et basé sur le système de matériaux $Al_{0,48}In_{0,52}As/Ga_{0,47}In_{0,53}As$. Les équations de Schrödinger et Poisson ont été résolues sur $2p+1=3$ étages en utilisant 60 sous–bandes mais, par souci de lisibilité, toutes n'ont pas été représentées. Les fonctions d'onde en trait tireté symbolisent les états radiatifs. La séquence épitaxiale d'un étage est (en Å) : 50/**13**/39/**18**/34/**22**/30/**27**/25/**40**, où les couches d'AlInAs ont été graissées. Toutes les couches sont dopées avec $N_D = 10^{17}$ cm^{-3}. La densité surfacique totale d'un étage est $N_s = 9{,}7 \times 10^{15}$ m^{-2}. Le champ électrique est $F = 25$ kV cm^{-1}, la température $\theta = 77$ K.

Dans ce LCQ, tant la région active que l'injecteur sont constitués de superréseaux. On remarque, sur la figure 6.1, que les sous–bandes forment deux *mini–bandes* séparées par un mini–gap d'environ 120 meV. Le fort dopage dans cette structure s'explique par la nécessité d'écranter, par la charge électronique, l'effet du champ électrique F afin d'obtenir une « bande plate ». Nous avons représenté par des traits tiretés les états quantiques qui sont susceptibles de s'« inverser ». L'écart énergétique entre ces sous–bandes est $\Delta E = 115$ meV, ce qui correspond à une fréquence $\nu \sim 28$ THz. Cette valeur est proche de celle publiée dans la référence [3], ce qui montre la validité de notre modèle de détermination des énergies propres et des fonctions d'onde dans les structures périodiques.

L'élément de dipôle entre ces deux niveaux est assez modeste pour une conception en superréseaux, puisqu'il s'élève à $\langle z \rangle = 3$ nm. Dans la référence [3], un élément de dipôle de $\langle z \rangle \sim 4$ nm a été calculé. La différence sensible entre ces deux résultats peut s'expliquer par des paramètres matériaux, comme la masse ou le coefficient de non–parabolicité, qui ne sont pas identiques.

Dans la référence [3], il a été constaté un effet laser jusqu'à 135 K en mode pulsé. La puissance maximale a été atteinte à 90 K avec 50 mW. Examinons maintenant les résultats des simulations de Monte Carlo que nous avons menées sur ce LCQ.

6.1.2 Résultats des simulations Monte Carlo

Nous avons simulé 2000 super–particules sur une durée totale de 300 ps, avec un pas de temps $\Delta t = 3 \times 10^{-15}$ s. Les mécanismes d'interaction suivants ont été inclus dans les simulations : interaction avec les phonons, impuretés ionisées et le désordre d'alliage. Nous n'avons pas inclus l'interaction électron–électron dans cette étude. En effet, dans la littérature, il est mentionné fréquemment que celle–ci n'est pas prédominante dans la conception des LCQ en infrarouge moyen [150] car l'écart énergétique entre les sous–bandes est assez conséquent.

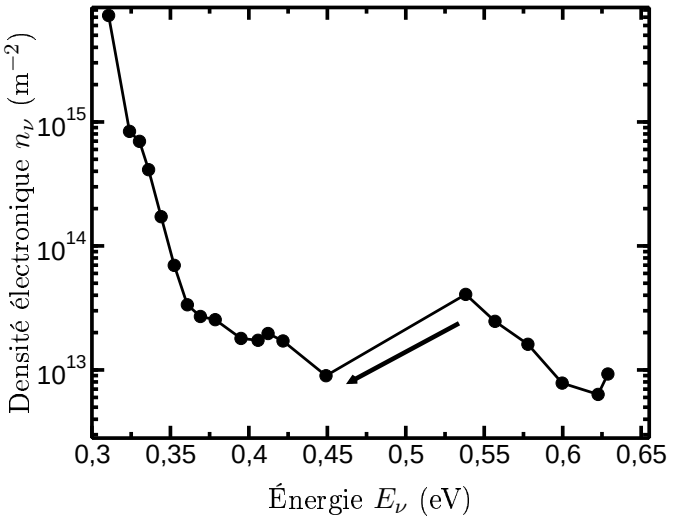


FIG. 6.2 – Répartition de la densité électronique par sous–bande du LCQ de la figure 6.1. Le champ électrique est $F = 25$ kV cm^{-1} et la température $\theta = 77$ K. L'échelle des ordonnées est semi–logarithmique. Les traits reliant les points sont tracés afin de servir de guide à l'œil, ainsi que la flèche qui symbolise l'émission laser mesurée expérimentalement dans la référence [3].

La figure 6.2 représente les densités électroniques n_ν des différentes sous–bandes E_ν de la structure de la figure 6.1. L'amplitude de l'inversion de population, marquée par une flèche sur la figure 6.2, est relativement médiocre au vu de la densité électronique totale du LCQ ($\sim 10^{16}$ m^{-2}). Elle s'élève à $\Delta n = 3{,}2\times10^{13}$ m^{-2}, soit $\sim 0{,}3$ % de la densité totale. D'ailleurs on constate que, l'inversion de population a lieu non seulement entre deux niveaux discrets, mais plus globalement entre le premier niveau de la deuxième mini–bande supérieure et de nombreux niveaux du haut de la mini–bande 1. Ce constat, ajouté au fait que le niveau des dopants présents dans la structure est élevé, explique très probablement que la raie d'émission de ce LCQ soit relativement « large » même à basse température, avec un FWHM[1]de 30 meV [3].

Quant au courant, nous l'avons évalué à partir d'un décompte statistique des transitions inter–étages. Dans les conditions de simulation de la figure 6.1, il s'élève à $J = 4{,}76$ kA cm^{-2}. Au vu des résultats expérimentaux de la référence [3] faisant état d'un courant à 90 K qui s'élève à $\simeq$ 15 kA cm^{-2}, notre modèle semble sous–estimer le courant et donc il néglige probablement certains mécanismes de transition inter–étages. Effectivement, il nous semble que le transport dans la mini–bande de l'injecteur est improprement décrit par nos simulations car l'interaction inter–porteurs n'y est pas incluse. Or, nous pensons qu'elle y jouerait un grand rôle au regard des faibles écarts énergétiques entre les états de cette mini–bande. Ce LCQ devrait donc être simulé en incorporant l'interaction électron–électron, ce qui est très coûteux en temps calcul, du fait du grand nombre de sous–bandes et de la densité électronique très élevée. Cependant, nous avons constaté que, même sans l'interaction électron–électron, le LCQ a des performances relativement moyennes, le courant étant particulièrement élevé et l'élément de dipôle faible. Le niveau de dopage dans cette structure s'est vite révélé un frein pour atteindre des performances intéressantes, car, outre un courant élevé, il serait à l'origine de l'élargissement spectral important. C'est pourquoi ce LCQ a été supplanté par d'autres structures à superréseau à pas variable qui font montre de performances plus intéressantes. Nous étudierons une telle structure dans la deuxième section de ce chapitre.

Nous avons tracé sur la figure 6.3 la caractéristique courant–tension $J(F)$ pour la structure de la figure 6.1 à le température $\theta = 77$ K. On constate que, dans la plage de champ 25–27 kV/cm, la caractéristique présente une *résistance différentielle négative*, avec une chute de la densité de courant alors que le champ électrique croît.

La figure 6.4 représente la densité électronique par sous–bandes du LCQ de la figure 6.1 pour différentes valeurs du champ électrique F. On constate que les populations du niveau laser haut et des états laser bas augmentent en même temps que le champ appliqué F croît. Les transitions inter–étages apportent ainsi au gaz électronique un surplus d'énergie qui, par exemple, pour un champ de $F = 27$ kV/cm équivaut à ~ 26 meV par période. Pour le champ de 27 kV cm^{-1}, on peut remarquer un pic dans la répartition de la distribution pour une énergie proche de 0,62 eV. L'explication de cet état anormalement peuplé réside dans le couplage entre les étages successifs à cause de la délocalisation des fonctions d'onde. Si l'on faisait apparaître les niveaux de tous les étages, cet état serait groupé avec ceux de la mini–bande fondamentale de l'étage précédent.

Nous avons tracé sur la figure 6.5 les densités électroniques des différentes sous–bandes pour différentes températures de réseau en maintenant le champ électrique constant à $F =$ 25 kV cm^{-1}. Le fonctionnement à température ambiante de ce LCQ semble prometteur puisque l'inversion de population reste maintenue avec $\Delta n \simeq 7 \times 10^{13}$ m^{-2}, soit un doublement de

[1]Acronyme anglais signifiant *Full Width at Half Maximum*, c'est–à–dire littéralement largeur totale à demi–hauteur.

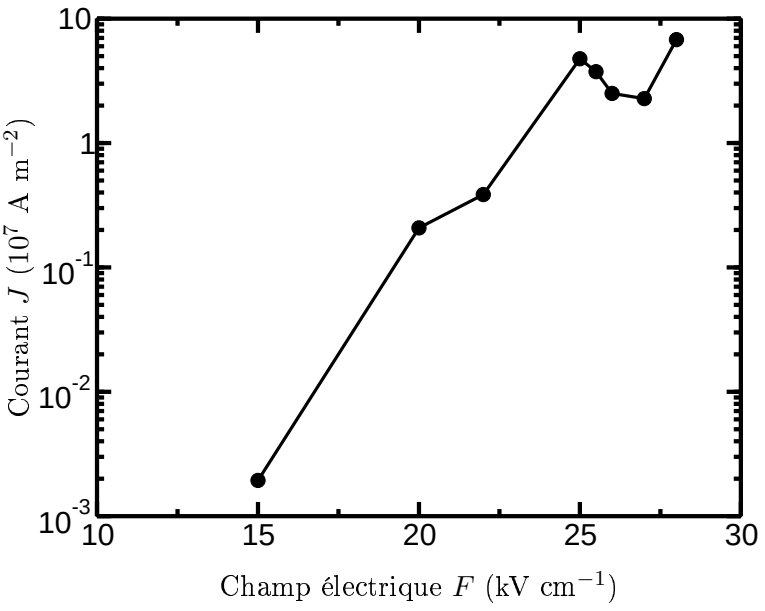


FIG. 6.3 – Caractéristique courant–tension $J(F)$ du LCQ de la figure 6.1 en échelle semi–logarithmique. La température a été maintenue constante à 77 K.

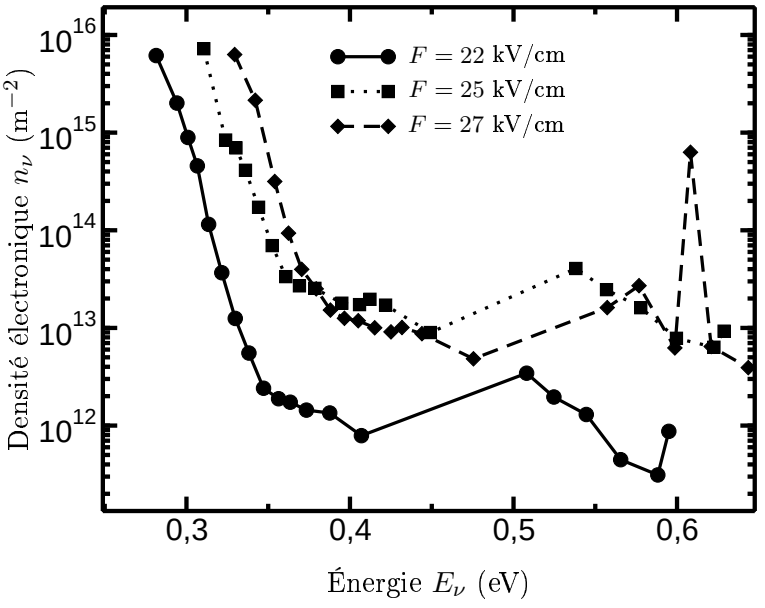


FIG. 6.4 – Répartition de la densité électronique n_ν par sous–bande du LCQ de la figure 6.1 pour différents champs électriques F. La température de réseau a été maintenue constante à $\theta = 77$ K.

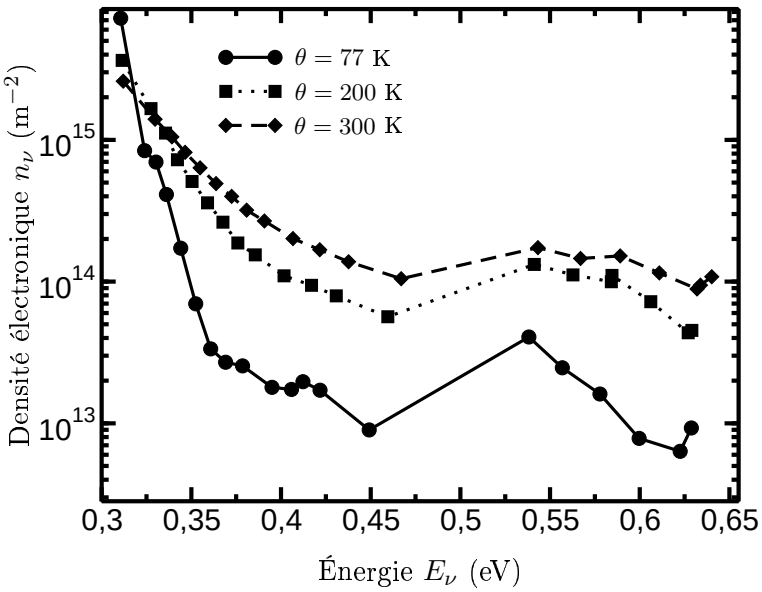


FIG. 6.5 – Répartition de la densité électronique n_ν par sous–bande du LCQ de la figure 6.1 pour différentes températures de réseau θ. Le champ a été maintenu constant à $F = 25$ kV cm^{-1}.

son amplitude par rapport à sa valeur à 77 K ($\sim$ 0,7 % de la charge totale à 300 K). À cette température de 300 K, c'est l'interaction sur phonon optique polaire qui prédomine notablement. Cependant, ce comportement reste purement qualitatif, seule l'expérience permettant de statuer sur l'émission laser à température ambiante.

6.2 Étude d'un laser à cascade quantique à superréseaux à pas variable térahertz

Dans cette section, nous étudions un LCQ en infrarouge lointain basé sur l'AlGaAs/GaAs. La conception du LCQ diffère également du cas précédent puisque l'injecteur est un superréseau à pas variable. Dans un premier temps, nous présenterons la structure de bande de conduction ainsi que les principales fonctions d'onde. Ensuite, nous discuterons de l'influence de l'interaction électron–électron sur la répartition de la charge électronique entre les différents niveaux quantiques. Nous discuterons également de la possibilité d'obtenir le gain du LCQ par les résultats de la simulation de Monte Carlo.

6.2.1 Structure de la bande de conduction et fonctions d'onde

Le LCQ conçu par Köhler *et al.* [4, 246] est basé sur le concept de région active sous la forme d'un *superréseau à pas variable*, c'est–à–dire d'une alternance d'un grand nombre de puits quantiques d'épaisseur diminuant graduellement. Dans le cas qui nous intéresse ici, le système de matériaux est le GaAs/$Al_{0,15}Ga_{0,85}As$. La figure 6.6 présente la structure de bande et les principales fonctions d'onde du LCQ pour un champ électrique appliqué $F = 3{,}5$ kV cm^{-1} et une température $\theta = 80$ K. Pour obtenir une description complète du LCQ, nous avons utilisé 60 sous–bandes. Les équations de Schrödinger et Poisson ont été résolues sur $2p+1 = 3$

étages au sens de la méthode de périodisation présentée au paragraphe 3.3. Ainsi, 20 sous–bandes sont calculées par étage. Le pas de discrétisation dans la direction de confinement est $\Delta z = 1$ Å. La précision de la résolution des énergies propres a été fixée à $\Delta E = 10^{-4}$ eV.

Explicitons brièvement les paramètres matériaux utilisés dans la simulation. La discontinuité de bande de conduction entre le GaAs et l'$Al_{0,15}Ga_{0,85}As$, évaluée selon la loi dite « 62 :38 », est $\Delta E_c = 0{,}15$ eV. La masse effective du GaAs est $m^* = 0{,}063 \times m_0$, celle de l'$Al_{0,15}Ga_{0,85}As$ est prise égale à $0{,}079 \times m_0$. Le coefficient de non–parabolicité du GaAs vaut $\alpha = 0{,}618$ eV^{-1}. Pour les autres paramètres matériaux, nous avons repris les données des références [92, 204]. Le lecteur y trouvera les valeurs des différents paramètres (masse, non–parabolicité, *etc*) en fonction de la composition en aluminium ainsi que la bibliographie dont sont issues ces données.

On constate que l'emploi d'un superréseau à pas variable permet d'obtenir une structure de bande plate sans avoir recours à un niveau de dopants important. Nous avons tracé sur la figure 6.6 en trait tireté les niveaux radiatifs de l'émission térahertz. Ces états sont, respectivement, le 7ième et le 8ième niveau à partir de la sous–bande fondamentale. L'écart énergétique entre ces sous–bandes est $\Delta E_{87} = 18{,}8$ meV, c'est–à–dire $\nu_{87} = 4{,}5$ THz. L'élément de dipôle entre ces états s'élève à $\langle z_{87} \rangle \simeq 6{,}9$ nm. On remarque que cette valeur est supérieure d'un facteur environ deux à celle calculée dans la structure en infrarouge moyen du paragraphe précédent.

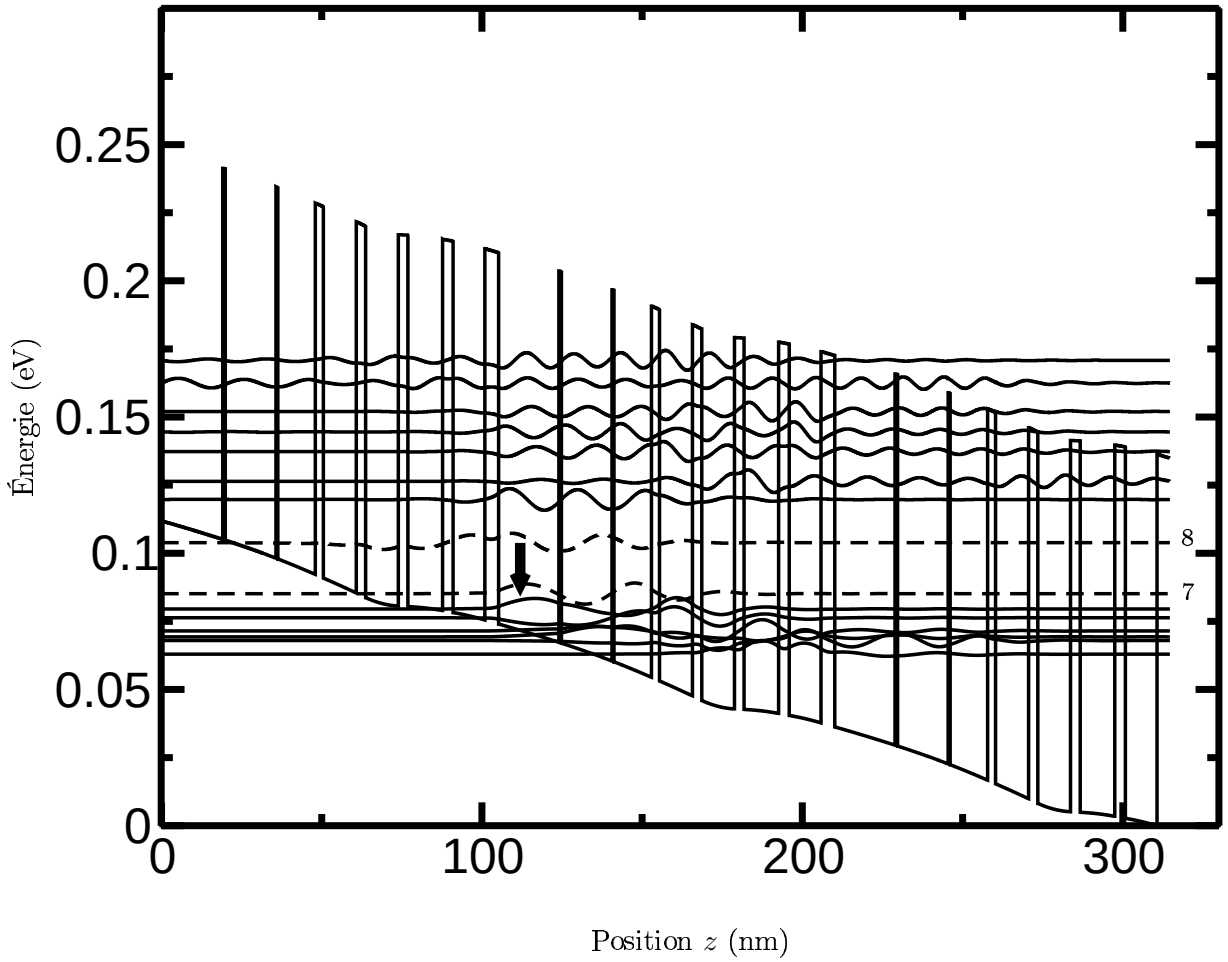


FIG. 6.6 – Structure de la bande de conduction et principales fonctions d'onde de l'étage central du LCQ décrit par Köhler *et al.* dans la référence [4]. Ce LCQ est basé sur le système de matériaux GaAs/$Al_{0,15}Ga_{0,85}As$. Les équations de Schrödinger et Poisson ont été résolues sur $2p+1=3$ étages en utilisant 60 sous–bandes, mais par souci de lisibilité toutes n'ont pas été représentées. La séquence épitaxiale d'un étage est (en Å) : **43**/188/**8**/158/**6**/117/**25**/103/**29**/102/**30**/108/**33**/99 où les couches d'AlGaAs ont été graissées et le puits de 102 Å est dopé avec $N_D = 4\times10^{22}$ m^{-3}. La densité électronique totale par étage est $N_s = 4{,}08\times10^{14}$ m^{-2}, le champ électrique appliqué $F = 3{,}5$ kV cm^{-1} et la température $\theta = 80$ K. La flèche désigne les deux niveaux radiatifs, 7 et 8, qui ont été tracés en traits tiretés.

6.2.2 Paramètres des simulations Monte Carlo

Nous avons simulé 5000 particules sur une durée totale de 300 ps, avec un pas de temps $\Delta t = 5 \times 10^{-16}$ s.

En ce qui concerne la modélisation de l'interaction électron–électron, les éléments de matrice du potentiel coulombien écranté et non–écranté ont été calculés sur un maillage de 100 points avec un pas de l'espace réciproque s'élevant à $\Delta Q = 10^7$ m^{-1}. La détermination du pas ΔQ est soumise à deux contraintes qui sont opposées. D'une part, afin de modéliser des échanges énergétiques de l'ordre de grandeur de 1 THz (i.e. 4 meV), le maillage de l'espace réciproque doit être choisi relativement fin. En utilisant une relation de dispersion parabolique $\varepsilon = \hbar^2\mathbf{K}^2/2m^*$, on peut estimer le vecteur d'onde correspondant à une énergie de 4 meV. Dans le GaAs, on obtient $K \approx 8 \times 10^7$ m^{-1}. D'autre part, ΔQ est fixé par les ressources informatiques et la place mémoire disponibles sur les stations de calcul. Ainsi, tous les systèmes possédant un grand nombre d'états ne sont pas simulables, ou en tout cas, pas dans les mêmes conditions de « finesse » des maillages. Notre programme informatique simulant les 60 sous–bandes de la structure de Köhler *et al.* occupe plus de 1 Go de mémoire. D'ailleurs, même avec l'accélération du calcul des facteurs de forme, le calcul des majorants des probabilités électron–électron dure environ une heure avec la configuration informatique du chapitre 3. Nous avons opté pour le modèle d'écrantage MSB avec réactualisation des probabilités tous les 2000 pas de temps à l'aide d'une polarisabilité calculée dans l'hypothèse de la faible déviation.

Les mécanismes d'interaction suivants ont été inclus dans le modèle : interaction électron–électron, interaction électron–phonon (acoustique et optique polaire), interaction avec les impuretés ionisées et l'interaction d'alliage. La pas d'énergie pour le calcul des probabilités a été fixé à $\Delta\varepsilon = \hbar\omega_{\mathrm{op}}/25 \approx 1{,}4$ meV, valeur inférieure à l'énergie correspondant à 1 THz, i.e., 4 meV.

6.2.3 Influence de l'interaction électron–électron

Répartition de la densité électronique en fonction des sous–bandes

Afin de discuter de l'influence de l'interaction inter–porteurs sur le transport dans le LCQ de la figure 6.6, nous avons représenté sur la figure 6.7 la répartition de la densité électronique n_ν en fonction des énergies propres E_ν en incluant ou non l'interaction électron–électron dans le simulateur Monte Carlo.

On constate nettement que sans l'inclusion de l'interaction électron–électron, *aucune inversion de population à une fréquence proche de 4,5 THz n'est obtenue.* Par contre, en incluant l'interaction inter–porteurs, nous trouvons une inversion de population correspondant à un écart énergétique $\Delta E = 18{,}8$ meV.

Dans la référence [246], des simulations de Monte Carlo ont donné une inversion de population $\Delta n_{87} = n_8 - n_7 \simeq 1{,}1 \times 10^{13}$ m^{-2}. Nous trouvons, à partir des résultats de la figure 6.7, $\Delta n_{87} = 2{,}5 \times 10^{13}$ m^{-2}, soit ~ 6 % de la densité surfacique totale. Dans la référence [148], Indjin *et al.* ont calculé que Δn_{87} était compris entre $1{,}8 \times 10^{13}$ m^{-2} et $0{,}5 \times 10^{13}$ m^{-2} pour des températures de réseau allant de 4 K à 60 K. La différence entre ces résultats peut être due à de multiples raisons qui ont à voir, tant avec le choix des paramètres matériaux, qu'avec la modélisation de l'interaction électron–électron et de l'écrantage, détails qui apparaissent rarement dans les publications. De plus, une légère modification sur les fonctions d'onde peut avoir des conséquences qu'il est souvent difficile de prévoir sur les taux d'interactions entre les états.

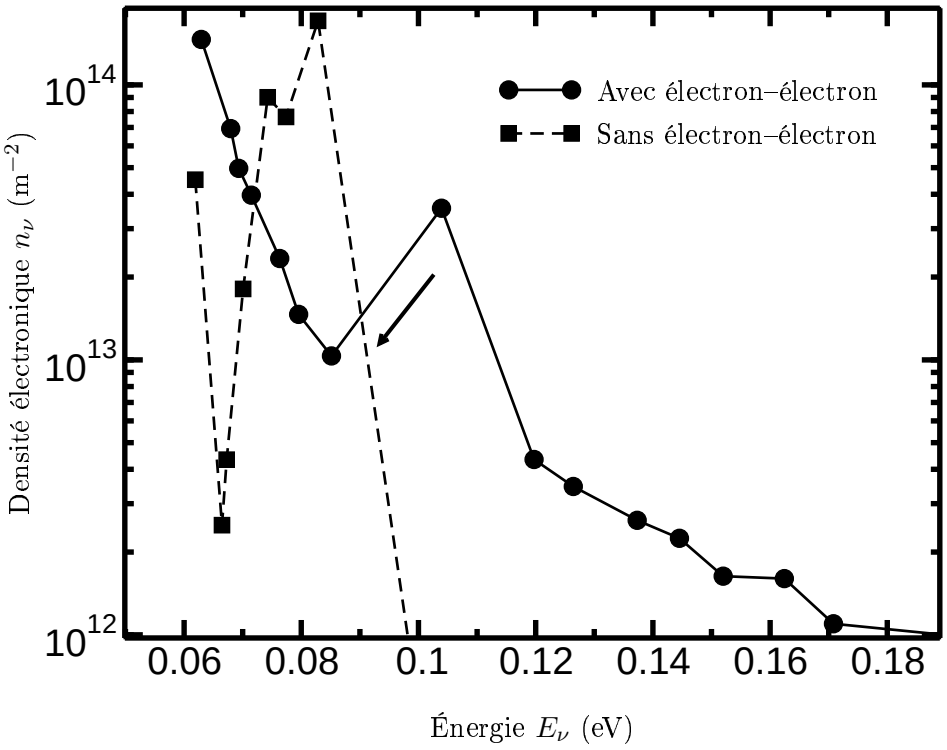


FIG. 6.7 – Répartition de la densité électronique n_ν par sous–bande pour le LCQ de la figure 6.6. La flèche permet de symboliser la transition radiative à la fréquence $\nu \sim 4{,}5$ THz. Le champ électrique appliqué est $F = 3{,}5$ kV cm^{-1} et la température $\theta = 80$ K.

Estimation du gain quantique

Il peut être intéressant, à bien des égards, de calculer le gain des LCQ pour le comparer aux pertes de la cavité. Ces pertes peuvent être séparées essentiellement en trois contributions dues au guide d'onde, aux miroirs et à l'absorption des porteurs libres. Nous allons voir que les résultats des simulations de Monte Carlo peuvent, dans une certaine mesure, fournir des indications sur ce gain.

Le gain $g_{\nu\mu}$ entre deux niveaux ν et μ peut être calculé à partir des résultats Monte Carlo et à partir de la connaissance de l'amplitude de l'inversion de population $\Delta n_{\nu\mu}$. L'expression de $g_{\nu\mu}$ est [37, 52, 247] :

$$g_{\nu\mu} = \frac{\Delta n_{\nu\mu} e^2 f_{\nu\mu}}{2\pi D c n_{\mathrm{op}} \kappa_0 m^* \gamma_{\nu\mu}}, \tag{6.1}$$

où $f_{\nu\mu}$ est la force d'oscillateur[2] pour la transition optique $\nu \rightarrow \mu$, c est la vitesse de la lumière, n_{op} est l'indice optique du matériau, D est, on le rappelle, la longueur d'un étage de la structure, et $\gamma_{\nu\mu}$ est la « largeur de raie » de l'émission (en seconde^{-1}). Ce paramètre $\gamma_{\nu\mu}$ est relativement délicat à déterminer par les simulations de Monte Carlo. Il représente l'élargissement spectral dû aux mécanismes non–radiatifs qui « concurrencent » la radiation optique.

Dans un premier temps, on utilise une valeur communément mesurée pour d'autres LCQ térahertz de $\gamma \approx 2$ meV. Avec nos résultats de simulation, on calcule ainsi un gain $g_{87} \simeq 38\ \mathrm{cm}^{-1}$. L'application numérique a été effectuée avec les paramètres matériaux du GaAs, i.e., $n_{\mathrm{op}} = 3{,}3$ et $m^* = 0{,}063 \times m_0$. Ce calcul semble s'accorder avec celui de la référence [246] qui fait état d'un gain compris entre 31 et 110 cm^{-1}. À titre de comparaison, cette formule appliquée au LCQ étudié dans la première section, c'est–à–dire à la structure conçue par Scamarcio *et al.*, donne $g = 6{,}4\ \mathrm{cm}^{-1}$ en utilisant $\gamma = 30$ meV, $n_{\mathrm{op}} = 3{,}2$ et $m^* = 0{,}044 \times m_0$ [3].

La quantité γ^{-1} est un *temps de cohérence de phase* qui, en toute rigueur, exprime la perte de cohérence quantique entre éléments non–diagonaux de l'opérateur densité [37, 248]. Tout le problème est alors de préciser quelles interactions sont *déphasantes*. Ce sujet fait, encore aujourd'hui, l'objet de travaux théoriques, que nous n'aborderons pas dans ce travail, car ils dépassent de très loin le sujet de cette thèse. Mentionnons simplement que la notion de cohérence est intimement liée au choix de la représentation du système et au choix de la relation de jauge [135]. Afin essayer d'obtenir un ordre de grandeur raisonnable, nous allons considérer que seules les interactions inélastiques sont déphasantes, hypothèse émise dans les références [248, 249], qui ne considèrent que l'interaction sur phonons optiques polaires intra-sous–bandes.

Par un décompte statistique des interactions intervenues durant la simulation de Monte Carlo, il est possible de calculer les « durées de vie » intra- et inter-sous–bande $\tau_{\nu\rightarrow\mu}$. Si durant le temps de simulation t_{sim}, on décompte statistiquement $N^{\eta}_{\nu\rightarrow\mu}$ transitions de la sous–bande ν vers la sous–bande μ par le mécanisme d'interaction η, alors la durée de vie $\tau^{\eta}_{\nu\rightarrow\mu}$ peut être

[2] La force d'oscillateur est reliée à l'élément dipolaire $\langle z_{\nu\mu}\rangle$ par l'expression suivante :

$$f_{\nu\mu} = \frac{2m_0^* \Delta E_{\nu\mu}}{\hbar^2} \langle z_{\nu\mu}\rangle^2.$$

Cette grandeur est sans dimension. Cette définition fait abstraction du problème posé par la non–parabolicité. Pour de plus amples détails, le lecteur est invité à consulter l'article de Sirtori *et al.* [48]

simplement calculée par[3] :

$$\tau^{\eta}_{\nu\to\mu} = \frac{N_\nu t_{\text{sim}}}{N^{\eta}_{\nu\to\mu}}, \tag{6.2}$$

où N_ν le nombre d'électrons sur la sous–bande ν. Alors la durée de vie totale τ_ν est calculée par :

$$\tau_\nu^{-1} = \sum_{\mu\neq\nu,\eta} (\tau^{\eta}_{\nu\to\mu})^{-1}. \tag{6.3}$$

Nous avons calculé un temps de relaxation $\tau_{87} \simeq 0{,}75$ ps, ce qui correspond à $\gamma_{87} \simeq 0{,}9$ meV. Avec cette valeur de γ_{87}, le gain calculé avec la formule (6.1) s'élève à $g_{87} = 115$ cm^{-1}. Visiblement la valeur de γ_{87}, calculée uniquement avec les interactions avec les phonons optiques polaires, semble inférieure aux valeurs mesurées. On néglige manifestement un certain nombre d'interactions « décohérentes ». Dans la littérature, la rugosité des interfaces semble être un facteur d'élargissement, les transitions verticales étant mieux définies que les transitions diagonales. En outre, on néglige l'ensemble des interactions électron–électron, hypothèse très sévère. À dire vrai, un cadre théorique sur le déphasage induit par l'interaction électron–électron est aujourd'hui toujours manquant. Woerner *et al.* [144] indiquent ainsi que seule une fraction des interactions électron–électron contribue à la décohérence. À ce niveau, il semble que le cadre de la règle d'or de Fermi décrivant les interactions entre états propres du Hamiltonien non–perturbé de BenDaniel–Duke semble trop restrictif et ne permette pas de tenir compte de superposition cohérente d'états quantiques [144].

Nous allons donner un exemple où un mécanisme supplémentaire a été décompté dans le calcul de γ. Ainsi, nous avons calculé τ en incluant les interactions électron–électron intra-sous–bande 8 et inter-sous–bande $8 \to 7$. Dans ce cas, on obtient $\tau \simeq 0{,}07$ ps, soit $\gamma \simeq 10$ meV, valeur qui est manifestement surestimée. Le calcul de γ attend donc une définition précise des interactions déphasantes à prendre en compte. Cependant, toute nouvelle interaction introduite dans le modèle modifie les performances du LCQ, c'est–à–dire le courant, le paramètre γ et l'inversion de population Δn. Comme $g \propto \Delta n/\gamma$, il est difficile de donner une estimation qualitative de l'influence d'un nouveau mécanisme d'interaction sur le gain.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié deux exemples de LCQ. Les deux structures diffèrent tant par le système de matériaux que par leur fréquence d'émission. Ainsi nous avons pu illustrer l'étendue des applications possibles du simulateur et son caractère général.

Pour ces deux structures, notre modèle prédit une inversion de population qui concerne, dans les deux cas, au mieux une faible fraction de la densité électronique totale. Nous avons constaté que la non inclusion de l'interaction entre les électrons conduit à une sous–estimation de la densité de courant dans le LCQ émettant dans l'infrarouge moyen à $\lambda = 11$ μm.

Dans le tout premier exemple de LCQ térahertz, nous avons montré un effet spectaculaire de l'interaction électron–électron sur les densités électroniques de sous–bandes. Nos résultats Monte Carlo prédisent pour cette structure un gain compris entre 38 et 115 cm^{-1} suivant la valeur de l'élargissement spectral. Dans le prochain chapitre, nous allons étudier un autre LCQ térahertz basé sur le concept de dépopulation par résonance de phonon et qui a montré

[3] Il ne s'agit en aucune façon d'une définition unique, de multiples normalisations et définitions pouvant conduire à la notion de durée de vie dans la simulation de Monte Carlo.

des performances tout à fait remarquables. Le LCQ térahertz à superréseau à pas variable pourra alors servir de point de comparaison.

Chapitre 7

Laser à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon

Introduction

Dans la section 7.1, nous présentons le laser à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon conçu par Williams *et al.* [5]. Nous détaillons la structure de bande de ce composant, les états électroniques et le principe de fonctionnement à l'origine de l'inversion de population. Dans la section 7.2, nous exposons les premiers résultats de simulations Monte Carlo de ce LCQ. Dans un premier temps, nous précisons les paramètres de simulation que nous avons adoptés. Ensuite, nous discutons dans le détail de l'influence de l'interaction électron–électron sur le transport. Dans la section 7.3, nous discutons de l'impact du modèle physique de l'interaction inter–porteurs sur les performances de ce LCQ. Dans la dernière section 7.4, nous étudions l'influence de deux paramètres prépondérants que sont la température de réseau et la polarisation extérieure. Nous essaierons de déterminer l'origine des densités de courants élevées, dont souffre le composant. Enfin, pour conclure le chapitre, nous discutons du fonctionnement du composant à température ambiante.

7.1 Présentation de la structure

La première structure à dépopulation par résonance de phonon (expression abrégée par l'acronyme DPRP dans la suite de ce mémoire) a été conçue par Williams *et al.* du Massachusetts Institute of Technology à Boston [5]. Ce premier composant a été a l'origine d'une famille de LCQ qui sont à l'état de l'art pour les conditions de fonctionnement au térahertz (fréquence, puissance de sortie, température en CW, ...), tout en conservant une séquence épitaxiale élémentaire relativement simple par rapport aux LCQ utilisant des superréseaux [5, 25, 64–66]. Nous allons voir que, dans ce LCQ, le phénomène d'inversion de population peut être décrit à l'aide de seulement cinq sous–bandes. Cette relative simplicité permet de mener une étude poussée de l'influence de l'interaction électron–électron et de sa modélisation dans un LCQ émettant aux fréquences térahertz.

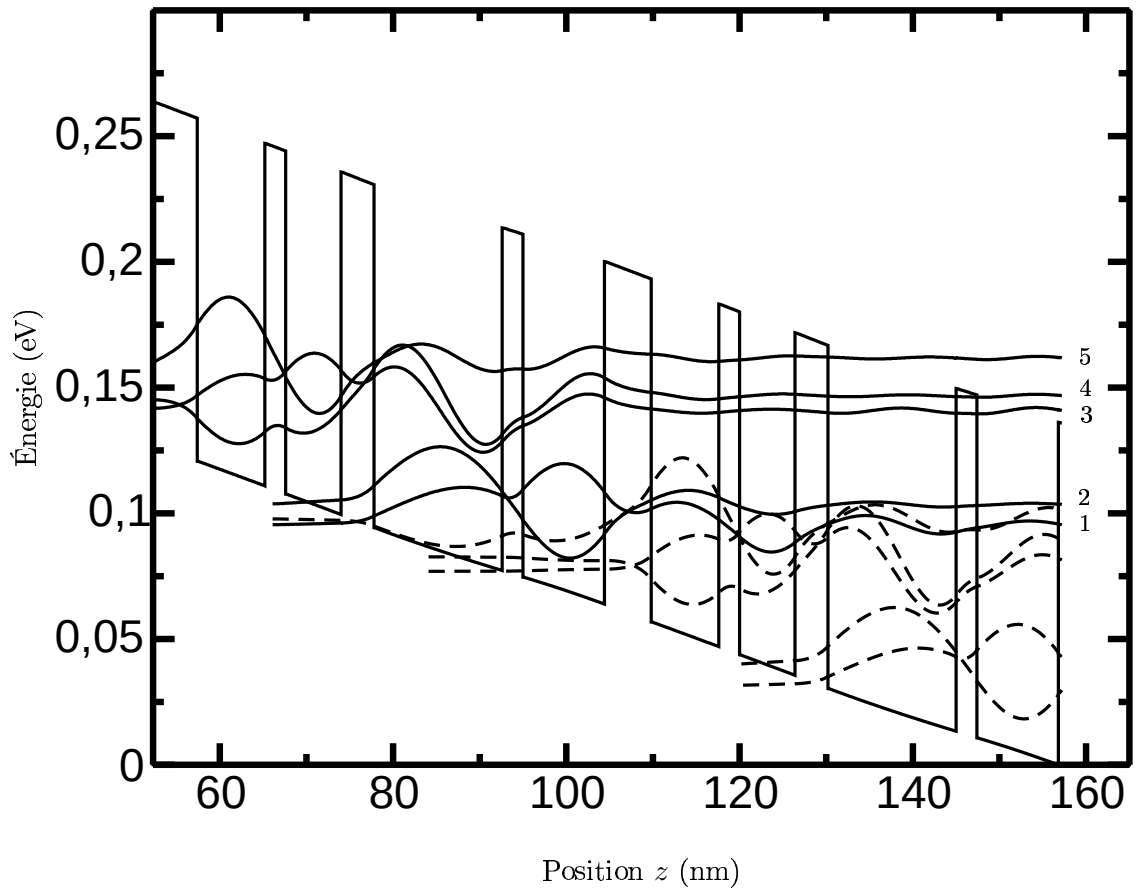


FIG. 7.1 – Potentiel et principales fonctions d'onde de l'étage central (trait plein) du laser à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon fabriqué dans le système de matériaux GaAs/$Al_{0,15}Ga_{0,85}As$ [5].
Les fonctions d'onde ont été obtenues en résolvant les équations de Schrödinger et Poisson sur $2p+1=3$ étages à l'aide de 30 sous–bandes, toutes n'étant pas représentées par souci de lisibilité. Le champ externe appliqué est $F = 12{,}2$ kV cm^{-1} et la température de réseau est 44 K. On a fait figurer en trait tireté les fonctions d'onde de l'étage adjacent obtenues par périodisation. La séquence épitaxiale d'un étage est la suivante (en Å) : **54**/78/**24**/64/**38**/148/**24**/94, où les barrières d'AlGaAs ont été graissées et le puits de 148 Å est dopé à $1{,}9 \times 10^{16}$ cm^{-3}, pour une densité surfacique totale par étage de $N_s = 2{,}8 \times 10^{14}$ m^{-2}.

La figure 7.1 représente la structure de la bande de conduction et les principales fonctions d'onde du LCQ à DPRP pour $F = 12{,}2$ kV cm^{-1} et $\theta = 44$ K. Pour ces calculs, nous avons repris les paramètres matériaux utilisés pour l'étude du LCQ à superréseau à pas variable du chapitre précédent. Les équations de Schrödinger et Poisson ont été résolues sur un maillage de pas spatial $\Delta z = 1$ Å, sur $2p + 1 = 3$ étages, par la méthode de périodisation présentée au paragraphe 3.3. Cette structure est convenablement décrite à l'aide de 30 sous–bandes, soit dix par étage, toutes n'étant pas représentées par souci de lisibilité. C'est donc à dessein que nous avons employé précédemment l'expression de « relative simplicité », car la modélisation de l'interaction électron–électron dans ce LCQ nécessite, tout de même, de très importants moyens informatiques pour calculer les éléments de matrice du potentiel coulombien entre ces 30 sous–bandes.

La précision sur les valeurs propres est de 10^{-4} eV. L'obtention des 30 états électroniques s'effectue en environ une minute avec la configuration informatique présentée au chapitre 3. On constate sur la figure 7.1 que les fonctions d'onde sont fortement délocalisées sur plusieurs étages. En particulier, on remarquera le recouvrement important entre les fonctions d'onde de l'injecteur (notés 1, 2 et 1′, 2′) d'un étage à l'autre, ce qui est confirmé par l'élément de dipôle $\langle z_{12'} \rangle = 1{,}4$ nm. Le tableau 7.1 donne les valeurs des énergies propres représentées sur la figure 7.1.

TAB. 7.1 – Énergies propres E_ν, populations initiales ainsi que les majorants électron–électron des sous–bandes représentées par la figure 7.1.
La température est $\theta = 44$ K et le champ électrique $F = 12{,}2$ kV/cm.

ν	E_ν (eV)	Populations initiales (10^{13} m^{-2})	Majorants électron–électron $\Lambda_\nu^{e/e}$ en début de simulation (10^{13} s^{-1})
1	$9{,}54 \times 10^{-2}$	24,8	47,6
2	0,104	3,2	21
3	0,141	~ 0	3
4	0,147	~ 0	3
5	0,162	~ 0	2,8

La séquence épitaxiale de ce LCQ est constituée d'une paire de double puits quantiques réalisés à l'aide des matériaux GaAs/$Al_{0,15}Ga_{0,85}As$ et réglés de manière à obtenir, sous l'application du champ externe $F = 12{,}2$ kV/cm, les caractéristiques suivantes :

- Une émission laser qui se produit entre les niveaux notés 5 et 4 à la fréquence de 3,6 THz (c'est–à–dire $\Delta E_{54} = 15$ meV), avec un élément dipolaire $\langle z_{54} \rangle = 5{,}4$ nm. Dans la référence [5], l'écart énergétique calculé est d'environ de 14,2 meV, pour un élément dipolaire de 6,4 nm. La différence entre nos valeurs et celles de la référence [5] peut s'expliquer par des écarts sur les paramètres matériaux, comme la masse effective ou la discontinuité de la bande de conduction entre GaAs et $Al_{0,15}Ga_{0,85}As$;
- Un anti–croisement des sous–bandes 4 et 3 : l'écart énergétique entre ces états est ainsi très faible, $\Delta E_{43} = 5{,}9$ meV et le recouvrement spatial très important $\langle z_{43} \rangle = 9$ nm ;
- Un écart énergétique entre les sous–bandes 3 et 2, légèrement supérieur à l'énergie du phonon optique polaire du GaAs, i.e., $\Delta E_{32} = 37$ meV $\approx \hbar\omega_{\rm op}$;

- Le couplage avec l'étage adjacent est assuré par l'anti–croisement des niveaux 1 et 5′, 5′ étant le niveau laser haut de l'étage adjacent. L'écart énergétique entre ces niveaux est $\Delta E_{15'} = 2{,}7$ meV et $\langle z_{15'} \rangle = 2{,}8$ nm. La « chute de potentiel » d'un étage à l'autre est $\Delta \approx 64$ meV (ou ~ 64 mV/période).

Nous avons fait abondamment référence au chapitre 1 au mécanisme de dépopulation du niveau laser bas par phonon. Rappelons en quoi cela consiste : l'écart énergétique entre les sous–bandes 3 et 2, c'est–à–dire entre le doublet des niveaux laser bas et l'injecteur, est réglé sur l'énergie du phonon optique polaire. Ainsi, la probabilité de réaliser la transition inter-sous–bande $3 \rightarrow 2$ par émission d'un phonon optique polaire est très importante. La résonance avec l'énergie de phonon permet donc de dépeupler « indirectement » le niveau laser bas. Ce phénomène assure la sélectivité du dépeuplement, en évitant de vider le niveau laser haut et de diminuer le temps de vie du niveau 3. En outre, ce mécanisme d'émission de phonon optique s'amplifie lorsque la température augmente [5]. Ce mécanisme sera plus amplement détaillé lorsque nous aborderons ultérieurement les taux de transitions à l'issue des simulations de Monte Carlo. Discutons maintenant de l'influence de l'interaction inter–porteurs sur les performances (i.e., amplitude de l'inversion de population, densité de courant, ...) de ce LCQ.

7.2 Influence de l'interaction électron–électron

Dans cette partie nous essayons d'examiner l'influence de l'interaction électron–électron sur le transport dans le LCQ de la figure 7.1. Pour cela, nous comparerons les résultats obtenus avec et sans l'interaction inter–porteurs. Mais avant cela, précisons tout d'abord les paramètres de simulation que nous avons utilisés.

7.2.1 Paramètres des simulations Monte Carlo

La plupart des paramètres sont fixés après de nombreux essais afin d'optimiser la précision et le temps de simulation. Pour le LCQ à DPRP, un point en (θ, F), avec les paramètres que nous donnons ci–dessous et la configuration informatique du chapitre 3, s'obtient en ~ 36 heures. Le programme occupe, du fait des tableaux relatifs au potentiel coulombien, environ 250 Mo en mémoire.

1. <u>Paramètres de Monte Carlo :</u>

   Nous avons étudié le transport de 2000 électrons sur une durée totale de 200 ps avec un pas de temps $\Delta t = 5 \times 10^{-16}$ s pour la plupart des simulations. En effet, dans certaines conditions de simulation, il est nécessaire d'adapter le pas Δt : par exemple, nous verrons que lorsque la température augmente les probabilités d'interactions augmentent avec elle, obligeant à diminuer le pas de temps. Nous préciserons, lorsque ces études seront menées en section 7.4, quel a été le pas de temps choisi. Le principe d'exclusion de Pauli a été modélisé en prenant un maximum de 50 particules par case de l'espace des phases. Nous verrons que, dans le régime de gaz non dégénéré que nous obtenons, le principe de Pauli a peu d'influence.

2. <u>Modélisation des interactions :</u>

   Les mécanismes d'interaction suivant ont été considérés : électron–électron, électron–phonons (acoustiques et optiques polaire), électron–impuretés ionisées et interaction d'alliage.

Nous avons employé un pas de discrétisation en énergie des probabilités d'interaction identique à celui utilisé pour le LCQ térahertz du chapitre précédent, c'est–à–dire $\hbar\omega_{\mathrm{op}}/25 \approx 1{,}4$ meV.

En ce qui concerne la modélisation de l'interaction électron–électron, le potentiel coulombien est calculé sur 200 points avec un pas $\Delta Q = 7 \times 10^6$ m^{-1}, ce qui correspond à une énergie maximale de $\simeq 0{,}7$ eV. Sauf pour les calculs menés dans la section 7.3, nous incluons dans la modélisation de l'interaction électron–électron l'effet du terme d'échange dû à la répulsion entre électrons de spins parallèles.

3. Paramètres d'écrantage hors d'équilibre :

   Dans cette première partie sur la présentation de l'effet de l'interaction électron–électron, nous utilisons le modèle d'écrantage MSB présenté au chapitre 5. Nous reportons au chapitre 8 une discussion plus poussée sur l'influence du modèle d'écrantage. On suppose que l'essentiel de la distribution électronique est portée par la sous–bande fondamentale, qui est donc seule à écranter le gaz électronique (sous–bande numérotée 1 sur la figure 7.1). Ainsi, on fait g = 1 dans les équations de l'écrantage [équations (5.29)]. On procède à une remise à jour de l'écrantage et des probabilités électron–électron tous les 2000 pas de temps. Un seuil de 7 % de la densité électronique totale a été fixé de manière à travailler avec des sous–bandes dont la population est représentative, sans être trop affectée par les fluctuations brèves.

Dans la suite de cette partie, nous allons d'abord introduire le lecteur aux ordres de grandeurs des taux de transitions des différents mécanismes d'interaction. Puis, nous étudierons l'influence de l'interaction inter–porteurs, successivement, sur la dynamique du système, sur la répartition de la densité électronique entre les différentes sous–bandes et sur les fonctions de distribution. À cette occasion, nous aborderons la notion très importante de température électronique de sous–bande qui sera utilisée dans la suite de ce mémoire.

7.2.2 Probabilités d'interaction dans le LCQ à DPRP à $\theta = 44$ K

TAB. 7.2 – Majorants électron–électron $\Lambda^{\mathrm{e/e}}_{\nu\to\mu}$ [Éq. (4.16)] intra- et inter-sous–bandes pour les cinq sous–bandes principales du LCQ de la figure 7.1.
Ces calculs sont menés à partir des populations et du tenseur de polarisabilité à l'équilibre thermodynamique à la température $\theta = 44$ K. L'unité des probabilités est 10^{13} s^{-1}.

$\nu \to \mu$	1	2	3	4	5
1	24,7	20,4	3×10^{-2}	$2{,}4 \times 10^{-2}$	$6{,}2 \times 10^{-3}$
2	8,4	11,8	10^{-2}	$1{,}2 \times 10^{-2}$	$8{,}7 \times 10^{-3}$
3	1,1	0,32	1,46	2×10^{-2}	10^{-3}
4	1,1	0,3	$2{,}1 \times 10^{-2}$	1,4	$4{,}2 \times 10^{-3}$
5	~ 1	0,3	$8{,}\times 10^{-3}$	10^{-2}	1,4

Dans un premier temps, nous présentons les ordres de grandeur des divers mécanismes d'interaction dans le laser à cascade quantique à DPRP. Nous avons tracé sur la figure 7.2 les probabilités totales pour les cinq sous–bandes de la structure à DPRP en fonction de

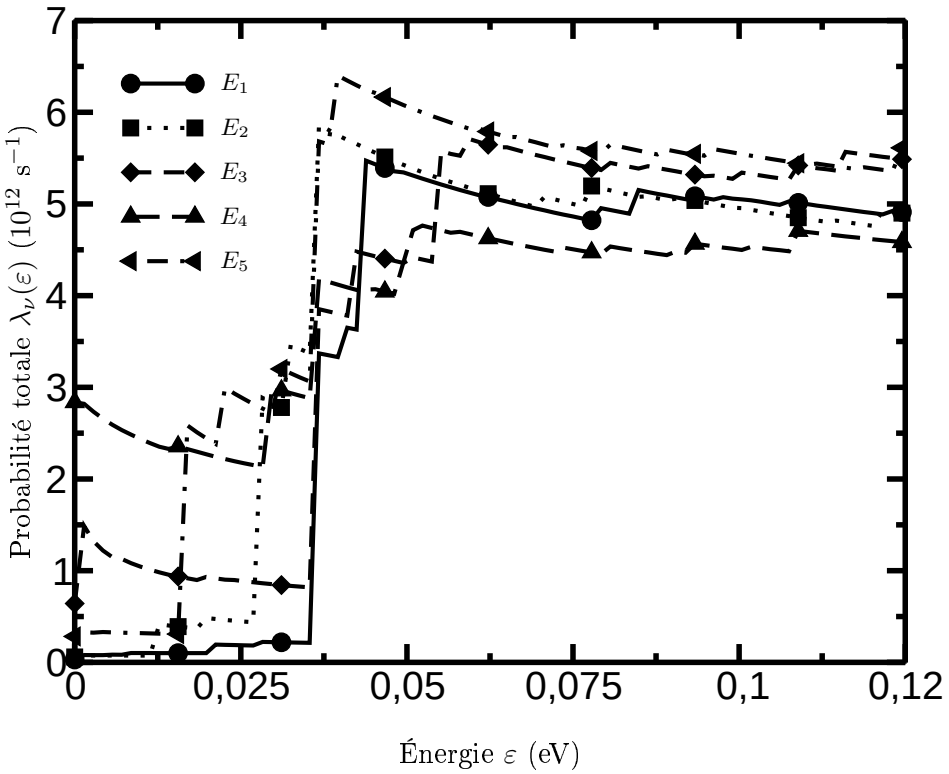


FIG. 7.2 – Probabilité totale par sous–bande en fonction de l'énergie cinétique ε pour les cinq sous–bandes de l'étage central du LCQ de la figure 7.1.
Le pas en énergie est $\Delta\varepsilon \simeq 1{,}4$ meV. L'interaction électron–électron ainsi que l'interaction sur impuretés ionisées n'ont pas été représentées sur la figure par souci de lisibilité.

l'énergie cinétique ε, c'est–à–dire la somme des probabilités $\lambda_{\nu\mu}(\varepsilon)$ sur l'indice de sous–bande finale μ. Par souci de bien distinguer les différents mécanismes, nous n'avons par représenté l'interaction électron–électron et l'interaction sur impuretés ionisées. Les majorants électron–électron totaux sont donnés, quant à eux, par le tableau 7.1. À noter que les valeurs de ce tableau sont calculées à l'équilibre thermodynamique. Elles pourront évoluer fortement en cours de simulation.

Sur la figure 7.2, on remarque les nombreux seuils d'émission de phonon optique polaire intra- et inter-sous–bandes. En comparant cette figure et le tableau 7.1, on constate que, dans l'ensemble, les probabilités électron–électron sont d'un ordre de grandeur de 100 à 10 fois supérieures que les autres probabilités, i.e., majoritairement les probabilités sur phonon optique polaire.

La probabilité d'interaction sur impuretés ionisées s'élève, pour sa valeur maximale, à quelques 10^{13} s^{-1}. L'interaction d'alliage est 10 à 100 fois plus rare que l'interaction sur phonon optique polaire. De manière semblable, l'interaction sur phonon acoustique est, à 44 K, inférieure d'un facteur 10^4 à celle du phonon optique polaire. Nos calculs montrent que ces mécanismes d'interaction sont beaucoup moins élevés. Ils induiront peu de transitions inter-sous–bandes et donc inter–étages, et ne participeront pas de manière prépondérante au courant dans le LCQ.

Détaillons à présent quelque peu les majorants de l'interaction électron–électron en discutant des contributions intra- et inter-sous–bandes rassemblées dans le tableau 7.2. On constate que les probabilités inter-sous–bandes sont de deux à trois ordres de grandeur inférieures aux probabilités intra-sous–bandes. Ceci s'explique par le fait que les facteurs de recouvrement, intervenant dans le calcul des probabilités électron–électron inter-sous–bandes $\Lambda_{\nu\mu}$, ont des maximums beaucoup plus faibles que les éléments intra-sous–bande $F_{\nu\nu\nu\nu}$, qui sont les éléments qui contribuent majoritairement aux probabilités intra-sous–bande $\Lambda_{\nu\nu}$ et qui valent 1 en $Q = 0$ (voir chapitre 5).

7.2.3 Détail des réjections dans le traitement de l'interaction électron–électron

La figure 7.3 permet de mieux comprendre comment est traitée l'interaction électron–électron par la méthode de Monte Carlo et quel est son coût numérique. Nous avons tracé sur cette figure la proportion des événements électron–électron rejetés par rapport au total des événements électron–électrons tirés au cours de la simulation. Avant toute chose, nos calculs montrent qu'en général environ 95 % des interactions sont en fait rejetées, confirmant le fait que le traitement de l'interaction inter–porteurs se révèle en fait très coûteux.

Rappelons que les interactions électron–électron peuvent être refusées soit parce que la conservation de l'énergie n'est pas vérifiée, soit après détermination de l'état final. Les courbes de la figure 7.3 expliquent par quelle catégorie de réjections les interactions sont refusées. On constate que c'est essentiellement la réjection sur la détermination des états finaux qui l'emporte. On remarque également, qu'au fur et à mesure que la simulation se déroule, le nombre de réjections sur la conservation de l'énergie diminue. On peut montrer que cela est dû au fait que les électrons sont plus « chauds » et donc vérifient plus facilement les lois de conservation de l'énergie lors des transitions inter-sous–bandes. Enfin, on remarque que le régime, dans lequel évolue le gaz électronique dans ce LCQ, est un régime de gaz non–dégénéré puisque le principe d'exclusion de Pauli conduit à très peu de réjections sur la paire des électrons principal et partenaire.

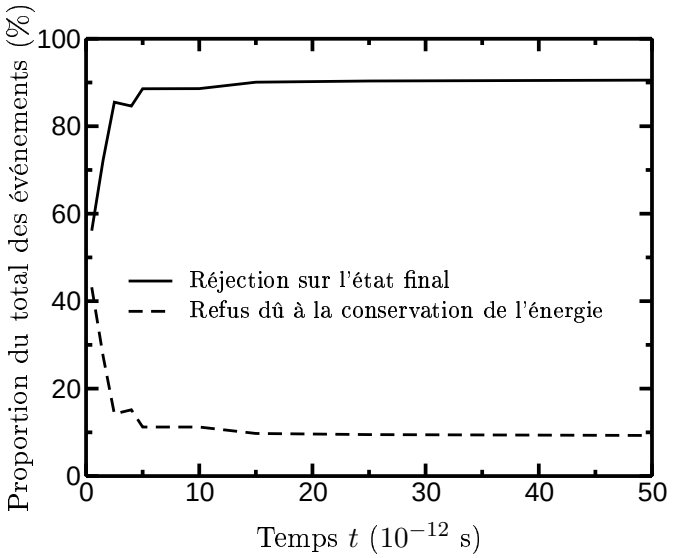


FIG. 7.3 – Évolution temporelle de la proportion des interactions électron–électron rejetées.
Trait plein : proportion des événements électron–électron rejetés après le choix des états électroniques finaux ; Trait tireté : proportion des événements électron–électron non acceptés car ne satisfaisant pas à la conservation de l'énergie et du moment transverse. La réjection sur le principe d'exclusion de Pauli étant très faible, elle n'a pas été tracée sur cette figure.

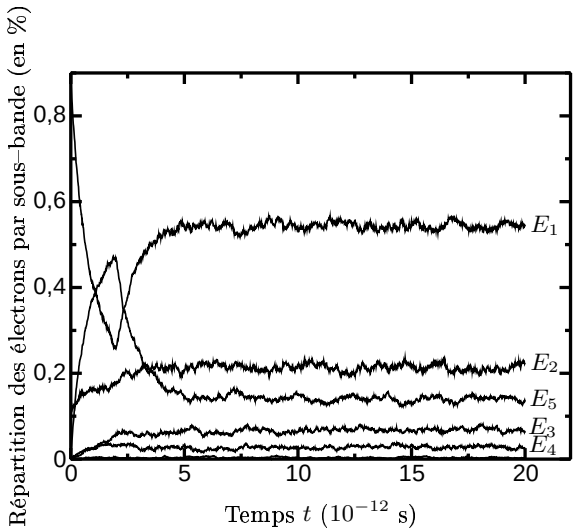
7.2.4 Caractéristiques du LCQ à $\theta = 44$ K

Dans un premier temps, nous allons discuter de l'influence de l'interaction inter–porteurs sur les densités électroniques surfaciques par sous–bande. Les figures 7.4(a), 7.4(b) et 7.4(c) représentent l'évolution temporelle des populations par sous–bande en incluant ou non l'interaction électron–électron.

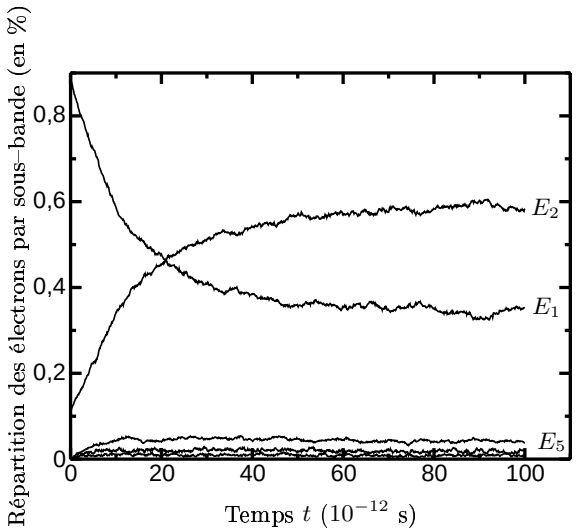
Tout d'abord, on s'aperçoit, en examinant par exemple la figure 7.4(a), du caractère hors d'équilibre du transport, car, au cours du temps, les populations s'écartent de leurs valeurs initiales à l'équilibre. Ceci démontre la nécessité d'un modèle d'interaction inter–porteurs et d'écrantage adapté au transport loin de l'équilibre.

De plus, on constate que la dynamique [figures 7.4(a) et 7.4(b)] est environ dix fois plus rapide en incluant l'interaction électron–électron : le régime stationnaire est atteint en environ 10 ps sur la figure 7.4(a), tandis qu'il faut environ 100 ps sur la figure 7.4(b). Cela est cohérent avec les taux de transitions détaillés dans le paragraphe précédent. En outre, on remarque [figure 7.4(c)] que l'interaction électron–électron influence d'une manière significative l'amplitude de l'inversion de population entre les niveaux 4 et 5. Dans la littérature, l'inversion de population $\Delta n_{54} = n_5 - n_4$ est estimée entre $3{,}2 \times 10^{13}$ m^{-2} [5] et $5{,}6 \times 10^{13}$ m^{-2} [67]. La non inclusion de l'interaction électron–électron conduit à une inversion de population de l'ordre de $\sim 10^{13}$ m^{-2}, très en deçà de celle obtenue lorsque l'interaction inter–porteurs est considérée. Dans ce cas, $\Delta n_{54} \simeq 3 \times 10^{13}$ m^{-2} est proche des estimations de la littérature précédemment citées. L'interaction inter–porteurs ouvre des canaux d'interactions inter-sous–bandes supplémentaires, ce qui permet, entres autres, un couplage inter–étages plus grand.

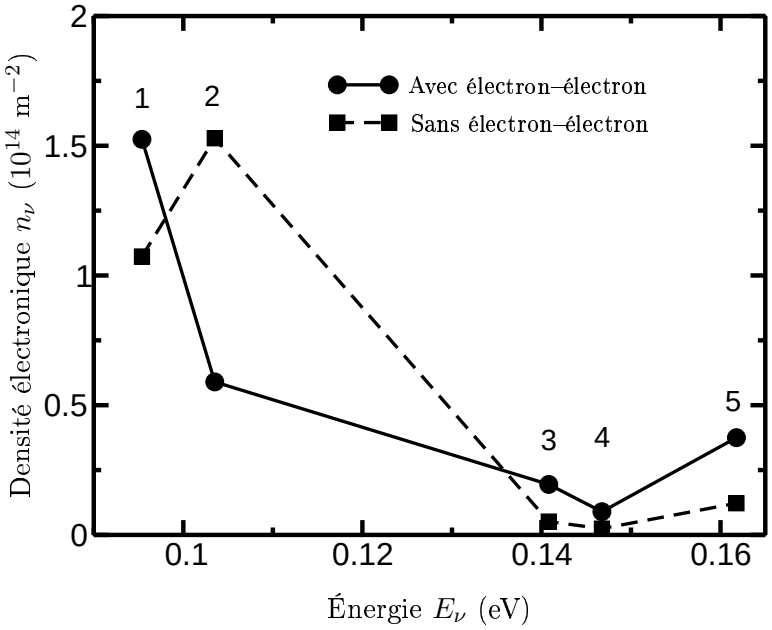
En ce qui concerne le courant J, les résultats diffèrent également selon que l'interaction inter–porteurs est présente ou pas. Sans l'interaction électron–électron, le courant perpendiculaire est $J = 0{,}22$ kA cm^{-2} alors que celui–ci vaut $J \simeq 1{,}3$ kA cm^{-2} lorsque l'interaction



(a) Évolution au cours du temps des populations par sous–bande avec l'interaction électron–électron. Le régime stationnaire est atteint après ~ 10 ps.



(b) Évolution au cours du temps des populations par sous–bande sans l'interaction électron–électron. Le régime stationnaire est atteint après ~ 100 ps.



(c) Répartition des populations par sous–bande avec (symbole ●) et sans (symbole ■) l'interaction électron–électron.

FIG. 7.4 – Influence de l'interaction électron–électron sur l'occupation des sous–bandes du laser à cascade quantique de la figure 7.1.

entre électrons est incluse. Williams *et al.* ont mesuré un courant de seuil $J \sim 1{,}2$ kA cm^{-2} [5], ce qui montre que les résultats de notre simulation Monte Carlo sont en accord raisonnable avec la littérature. On vérifie par ce biais que l'interaction électron–électron est nécessaire à la description du transport dans les LCQ à DPRP.

Procédons maintenant à un calcul du gain g_{54}, de manière similaire à celui effectué pour la structure térahertz du chapitre précédent. Dans un premier temps, nous appliquons la formule donnant le gain g_{54}, avec la largeur FWHM mesurée expérimentalement et qui s'élève à $\gamma = 4$ meV [5]. À l'aide de $\Delta n_{54} = 3 \times 10^{13}$ m^{-2} et $f_{54} = 0{,}71$, on calcule un gain de $g_{54} = 34$ cm^{-1}.

Par contre, en utilisant un décompte statistique des interactions sur phonons optiques polaires durant la simulation, on obtient $\tau \simeq 1{,}6$ ps soit $\gamma \simeq 0{,}43$ meV et $g_{54} = 52$ cm^{-1}. Dans la littérature, Callebaut *et al.* ont calculé un gain $g_{54} = 68$ cm^{-1} [67]. Cependant, il a été démontré que, dans une configuration de l'environnement optique avec des pertes dues aux miroirs importantes, le dispositif n'émet pas, car le gain laser n'est pas assez important pour compenser les pertes totales α_{tot}. Ces pertes (dues au guide d'onde α_{G} et aux miroirs α_{M}) sont évaluées à $\alpha_{\text{tot}} = (\alpha_{\text{G}} + \alpha_{\text{M}})/\Gamma = 58$ cm^{-1} dans les références [5, 67]. Callebaut *et al.* constatent que leur calcul conduit à une surestimation du gain. Ces résultats montrent la difficulté à obtenir un calcul prédicitif du gain par la simulation Monte Carlo.

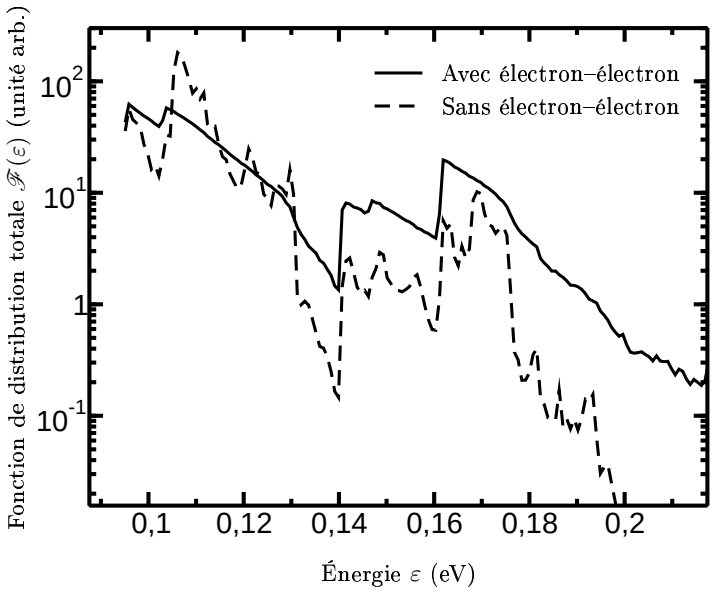
TAB. 7.3 – Comparaison des durées de vie totales τ_ν des sous–bandes de la structure de la figure 7.1 obtenues avec et sans l'interaction électron–électron.
Les valeurs des durées de vie sont exprimées en picoseconde. Le champ électrique est $F = 12{,}2$ kV cm^{-1} et la température $\theta = 44$ K.

	Avec l'interaction électron–électron	Sans l'interaction électron–électron
τ_1	0,47	~ 1
τ_2	0,25	14,5
τ_3	0,17	0,7
τ_4	0,14	0,6
τ_5	0,28	3

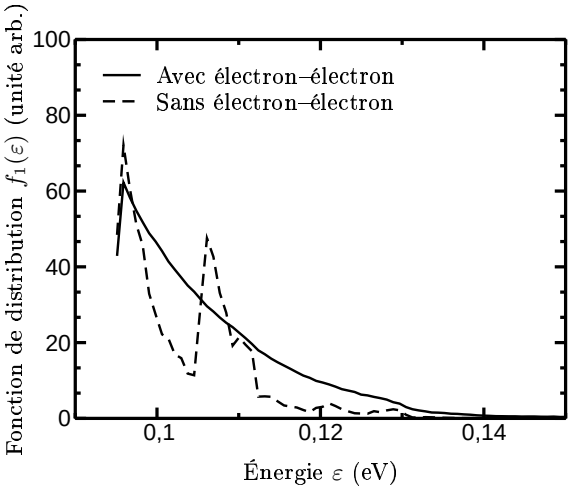
Le tableau 7.3 permet de cerner de manière plus précise l'influence de l'interaction électron–électron puisque nous y reportons les durées de vie des cinq principaux niveaux quantiques mis en jeu dans le transport. On remarque que la durée de vie des niveaux 3 et 4 est très brève de par l'interaction électron phonon avec les niveaux de l'injecteur (par exemple $\tau^{\text{op}}_{3\to 2} = 1{,}13$ ps). Sans l'interaction électron–électron, le couplage entre le niveau 1 et la sous–bande laser haut $5'$ de l'étage adjacent est $\tau^{\text{tot}}_{1\to 5'} \simeq 80$ ps. Avec l'interaction inter–porteurs, ce couplage est beaucoup plus fort puisque $\tau^{\text{tot}}_{1\to 5'} = 4{,}7$ ps et il est essentiellement produit par l'interaction électron–électron puisqu'on calcule $\tau^{\text{ee}}_{1\to 5'} = 5{,}5$ ps.

7.2.5 Les fonctions de distribution

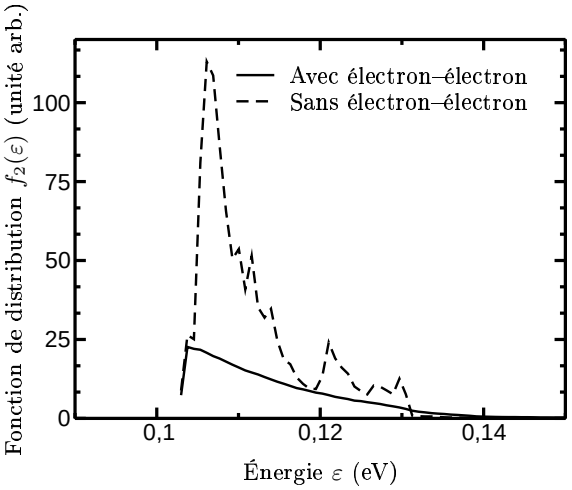
Afin d'approfondir les phénomènes physiques induits par l'interaction inter–porteurs, nous présentons, dans ce paragraphe, les résultats sur les fonctions de distribution et montrons plus spécifiquement que la notion de température de sous–bande est intimement reliée à l'in-



(a) Fonction de distribution totale $\mathscr{F}(\varepsilon)$ en échelle semi–logarithmique.



(b) Fonction de distribution de la sous–bande 1.



(c) Fonction de distribution de la sous–bande 2.

FIG. 7.5 – Fonctions de distribution par sous–bande $f_\nu(\varepsilon)$ et totale $\mathscr{F}(\varepsilon)$ en fonction de l'énergie cinétique ε avec (trait plein) et sans (trait tireté) l'interaction électron–électron à $\theta = 44$ K.
La référence en énergie est l'énergie de la sous–bande 1 de la structure de la figure 7.1, i.e., $\varepsilon_{\text{ref}} = 9{,}54 \times 10^{-2}$ eV.

teraction électron–électron. Les figures 7.5(a), 7.5(b) et 7.5(c) représentent les fonctions de distribution $f_\nu(\varepsilon)$ des sous–bande 1 et 2, ainsi que la fonction de distribution totale [notée $\mathscr{F}(\varepsilon)$] en fonction de l'énergie cinétique ε. Sans l'interaction électron–électron, on voit que les fonctions de distribution présentent une série de pics, dus principalement aux divers seuils de transitions inter-sous–bandes par émission/absorption de phonons optiques polaires. On constate que l'inclusion de l'interaction inter–porteurs conduit à peupler plus significativement certaines plages d'énergie, à supprimer les pics de phonons en « lissant » les fonctions de distribution. La fonction de distribution est alors correctement modélisée par une statistique de Maxwell–Boltzmann à la température électronique θ_ν, supérieure à la température de réseau. Il a été argué dans la référence [153] que l'interaction électron–électron était à l'origine de ce phénomène. Parmi tous les mécanismes d'interaction dans la simulation, ce sont les événements électron–électron *intra-sous–bandes purs*, mettant en jeu les éléments de matrice du potentiel coulombien $M_{\nu\nu\nu\nu}$, qui participent à ce phénomène. Outre que ces événements sont de loin les plus nombreux [car $F_{\nu\nu\nu\nu}(Q=0)=1$], la conservation du moment et de l'énergie donne $G'=G$: en d'autres termes, l'interaction électron–électron conduit à redistribuer l'énergie à l'intérieur de chaque sous–bande en fixant une énergie moyenne.

7.2.6 Température électronique de sous–bande

TAB. 7.4 – Comparaison des températures électroniques θ_ν des sous–bandes de la structure de la figure 7.1 en incluant ou non l'interaction électron–électron. La température de réseau est $\theta = 44$ K. Les températures sont exprimées en Kelvin.

	Avec l'interaction électron–électron	Sans l'interaction électron–électron
θ_1	127	86
θ_2	125	79
θ_3	93	44
θ_4	60	45
θ_5	94	51

Le tableau 7.4 rassemble les températures électroniques θ_ν par sous–bande obtenues à la fin des 200 ps de simulation et calculées à partir de la méthode décrite au paragraphe 5.5.2 et dans l'annexe E. L'observation des résultats de ce tableau appelle trois commentaires :

1. La température électronique θ_ν est *différente pour chaque sous–bande* et sensiblement plus élevée que la température de réseau de 44 K (de deux à trois fois). Ce point est particulièrement important car il met en défaut les hypothèses de la méthode par équations bilan qui suppose une température *égale* pour toutes les sous–bandes. Ces résultats montrent que la modélisation des populations et du gaz électronique des différentes sous–bandes est relativement difficile ;
2. Les températures électroniques de sous–bandes sont bien plus basses sans l'interaction électron–électron. Cependant, mentionnons ici que notre méthode repose sur l'hypothèse que la fonction de distribution conserve une certaine propriété de la fonction de Fermi–Dirac. Or, au vu des figures 7.5(b) et 7.5(c), on constate, de par les nombreux pics de

phonons, que la fonction de distribution ne peut pas être correctement modélisée par une statistique de Fermi–Dirac. Les valeurs obtenues sont donc purement indicatives et sont largement critiquables. Comme indicateur de l'échauffement, on peut comparer l'énergie moyenne totale des particules, qui avec électron–électron vaut $\langle\varepsilon\rangle_{\text{tot}} = 124$ meV et sans $\langle\varepsilon\rangle_{\text{tot}} \simeq 113$ meV. Ainsi on vérifie que l'inclusion de l'interaction inter–porteurs a pour effet d'échauffer le gaz électronique.

Dans les LCQ, l'énergie provient du champ électrique perpendiculaire appliqué aux extrémités du composant et une transition inter–étages conduit à une augmentation de l'énergie totale de l'électron. Le gaz électronique est globalement plus chaud avec l'interaction électron–électron car le nombre de transitions inter–étages est plus élevé et l'effet de redistribution de l'énergie, à l'intérieur des sous–bandes ainsi qu'entre états, est plus important. Le couplage plus prononcé avec les étages adjacents se traduit également, nous l'avons vu, par un courant perpendiculaire J plus important, lorsque l'interaction électron–électron est incluse.

3. Les sous–bandes 1 et 2 ont des températures très voisines, que l'on évalue à 127 K et 125 K respectivement. Cela s'explique par le phénomène de *thermalisation mutuelle*, selon la terminologie de la littérature [206]. L'interaction électron entre ces deux sous–bandes, proches en énergie ($\Delta E_{21} \simeq 8$ meV), contribue à redistribuer l'énergie entre les deux sous–bandes. Cette redistribution se fait essentiellement par l'intermédiaire des transition *double intra-sous–bandes* mettant en jeu les éléments de matrice du type $M_{\mu\nu\mu\nu}$. Cette classe d'événements électron–électron fait subir aux deux électrons deux transitions intra-sous–bandes mais avec un échange possible d'énergie cinétique. Chiffrons ce couplage par interaction inter–porteurs sur un exemple : les événements double intra-sous–bande sont très nombreux puisqu'ils conduisent à $\tau^{\text{ee}}_{1\to1,\ 2\to2} \simeq 0{,}7$ ps.

Pour résumer cette première partie, nous avons vu que l'inclusion de l'interaction électron–électron modifie la dynamique et les performances du LCQ térahertz à DPRP émettant à 3,4 THz. Nous avons montré que l'interaction électron–électron influence sensiblement l'amplitude de l'inversion de population et la densité de courant, en augmentant ces valeurs. Nous avons également montré l'effet de l'interaction inter–porteurs sur la fonction de distribution. Ainsi, l'interaction entre les électrons étale la distribution énergétique et augmente les températures électroniques de sous–bandes. Pour les sous–bandes 1 et 2, l'interaction inter–porteurs contribue à leur thermalisation mutuelle. Nous allons maintenant examiner si l'amplitude de l'inversion de population est sensible au modèle physique de l'interaction électron–électron.

7.3 Influence de la modélisation de l'interaction électron–électron

Maintenant que nous avons un peu mieux cerné l'importance de l'interaction électron–électron dans la description du transport hors d'équilibre du laser à cascade quantique à DPRP, nous allons, dans cette partie, étudier l'influence des paramètres physiques du modèle de cette interaction.

Nous avons tracé sur la figure 7.6 les densités électroniques de sous–bandes pour différentes modélisations de l'interaction électron–électron. À titre illustratif, trois modélisations de l'interaction inter–porteurs ont été comparées : (i) le modèle utilisé depuis le début de ce chapitre ; (ii) un modèle sans les termes d'échanges de spin, c'est–à–dire en prenant comme

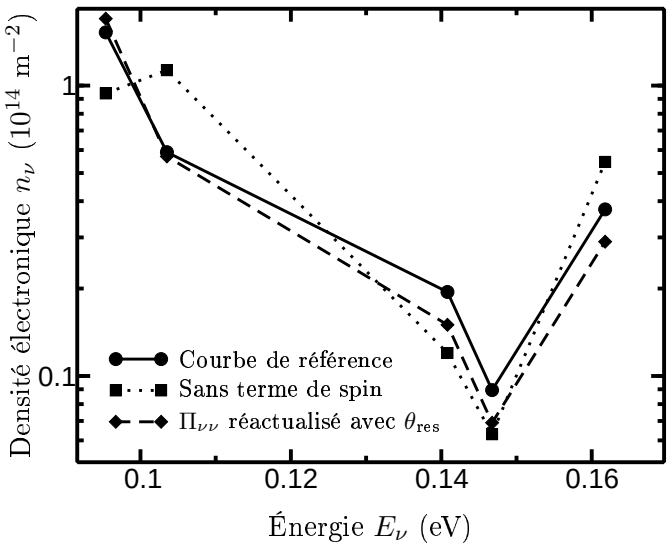


FIG. 7.6 – Répartition de la densité électronique n_ν en fonction des différentes énergies E_ν des niveaux quantiques de la figure 7.1 pour différentes modélisations de l'interaction électron–électron.
Symbole ● : Modélisation de l'interaction de « référence » avec un modèle d'écrantage MSB ; Symbole ■ : Sans le terme d'échange de spin ; Symbole ♦ : Éléments diagonaux de la polarisabilité hors d'équilibre calculés avec la température de réseau θ_{res}.

élément de matrice celui proposé par Goodnick *et al.* [215] :

$$M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q) = \frac{1}{2} V^{\text{ecr}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q), \tag{7.1}$$

dans l'équation (4.16) ; (iii) un modèle pour lequel les éléments diagonaux de la polarisabilité sont calculés, non avec une température électronique propre à chaque sous–bande, mais avec la température de réseau.

On s'aperçoit que l'influence du terme d'échange de spin est relativement importante : la sous–bande 2 voit sa population pratiquement divisée par deux lorsqu'on prend en compte l'interaction entre électrons de spins anti–parallèles, tandis que l'amplitude de l'inversion de population est moindre, passant de $4,8 \times 10^{13}$ m^{-2} à $\sim 3 \times 10^{13}$ m^{-2}. Les transitions inter-sous–bandes semblent influencées par le terme d'échange et en particulier la dynamique entre les sous–bandes 1 et 2. À titre d'exemple, nous comparons les durées de vie de $(1 \to 1, 3 \to 2)$: $\tau^{\text{ee}}_{1\to 1,\ 3\to 2} \simeq 1$ ps alors qu'avec le terme d'échange on obtient $\tau^{\text{ee}}_{1\to 1,\ 3\to 2} = 0{,}7$ ps.

Si l'on compare les modèles (i) et (iii), on constate une différence au niveau des populations électroniques de sous–bandes, qui conduit, au final, à une inversion de population variant d'environ 30 % selon le modèle considéré ($\Delta n^{(\text{iii})}_{54} = 2{,}2 \times 10^{13}$ m^{-2}).

En conclusion, on a donc montré, avec quelques exemples, que la modélisation de l'interaction électron–électron pouvait influencer l'amplitude de l'inversion de population. En outre, les paramètres numériques, comme par exemple la discrétisation ΔQ du calcul des éléments de matrice du potentiel coulombien écranté $V^{\text{ecr}}(Q)$, influencent également le traitement de l'interaction inter–porteurs et donc les résultats. Cependant, la discussion de l'influence respective, tant du modèle physique, que des paramètres numériques, est ardue car les phénomènes sont le plus souvent inter–dépendants.

7.4 Étude du comportement en fonction de la température et du champ électrique

Nous étudions, dans cette partie, l'influence de la température et le champ électrique sur les performances du LCQ à DPRP. Ces deux paramètres extérieurs sont primordiaux et, en particulier, la température, si l'on veut assurer un fonctionnement du LCQ dans des conditions autres que celles très restrictives des laboratoires. Effectivement, la température est très importante car elle limite les possibles débouchés des LCQ lorsque sa valeur maximale est trop faible. Quant au champ électrique, il permet l'alignement précis des niveaux quantiques et permet de déterminer le courant de seuil, courant à partir duquel l'émission laser est observée. Nous débutons cette section par l'étude des performances en fonction de la polarisation extérieure.

7.4.1 Influence du champ électrique

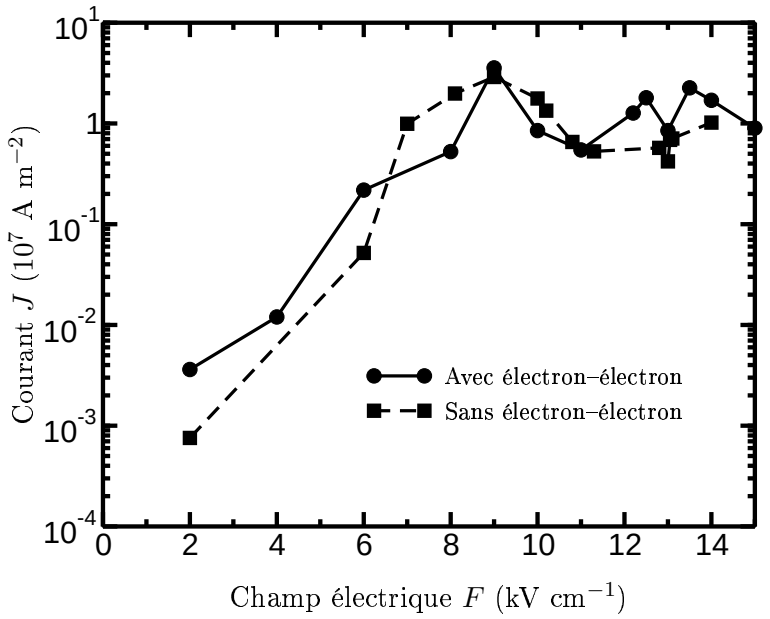
Densité de courant induit par l'interaction électron–électron

Nous avons tracé sur les figures 7.7(a) et 7.7(b) la caractéristique « courant–tension » $J(F)$, avec ou sans l'interaction inter–porteurs sur figure 7.7(a) et la proportion du courant due aux transitions inter–étages par l'interaction électron–électron sur la figure 7.7(b). La température a été maintenue constante à $\theta_{\text{res}} = 44$ K. On constate, sur la figure 7.7(a), l'effet de *résistance différentielle négative* qui se produit pour des champs électriques compris entre 9 et $\sim 13,5$ kV cm^{-1}. On remarque, en outre, que l'interaction électron–électron a pour effet d'augmenter significativement la valeur du courant ou de la diminuer, selon la gamme de la polarisation extérieure. D'ailleurs, on constate sur la figure 7.7(b), que l'interaction inter–porteurs est à l'origine d'une grande partie du courant, jusqu'à ~ 90 % du courant total pour certaines valeurs du champ électrique.

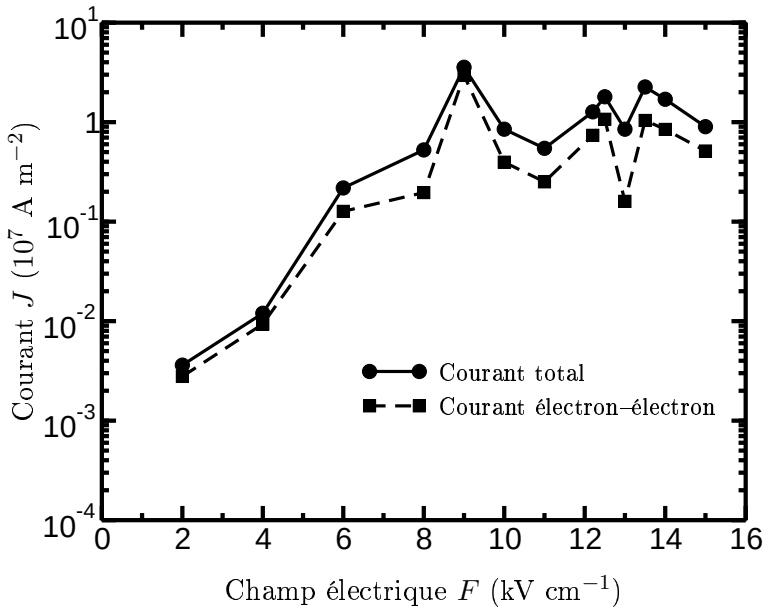
Notion de courant « parasite »

Si l'on compare l'ensemble des valeurs du courant à celles mesurées dans la littérature [5], on constate, qu'hormis pour le régime de résistance différentielle négative, les valeurs du courant sont très largement supérieures à celles mesurées. D'après Callebaut *et al.*, dans la plage 7–9 kV/cm, les valeurs excessivement élevées peuvent s'expliquer par des canaux inter–étages dits « parasites » [67]. Selon cette même référence [67], le courant parasite est généré par la trop grande délocalisation des fonctions d'onde, qui est à l'origine d'un fort couplage entre les états d'étages adjacents. Ainsi, Callebaut *et al.* ont soustrait au courant total une certaine fraction du courant attribuée à des chemins parasites. Ce courant parasite peut être, pour certaines valeurs du champ, très important, puisqu'ils affirment enlever $J_{\text{paras}} \sim 2$ kA cm^{-2} pour $F \sim 8{,}6$ kV cm^{-1}. Cependant, la méthode de calcul du courant parasite J_{paras} n'est pas précisée dans la référence [67].

Dans un esprit similaire, nous proposons de retirer les transitions indues entre injecteurs d'étages adjacents $(1,2) \rightarrow (1',2')$ au courant total. À titre d'exemple, la figure 7.8 représente le courant corrigé des transitions inter–étage indues, en fonction du champ électrique dans le cas où l'interaction électron–électron n'est pas incluse. Lorsqu'on observe le courant corrigé, on trouve des valeurs qui sont plus raisonnables et sensiblement en adéquation avec les valeurs de la littérature [5, 67].



(a) Évolution du courant en fonction du champ électrique avec (symbole ●) et sans (symbole ■) l'interaction électron–électron.



(b) Participation des transitions inter–étages électron–électron (symbole ■) au courant total (symbole ●).

FIG. 7.7 – Influence de l'interaction électron–électron sur la densité de courant J en fonction du champ appliqué F. La température de réseau a été maintenue constante à $\theta_{\text{res}} = 44$ K.

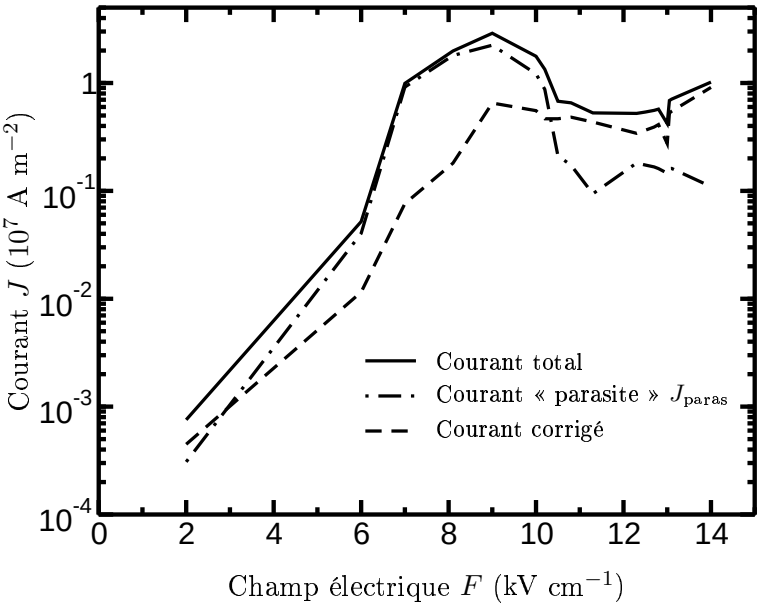


FIG. 7.8 – Caractéristiques courant/tension $J(F)$ avec et sans les transitions inter–étages $(1,2) \rightarrow (1',2')$ déclarées comme « parasites ». L'interaction électron–électron n'a pas été inclus dans ces calculs. La température de réseau a été maintenue constante à $\theta_{\text{res}} = 44$ K.

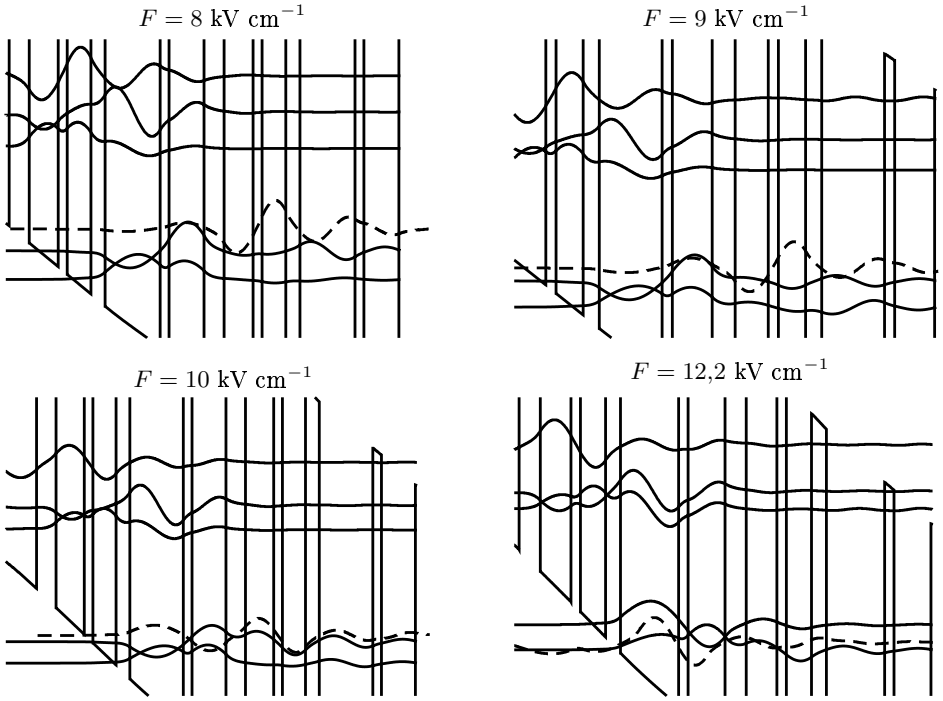


FIG. 7.9 – Position des fonctions d'onde par rapport au niveau laser haut de l'étage adjacent (trait tireté) pour différentes polarisations extérieures. La température de réseau est $\theta_{\text{res}} = 44$ K.

Afin d'expliquer ce couplage parasite, la figure 7.9 représente la configuration des fonctions d'onde pour différentes valeurs du champ électrique F. On aperçoit que pour le champ $F = 9$ kV/cm, la « queue » de la fonction d'onde du niveau 1 se localise également dans le double puits des états d'injecteurs de l'étage adjacent. Effectivement, pour cette polarisation extérieure, on calcule $\langle z_{12'} \rangle = 3{,}8$ nm et $\langle z_{22'} \rangle = 2{,}5$ nm. Cette queue de densité de présence est moins importante pour $F = 8$ kV/cm ou pour $F = 10$ kV/cm. On voit également que pour $F = 12{,}2$ kV/cm, la fonction d'onde $\varphi_{5'}(z)$ est presque en anti–croisement avec la sous–bande 1, assurant par ce fait un couplage inter–étage optimal et un recouvrement maximal entre ces deux sous–bandes.

Densités électroniques de sous–bande et fonction de distribution

Les figures 7.10(a) et 7.10(b) représentent l'évolution des densités électroniques et de l'inversion de population, tracées pour différentes valeurs du champ électrique F, en maintenant la température de réseau constante à 44 K. On constate, sur la figure 7.10(a), qu'à champ F faible, la densité électronique est essentiellement portée par la sous–bande fondamentale, avec, par exemple, $n_1 \sim 2 \times 10^{14}$ m^{-2} pour $F = 10$ kV/cm. Avec l'augmentation du champ, les populations des autres sous–bandes augmentent. En ce qui concerne l'inversion de population, d'après la figure 7.10(b), il semble que le champ F optimal se situe entre 12,2 et 13,5 kV cm^{-1}. On s'aperçoit que la population du niveau laser haut évolue dans une gamme relativement restreinte : pour les champs tracés sur la figure 7.10(a), la valeur maximale est $4{,}3 \times 10^{13}$ m^{-2} et la valeur minimale $1{,}65 \times 10^{13}$ m^{-2}. Par contre la population des autres niveaux, et en particulier des niveaux de l'injecteur et du niveau laser bas, fluctue beaucoup.

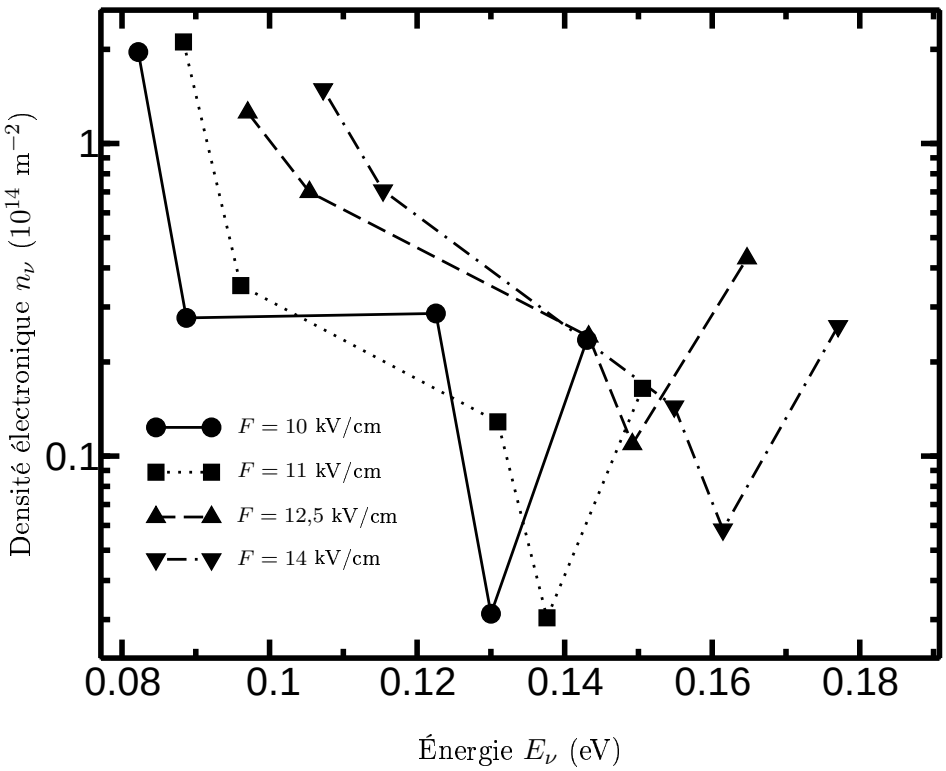
La figure 7.11 représente la fonction de distribution totale $\mathscr{F}(\varepsilon)$ en fonction de l'énergie cinétique pour différentes valeurs du champ F et en maintenant la température de réseau constante à 44 K. On constate que plus le champ électrique F augmente, plus la fonction de distribution $\mathscr{F}(\varepsilon)$ s'étale sur une plus grande plage d'énergie. Ainsi l'énergie fournie par le champ perpendiculaire F se retrouve dans l'énergie des porteurs, l'interaction électron–électron redistribuant l'énergie potentielle gagnée lors d'une transition inter–étages sous forme d'énergie cinétique. L'évolution des températures par sous–bande θ_ν en fonction du champ électrique F est donnée par le tableau 7.5. Dans la plage de champ 10–13 kV cm^{-1}, les températures passent par des minima qui correspondent aux minima de performance au niveau de l'amplitude de l'inversion de population en $F = 11$ kV cm^{-1} et $F = 13$ kV cm^{-1}. À partir de $F = 14$ kV cm^{-1}, et même si l'inversion de population reste médiocre, les températures des sous–bandes augmentent avec l'énergie apportée par la chute de potentiel par étage.

Nous allons maintenant procéder à une étude similaire des performances en faisant varier la température de réseau, tout en maintenant le champ électrique constant à 12,2 kV cm^{-1}.

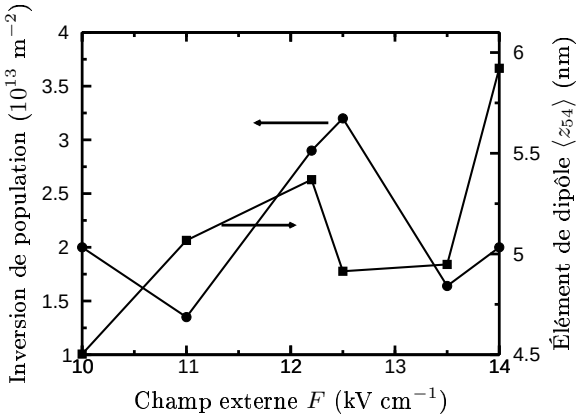
7.4.2 Influence de la température de réseau

Dans cette partie, nous étudions les caractéristiques du LCQ à DPRP pour différentes températures de réseau. Rappelons que, dans notre modèle Monte Carlo, la température de réseau intervient en trois endroits :

1. Lors de la résolution des équations de Schrödinger et Poisson donnant les populations initiales ;
2. Lors de la phase d'initialisation pour la répartition des électrons dans l'espace des phases par des distributions de Fermi–Dirac ;



(a) Répartition de la densité électronique par sous–bande.



(b) Évolution de l'inversion de population et de l'élément de dipôle $\langle z_{54} \rangle$ en fonction du champ électrique F.

FIG. 7.10 – Évolution des densités électroniques n_ν pour différents champs électriques F. La température de réseau a été maintenue constante à 44 K.

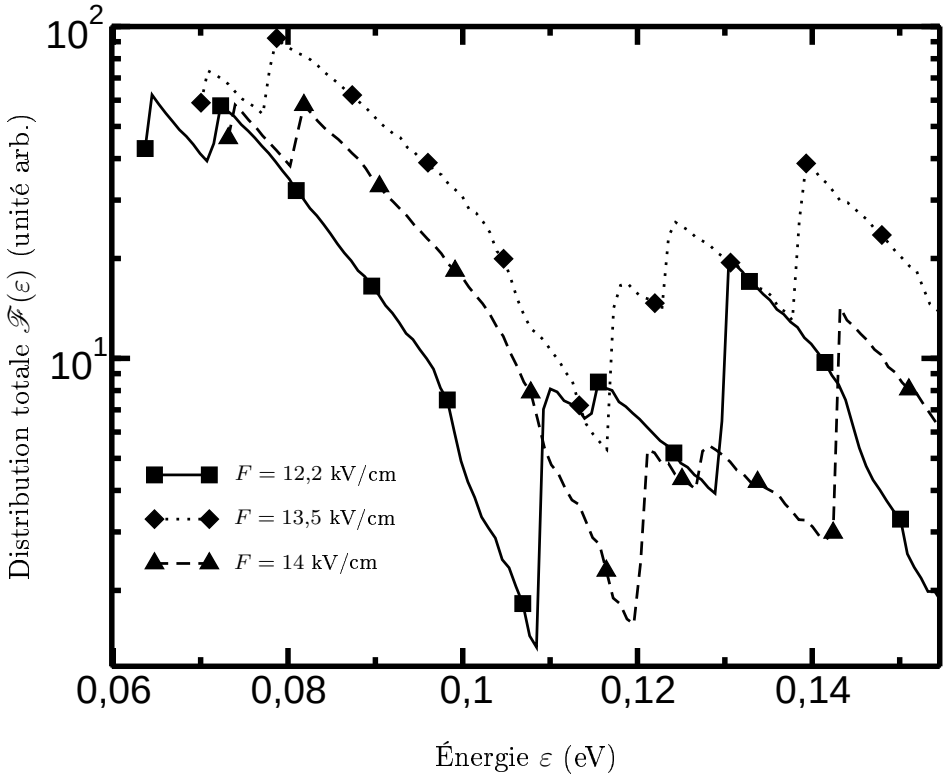


FIG. 7.11 – Fonction de distribution totale $\mathscr{F}(\varepsilon)$ en fonction de l'énergie pour différents champs électriques F. La température a été maintenue constante à 44 K.

TAB. 7.5 – Températures des sous–bandes de la structure de la figure 7.1 pour différentes valeurs du champ externe appliqué F, la température de réseau étant de 44 K.
Les valeurs des températures sont exprimées en Kelvin. L'abréviation VNR signifie « Valeur Non Représentative ».

	$F = 10$ kV/cm	$F = 11$ kV/cm	$F = 12{,}2$ kV/cm	$F = 13$ kV/cm	$F = 14$ kV/cm
θ_1	127	108	127	106	139
θ_2	102	91	125	120	145
θ_3	98	74	93	79	116
θ_4	VNR	VNR	60	61	VNR
θ_5	77	63	94	44	101

3. Dans le calcul des probabilités d'interaction avec les phonons (facteur de population selon la statistique de Bose–Einstein).

Les probabilités électron–électron augmentant fortement avec la température, il a fallu régler en conséquence le pas de temps : pour la simulation à $\theta = 100$ K et $\theta = 200$ K, nous avons choisi un pas de temps $\Delta t = 10^{-16}$ s, pour la simulation à température ambiante, le pas de temps a été considérablement réduit à $\Delta t = 10^{-17}$ s.

La figure 7.12(a) représente la répartition de la densité électronique n_ν pour les sous–bandes du LCQ à DPRP pour différentes températures de réseau θ_{res}. On constate que la densité électronique s'étale sur les sous–bandes à mesure que la température de réseau est plus élevée. Ainsi, l'amplitude de l'inversion de population entre les niveaux 4 et 5 diminue car l'état laser bas 4 se repeuple. À la température $\theta = 300$ K, on conserve encore une inversion de population relativement importante d'environ 3,6 % de la densité électronique totale, soit $\sim 10^{13}$ m^{-2}. Ce résultat laisse espérer un gain positif, mais est loin de garantir que celui–ci sera supérieur aux pertes. En particulier, le facteur d'élargissement γ ne peut que qu'augmenter lorsque la température croît, ne serait–ce que parce que les interactions sur phonon optique polaire sont plus importantes, ce qui, au final, est défavorable au gain.

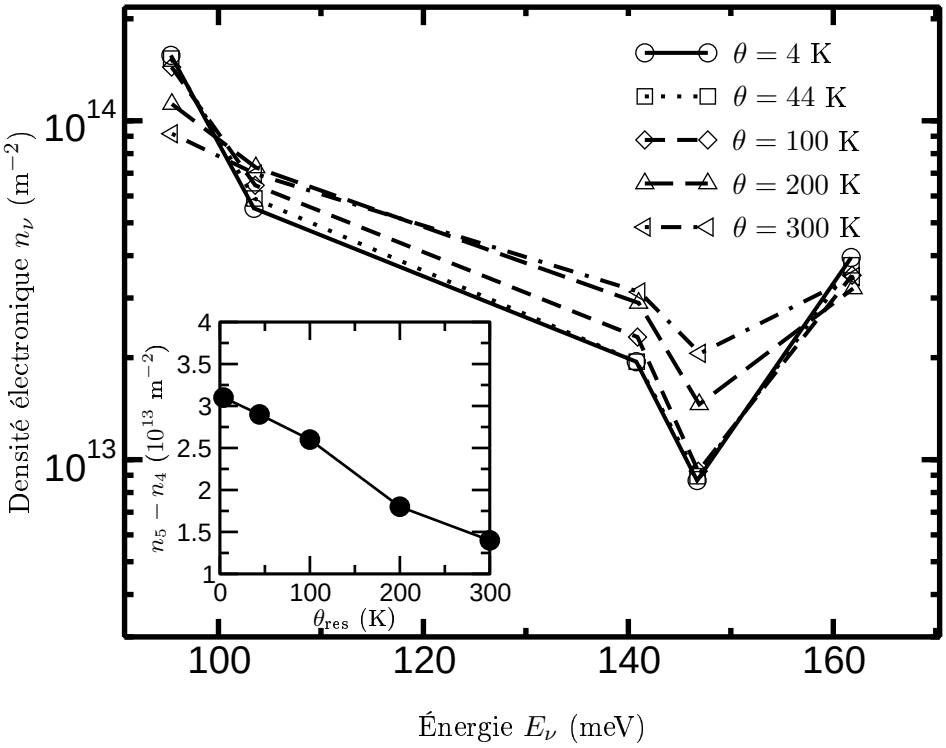
Dans la littérature [5, 72], il est fréquent de trouver une approximation du courant de seuil J_{th} en fonction de la température θ par une loi phénoménologique du type [37] :

$$J_{\text{th}}(\theta) = J_0 \exp\left(\frac{\theta}{\theta_0}\right). \tag{7.2}$$

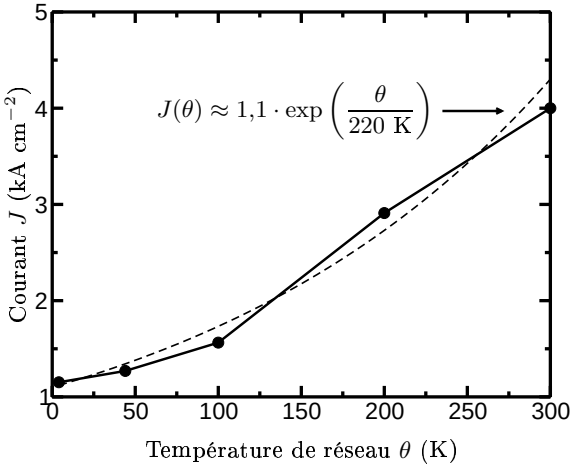
À partir des points de la courbe de la figure 7.12(b) et même si nos valeurs de courants ne sont pas ceux au seuil, nous avons calculé $J_0 \approx 1{,}1 \times 10^7$ A m^{-2} et $\theta_0 \approx 220$ K. Williams *et al.* ont calculé, quant à eux, une température de « mérite » $\theta_0 \approx 120$ K, mais en utilisant seulement deux points pour interpoler leurs résultats [5]. La valeur élevée de la température de mérite θ_0, que nous avons calculée, est sûrement surestimée, mais elle suggère que le LCQ à DPRP se comporte de manière performante à température élevée.

Nous avons observé sur la figure 7.12(a) une repopulation du niveau laser bas 4. Les taux de transitions entre sous–bandes peuvent éclairer ce phénomène. À cet effet, le tableau 7.6 résume les taux d'interactions totaux et par l'interaction électron–électron mettant en jeu la sous–bande 4. On constate qu'à la température de 44 K, le peuplement du niveau 4 se fait par les niveaux 3 et 5. Par contre à la température de 200 K, c'est par les niveaux 2, 3 et 5, que le niveau 4 se repeuple avec des taux de transitions beaucoup plus rapides qu'à 44 K. On remarque aussi que la contribution de l'interaction inter–porteurs dans les durées de vie totales reste majoritaire à 200 K, mais un peu plus faible qu'à 44 K.

La figure 7.13 représente la fonction de distribution totale $\mathscr{F}(\varepsilon)$ en fonction de l'énergie ε pour différentes températures de réseau. On y voit clairement l'étalement de la distribution sur une plage énergétique de plus en plus importante. Les températures électroniques des différentes sous–bandes sont reportées, quant à elles, dans le tableau 7.7 pour ces différentes températures de réseau. On constate peu de différences dans les températures de sous–bandes entre 4 K et 44 K. Par contre à partir de 100 K, les températures de sous–bandes s'élèvent avec la température du réseau. Ceci est principalement dû à l'action de la probabilité sur phonon optique polaire qui augmente fortement dans la plage de température 50–100 K et en particulier la probabilité d'absorption de phonons. Cela est illustré par la figure 7.14 qui représente l'évolution du facteur dit de « Bose » $N_{\text{op}} = [\exp(\hbar\omega_{\text{op}}/k_B\theta) - 1]^{-1}$ en fonction de la température pour le phonon optique polaire dans le GaAs.



(a) Répartition des densité électroniques par sous–bande pour la structure de la figure 7.1. En médaillon est représentée l'inversion de population Δn_{54} en fonction de la température de réseau θ_{res}.



(b) Courant J en fonction de la température de réseau. En trait tireté, on a fait figurer la loi exponentielle de paramètre de mérite $\theta_0 = 220$ K.

FIG. 7.12 – Évolution des densités électroniques de sous–bandes n_ν et du courant pour différentes températures de réseau. Le champ a été maintenu constant à 12,2 kV cm^{-1}.

TAB. 7.6 – Taux de transition mettant en jeu la sous–bande laser bas, pour la température de réseau de 44 K et de 200 K.

$\mu \to \nu$	Durée de vie totale (ps)	Durée de vie électron–électron (ps)
Température de réseau $\theta = 44$ K		
$\tau_{1\to4}$	5,7	7,1
$\tau_{4\to1}$	0,34	0,4
$\tau_{2\to4}$	8,8	9
$\tau_{4\to2}$	0,64	1,3
$\tau_{3\to4}$	1,6	1,9
$\tau_{4\to3}$	0,64	0,74
$\tau_{5\to4}$	2,5	4
$\tau_{4\to5}$	1,18	1,54
Température de réseau $\theta = 200$ K		
$\tau_{1\to4}$	3	3,3
$\tau_{4\to1}$	0,28	0,3
$\tau_{2\to4}$	2,8	3,4
$\tau_{4\to2}$	0,46	0,62
$\tau_{3\to4}$	0,85	1,2
$\tau_{4\to3}$	0,4	0,6
$\tau_{5\to4}$	1,15	2,2
$\tau_{4\to5}$	0,78	1,1

TAB. 7.7 – Températures des sous–bandes de la structure de la figure 7.1 pour différentes températures de réseau θ_{res}.
Le champ externe est maintenu constant à la valeur de $F = 12{,}2$ kV cm^{-1}. Les valeurs des températures sont exprimées en Kelvin.

	$\theta_{\text{res}} = 4$ K	$\theta_{\text{res}} = 44$ K	$\theta_{\text{res}} = 100$ K	$\theta_{\text{res}} = 200$ K	$\theta_{\text{res}} = 300$ K
θ_1	129	127	155	265	406
θ_2	116	125	145	257	400
θ_3	94	93	143	252	370
θ_4	35	60	102	207	320
θ_5	88	94	118	237	377

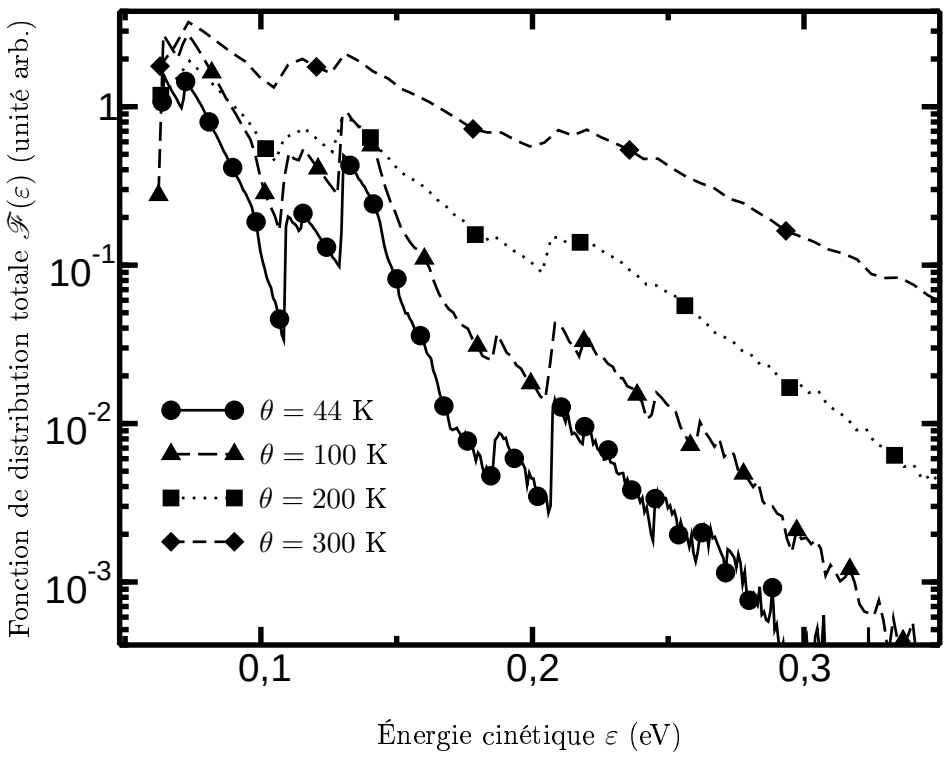


FIG. 7.13 – Fonction de distribution totale $\mathscr{F}(\varepsilon)$ en fonction de l'énergie ε pour différentes températures de réseau. Le champ électrique a été maintenu constant à 12,2 kV/cm.

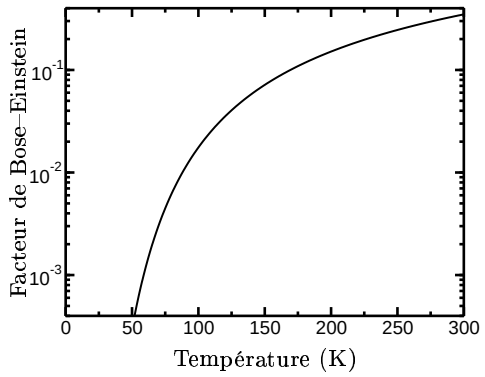


FIG. 7.14 – Tracé du facteur de Bose–Einstein pour la probabilité de phonon optique polaire dans le GaAs (i.e. $\hbar\omega_{\mathsf{op}} \approx 35$ meV).

Conclusion

Dans ce chapitre, les performances du laser à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon émettant à 3,4 THz ont été examinées. Nous avons discuté, essentiellement, de l'inclusion de l'interaction électron–électron et de son influence sur l'inversion de population, la densité de courant et le gain. Nos résultats montrent un accord raisonnable avec la littérature.

Nous avons également montré que l'interaction électron–électron échauffait le gaz électronique, la fonction de distribution de chaque sous–bande étant caractérisée par une température électronique différente, largement supérieure à la température de réseau.

Pour conclure l'étude du LCQ à DPRP, l'influence du champ électrique et de la température de réseau sur l'inversion de population à 3,4 THz a été étudiée. Nos calculs conduisent à une surestimation du courant sur une large gamme de champs électriques. Nous avons pu montrer qu'une large proportion du courant était due à des transitions inter–étages entre états injecteurs d'étages adjacents. Une fois le courant corrigé, les valeurs semblent en accord raisonnable comparées à celles publiées dans la littérature [5,67]. Nous avons également montré que, d'après nos calculs, l'inversion de population devrait se maintenir à température ambiante avec une valeur réduite, inférieure à 4 % de la densité électronique totale.

Dans le prochain chapitre, nous allons voir qu'il est possible d'utiliser cette structure dans un régime plus basse fréquence.

Chapitre 8

Variantes de la structure à dépopulation par résonance de phonon

Introduction

Dans le chapitre précédent, le mécanisme de dépopulation par résonance de phonon a été utilisé pour émettre à une fréquence de quelques térahertz. Dans ce chapitre, deux structures vont être examinées afin de diminuer la fréquence d'émission vers 1 THz. Dans la première section, nous examinons la suggestion de Lee *et al.* [6] permettant d'obtenir une émission à une fréquence proche de 1,4 THz avec le LCQ à dépopulation par résonance de phonon présenté au chapitre précédent. La proposition de Lee *et al.* peut être vue comme une « variante » du principe de fonctionnement du LCQ à DPRP émettant à 3,4 THz, sans modification de la séquence épitaxiale. Nous discuterons à cette occasion de l'influence de l'interaction électron–électron et du modèle d'écrantage multi-sous–bandes sur l'amplitude de l'inversion de population. Une autre voie pour diminuer la fréquence est d'ajuster les épaisseurs des couches, ce qui a été réalisé par Williams *et al.* [7]. Ainsi, dans la deuxième section du chapitre, un nouveau LCQ est introduit, toujours de la famille des LCQ à dépopulation par résonance de phonon, récemment publié et qui émet à 2,1 THz [7]. À partir de cette structure, nous verrons qu'il est possible de modifier certains paramètres matériaux pour descendre jusqu'à une fréquence proche de 1 THz.

8.1 Émission à 1,4 THz dans le laser à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon

Dans cette première partie, nous présentons les travaux de Lee *et al.* [6] qui suggèrent la possibilité d'émettre à une fréquence de 1,4 THz avec la structure à DPRP présentée au chapitre précédent. Nous discuterons également de l'influence de l'interaction inter–porteurs sur les amplitudes des inversions de population aux fréquences voisines de 1,4 THz, cette question n'ayant pas été abordée dans l'étude de la référence [6].

8.1.1 Présentation de la suggestion de S.C. Lee et A. Wacker

Pour fixer la terminologie, nous appellerons *période élémentaire* de la structure à DPRP de la figure 7.1, la séquence épitaxiale de la plus petite période du LCQ, c'est–à–dire la séquence

TAB. 8.1 – Écarts énergétiques et éléments de dipôle des transitions de classe A et B du LCQ de la figure 8.1.

Transition $\nu \to \mu$	Écart énergétique $E_\nu - E_\mu$ (meV) (entre parenthèses la fréquence en THz)	Élément de dipôle (nm)
Classe A		
$6 \to 4$, $10 \to 9$	14.8 ($\sim$ 3,5)	5
Classe B		
$5 \to 4$	11.4 ($\sim$ 2,8)	3.8
$7 \to 6$	5.5 ($\sim$ 1,4)	6.4

(en Å) : 54/78/24/64/38/148/24/94. Dans la référence [6], S.C. Lee et A. Wacker ont étudié le gain quantique du LCQ de Williams *et al.*, à 3,4 THz. Leurs calculs, effectués à l'aide des fonctions de Green, ont mis en évidence une possible émission à une fréquence aussi basse que 1,4 THz. Leur suggestion repose sur l'utilisation de la périodicité supposée parfaite des LCQ. Ainsi, en superposant la répartition des densités électroniques par sous–bandes (figure 7.4(c)) sur deux étages consécutifs, on observe de nouveaux phénomènes d'inversion de population, de grandes amplitudes, tels ceux, par exemple, mettant en jeu les états de l'injecteur et l'état laser haut d'étages adjacents. Ce mode de fonctionnement permet d'utiliser les populations très élevées des états de l'injecteur. En outre, l'étude des éléments de dipôle confirme que ces états sont très fortement couplés et peuvent contribuer au gain.

Le fait d'utiliser les niveaux de l'injecteur de l'étage adjacent comme états laser hauts très peuplés, peut s'envisager dans la plupart des LCQ. Ce qui est particulier aux structures du type de celle étudiée ici (à DPRP), c'est que les états injecteurs sont très couplés avec les états des étages adjacents.

Cette situation, où la transition laser se fait entre deux étages adjacents, n'entre pas dans la configuration prévue lors de la mise au point du modèle. Nous avons donc préféré traiter plus complètement le problème, en considérant comme étage deux périodes élémentaires de la structure initialement proposée par Williams *et al.*, i.e., la séquence épitaxiale : **54**/78/**24**/64/**38**/148/**24**/94/**54**/78/**24**/64/**38**/148/**24**/94, où les barrières d'AlGaAs ont été graissées. À partir de ce paragraphe et dans la suite de cette partie, nous abandonnons la dénomination des sous–bandes utilisée dans le chapitre précédent. Nous adoptons la numérotation des sous–bandes présentée sur la figure 8.1. Ainsi les transitions radiatives, étudiées expérimentalement par Williams *et al.* [5], se produisent entre les sous–bandes $6 \to 4$ et $10 \to 9$. Elles seront appelées transitions de *classe A*, afin de bien les distinguer de celles suggérées par Lee *et al.* [6] et qui mettent en jeu les sous–bandes $7 \to 6$ et $5 \to 4$. Ces dernières seront regroupées sous le terme de transitions de *classe B*. À ce stade, il n'est pas inutile de nous résumer à l'aide du tableau 8.1, qui présente les fréquences ainsi que les éléments de dipôle des transitions de classes A et B.

À noter que pour les calculs présentés sur la figure 8.1, nous avons utilisé les mêmes paramètres numériques qu'au chapitre précédent, c'est–à–dire un pas spatial $\Delta z = 1$ Å, une précision de 10^{-4} eV pour les fonctions d'onde calculées sur $2p + 1 = 3$ étages. La structure est décrite en utilisant 60 sous–bandes.

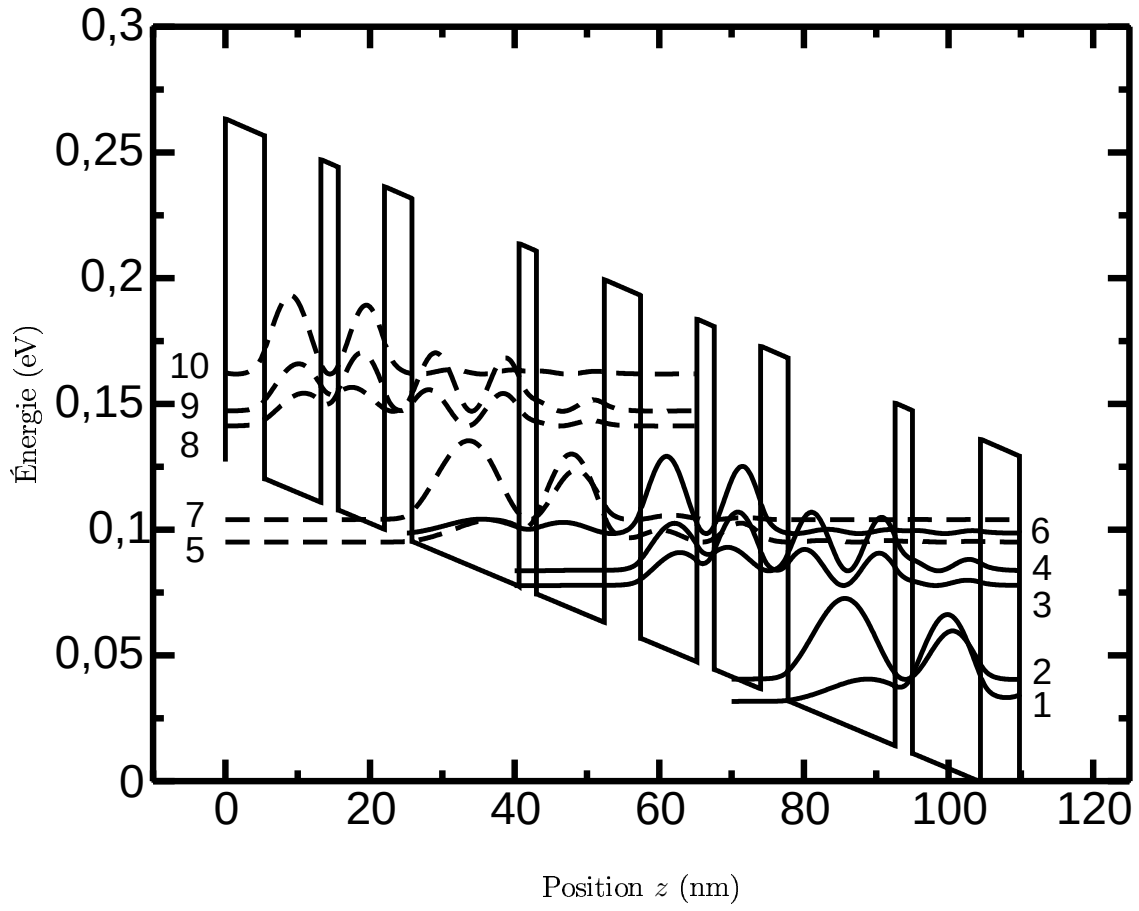


FIG. 8.1 – Fonctions d'onde (modules au carré) de la « variante » du LCQ à DPRP en considérant deux périodes élémentaires de la structure de la figure 7.1. Les fonctions d'onde en trait plein (resp. en trait tireté) appartiennent à la période de « droite » (resp. de « gauche ») et sont numérotées à droite (resp. à gauche). Les équations de Schrödinger et Poisson ont été résolues sur $2p+1=3$ étages, c'est–à–dire sur 6 périodes élémentaires du LCQ à DPRP de la figure 7.1. Le nombre de sous–bandes a été fixé à 60, soit 30 par étage. Par souci de lisibilité, toutes n'ont pas été représentées sur la figure. La densité électronique totale par étage est $N_s = 5{,}6 \times 10^{14}$ m^{-2}, le champ est de $F = 12{,}2$ kV/cm et la température $\theta = 44$ K.

8.1.2 Résultats Monte Carlo

Dans cette sous–partie, nous présentons les résultats de simulation pour le LCQ de la figure 8.1. À cette occasion, nous discuterons de l'effet du modèle physique d'écrantage sur la répartition de la densité électronique. Puis, dans un second temps, nous examinerons l'influence de l'interaction inter–porteurs sur les performances attendues de ce LCQ à 1,4 THz.

Paramètres des simulations Monte Carlo

Nous avons repris les paramètres numériques utilisés pour modéliser la structure à DPRP au chapitre précédent, à une modification près portant sur le pas de discrétisation ΔQ des éléments de matrice du potentiel coulombien. Nous avons déjà insisté sur le temps de calcul nécessaire à l'évaluation des éléments de matrice du potentiel coulombien non écranté dans les systèmes à grand nombre de sous–bandes (ici 60). Afin de limiter le stockage et de rester dans la limite des capacités des stations de calcul, nous avons choisi de discrétiser le potentiel coulombien sur ~ 100 pas de $\Delta Q = 2 \times 10^7$ m^{-1}. Avec ces 60 sous–bandes, le programme occupe une place mémoire d'environ 1 Go et son exécution dure environ 100 heures.

Le modèle d'écrantage, que nous avons utilisé, est celui décrit au chapitre 5 et désigné par l'acronyme MSB. Nous l'avons cependant complété en employant, à la place de la sous–bande écrantante unique g, une *sous–bande écrantante équivalente*. Nous allons donc brièvement expliquer cette notion avant de passer aux résultats des simulations.

Notion de sous–bande écrantante équivalente

Dans un système multi-sous–bandes, rares sont les cas où une seule sous–bande porte l'essentiel de la charge. Le LCQ, que nous étudions dans cette section, est un exemple typique de structure dans laquelle la densité électronique est répartie sur plusieurs sous–bandes. Dans le but de décrire ces systèmes, le modèle MSB présenté au chapitre 5 et qui faisait intervenir la sous–bande fondamentale g comme sous–bande écrantante, a été adapté en utilisant une sous–bande écrantante équivalente qui remplace l'ensemble des sous–bandes $\{\mathrm{g}_1, \mathrm{g}_2, \ldots\}$ significativement peuplées. Pour cela, les équations (5.29) sont généralisées en utilisant les remplacements suivants :

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{g}}(Q) &\rightarrow \sum_j V^{\mathrm{nu}}_{\mathrm{g}_j\mathrm{g}_j\mathrm{g}_j\mathrm{g}_j}(Q)\Pi_{\mathrm{g}_j\mathrm{g}_j}(Q), \\ N_{\nu\nu'\mathrm{g}}(Q) &\rightarrow \sum_j V^{\mathrm{nu}}_{\nu\mathrm{g}_j\nu'\mathrm{g}_j}(Q)\Pi_{\mathrm{g}_j\mathrm{g}_j}(Q). \end{aligned} \tag{8.1}$$

Dans la suite de ce chapitre, on considère que la sous–bande écrantante équivalente est formée des sous–bandes 1, 2, 5 et 7.

Influence du modèle d'écrantage

Dans un premier temps, nous cherchons à étudier l'influence du modèle d'écrantage sur l'occupation des sous–bandes du LCQ de la figure 8.1. Pour cela, la figure 8.2 représente les densités électroniques des différentes sous–bandes pour deux modèles d'écrantage, d'une part le modèle MSB avec une sous–bande écrantante équivalente et, d'autre part, le modèle USSB avec une unique sous–bande écrantante, en l'occurrence la sous–bande 1.

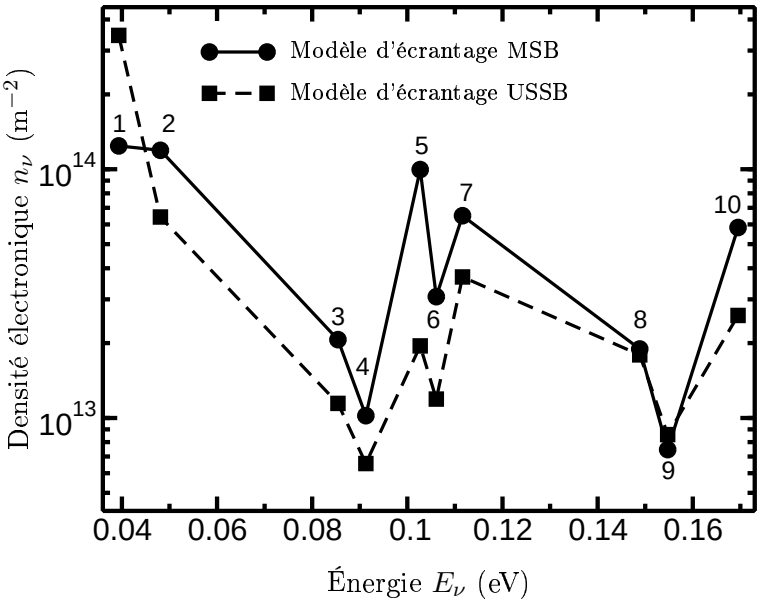


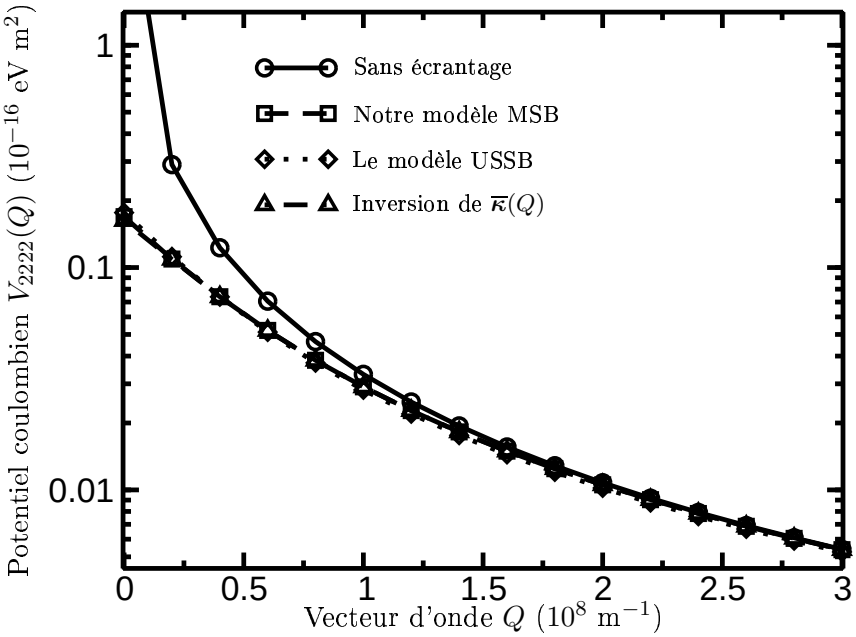
FIG. 8.2 – Répartition de la densité électronique par sous–bandes du LCQ de la figure 8.1 pour différents modèles d'écrantage.
Trait plein : modèle d'écrantage MSB avec une sous–bande écrantante équivalente ; Trait tireté : modèle d'écrantage USSB par la sous–bande fondamentale 1.

On constate que l'usage de notre modèle d'écrantage conduit à une répartition plus homogène des densités électroniques sur l'ensemble des sous–bandes. En effet, dans le cas où le modèle USSB est utilisé, la sous–bande 1 porte 60 % de la distribution avec $n_1 \simeq 3{,}5 \times 10^{14}$ m^{-2}, tandis qu'avec notre modèle d'écrantage, la densité du niveau 1 n'est plus que $n_1 = 1{,}2 \times 10^{14}$ m^{-2}. De plus, lorsque le modèle d'écrantage MSB est utilisé, l'inversion de population de classe B entre les niveaux 5 et 4 s'élève à $\Delta n_{54} = 9 \times 10^{13}$ m^{-2}, soit 10 fois celle obtenue avec le modèle USSB. Le modèle « physique » d'écrantage a donc une influence significative sur les performances attendues du LCQ.

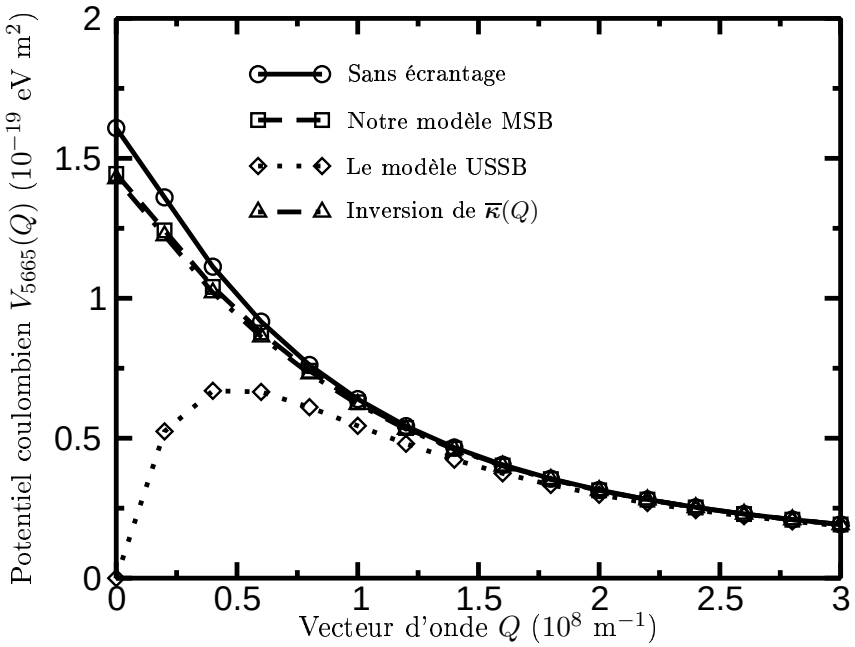
Éléments de matrice du potentiel coulombien

Dans cette sous–section, nous allons essayer d'interpréter les résultats précédents en étudiant les éléments de matrice du potentiel coulombien. Dans le même esprit que l'étude qui a été menée au paragraphe 5.4.4, nous allons ici nous intéresser uniquement à quelques éléments de matrice représentatifs.

Les figures 8.3(a) et 8.3(b) représentent deux éléments de matrice du potentiel coulombien en fonction du vecteur d'onde Q pour différents modèles d'écrantage. Plus spécifiquement, quatre modèles d'écrantage sont considérés : (i) pas d'écrantage, i.e., l'élément de matrice du potentiel nu ; (ii) le modèle MSB ; (iii) le modèle USSB ; (iv) l'inversion complète de la matrice diélectrique $[\overline{\boldsymbol{\kappa}}(Q)]^{-1}$ qui reste notre modèle « étalon ». Pour les modèles (ii) et (iii), nous n'avons pas utilisé de sous–bande écrantante équivalente par souci de simplification et nous avons considéré uniquement l'écrantage par la sous–bande fondamentale, c'est–à–dire que g $\equiv$ 1. Par ailleurs, pour ces calculs effectués en début de simulation, on a utilisé la température de réseau, soit 44 K, afin d'évaluer les éléments du tenseur de polarisabilité.



(a) Élément de matrice $V_{2222}(Q)$. Les trois dernières courbes, marquées des symboles □, ◊ et △, sont confondues.



(b) Élément de matrice $V_{5665}(Q)$.

FIG. 8.3 – Éléments de matrice du potentiel coulombien en fonction du vecteur d'onde Q obtenus en début de simulation pour différents modèles d'écrantage. Les sous–bandes sont celles de la structure de la figure 7.1.

La figure 8.3(a) représente un élément de matrice *intra-sous–bande pur* $V_{2222}(Q)$. On constate que les trois modèles d'écrantage (ii), (iii) et (iv) écrantent de manière similaire puisque les courbes sont *confondues*.

La figure 8.3(b) présente l'élément de matrice $V_{5665}(Q)$, qui correspond à un exemple « d'interactions inter-sous–bandes résultant en une transition inter-sous–bandes » dans la terminologie de la référence [207]. On remarque que le modèle USSB induit un comportement erroné pour les faibles valeurs de vecteur d'onde échangé et même annule « artificiellement » l'élément de matrice en $Q = 0$. On voit que notre modèle, proche du résultat obtenu par la méthode d'inversion du tenseur diélectrique, rectifie le comportement indu de l'élément de matrice en $Q \to 0$. Cette modification profonde de l'allure de l'élément de matrice qui, dans le cas précis, se rapproche de l'élément de matrice non écranté, a de grandes conséquences sur la simulation de Monte Carlo. Le maximum de l'élément de matrice obtenu avec notre modèle est quatre fois supérieur à celui obtenu avec le modèle USSB. Ainsi, on constate que, durant la simulation, des sous–bandes qui n'étaient pas explorées auparavant, le sont d'avantage avec notre modèle d'écrantage. Pour l'exemple $(5 \to 6, 6 \to 5)$ qui nous intéresse ici, notre modèle conduit à une augmentation par un facteur 1000 du nombre d'événements.

Pour en terminer avec le nombre de processus inter-sous–bandes, le tableau 8.2 résume le nombre d'événements inter-sous–bandes qui se réalisent par picoseconde. On remarque que l'inclusion de l'interaction électron–électron conduit logiquement à effectuer beaucoup plus de transitions inter-sous–bandes. De plus, notre modèle d'écrantage augmente ce nombre car les éléments de matrice du potentiel coulombien écranté sont modélisés de manière plus physique. Bien évidemment, ces différences peuvent également être observées sur la valeur du courant.

TAB. 8.2 – Comparaison du nombre de processus inter-sous–bandes pour différents modèles d'écrantage.

	Nombre de processus inter-sous–bandes (par picoseconde)
Sans interaction électron–électron	0,14
Modèle d'écrantage USSB	1
Modèle d'écrantage MSB	3

Influence de l'interaction électron–électron

Afin de mieux comprendre l'influence de l'interaction inter–porteurs sur la répartition des électrons, nous avons représenté sur la figure 8.4 la répartition de la densité électronique par sous–bande en incluant ou non l'interaction électron–électron. On constate que, comme il a été évoqué au chapitre précédent, l'interaction entre les électrons semble bénéfique aux interactions de la classe A, car la redistribution de la densité électronique profite aux niveaux lasers hauts de ces transitions, c'est–à–dire aux sous–bandes 6 et 10. Ainsi, le niveau 10 voit sa densité électronique multipliée par un facteur proche de cinq.

A contrario, l'interaction électron–électron semble pénaliser les performances pour la fréquence de la classe B voisine de 1 THz par rapport aux résultats obtenus sans l'interaction inter–porteurs. Effectivement, on constate que l'amplitude de l'inversion de population entre les niveaux 6 et 7 est environ quatre fois plus faible lorsque l'interaction inter–porteurs est

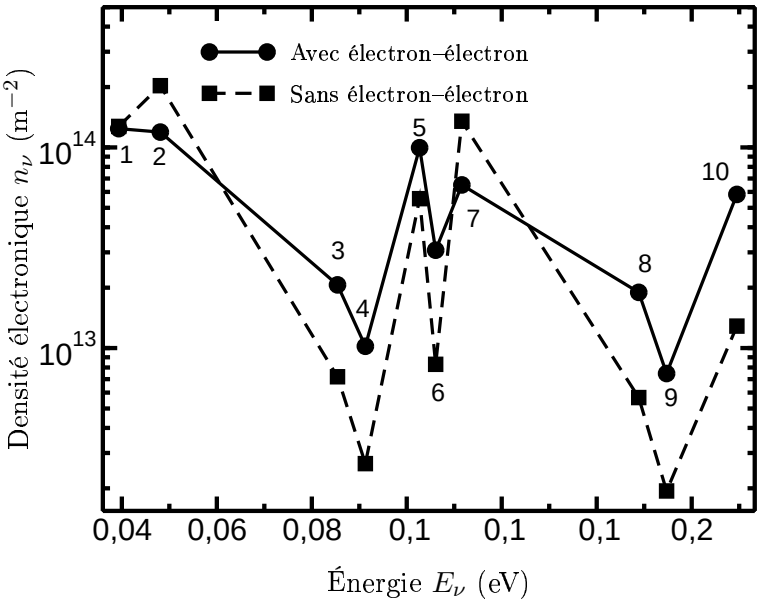


FIG. 8.4 – Répartition de la densité électronique par sous–bande de la structure de la figure 8.1 avec (trait plein) et sans (trait tireté) l'interaction électron–électron.
Le modèle d'écrantage utilisé est le modèle MSB avec une sous–bande écrantante équivalente formée des sous–bandes 1, 2, 5 et 7.

incluse dans la simulation de Monte Carlo. Essayons d'expliquer ce résultat en étudiant les taux de transitions du niveau laser haut de cette transition, i.e., la sous–bande 7. À partir des simulations, nous avons calculé un taux de transition non–radiatif $7 \rightarrow 6$ de $\tau_{7\rightarrow 6}^{\text{tot}} \simeq 5$ ps et une durée de vie du niveau 7 de $\tau_7 \sim 1.2$ ps. Si on s'intéresse au détail des mécanismes de transitions inter-sous–bandes, on trouve $\tau_{7\rightarrow 6}^{\text{ee}} = 5.6$ ps et $\tau_{7\rightarrow 6}^{\text{op}} = 53$ ps pour la durée de vie électron–électron et sur phonon optique polaire, respectivement. Ces résultats appellent deux commentaires : (i) la durée de vie du niveau laser haut 7 est essentiellement déterminée par la transition $7 \rightarrow 6$; (ii) parmi tous les mécanismes inter-sous–bandes $7 \rightarrow 6$, *c'est l'interaction électron–électron qui prédomine*, d'un facteur 10 environ par rapport au phonon optique polaire. Ainsi l'interaction entre les électrons conduit à une *repopulation* du niveau laser bas 6. Bien que l'amplitude de l'inversion de population reste satisfaisante ($\Delta n_{76} \sim 3 \times 10^{13}$ m^{-2}), elle n'est pas aussi grande qu'escomptée par Lee *et al.* [6].

8.1.3 Conclusion

Dans cette section, nous avons étudié le LCQ à dépopulation par résonance de phonon dans un mode de fonctionnement autre que celui pour lequel il avait été spécifiquement conçu par Williams *et al.* En considérant deux périodes de cette structure, nous avons mis en évidence des possibles transitions à des fréquences proches de 1 THz, comme il avait été suggéré par Lee *et al.* Nous avons discuté de l'influence du modèle physique d'écrantage en étudiant la répartition de la charge électronique. Nous avons également montré que l'interaction électron–électron, qui n'avait pas été incluse dans le modèle de Lee et Wacker, semble détériorer l'inversion de population à 1,4 THz. D'ailleurs, de manière plus générale, il apparaît que la repopulation du niveau laser bas par interactions inter–porteurs sera le mécanisme d'interaction non radiatif

pénalisant pour toutes les fréquences voisines de 1 THz et ce d'autant plus que les sous–bandes sont très fortement couplées.

8.2 Laser à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon émettant à 1 THz

Après le LCQ à DPRP à 3,4 THz, Williams *et al.* ont proposé de nouvelles séquences épitaxiales afin d'augmenter les performances en température [5, 25, 64–66]. Leurs travaux les plus récents, présentés dans la référence [7], font état du LCQ de fréquence la plus basse jamais obtenue à ce jour, sans utilisation d'un champ magnétique. Ils ont amélioré la structure initiale en utilisant le fait que l'on peut contrôler l'écart énergétique de l'émission indépendamment du mécanisme sélectif de dépopulation par résonance de phonon. En jouant sur les épaisseurs des barrières, on règle de manière précise les écarts énergétiques des niveaux anti–croisés 4 et 3. Ainsi, en augmentant la barrière intra–région active (24 Å dans le LCQ à 3,4 THz) à 31 Å, l'écart d'anti–croisement ΔE_{43} croît. Ce faisant, on relève le niveau 4 et on diminue la fréquence d'émission ΔE_{54}.

8.2.1 Simulation de la structure à DPRP émettant à 2,1 THz

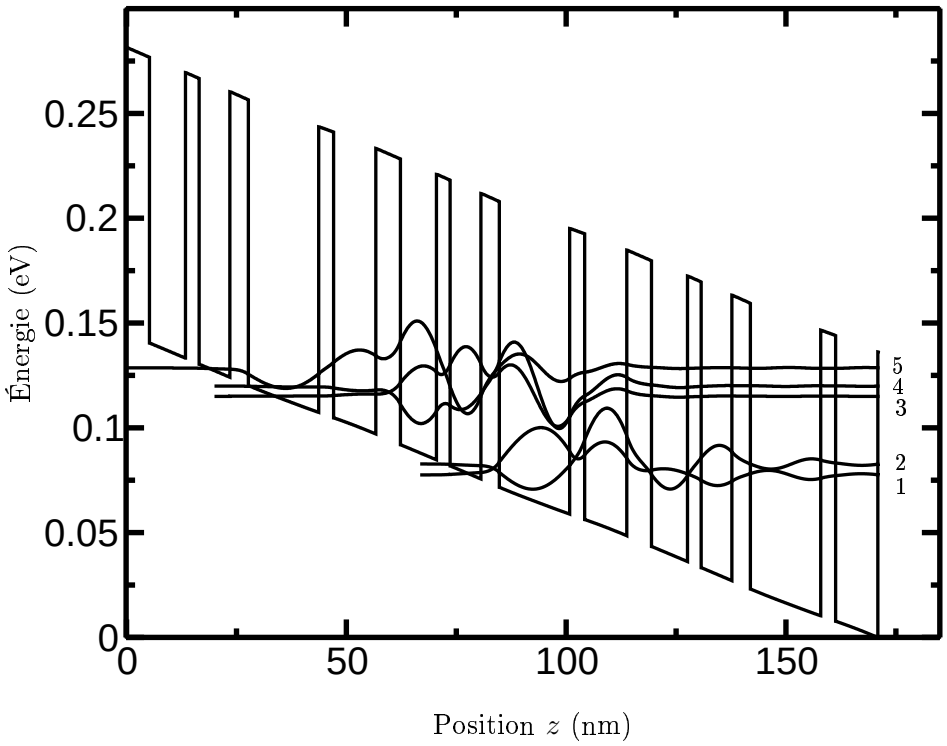


FIG. 8.5 – Structure de bande et principales fonctions d'onde du LCQ à DPRP basse fréquence à 2,1 THz [7].
La séquence épitaxiale d'un étage est (en Å) : **56**/82/**31**/70/**42**/160/**34**/96, où les barrières d'AlGaAs ont été graissées et le puits de 160 Å est dopé à $1{,}9 \times 10^{16}$ cm^{-3}. La densité électronique totale par étage est $N_s = 3{,}04 \times 10^{14}$ m^{-2}. Le champ électrique est $F = 8{,}5$ kV cm^{-1} et la température $\theta = 44$ K.

La structure de la figure 8.5 représente le LCQ de fréquence 2,1 THz [7]. Le champ électrique n'étant pas précisé dans la référence [7], nous l'avons réglé à 8,5 kV cm^{-1} pour obtenir une fréquence proche de 2,1 THz. Nous avons tracé sur la figure 8.5 la structure de bande de conduction et les principales fonctions d'onde, calculées sur $2p+1 = 3$ étages, pour une température de réseau de $\theta = 44$ K. Dix sous–bandes par étage ont été utilisées. Nos calculs montrent que l'écart énergétique, $\Delta E_{42} = 37{,}6$ meV, entre les niveaux 4 et 2 reste voisin de l'énergie de phonon optique polaire. La fréquence obtenue est précisément de 2,1 THz ($\Delta E_{54} = 8{,}7$ meV). L'élément de dipôle entre ces sous–bandes a été calculé à $\langle z_{54} \rangle = 6{,}6$ nm.

Les performances publiées de ce LCQ sont une température maximale de fonctionnement en mode pulsé de 72 K et 40 K en CW. Quant à la puissance maximale, elle s'élève à 1,2 mW à 17 K en CW. Voyons les résultats obtenus par nos simulations de Monte Carlo.

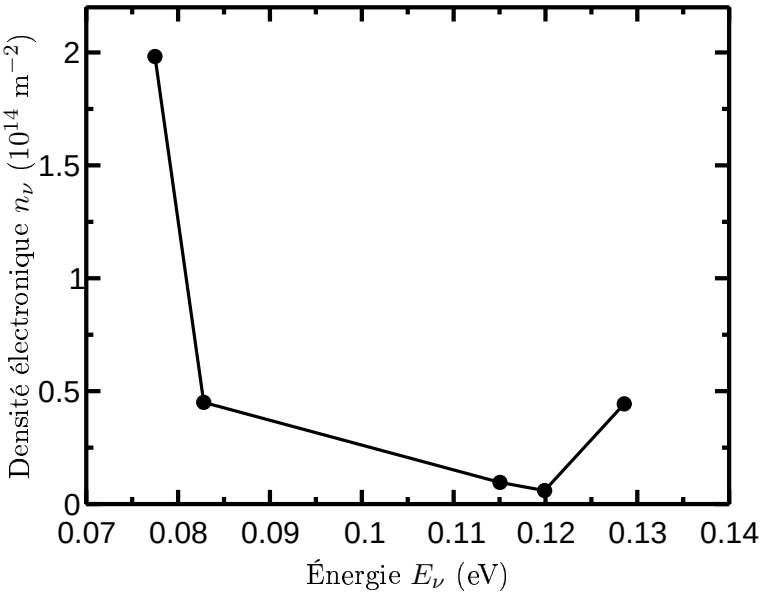


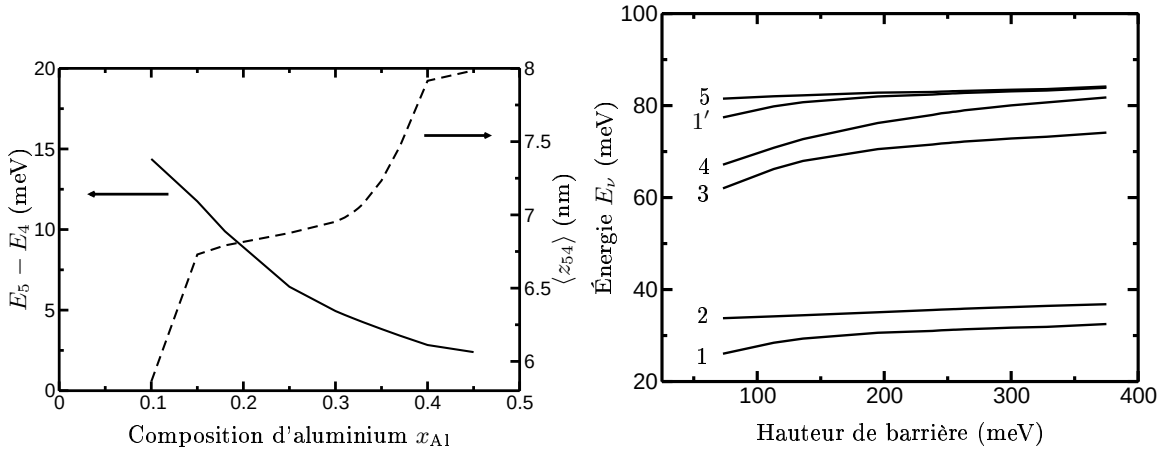
FIG. 8.6 – Densité électronique par sous–bande pour le LCQ de la figure 8.5.

La figure 8.6 représente les densités électroniques des sous–bandes de la figure 8.5, en incluant les interactions usuelles et l'interaction entre les électrons. On constate une inversion de population, entre les niveaux 4 et 5 de la figure 8.5, qui s'élève à $n_5 - n_4 = 3{,}8 \times 10^{13}$ m^{-2}, c'est–à–dire environ 13 % de la densité surfacique totale. Le courant vaut, quant à lui, 0,63 kA cm^{-2}, valeur tout à fait comparable aux mesures publiées dans la référence [7, figure 2].

8.2.2 Modifications de la structure : vers les très basses fréquences

À partir de cette structure, il est souhaitable de diminuer encore la fréquence d'émission. Nous proposons, dans ce but, d'ajuster non plus les épaisseurs des barrières, mais leur hauteur en faisant varier leur composition en aluminium.

Le raisonnement que nous avons mené est le suivant. En première approximation, on peut considérer que l'augmentation de la hauteur d'une barrière de δV décale les niveaux d'énergie E_ν proportionnellement à leur probabilité de présence $|\varphi_\nu(z)|^2$ dans la barrière. Ainsi, si une fonction d'onde s'annule dans la barrière et que l'on augmente la hauteur de celle–ci, le niveau d'énergie restera quasiment inchangé. On constate, en observant la figure 8.5,



(a) Écart énergétique $E_5 - E_4$ et élément de dipôle $\langle z_{54} \rangle$ en fonction de la composition d'aluminium x_{Al}.

(b) Énergies propres E_ν en fonction de la hauteur des barrières.

FIG. 8.7 – Évolution des énergies en fonction de la composition en aluminium des barrières en $\mathsf{Al}_{x_{\mathsf{Al}}}\mathsf{Ga}_{1-x_{\mathsf{Al}}}\mathsf{As}$ de 31 et 34 Å du LCQ de la figure 8.5 sous un champ électrique de 8,5 kV cm^{-1}.

que la fonction d'onde $\varphi_5(z)$ n'a que très peu de probabilité de présence dans les barrières « intra–injecteur » et « intra–région active », c'est–à–dire dans les barrières de 31 et 34 Å, respectivement. Cependant, ce n'est pas le cas de la fonction d'onde de la sous–bande 4. Ainsi, en augmentant la hauteur de ces deux barrières, on va accroître l'énergie propre de la sous–bande 4 en laissant celle du niveau 5 pratiquement inchangée.

Pour confirmer ce raisonnement, nous avons tracé, sur les figures 8.7(a) et 8.7(b), l'évolution des énergies propres et de l'élément de dipôle de la transition $5 \rightarrow 4$, pour différentes compositions d'aluminium de ces barrières. On remarque que l'augmentation de la composition d'aluminium a bien pour effet de diminuer la fréquence de la possible transition laser $5 \rightarrow 4$, tout en augmentant l'élément de dipôle. On constate sur la figure 8.7(a) que l'on peut régler assez finement la fréquence jusqu'à obtenir 1 THz, voire en deçà. Sur la figure 8.7(b), on remarque que l'augmentation de la hauteur des barrières a pour effet de rapprocher le niveau 4 du niveau 5 tout en maintenant presque constants les écarts énergétiques nécessaires à la résonance de phonon, comme l'écart ΔE_{32}.

Il reste à vérifier que l'inversion de population est préservée. Pour obtenir un premier élément de réponse, nous avons effectué une série de simulations en négligeant l'interaction électron–électron, ce qui permet un calcul très rapide. Les résultats, qui n'ont qu'une valeur indicative, sont représentés sur la figure 8.8, où l'on a tracé l'inversion de population en fonction de la composition en aluminium des barrières. On observe que l'inversion est importante sur une large gamme de composition et maximale pour une composition $x_{\mathrm{Al}} = 32$ %, avec $\Delta n_{54} = 8{,}4 \times 10^{13}$ m^{-2}. Nous retenons donc cette composition pour une étude plus poussée que nous présenterons dans la suite de cette section.

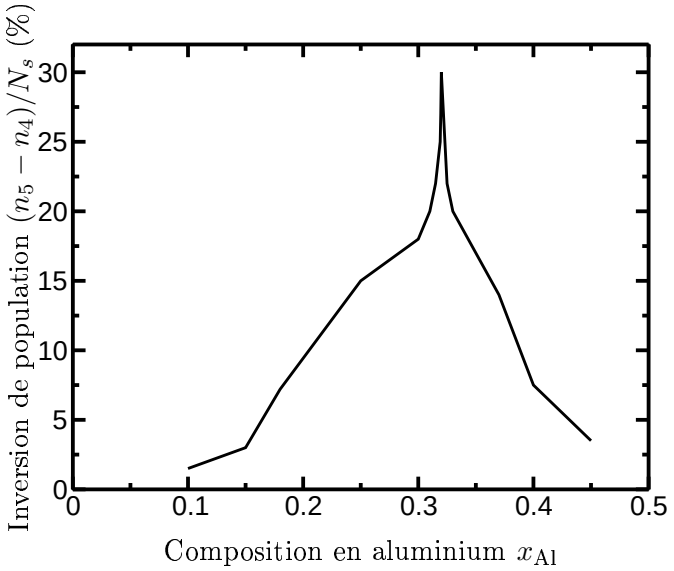


FIG. 8.8 – Amplitude de l'inversion de population (en pourcentage de la densité électronique totale N_s) en fonction de la composition en aluminium x_{Al} des barrières d'$\mathsf{Al}_{x_{\mathsf{Al}}}\mathsf{Ga}_{1-x_{\mathsf{Al}}}\mathsf{As}$ de 31 et 34 Å du LCQ de la figure 8.5.
La polarisation extérieure est de 8,5 kV cm^{-1}. L'interaction électron–électron n'a pas été incluse dans ces calculs.

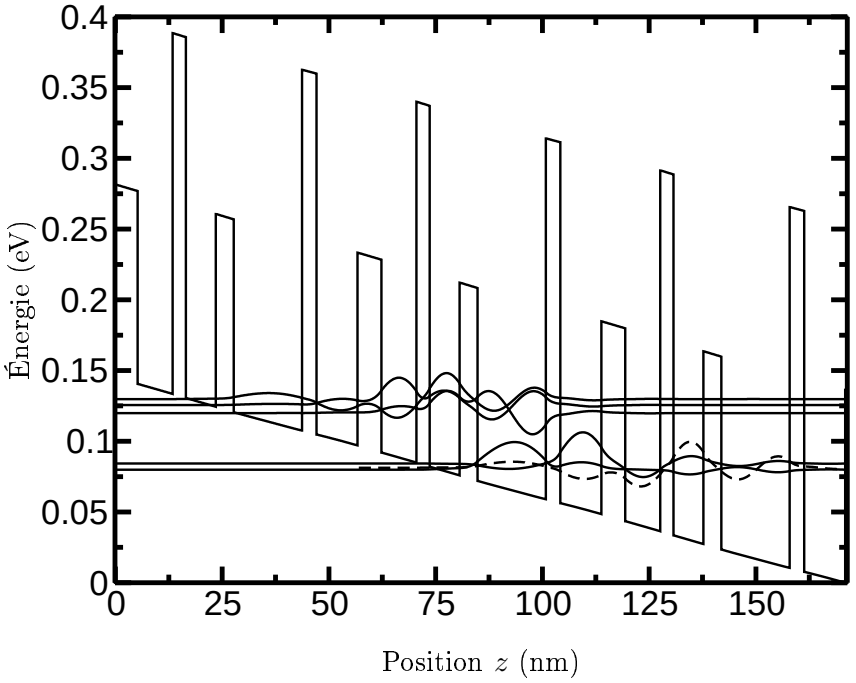


FIG. 8.9 – Structure de bande et principales fonctions d'onde du LCQ à DPRP, dont la composition en aluminium des barrières de 31 et 34 Å a été fixée à 32 %.
La fonction d'onde en trait tireté est celle du niveau laser haut de l'étage adjacent $\varphi_{5'}(z)$. Le champ électrique est $F = 8{,}5$ kV cm^{-1} et la température $\theta = 44$ K.

8.2.3 Évolution avec le champ électrique du LCQ à 32 % d'aluminium

De manière indicative, les simulations sans l'inclusion de l'interaction électron–électron nous ont permis de trouver un candidat intéressant pour une composition de 32 % en aluminium. Nous allons examiner ses caractéristiques en fonction de la polarisation extérieure. Nous reviendrons également sur l'influence de l'interaction électron–électron.

Pour cette composition de 32 % d'aluminium, la fréquence la plus basse que l'on peut obtenir est 1 THz avec un élément de dipôle $\langle z \rangle = 8$ nm, pour un champ électrique $F =$ 8,5 kV/cm. D'ailleurs, nous avons tracé sur la figure 8.9 la structure de bande et les principales fonctions d'onde du LCQ pour ce champ. On remarque que le niveau 1 est très fortement couplé avec le niveau laser haut 5′ (trait tireté) de l'étage adjacent puisque $\langle z_{15'} \rangle = 6$ nm. On peut donc raisonnablement penser que le courant dans ce LCQ va être très important.

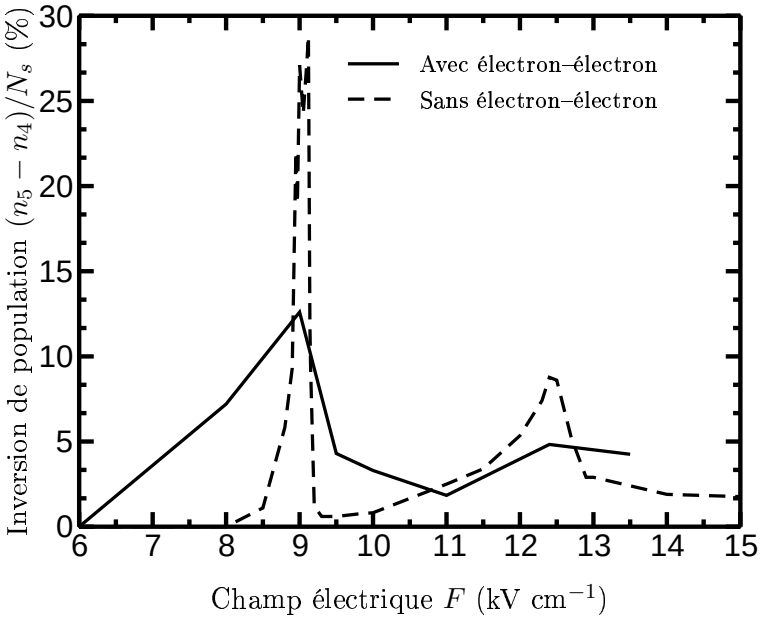


FIG. 8.10 – Amplitude de l'inversion de population (en proportion de la charge totale disponible N_s) en fonction du champ électrique F, avec (trait plein) et sans (trait tireté) l'interaction électron–électron. Le LCQ simulé est celui de la figure 8.9.

La figure 8.10 représente la différence de population Δn_{54} en fonction du champ électrique pour le LCQ de la figure 8.9. On remarque que l'inversion de population peut être observée sur une large gamme de polarisations extérieures. De plus, on constate un pic très marqué vers 9 kV cm^{-1}. L'interaction électron–électron conduit à une évolution moins brutale, avec des valeurs maximales plus faibles mais une inversion de population présente pour toute une gamme de champs, comme par exemple $F = 9{,}5$ kV cm^{-1}, qui ne l'induisaient pas lorsque l'interaction n'était pas incluse.

Nous avons tracé sur la figure 8.11 l'évolution de la fréquence et de l'élément de dipôle de la transition $5 \rightarrow 4$ en fonction du champ électrique F. On peut noter que les niveaux d'énergies E_4 et E_5 s'écartent lorsque le champ électrique croît : c'est le décalage vers le bleu dû à l'*effet Stark* [37]. À partir de $F = 10$ kV cm^{-1}, on constate une évolution linéaire de la fréquence d'émission avec le champ, qui pourrait permettre un ajustement précis de la

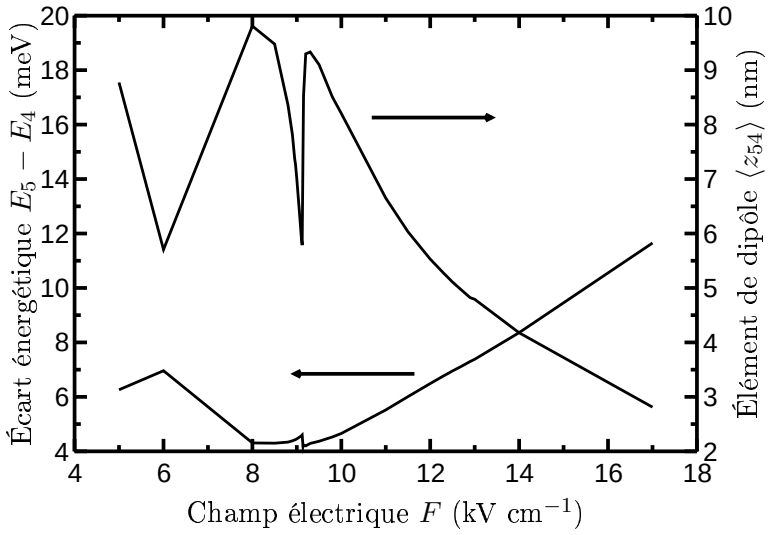


FIG. 8.11 – Évolution de la fréquence et de l'élément de dipôle de la transition térahertz $5 \rightarrow 4$ en fonction du champ électrique F. Le LCQ simulé est celui de la figure 8.9.

fréquence dans une large gamme. Examinons à présent l'évolution du courant en fonction du champ électrique.

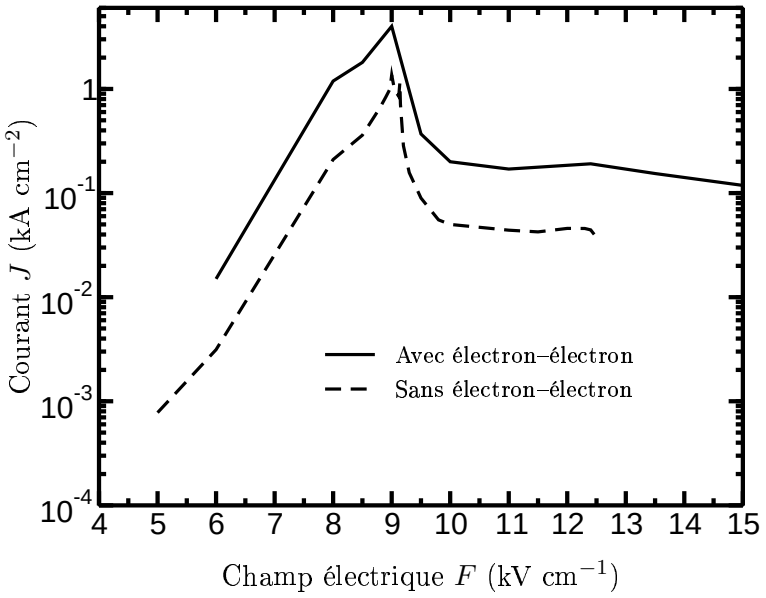


FIG. 8.12 – Évolution du courant J en fonction du champ électrique F du LCQ de la figure 8.9, avec (trait plein) et sans (trait tireté) l'interaction électron–électron.

Nous avons tracé sur la figure 8.12 la caractéristique courant–tension du LCQ de la figure 8.9, en incluant ou non l'interaction électron–électron. On s'aperçoit que cette structure souffre, comme la plupart des LCQ de la famille à DPRP, d'un courant très élevé puisqu'il s'élève à 4 kA cm^{-2} pour un champ électrique de 9 kV/cm. Dans cette structure, où les états

sont, non seulement très rapprochés en énergie, mais aussi fortement délocalisés, le courant se fait majoritairement (~ 80 %) par l'interaction électron–électron. Dans la plage de champs électriques 10–13,5 kV cm^{-1}, le courant atteint un « plateau » avec une valeur d'environ $J \approx 180$ A cm^{-2}, 20 fois plus faible que le courant maximal pour $F \approx 9$ kV cm^{-1}. Cette gamme de champs électriques (10–14 kV cm^{-1}) est donc potentiellement intéressante, car le courant évolue de manière stable comparativement au comportement plus « abrupt » observé dans la gamme 8–9,5 kV cm^{-1}.

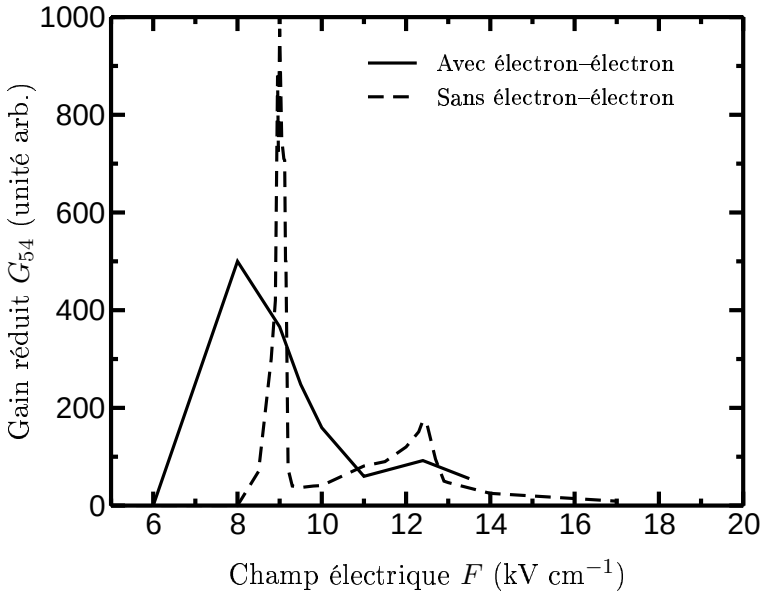


FIG. 8.13 – Facteur de mérite $G_{54} \propto \langle z_{54} \rangle^2 \times (n_5 - n_4)$ en fonction du champ électrique F pour le LCQ de la figure 8.9. Les calculs ont été effectués avec (trait plein) et sans (trait tireté) l'interaction électron–électron.

Pour conclure cette partie, nous allons maintenant synthétiser les résultats en étudiant le facteur de mérite G_{54} de l'émission, à savoir le produit de l'inversion de population par le carré de l'élément dipolaire. L'évolution du gain « réduit » G_{54} de l'émission térahertz en fonction du champ électrique a été tracée sur la figure 8.13, avec et sans l'interaction électron–électron. Pour des champs voisins de 12 kV/cm, le gain G_{54} conserve une valeur raisonnable bien qu'inférieure d'un facteur 5 à sa valeur maximale. Cela suggère des possibilités intéressantes car le courant est ici assez faible, inférieur d'un facteur 20, ce qui pourrait être un avantage appréciable.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié deux « variantes » du LCQ à DPRP qui fonctionnent à des fréquences inférieures à 2 THz. Dans un premier temps, nous avons vu qu'il était possible d'obtenir un phénomène d'inversion de population à 1,4 THz, à l'aide d'états de l'injecteur dans la structure à DPRP, habituellement utilisée à la fréquence de 3,4 THz. Cependant, nous avons mis en évidence que l'interaction électron–électron, couplant fortement les niveaux lasers haut et bas, s'oppose fortement à l'inversion de population. La conclusion très prometteuse de

Lee *et al.*, obtenue sans l'interaction électron–électron, semble ici confirmée. Mais le problème mis en évidence ici pourra se révéler gênant, car il est général à la gamme de fréquences visées.

Dans un second temps, nous avons étudié le LCQ à DPRP à 2,1 THz. Nos résultats confirment que la structure souffre également de courants électriques importants. En alternant les barrières à 18 et 32 % d'aluminium, nous avons montré qu'il était possible de diminuer les écarts énergétiques de la transition laser, afin d'obtenir des fréquences inférieures à 2 THz, voire même en deçà de 1 THz. Nos résultats avec l'interaction électron–électron montrent que le phénomène d'inversion de population est obtenu sur une large gamme de champs électriques. Néanmoins, nos calculs suggèrent la possibilité d'utiliser le composant après le régime de forte résistance différentielle négative, dans une zone de courant plus faible, tout en ayant des performances de gain appréciables. En outre, dans cette gamme, nos simulations montrent que la fréquence peut être facilement accordée avec le champ électrique.

Pour conclure, nous souhaitons souligner deux points qui nous semblent communs à tous les lasers opérant aux fréquences voisines de 1 THz. Du fait des très faibles écarts énergétiques entre sous–bandes, l'évolution de nombreux paramètres des LCQ en fonction du champ électrique sera probablement abrupte. De petites variations de potentiel, quelqu'en soit l'origine, peuvent avoir un impact très important sur l'alignement des niveaux et donc sur les performances des LCQ. De tels lasers risqueront de présenter des comportement instables à cause des phénomènes de charge d'espace. De plus, pour les fréquences proches de 1 THz voire sub–térahertz, l'interaction inter–porteurs sera un des mécanismes non–radiatifs les plus pénalisants à cause des repopulations par transition directe via l'interaction électron–électron.

Dans la pratique, maintenant que la conception des niveaux quantiques de LCQ émettant à 1 THz a été réalisée, il convient par l'expérience de s'assurer de la faisabilité de telles structures. Ces recherches soulèveront, à n'en pas douter, de nombreuses problématiques très riches d'un point de vue scientifique.

Conclusion générale

Au cours de ce travail, nous avons examiné le transport dans des lasers à cascade quantique émettant dans l'infrarouge lointain et moyen. Cette étude a été effectuée à l'aide d'une méthode de simulation microscopique incluant l'interaction électron–électron : la méthode de Monte Carlo.

Dans la première partie de ce mémoire, nous avons rappelé le contexte scientifique de nos travaux. Nous avons détaillé les difficultés soulevées par la réalisation de sources cohérentes à l'état solide émettant en infrarouge et, tout particulièrement, en infrarouge lointain. Nous avons montré que, parmi les dispositifs rayonnant en infrarouge, les LCQ se situaient à l'état de l'art des performances, tant au niveau de la descente en fréquence, que pour les conditions de fonctionnement.

Ensuite, dans la deuxième partie du mémoire, nous avons décrit le modèle physique du simulateur Monte Carlo adapté au transport inter-sous–bandes dans les LCQ. Un modèle le plus général possible a été présenté, incluant de nombreux mécanismes d'interaction et, en particulier, l'interaction électron–électron par l'intermédiaire d'un algorithme spécifique basé sur une technique de majoration/réjection.

Dans la troisième partie de ce mémoire, nous avons appliqué le modèle à l'étude du transport électronique dans les LCQ émettant dans l'infrarouge. Sur une première structure [3], émettant dans l'infrarouge moyen, il a été vérifié que notre solveur Schrödinger/Poisson était apte à décrire les LCQ particulièrement complexes, mêmes lorsqu'ils sont constitués de superréseaux. Concernant un LCQ émettant dans l'infrarouge lointain [4], nos résultats, en bon accord avec la littérature existante, ont mis en évidence le rôle prépondérant de l'interaction électron–électron sur l'inversion de population.

Nous avons ensuite étudié le LCQ à dépopulation par résonance de phonon émettant à 3,4 THz [5]. Nous avons montré que l'interaction électron–électron modifie considérablement la distribution électronique de chaque sous–bande. Nos résultats mettent en évidence la dépendance de l'amplitude de l'inversion de population et du courant avec la modélisation de l'interaction électron–électron. Nos études confirment également que les LCQ utilisant le principe de dépopulation par résonance de phonon souffrent de densités de courant élevées, principalement à cause d'une très grande délocalisation des fonctions d'onde. Le phénomène d'inversion de population semble subsister à température ambiante, bien que limité par la repopulation du niveau radiatif bas. Par ailleurs, nos résultats confirment les résultats de Lee *et al.* [6] concernant une émission à 1,4 THz dans cette structure. L'analyse physique de nos simulations montre qu'à cette fréquence, c'est l'interaction électron–électron qui est le mécanisme non radiatif risquant de limiter les performances. Ce phénomène semble inhérent à la gamme des fréquences visées et délicat à éviter, car il paraît être intrinsèque aux sous–bandes proches en énergie et fortement couplées.

Nous avons terminé nos études en examinant le LCQ émettant à la fréquence la plus basse

atteinte à ce jour de 2,1 THz. En modifiant la structure de bande de ce composant, nous avons proposé un LCQ pouvant émettre à 1 THz. De manière prospective, nos résultats sur la caractéristique courant–tension de ce dispositif suggèrent la possibilité de fonctionner dans une région de courant réduit, où la fréquence peut être réglée entre 1,3 et 2,3 THz.

Nous avons présenté un modèle microscopique des LCQ aussi général que possible, qui, à l'avenir, nous l'espérons, permettra d'étudier d'autres structures basées sur des systèmes de matériaux différents du GaAs/AlGaAs. Le modèle que nous venons d'exposer améliore en de nombreux points la modélisation de l'interaction électron–électron dans des systèmes à grand nombre de sous–bandes en régime stationnaire hors d'équilibre. Cependant, de nombreux prolongements sont possibles à ce travail et, afin d'accompagner la descente en fréquence des LCQ, un certain nombre d'améliorations sont nécessaires au modèle. Au regard des écarts énergétiques visés aux fréquences térahertz, il semble que la prise en compte de la charge d'espace doive être très précise et ne puisse se baser sur les populations initiales à l'équilibre. Cela signifierait que les équations de Schrödinger et Poisson doivent être résolues régulièrement en cours de simulation et les probabilités d'interaction recalculées en conséquence, pour assurer l'auto–cohérence du modèle. Toutefois, il s'agit là d'une tâche très ardue, les contraintes informatiques risquant d'obérer considérablement cet objectif. En outre, il semble nécessaire de développer de nouvelles méthodes numériques afin d'éviter — ou de pouvoir pleinement traiter, selon les cas — les fluctuations de charge dans les systèmes hors d'équilibre. Ces études pourront peut–être s'effectuer en bâtissant des modèles « hybrides », couplant les simulations de Monte Carlo avec, par exemple, des modèles moins coûteux en temps calcul, comme les équations de bilan.

Sur un tout autre plan, nous pensons que notre modèle peut être appliqué à l'étude, non plus des sources, mais des photo–détecteurs. En effet, la notion de « gap térahertz » concerne également les détecteurs. Les LCQ peuvent être utilisés en tant que photo–détecteurs, en particulier dans la gamme térahertz [250, 251]. Un prolongement logique du modèle que nous venons de présenter est l'étude des LCQ en tant que détecteurs et, pour cela, notre simulateur devra être complété en incluant le couplage des électrons avec les photons. En outre, l'étude du bruit électronique des photo–détecteurs peut se révéler d'un grand intérêt. Or, la simulation Monte Carlo est un outil parfait pour examiner les phénomènes liés au bruit. Un prolongement logique de notre travail pourra être l'étude des fluctuations électroniques dans les LCQ utilisés comme photo–détecteurs.

Annexes

Annexe A

Interaction avec les phonons optiques polaires

Dans cette annexe, nous développons les expressions mathématiques utilisées pour calculer la probabilité d'interaction avec les phonons optiques polaires.

Expression mathématique de la probabilité d'interaction

On suppose la loi de dispersion des phonons optiques polaires constante : $\omega(\mathbf{q}) = \omega_{\mathrm{op}}$. La probabilité d'interaction pour un gaz électronique bidimensionnel avec les modes de phonons en volume s'écrit à l'aide des facteurs de forme électron–électron[1] [179, 196, 253, 254] :

$$\begin{aligned}\lambda_{\mu\nu}(\mathbf{K}) &= \frac{m_\nu^* e^2 \hbar\omega_{\mathrm{op}}}{8\pi\hbar^3\kappa_0}\left(\frac{1}{\kappa_\infty}-\frac{1}{\kappa_r}\right)\gamma'_\nu[E_\mu+\varepsilon_\mu(\mathbf{K})-E_\nu-\sigma\hbar\omega_{\mathrm{op}}] \\ &\times \left[N_{\mathrm{op}}+\frac{1}{2}(\sigma+1)\right]\int_0^{2\pi}\frac{F_{\mu\mu\nu\nu}(Q)}{Q}\mathrm{d}\beta, \end{aligned} \tag{A.1}$$

où $Q = |\mathbf{K}-\mathbf{K}'|$, κ_∞ est la constante diélectrique à haute fréquence, N_{op} est le nombre de phonons et $\sigma = \pm 1$. Le cas $\sigma = +1$ (resp. $\sigma = -1$) correspond à l'émission (resp. à l'absorption) d'un phonon optique polaire. On rappelle que le facteur de forme $F_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)$ a pour expression :

$$F_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q) = \int_0^L \mathrm{d}z \int_0^L \mathrm{d}z' \varphi_\mu(z)\varphi_\nu(z')\exp\left(-Q|z-z'|\right)\varphi^*_{\mu'}(z)\varphi^*_{\nu'}(z'). \tag{A.2}$$

Le calcul de ce facteur est effectué selon la méthode d'accélération numérique par décomposition en séries de Fourier telle qu'elle sera présentée dans l'annexe D.

[1] On utilise pour cela la propriété de convolution des transformées de Fourier des produits de fonctions d'onde [252] :

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}q_z\frac{I_{\mu\nu}(q_z)I^*_{\mu\nu}(q_z)}{Q^2+q_z^2} = \pi\frac{F_{\mu\mu\nu\nu}(Q)}{Q},$$

où

$$I_{\mu\nu}(q_z) = \int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}z\varphi_\mu(z)\varphi^*_\nu(z)\mathrm{e}^{\mathrm{i}q_z\cdot z}.$$

Détermination de l'angle de déviation

L'angle de déviation $\beta = (\widehat{\mathbf{K},\mathbf{K}'})$ est calculé à l'aide d'une technique de réjection dite de *Von–Neumann*. Rappelons le principe de cette méthode. Pour l'interaction sur phonon optique polaire, l'angle β suit la distribution :

$$\mathcal{P}_{\mu\nu}(\beta) \propto \frac{F_{\mu\mu\nu\nu}[Q(\beta)]}{Q(\beta)}, \tag{A.3}$$

où $Q(\beta)$ est donné par :

$$Q^2 = K^2 + K'^2 - 2KK'\cos\beta, \tag{A.4}$$

avec

$$\frac{\hbar^2\mathbf{K}'^2}{2m^*_\nu} = \varepsilon_\nu(1 + \langle\alpha\rangle_\nu\varepsilon_\nu), \tag{A.5}$$

$$\varepsilon_\nu = \varepsilon_\mu(\mathbf{K}) + E_\mu - E_\nu \pm \hbar\omega_0. \tag{A.6}$$

La distribution $\mathcal{P}_{\mu\nu}(Q)$ est majorée numériquement par $\mathsf{P}_{\mu\nu}$. On tire alors l'angle β au hasard uniformément entre 0 et 2π. On tire un nombre aléatoire r entre 0 et 1. Si l'équation suivante est vérifiée, alors l'angle β est conservé [87] :

$$r \times \mathsf{P}_{\mu\nu} \leq \mathcal{P}_{\mu\nu}(\beta), \tag{A.7}$$

dans le cas contraire, on recommence la procédure avec deux nouveaux nombres aléatoires β et r.

Annexe B

Probabilité d'interaction électron–électron pour un gaz bidimensionnel

Dans cette annexe, nous donnons le détail du calcul de la probabilité d'interaction électron–électron à courte distance pour un gaz bidimensionnel.

B.1 Dérivation de la probabilité d'interaction électron–électron

L'interaction électron–électron est particulièrement complexe, car elle fait intervenir les états initiaux et finaux de deux électrons, c'est–à–dire quatre fonctions d'onde. De plus, la conservation de l'énergie et du moment concerne les deux particules. Voyons plus en détails comment obtenir le taux d'interaction, i.e., l'équation (4.3). Le taux de transition $|\mu\mathbf{K}, \nu\mathbf{P}\rangle \rightarrow |\mu'\mathbf{K}', \nu'\mathbf{P}'\rangle$, en utilisant la règle d'or de Fermi, s'écrit :

$$\begin{aligned} \lambda^{\mathrm{e/e}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{K},\mathbf{P},\mathbf{K}',\mathbf{P}') &= \frac{2\pi}{\hbar}\left|M^{\mu\nu\mu'\nu'}_{\mathbf{K},\mathbf{P},\mathbf{K}',\mathbf{P}'}\right|^2 \times f_\nu(\mathbf{P}) \\ &\times \delta\left[E_\mu(\mathbf{K}) + E_\nu(\mathbf{P}) - E_{\mu'}(\mathbf{K}') - E_{\nu'}(\mathbf{P}')\right], \end{aligned} \tag{B.1}$$

où l'on a posé, pour simplifier les notations :

$$M^{\mu\nu\mu'\nu'}_{\mathbf{K},\mathbf{P},\mathbf{K}',\mathbf{P}'} \equiv \langle \mathbf{K}, \mu, \mathbf{P}, \nu | \hat{V}_{\mathrm{e/e}} | \nu', \mathbf{P}', \mu', \mathbf{K}' \rangle. \tag{B.2}$$

Pour obtenir, *in fine*, une densité de probabilité $\lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K})$ par unité de temps, homologue à celles obtenues pour les autres mécanismes d'interaction, on part de l'équation (B.1) libellée par quatre indices de sous–bandes et quatre vecteurs d'onde, et on « somme » sur $\mathbf{K}', \mathbf{P}, \mathbf{P}'$, ν et ν'. Ainsi le calcul numérique complet de la probabilité requiert une triple intégration sur des vecteurs d'onde bidimensionnels soit au total six intégrales « scalaires ». En utilisant la conservation de l'énergie totale et du moment, nous verrons que l'on peut réduire les intégrations au nombre de trois. Il n'en reste pas moins qu'un calcul *in extenso* de cette probabilité est excessivement coûteux en temps d'exécution ainsi qu'en stockage mémoire, dès que le système dépasse la dizaine d'états. Les limites des machines les plus modernes sont approchées voire dépassées par ces calculs : à titre d'exemple sur une machine type Pentium IV, le compilateur se refuse à allouer des tableaux comportant un nombre d'éléments supérieur à 3×10^7.

B.1.1 Élément de matrice

Le but de ce paragraphe est de déterminer l'élément de matrice de l'interaction électron–électron $M^{\mu\nu\mu'\nu'}_{\mathbf{K},\mathbf{P},\mathbf{K}',\mathbf{P}'}$. Rappelons que dans le cadre de la fonction enveloppe, les états électroniques $|\mu\mathbf{K}\rangle$ du système dans la représentation $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ s'écrivent :

$$\langle\mathbf{r}|\mu\mathbf{K}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{A}}}\varphi_\mu(z)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{B.3}$$

En découplant les intégrales sur les variables de position transverse $\mathbf{R}, \mathbf{R}'$ et selon l'axe de confinement z, z', on obtient[1] :

$$\begin{aligned} M^{\mu\nu\mu'\nu'}_{\mathbf{K},\mathbf{P},\mathbf{K}',\mathbf{P}'} &= \frac{1}{\mathcal{A}^2}\int \mathrm{d}\mathbf{R}\int \mathrm{d}\mathbf{R}'\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{K}+\mathbf{P}-\mathbf{K}'-\mathbf{P}')\cdot\mathbf{R}'} \\ &\times \iint \mathrm{d}z\mathrm{d}z'\varphi_\mu(z)\varphi_\nu(z')\hat{V}_{\mathrm{e/e}}(\mathbf{R}-\mathbf{R}', z-z')\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{K}'-\mathbf{K})\cdot\mathbf{R}}\varphi^*_{\mu'}(z)\varphi^*_{\nu'}(z'). \end{aligned} \tag{B.4}$$

L'intégrale par rapport à $\mathbf{R}$ permet de faire apparaître la transformée de Fourier du potentiel coulombien que nous noterons $M_{\mu\nu\mu'\nu'}(\mathbf{Q}, \omega_{\mathrm{d}})$, où $\mathbf{Q} = \mathbf{K} - \mathbf{K}'$ est le vecteur d'onde échangé et $\hbar\omega_{\mathrm{d}}$ l'énergie échangée pour la particule principale : $\hbar\omega_{\mathrm{d}} = E_\mu(\mathbf{K}) - E_{\mu'}(\mathbf{K}')$. À ce stade du calcul, nous ne précisons pas ce potentiel qui correspond en fait au potentiel coulombien *écranté* et *symétrisé*. L'intégrale sur $\mathbf{R}'$ donne la conservation du moment parallèle[2] de l'ensemble des deux particules :

$$\mathbf{K} + \mathbf{P} = \mathbf{K}' + \mathbf{P}'. \tag{B.5}$$

On poursuit le calcul en procédant à la sommation sur $\mathbf{K}', \mathbf{P}, \mathbf{P}'$ et ν, ν' :

$$\begin{aligned} \lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) &= \frac{2\pi}{\mathcal{A}^2\hbar}\sum_{\mathbf{K}',\mathbf{P},\mathbf{P}'}\sum_{\nu,\nu'} f_\nu(\mathbf{P})|M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q, \omega_{\mathrm{d}})|^2\delta(\mathbf{K}+\mathbf{P}-\mathbf{K}'-\mathbf{P}') \\ &\times \delta[E_\mu(\mathbf{K}) + E_\nu(\mathbf{P}) - E_{\mu'}(\mathbf{K}') - E_{\nu'}(\mathbf{P}')]. \end{aligned} \tag{B.6}$$

B.1.2 Hypothèse de bandes paraboliques

Continuons le calcul dans le cadre de bandes paraboliques en définissant une masse commune m^*_{e} afin de pouvoir traiter le Dirac en énergie (abrégé par δ_{E})

$$\delta_{\mathrm{E}} = \delta\left[\frac{\hbar^2}{2m^*_{\mathrm{e}}}(\mathbf{K}^2 + \mathbf{P}^2 - \mathbf{K}'^2 - \mathbf{P}'^2) + (E_\mu + E_\nu - E_{\mu'} - E_{\nu'})\right]. \tag{B.7}$$

On définit alors par commodité le vecteur d'onde relatif initial $\mathbf{G}$ (resp. final $\mathbf{G}'$) par l'expression :

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= \mathbf{P} - \mathbf{K}, \\ \mathbf{G}' &= \mathbf{P}' - \mathbf{K}'. \end{aligned} \tag{B.8}$$

[1] Pour simplifier le calcul de l'interaction électron–électron, les facteurs de Bloch $\mathcal{G}_{\mu\mu'}(\mathbf{K}, \mathbf{K}')$ et $\mathcal{G}_{\nu\nu'}(\mathbf{P}, \mathbf{P}')$ sont négligés.

[2] Pour les transitions inter–vallées, que nous ne considérons pas ici, il convient d'ajouter la différence appropriée $\Delta\mathbf{K}$ de vecteur d'onde du processus « Umklapp » considéré.

Ainsi δ_{E} s'écrit :

$$\delta_{\mathrm{E}} = \delta\left[\frac{\hbar^2}{4m_{\mathrm{e}}^*}(\mathbf{G}^2 - \mathbf{G}'^2) + (E_\mu + E_\nu - E_{\mu'} - E_{\nu'})\right]. \tag{B.9}$$

On procède alors à un changement de variable $\mathrm{d}\mathbf{P}' = (1/4)\mathrm{d}\mathbf{G}'$, et en utilisant la conservation de l'énergie, on obtient [210] :

$$\lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) = \frac{m_{\mathrm{e}}^*}{4\pi\hbar^3\mathcal{A}} \sum_{\nu,\nu',\mathbf{P}} f_\nu(\mathbf{P}) \int_0^{2\pi} |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q,\psi,\omega_{\mathrm{d}})|^2 \mathrm{d}\psi. \tag{B.10}$$

Où ψ est l'angle entre $\mathbf{G}$ et $\mathbf{G}'$. La conservation du moment et de l'énergie donne :

$$\mathbf{G}'^2 = \mathbf{G}^2 + \Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'}, \tag{B.11}$$

avec

$$\Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'} = \frac{4m_{\mathrm{e}}^*}{\hbar^2}(E_\mu + E_\nu - E_{\mu'} - E_{\nu'}). \tag{B.12}$$

D'où

$$Q = \frac{1}{2}\left[2\mathbf{G}^2 + \Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'} - 2G\left(\mathbf{G}^2 + \Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'}\right)^{1/2}\cos\psi\right]^{1/2}. \tag{B.13}$$

B.2 Terme d'échange de spin

La nature fermionique des électrons intervient dans l'interaction électron–électron par l'intermédiaire d'un terme d'échange que nous allons détailler. Lorsqu'on cherche les états quantiques d'un espace de n particules à partir des états quantiques à une particule, il convient de traiter les bosons par des états symétrisés et les fermions par des états anti–symétrisés [255, 256]. Ainsi, l'état quantique décrivant la paire initiale d'électrons, où les deux électrons ont respectivement pour spin σ_α et σ_β, s'écrit :

$$|\mu,\mathbf{K}(\sigma_\alpha);\nu,\mathbf{P}(\sigma_\beta)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|\mu,\mathbf{K}(\sigma_\alpha)\rangle|\nu,\mathbf{P}(\sigma_\beta)\rangle - |\nu,\mathbf{P}(\sigma_\beta)\rangle|\mu,\mathbf{K}(\sigma_\alpha)\rangle\right\}. \tag{B.14}$$

L'état final s'écrit de manière analogue. En utilisant cette nouvelle base antisymétrisée, et en sommant sur les spins des particules $\sigma_{\alpha,\beta}$, on montre que l'élément de matrice, qui doit être effectivement pris en compte dans la règle d'or de Fermi (B.1), est [255, voir p. 993 états dits *singulet* et *triplet*] :

$$\begin{aligned} M^{\mu\nu\mu'\nu'}_{\mathbf{K},\mathbf{P},\mathbf{K}',\mathbf{P}'} &= \frac{1}{4}|M_{\mathrm{d}} + M_{\mathrm{echge}}|^2 + \frac{3}{4}|M_{\mathrm{d}} - M_{\mathrm{echge}}|^2, \\ &= |M_{\mathrm{d}}|^2 + |M_{\mathrm{echge}}|^2 - \frac{1}{2}\left(\overline{M}_{\mathrm{d}}M_{\mathrm{echge}} + M_{\mathrm{d}}\overline{M}_{\mathrm{echge}}\right), \end{aligned} \tag{B.15}$$

où $\overline{c}$ signifie le complexe conjugué de c, et où l'on a posé, pour simplifier les écritures :

$$M_{\mathrm{d}} \equiv M^{\mu\nu\mu'\nu'}_{\mathbf{K},\mathbf{P},\mathbf{K}',\mathbf{P}'}, \tag{B.16a}$$

$$M_{\mathrm{echge}} \equiv M^{\mu\nu\nu'\mu'}_{\mathbf{K},\mathbf{P},\mathbf{P}',\mathbf{K}'}. \tag{B.16b}$$

L'élément de matrice de l'interaction électron–électron peut donc être séparé en deux contributions :

- Les termes *directs* : il s'agit de la contribution entre spins de même direction, c'est–à–dire les termes du type $|M_{\mathrm{d}}|^2$ et $|M_{\mathrm{echge}}|^2$;
- Un terme d'interférences ou d'*échange* : il s'agit des termes « croisés » $-(1/2)(\overline{M}_{\mathrm{d}} M_{\mathrm{echge}} + M_{\mathrm{d}} \overline{M}_{\mathrm{echge}})$.

Au final, les éléments de matrice étant sommés sur $\mathbf{K}'$ et $\mathbf{P}'$, on introduit un facteur 1/2 supplémentaire pour éviter les « doubles comptages » [210, 217–219]. L'élément de matrice $M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)$ intervenant dans le calcul de la probabilité [Éq. (B.10)] s'écrit donc :

$$\begin{aligned} |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q,Q',\omega)|^2 &= \frac{1}{2}\big[|V^{\mathrm{ecr}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q,\omega_{\mathrm{d}})|^2 + |V^{\mathrm{ecr}}_{\mu\nu\nu'\mu'}(Q',\omega_{\mathrm{echge}})|^2 \\ &- V^{\mathrm{ecr}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q,\omega_{\mathrm{d}}) V^{\mathrm{ecr}}_{\mu\nu\nu'\mu'}(Q',\omega_{\mathrm{echge}})\big], \end{aligned} \tag{B.17}$$

Annexe C

Fonction diélectrique d'un gaz électronique bidimensionnel

Nous présentons, dans cette annexe, le cadre général de l'écrantage pour un gaz bidimensionnel. Il nous a semblé intéressant de détailler l'ensemble des calculs qui sont habituellement dérivés pour les gaz tridimensionnels [225]. Dans la section C.1, nous exposons les hypothèses et les calculs permettant de dériver l'expression de la réponse diélectrique d'un gaz bidimensionnel. Puis, dans la section C.2, nous résumons l'ensemble des formules utilisées afin de calculer le tenseur de polarisabilité.

C.1 Théorie de l'écrantage bidimensionnel

Tenseur de polarisabilité $\overline{\overline{\mathbf{\Pi}}}$

Considérons un gaz d'électrons quantifié selon la direction de l'axe de croissance, noté $(O\hat{z})$. Nous soumettons ce gaz 2D à un potentiel perturbateur $\delta V^{\text{ext}}(\mathbf{r},\omega)$, dont on suppose la dépendance temporelle sinusoïdale :

$$\delta V^{\text{ext}}(\mathbf{r},\omega) = \delta V^{\text{ext}}(\mathbf{R},z,\omega) \equiv V(\mathbf{R},z)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{\alpha t}, \tag{C.1}$$

où le terme[1] $\exp(\alpha t)$, $\alpha \to 0^+$ assure que la perturbation est enclenchée de manière adiabatique. On peut également représenter le potentiel par sa série de Fourier par rapport à la variable $\mathbf{R}$:

$$\delta V^{\text{ext}}(\mathbf{R},z,\omega) = \sum_{\mathbf{Q}} \delta\phi_{\text{ext}}(\mathbf{Q},z,\omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\mathrm{e}^{\alpha t}. \tag{C.2}$$

On supposera que toutes les composantes $\delta\phi_{\text{ext}}(\mathbf{Q},z,\omega)$ de la série de Fourier de δV^{ext} peuvent être considérées de manières indépendantes et que les termes croisés de longueur d'onde différente s'annulent après sommation : c'est l'approximation dite *de la phase aléatoire*[2] (RPA).

On rappelle que les états $\Psi^{(0)}_{\nu,\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ correspondant au hamiltonien non perturbé $\mathcal{H}_{\text{B}}$ s'écrivent :

$$\Psi^{(0)}_{\nu,\mathbf{K}}(\mathbf{R},z) \propto \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}}\varphi_\nu(z)u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{C.3}$$

[1] À ne pas confondre avec le coefficient α de non–parabolicité.
[2] Traduction de l'anglais *Random–Phase Approximation*.

En appliquant la théorie des perturbations au premier ordre, nous pouvons calculer les fonctions d'onde des états perturbés du hamiltonien $\mathcal{H}_{\mathrm{B}} + \delta\phi_{\mathrm{ext}}$:

$$\Psi^{\mathrm{pertb}}_{\nu,\mathbf{K}}(\mathbf{R},z) \simeq \Psi^{(0)}_{\nu,\mathbf{K}}(\mathbf{R},z) + \lim_{\alpha\to 0^+} \sum_{\nu'\mathbf{K}'} \frac{e\langle \mathbf{K}',\nu'|\delta\phi_{\mathrm{ext}}(\mathbf{Q},z,\omega)|\nu,\mathbf{K}\rangle}{E_\nu(\mathbf{K}) - E_{\nu'}(\mathbf{K}') + \hbar\omega + \mathrm{i}\hbar\alpha} \Psi^{(0)}_{\nu',\mathbf{K}'}(\mathbf{R},z). \tag{C.4}$$

La variation de charge induite $\delta\rho_{\mathrm{ind}}$ par le potentiel $\delta\phi_{\mathrm{ext}}$ s'écrit :

$$\delta\rho_{\mathrm{ind}}(\mathbf{R},z) = -e\sum_{\nu\mathbf{K}} f_\nu(\mathbf{K}) \left[|\Psi^{\mathrm{pertb}}_{\nu,\mathbf{K}}(\mathbf{R},z)|^2 - |\Psi^{(0)}_{\nu,\mathbf{K}}(\mathbf{R},z)|^2 \right]. \tag{C.5}$$

En utilisant les expressions (C.3) et (C.4) et en supposant que le potentiel extérieur oscille « lentement », c'est–à–dire que tous les vecteurs d'onde $\mathbf{K}$ sont plus faibles que n'importe quel vecteur du réseau réciproque $\mathbf{G}$, la variation de charge induite par le potentiel extérieur s'écrit[3] :

$$\delta\rho_{\mathrm{ind}}(\mathbf{R},z,\omega) = e^2 \sum_{\mathbf{Q}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}} \sum_{\nu\nu'\mathbf{K}} \Pi_{\nu\nu'}(\mathbf{Q},\omega)\delta\phi_{\mathrm{ext}}(\mathbf{Q},\omega;\nu\nu')\varphi_\nu(z)\varphi_{\nu'}(z), \tag{C.6}$$

où on a défini le tenseur de *polarisabilité* $\overline{\mathbf{\Pi}}(\mathbf{Q},\omega)$ exprimant au final la réaction induite par la présence du potentiel perturbateur $\delta V^{\mathrm{ext}}(\mathbf{R},z,\omega)$:

$$\Pi_{\nu\nu'}(\mathbf{Q},\omega) = -\frac{1}{\mathcal{A}} \lim_{\alpha\to 0^+} \sum_{\mathbf{K}} \frac{g_\nu f_\nu(\mathbf{K}) - g_{\nu'} f_{\nu'}(\mathbf{K}+\mathbf{Q})}{E_\nu(\mathbf{K}) - E_{\nu'}(\mathbf{K}+\mathbf{Q}) + \hbar\omega + \mathrm{i}\hbar\alpha}, \tag{C.7}$$

où $\delta\phi_{\mathrm{ext}}(\mathbf{K}-\mathbf{K}',\omega;\nu\nu')$ est une écriture abrégée pour $\langle \mathbf{K},\nu|\delta\phi_{\mathrm{ext}}(\mathbf{K}-\mathbf{K}',z,\omega)|\mathbf{K}',\nu'\rangle$ et g_ν est l'indice de dégénérescence de la sous–bande ν. Si on isole la composante $\mathbf{Q}$ de la série de Fourier de $\delta\rho_{\mathrm{ind}}$, il vient :

$$\delta\rho_{\mathrm{ind}}(\mathbf{Q},z,\omega) = e^2 \sum_{\nu\nu'} \Pi_{\nu,\nu'}(\mathbf{Q},\omega)\delta\phi_{\mathrm{ext}}(\mathbf{Q},\omega;\nu\nu')\varphi_\nu(z)\varphi_{\nu'}(z). \tag{C.8}$$

Pour finir de dériver l'expression du tenseur diélectrique, il convient désormais : (i) de déterminer, de la variation de charge induite, le potentiel réponse V^{ind} ; (ii) d'exprimer le potentiel total en fonction du potentiel δV^{ext}. Ce sont ces deux points que nous allons décrire à présent et qui vont donc achever cette section.

Tenseur diélectrique $\overline{\boldsymbol{\kappa}}$

L'équation de Poisson permet de déterminer le potentiel V^{ind} de la variation de charge induite ρ_{ind} :

$$V^{\mathrm{ind}}(\mathbf{Q},z,\omega) = \int \mathrm{d}z' \mathcal{G}_Q(z,z')\rho_{\mathrm{ind}}(Q,z',\omega), \tag{C.9}$$

où $\mathcal{G}_Q(z,z')$ est la fonction de Green pour un système bidimensionnel. Elle représente la propagation de la perturbation apparue au point z' jusqu'au point z.

[3]Pour simplifier le calcul, les facteurs de Bloch provenant du recouvrement entre les fonctions $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ ont été négligés.

Le potentiel total V^{tot} est obtenu en sommant le potentiel extérieur δV^{ext} avec le potentiel V^{ind}, ce dernier étant relié à δV^{ext} par l'équation (C.9). De là, on définit le tenseur diélectrique $\overline{\boldsymbol{\kappa}}$ reliant le potentiel total au potentiel extérieur dans l'*approximation de Hartree* :

$$\overline{\boldsymbol{V}}^{\text{tot}} = [\overline{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{H}}]^{-1} \cdot \overline{\boldsymbol{\delta V}}^{\text{ext}}. \tag{C.10}$$

Pour obtenir l'expression définitive de $\overline{\boldsymbol{\kappa}}$, on projette V^{tot} sur la base des fonctions d'onde $\{\varphi_\mu\}$ et on obtient :

$$[\overline{\boldsymbol{\kappa}}_{\text{H}}]^{-1}_{\nu\nu'\mu\mu'}(\mathbf{Q},\omega) = \delta_{\nu\nu'}\delta_{\mu\mu'} + \delta V^{\text{ext}}_{\nu\mu\nu'\mu'}(Q)\Pi_{\mu\mu'}(\mathbf{Q},\omega). \tag{C.11}$$

Une meilleure approximation est celle où l'on considére que le potentiel induit par la perturbation V^{ind} perturbe également la distribution des porteurs. Dans ce cas, l'équation tensorielle reliant δV^{ext} à V^{tot} est

$$V^{\text{tot}}_{\nu\mu\nu'\mu'}(\mathbf{Q},\omega) = \delta V^{\text{ext}}_{\nu\mu\nu'\mu'}(\mathbf{Q}) + \sum_{\xi\xi'} \delta V^{\text{ext}}_{\nu\xi\nu'\xi'}(\mathbf{Q})\Pi_{\xi\xi'}(\mathbf{Q},\omega)V^{\text{tot}}_{\xi\mu\xi'\mu'}(\mathbf{Q},\omega). \tag{C.12}$$

Dans le cadre de l'interaction électron–électron, le potentiel perturbateur a pour expression :

$$\delta V^{\text{ext}}_{\nu\mu\nu'\mu'}(Q) = \frac{e^2}{2Q\kappa_0\kappa_r}\int_0^L \mathrm{d}z_1 \int_0^L \mathrm{d}z_2 \varphi_\nu(z_1)\varphi_\mu(z_2)\mathrm{e}^{-Q|z_1-z_2|}\varphi^*_{\nu'}(z_1)\varphi^*_{\mu'}(z_2). \tag{C.13}$$

C.2 Formulaire

TAB. C.1 – Formulaire des différentes expressions du tenseur de polarisabilité.

Dénomination	Expression mathématique	Non–parabolicité
Faible déviation	$\Pi_{\nu\nu}(Q\to 0) = \dfrac{n_\nu}{k_B\theta_\nu}\dfrac{\mathcal{Q}_\nu\mathcal{F}_{-1}(\eta_\nu) + 2\langle\alpha\rangle_\nu k_B\theta_\nu\mathcal{F}_0(\eta_\nu)}{\mathcal{Q}_\nu\mathcal{F}_0(\eta_\nu) + 2\langle\alpha\rangle_\nu k_B\theta_\nu\mathcal{F}_1(\eta_\nu)}$	Oui
	$\Pi_{\nu\nu'}(Q\to 0) = -\dfrac{n_\nu - n_{\nu'}}{E_\nu - E_{\nu'}}$	Non
Debye–Hückel	$\Pi_{\nu\nu}(Q\to 0) = \dfrac{n_\nu}{k_B\theta_\nu}$	Oui
Thomas–Fermi	$\Pi_{\nu\nu}(Q\to 0) = \rho_\nu\left(\mathcal{Q}_\nu^2 + \dfrac{4\langle\alpha\rangle_\nu n_\nu}{\rho_\nu}\right)^{1/2}$	Oui
Maldague	$\Pi_{\nu\nu}(Q) = \displaystyle\int_0^\infty \frac{\Pi^0_{\nu\nu}(Q,\theta_\nu=0,\mu_F)}{4k_B\theta_\nu\cosh^2[(E_F-E_\nu-\mu_F)/2k_B\theta_\nu]}\mathrm{d}\mu_F$	Non
Fetter	$\Pi_{\nu\nu}(Q) = \dfrac{n_\nu}{k_B\theta_\nu}\dfrac{2\pi^{1/2}}{Q\lambda_\nu}\Phi\left(\dfrac{Q\lambda_\nu}{4\pi^{1/2}}\right)$	Oui
Calcul numérique	$\Pi_{\nu\nu'}(Q) = -\dfrac{1}{2\pi^2}\dfrac{m^*_\nu}{\hbar^2}\displaystyle\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\Upsilon\int_0^\infty \frac{\gamma'_\nu(\varepsilon)[f_\nu(\varepsilon)-f_{\nu'}(\varepsilon')]}{E_\nu+\varepsilon-E_{\nu'}-\varepsilon'}\mathrm{d}\varepsilon$	Oui

Annexe D

Aspects numériques du calcul des facteurs de forme électron–électron

Dans cette annexe, nous présentons l'implémentation informatique du calcul du facteur de recouvrement dans la direction de quantification, intervenant dans l'interaction électron–électron et avec les phonons. Ce facteur de forme met en jeu quatre indices de sous–bandes et son côut calcul peut rapidement devenir un verrou « informatique ». Afin de simplifier son évaluation, nous proposons de décomposer les fonctions d'onde sur une base pour laquelle le calcul des facteurs de forme est analytique. Généralisant les approximations antérieures par des sinusoïdes [241], on utilisera une décomposition en séries de Fourier.

D.1 Expression mathématique

Le facteur de recouvrement a pour expression :

$$F_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q) = \int_0^L \mathrm{d}z_1 \int_0^L \mathrm{d}z_2 \varphi_\mu(z_1)\varphi_\nu(z_2)\mathrm{e}^{-Q|z_1-z_2|}\varphi^*_{\mu'}(z_1)\varphi^*_{\nu'}(z_2). \tag{D.1}$$

On décompose alors le produit des fonctions d'onde $\Xi_{\mu\mu'}(z_1) = \varphi_\mu(z_1)\varphi^*_{\mu'}(z_1)$ en série de Fourier :

$$\Xi_{\mu\mu'}(z_1) = \sum_{\sigma_1=-N_\mathrm{H}}^{N_\mathrm{H}} \gamma^{\nu\nu'}_{\sigma_1} \exp(\mathrm{i}\sigma_1 k_0 z_1), \tag{D.2}$$

où N_H est le nombre d'harmoniques retenues, $\gamma^{\nu\nu'}_{\sigma}$ le σ–ième coefficient de Fourier et $k_0 = 2\pi/L$. On réécrit l'équation (D.1) avec la décomposition en séries de Fourier des deux produits de fonctions d'onde :

$$F_{\nu\mu\nu'\mu'}(Q) \simeq \sum_{\sigma_1=-N_\mathrm{H}}^{N_\mathrm{H}} \sum_{\sigma_2=-N_\mathrm{H}}^{N_\mathrm{H}} \gamma^{\nu\nu'}_{\sigma_1}\gamma^{\mu\mu'}_{\sigma_2}\mathcal{J}_{\sigma_1\sigma_2}(Q), \tag{D.3}$$

Avec

$$\mathcal{J}_{\sigma_1\sigma_2}(Q) = \int_0^L \int_0^L \mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma_1 k_0 z_1}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma_2 k_0 z_2}\mathrm{e}^{-Q|z_1-z_2|}\mathrm{d}z_1\mathrm{d}z_2. \tag{D.4}$$

Un calcul simple montre que :

$$\mathcal{J}_{\sigma_1\sigma_2}(Q) = \frac{2LQ\delta_{\sigma_1,-\sigma_2}}{Q^2+\sigma_2^2k_0^2} + \frac{2(\mathrm{e}^{-QL}-1)(Q^2+\sigma_1\sigma_2k_0^2)}{(Q^2+\sigma_1^2k_0^2)(Q^2+\sigma_2^2k_0^2)}, \tag{D.5}$$

où δ est le symbole de Kronecker. D'où la décomposition en cinq sommes :

$$\begin{aligned} F_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q) &= \sum_{\sigma} \frac{2LQ}{Q^2+\sigma^2 k_0^2} + 2(\mathrm{e}^{-QL}-1)\Bigg[\left(\sum_{\sigma_1} \frac{\gamma_{\sigma_1}^{\mu\mu'} Q}{Q^2+\sigma_1^2 k_0^2}\right)\left(\sum_{\sigma_2} \frac{\gamma_{\sigma_2}^{\nu\nu'} Q}{Q^2+\sigma_2^2 k_0^2}\right) \\ &+ \left(\sum_{\sigma_1} \frac{\gamma_{\sigma_1}^{\mu\mu'} \sigma_1 k_0}{Q^2+\sigma_1^2 k_0^2}\right)\left(\sum_{\sigma_2} \frac{\gamma_{\sigma_2}^{\nu\nu'} \sigma_2 k_0}{Q^2+\sigma_2^2 k_0^2}\right)\Bigg]. \end{aligned} \tag{D.6}$$

Lorsque les fonctions d'onde sont à valeurs réelles, on peut alors utiliser la propriété suivante afin d'accélérer le calcul des sommes :

$$\sum_{\sigma_1=-N_{\mathrm{H}}}^{N_{\mathrm{H}}} \frac{\gamma_{\sigma_1}^{\mu\mu'} Q}{Q^2+\sigma_1^2 k_0^2} = \frac{\gamma_0^{\mu\mu'}}{Q} + \sum_{\sigma_1=1}^{N_{\mathrm{H}}} \frac{2\Re\mathrm{e}\{\gamma_{\sigma_1}^{\mu\mu'}\} Q}{Q^2+\sigma_1^2 k_0^2}, \tag{D.7}$$

où le symbole $\Re\mathrm{e}(y)$ signifie la partie réelle de y. L'élément de matrice du potentiel nu s'écrit donc :

$$V_{\mu\nu\mu'\nu'}^{\mathrm{nu}}(Q) = \frac{e^2}{2\kappa_0\kappa_r Q}\left[S_1^{\mu\nu\mu'\nu'} + (\mathrm{e}^{-QL}-1)(S_2^{\mu\mu'}S_2^{\nu\nu'} + S_3^{\mu\mu'}S_3^{\nu\nu'})\right], \tag{D.8}$$

où la correspondance entre les équations (D.6) et (D.8) permet de définir sans ambiguïté les termes S_j.

D.2 Aspects numériques

D.2.1 Gain en temps calcul

Afin d'évaluer le gain en temps calcul obtenu par la décomposition en séries de Fourier, nous allons prendre un exemple typique de LCQ. Considérons un LCQ de longueur $L = 300$ nm discrétisée par un pas $\Delta z = 1$ Å, i.e., en $N_z = 3000$ points. L'évaluation directe de la double intégrale de l'équation (D.1), par la méthode des rectangles par exemple, conduit à $N_z \times N_z \sim 10^7$ opérations. Avec notre méthode et $N_{\mathrm{H}} = 100$, le calcul d'une valeur de facteur de forme par l'équation (D.6) nécessite $\sim 5 \times 2N_{\mathrm{H}} = 10^3$ opérations, car les cinq sommes S_j peuvent être évaluées simultanément. Ainsi notre méthode permet d'économiser un gain en temps calcul de l'ordre de 10^4 pour chaque valeur $F_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)$, c'est–à–dire en ayant fixé les cinq paramètres μ, ν, μ', ν' et Q. Le gain en temps CPU devient donc particulièrement important dès lors que le nombre de sous–bandes considérées devient supérieur à 10.

Par cette méthode, le calcul des coefficients de Fourier $\{\gamma_\sigma^{\mu\mu'}\}$ des produits de fonctions d'onde peut devenir l'étape limitant les performances du programme. Dans le prochain paragraphe, nous donnons quelques pistes afin d'optimiser cette étape.

D.2.2 Calcul des coefficients de Fourier

Le calcul des coefficients $\gamma_\sigma^{\mu\mu'}$ peut être optimisé par différentes méthodes numériques :

- Pour calculer les coefficients de Fourier du *produit de fonctions d'onde* $\Xi_{\mu\mu'}(z)$, on peut utiliser la *convolution discrète* entre coefficients c_σ^μ des fonctions d'onde $\varphi_\mu(z)$:

$$\gamma_\sigma^{\mu\mu'} = \sum_{\sigma'} c_{\sigma'}^{\mu} c_{\sigma-\sigma'}^{\mu'}. \tag{D.9}$$

Or, par construction, les fonctions d'onde dans les lasers à cascade quantique sont obtenues par *périodisation* (voir paragraphe 3.3). Il est donc aisé de déterminer tous les coefficients c_σ^μ car les fonctions d'onde des étages adjacents sont obtenues par décalage spatial des fonctions d'onde de l'étage central et donc le théorème du décalage s'applique ;

- On peut également utiliser la propriété suivante :

$$\gamma_\sigma^{\mu\mu'} = (\gamma_{-\sigma}^{\mu'\mu})^*. \tag{D.10}$$

- Il existe, dans les librairies standards des compilateurs, des algorithmes dits de FFT[1] pouvant être mis à profit pour gagner d'avantage de temps calcul. Cependant cette technique impose généralement de travailler sur un nombre pair 2^M de mailles de l'espace réel z, ce qui nécessite de modifier le maillage utilisé pour la résolution de Schrödinger.

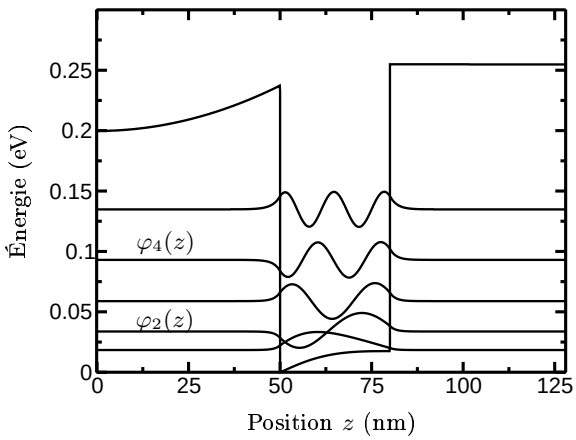
Un exemple de spectre de produit de fonctions d'onde est représenté en figure D.1 dans une structure relativement simple formée d'un puits quantique en GaAs entre deux barrières de $Ga_{0,3}Al_{0,7}As$. À titre indicatif, la température est de 77 K pour une densité électronique surfacique de 10^{15} m^{-2}.

Un des critères pour fixer le nombre N_H d'harmoniques est le théorème de Parseval qui s'écrit :

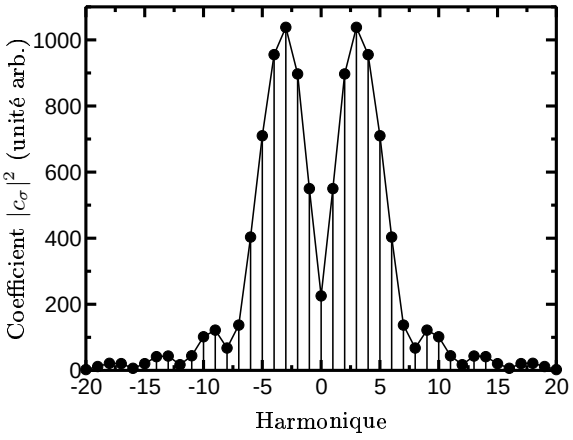
$$\frac{1}{L}\int_0^L \mathrm{d}z|\Xi_{\mu\mu'}(z)|^2 = \sum_{-\infty}^{\infty} |\gamma_\sigma^{\mu\mu'}|^2. \tag{D.11}$$

Le problème est que les fonctions d'onde ont généralement des valeurs proches de zéro sur une part importante de la zone de calcul. Afin d'obtenir l'annulation de la série de Fourier correspondante, un grand nombre d'harmoniques peut être nécessaire. Ce faisant les conditions aux limites $\varphi_\mu(0) = \varphi_\mu(L) = 0$ sont difficilement satisfaites, car on observe des « dépassements » aux extrémités de la structure (*phénomène de Gibbs*). Un nombre trop faible d'harmoniques conduit à des ondulations résiduelles que l'on peut voir représentées sur la figure D.2. Afin de réduire l'amplitude de ces phénomènes, on peut utiliser des méthodes numériques comme par exemple les *coefficients de Lanczos*. Ces méthodes n'ont pas été utilisées dans ce travail, car nous utilisons en général un nombre de coefficients largement suffisant, quitte à ne pas optimiser complétement cette étape du programme.

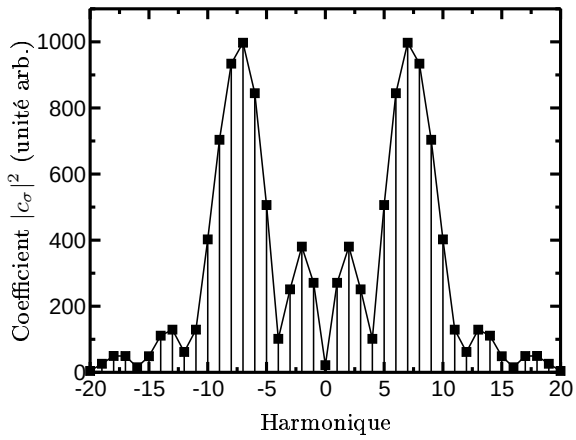
[1] Acronyme anglais pour *Fast Fourier Transform*, signifiant Transformation de Fourier Rapide.



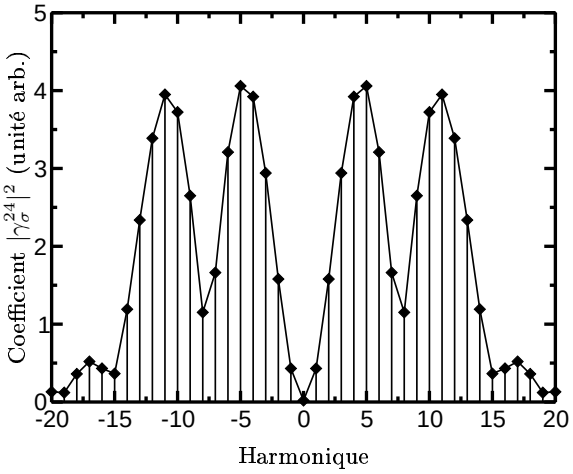
(a) Structure de bande et fonctions d'onde.



(b) Spectre de la sous–bande 2.



(c) Spectre de la sous–bande 4.



(d) Spectre de $\Xi_{24}(z)$.

FIG. D.1 – Exemple de spectre de Fourier de la fonction $\Xi_{24}(z) = \varphi_2(z)\varphi_4^*(z)$ dans une structure à simple puits quantique.

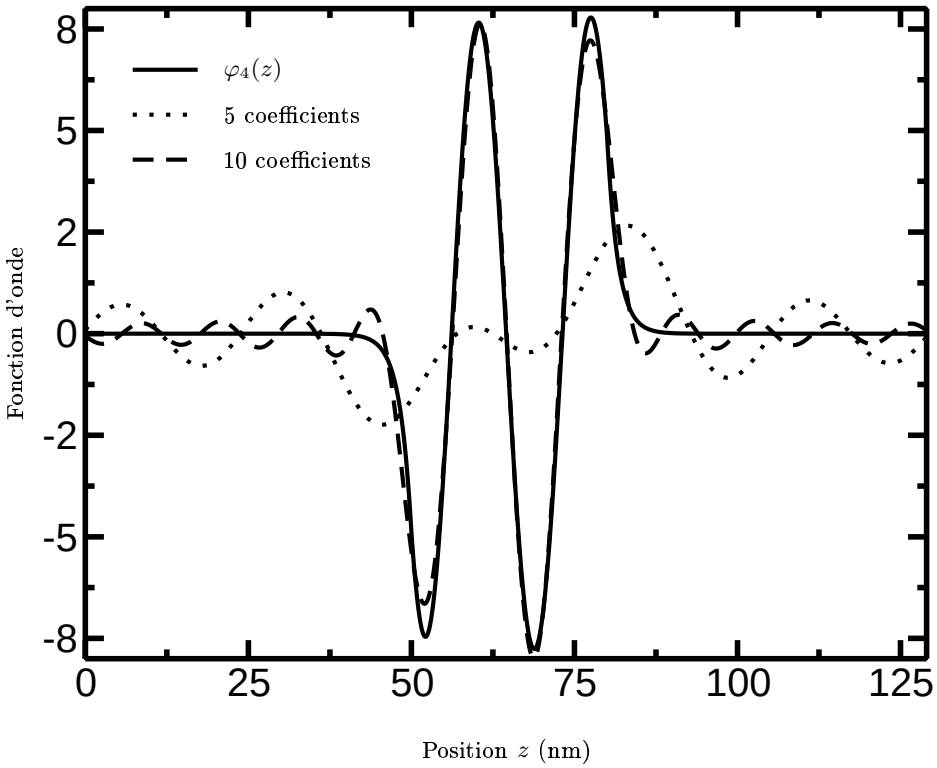


FIG. D.2 – Exemple de décomposition en séries de Fourier de la fonctions d'onde $\varphi_4(z)$.

Annexe E

Température électronique de sous–bande

Dans cette annexe, nous présentons le calcul des éléments diagonaux du tenseur de polarisabilité à l'aide d'une température électronique de sous–bande. Les hypothèses de ce modèle sont les suivantes : nous nous plaçons dans le cadre de la théorie RPA et dans l'approximation des faibles déviations. De plus, par souci de simplicité, nous supposons les bandes paraboliques, cependant une généralisation aux matériaux non–paraboliques est aisée et sera présentée dans la dernière section de cette annexe.

E.1 Rappel sur les éléments de matrice de la polarisabilité

On suppose que la fonction de distribution présente une symétrie cylindrique. Dans ce cadre, les éléments de matrice hors diagonaux du tenseur de polarisabilité ont l'expression suivante [6] :

$$\Pi_{\lambda\xi}(Q \to 0) = -\frac{n_\xi - n_\lambda}{E_\xi - E_\lambda}. \tag{E.1}$$

Le calcul des éléments de matrice diagonaux conduit à évaluer la quantité suivante :

$$\begin{aligned} S_\xi \equiv \Pi_{\xi\xi}(Q \to 0) &= -\frac{2(\text{spin})}{\mathcal{A}} \sum_{\mathbf{K}} \frac{\partial f_\xi(\mathbf{K})}{\partial E_\xi(\mathbf{K})}, \\ &= -\rho_\xi \int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon \frac{\partial f_\xi(\varepsilon)}{\partial E_\xi}, \\ &= \rho_\xi f_\xi(0). \end{aligned} \tag{E.2}$$

Cette formule a été largement utlisée dans la littérature en ce qui concerne l'étude de l'écrantage hors d'équilibre [210, 242]. Cependant, cette formule fait intervenir la valeur en un point de la discrétisation de l'espace des phases de la fonction de distribution $f_\xi(\mathbf{K})$, grandeur qui fluctue beaucoup en général et dépend du maillage en $\mathbf{K}$. Afin d'utiliser des paramètres moins bruités, nous proposons d'utiliser une température électronique de sous–bande qui peut être définie à l'aide de deux méthodes.

E.2 Température de sous–bande déterminée à l'aide de l'élargissement énergétique de la distribution

On suppose qu'au cours de la simulation dans les lasers à cascade quantique, la fonction de distribution conserve la propriété suivante de la fonction de Fermi–Dirac :

$$\frac{\partial f_\xi(\varepsilon)}{\partial E_\xi} = -\frac{f_\xi(\varepsilon)[1 - f_\xi(\varepsilon)]}{k_B \theta_\xi}. \tag{E.3}$$

Utilisant cette propriété nous réécrivons S_ξ :

$$S_\xi = \rho_\xi \frac{\Gamma_\xi}{k_B \theta_\xi}, \tag{E.4}$$

où

$$\Gamma_\xi = \int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon f_\xi(\varepsilon)[1 - f_\xi(\varepsilon)]. \tag{E.5}$$

Dans une certaine mesure, Γ_ξ représente l'élargissement énergétique de la fonction de distribution et peut être associé à la variance $(\delta f_\xi)^2$ de la fonction de distribution. À noter que numériquement parlant, il est plus aisé de calculer $f_\xi(\varepsilon)[1 - f_\xi(\varepsilon)]$ que la dérivée $\partial f_\xi / \partial E_\xi$ [Éq. (E.2)]. Ayant obtenu la relation (E.4), pour calculer S_ξ il nous faut déterminer la température électronique de sous–bande θ_ξ. On exprime alors Γ_ξ à l'aide de $f_\xi(0)$ [propriété (E.3)] et on utilise le fait que la grandeur[1] $f_\xi(0)$ peut être reliée analytiquement à l'aide de n_ξ et θ_ξ, et on obtient :

$$\Gamma_\xi = k_B \theta_\xi \left[1 - \exp\left(-\frac{n_\xi}{\rho_\xi k_B \theta_\xi}\right)\right]. \tag{E.6}$$

La fonction de distribution est nomalisée de manière à retrouver la densité électronique par sous–bande :

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon \rho_\xi f_\xi(\varepsilon) = n_\xi. \tag{E.7}$$

En général, la température de sous–bande θ_ξ est obtenue en résolvant[2] de manière itérative l'équation (E.6). Cette grandeur est alors directement utilisée pour calculer le facteur d'écran (E.4). Dans cette méthode, nous n'utilisons que des grandeurs globales comme la densité electronique n_ξ, ou intégrées comme Γ_ξ, qui se révèlent à l'usage moins bruitée que $f_\xi(0)$. D'ailleurs, sur la figure E.1 on a représenté le facteur d'écran S_1 obtenu en utilisant la valeur de la fonction de distribution $f_1(0)$ et celui calculé avec Γ_1 et θ_1. On constate qu'avec notre méthode, le facteur d'écran subit moins de fluctuations.

Nous donnons, dans la suite de ce paragraphe, la formule utilisée dans le cas d'un gaz dégénéré. Cette formule est commode car elle ne nécessite pas de calcul itératif pour évaluer la température. Dans ce cas, on procède a un développement limité de Γ_ξ :

$$\Gamma_\xi \simeq \frac{n_\xi}{\rho_\xi}\left(1 - \frac{n_\xi}{2\rho_\xi k_B \theta_\xi}\right). \tag{E.8}$$

[1] Il s'agit en fait de la fonction de Fermi d'ordre -1 : $f_\xi(0) = \mathcal{F}_{-1}(\eta_\xi)$, et on retrouve ainsi que l'équation (E.2) est identique à l'expression (5.16) sans la correction induite par la non–parabolicité.

[2] D'un point de vue pratique, lors de la première évaluation des paramètres d'écrantage la température initiale est celle du réseau, θ_{res}.

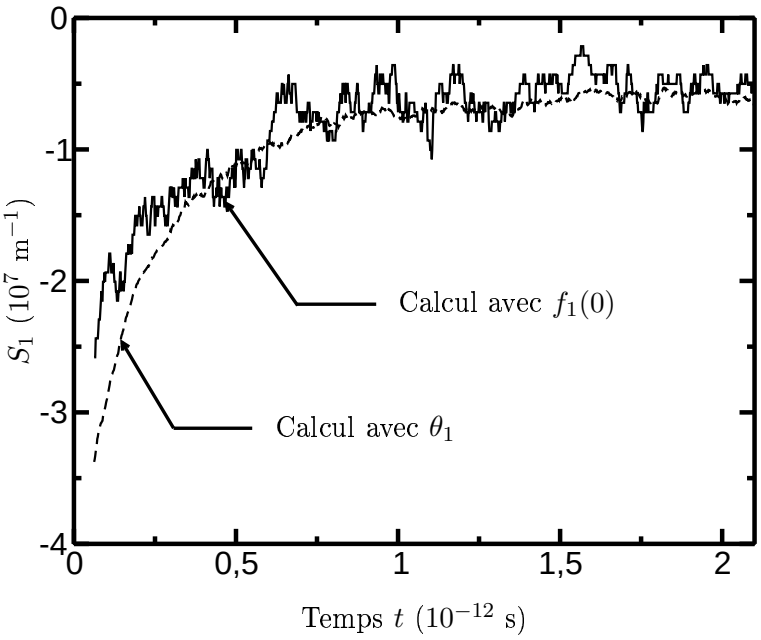


FIG. E.1 – Évolution du facteur de d'écran S_1 de la sous–bande fondamentale de la structure de la figure 7.1 en fonction du temps t. Deux méthodes de calcul ont été employées. Trait plein : S_1 déterminé à l'aide du paramètre $f_1(0)$; Trait pointillé : S_1 déterminé à l'aide de θ_1 et Γ_1.

D'où l'expression suivante du facteur d'écran :

$$\begin{aligned} S_\xi &\simeq \frac{n_\xi}{k_B\theta_\xi}, \\ &\simeq 2\frac{n_\xi}{\rho_\xi}(n_\xi - \rho_\xi\Gamma_\xi). \end{aligned} \tag{E.9}$$

E.3 Température de sous–bande déterminée à l'aide de l'énergie cinétique

En général, la température est reliée à l'énergie des porteurs [213, 219]. C'est pourquoi, pour définir d'une autre manière la température, on s'intéresse à la valeur moyenne de l'énergie cinétique par sous–bandes, définie par :

$$\begin{aligned} \langle\varepsilon\rangle_\xi &= \frac{2(\text{spin})}{\mathcal{A}}\sum_{\mathbf{K}} f_\xi(\mathbf{K})\varepsilon_\xi^{\text{cin}}(\mathbf{K}), \\ &= \rho_\xi\int_0^\infty \mathrm{d}\varepsilon f_\xi(\varepsilon)\times\varepsilon, \\ &= \rho_\xi(k_B\theta_\xi)^2\mathcal{F}_1(\eta_\xi), \end{aligned} \tag{E.10}$$

où η_ξ a pour définition :

$$\eta_\xi = \frac{E_F - E_\xi}{k_B\theta_\xi}. \tag{E.11}$$

La grandeur $\langle\varepsilon\rangle_\xi$ est particulièrement facile à calculer puisqu'elle s'obtient en « comptant » les énergies des électrons par sous–bande. On forme le rapport énergie moyenne sur densité électronique :

$$\frac{\langle\varepsilon\rangle_\xi}{n_\xi} = (k_B\theta_\xi)\frac{\mathcal{F}_1(\eta_\xi)}{\mathcal{F}_0(\eta_\xi)}. \tag{E.12}$$

On insère cette formule dans celle exprimant le facteur d'écran en fonction de la densité électronique [Éq. (5.16) avec $\langle\alpha\rangle_\xi = 0$], et on obtient :

$$S_\xi = \frac{n_\xi^2}{\langle\varepsilon\rangle_\xi}\cdot\frac{\mathcal{F}_{-1}(\eta_\xi)}{\mathcal{F}_0(\eta_\xi)}\cdot\frac{\mathcal{F}_1(\eta_\xi)}{\mathcal{F}_0(\eta_\xi)}. \tag{E.13}$$

Dans les cas extrêmes de gaz dégénérés et non dégénérés,[3] nous avons respectivement :

- Le facteur d'écran dans l'hypothèse de Thomas–Fermi :

$$S_\xi = \frac{n_\xi^2}{2\langle\varepsilon\rangle_\xi}. \tag{E.14}$$

- Le facteur d'écran dans l'hypothèse de Debye–Hückel :

$$S_\xi = \frac{n_\xi^2}{\langle\varepsilon\rangle_\xi}. \tag{E.15}$$

Dans le cas général, l'équation (E.12) doit être résolue avec l'équation :

$$\eta_\xi = \ln\left[\exp\left(\frac{n_\xi}{\rho_\xi k_B\theta_\xi}\right) - 1\right]. \tag{E.16}$$

E.4 Cas des matériaux non–paraboliques

On reprend la formulation de l'énergie moyenne $\langle\varepsilon\rangle_\xi$ en tenant compte de la relation de dispersion $\gamma_\xi(\varepsilon)$ de bandes non–paraboliques. La densité d'états s'écrit :

$$\begin{aligned}\rho_\xi(\varepsilon) &= \rho_\xi\gamma'_\xi(\varepsilon),\\ &= \rho_\xi(\mathcal{Q}_\xi + 2\langle\alpha\rangle_\xi\varepsilon).\end{aligned} \tag{E.17}$$

Dans ce cas $\langle\varepsilon\rangle_\xi$ s'écrit :

$$\langle\varepsilon\rangle_\xi = \rho_\xi(k_B\theta_\xi)^2[\mathcal{Q}_\xi\mathcal{F}_1(\eta_\xi) + 4\langle\alpha\rangle_\xi k_B\theta_\xi\mathcal{F}_2(\eta_\xi)]. \tag{E.18}$$

D'où l'expression dans le cas d'un gaz non dégénéré :

$$\frac{\langle\varepsilon\rangle_\xi}{n_\xi} = (k_B\theta_\xi)\frac{\mathcal{Q}_\xi + 4\langle\alpha\rangle_\xi k_B\theta_\xi}{\mathcal{Q}_\xi + 2\langle\alpha\rangle_\xi k_B\theta_\xi}. \tag{E.19}$$

Par cette équation on calcule aisément θ_ξ, d'où l'on déduit $S_\xi = n_\xi/(k_B\theta_\xi)$.

[3] On rappelle qu'un gaz dégénéré correspond à $E_F \gg k_B\theta$, et un gaz non dégénéré à $E_F \ll k_B\theta$.

Annexe F

Modélisation de la non–parabolicité dans l'interaction électron–électron

Dans cette annexe, nous développons un modèle de l'interaction électron–électron prenant en compte la non–parabolicité dans les lois de conservation de l'énergie et du moment de la paire d'électrons.

Introduction

Jusqu'à présent, nous avons utilisé une formulation de l'interaction électron–électron en bandes paraboliques, afin d'obtenir une formulation analytique de la conservation de l'énergie et du moment de la paire d'électrons. La non–parabolicité complique le problème car les expressions ne sont plus analytiques.

L'objectif de cette annexe est de présenter une méthode numérique pour prendre en compte une relation de dispersion $E_\nu(\mathbf{K})$ de bandes non–paraboliques dans l'interaction électron–électron. La section F.1 est consacrée à la description de la méthode que nous avons développée. Dans la section F.2, nous présentons quelques exemples d'application de notre méthode. Nous discuterons tout d'abord de quelques cas typiques concernant les matériaux GaAs et InAs. Ensuite, nous appliquerons la méthode au laser à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon étudié au chapitre 7.

F.1 Inclusion de la non–parabolicité dans la modélisation de l'interaction électron–électron

F.1.1 Position du problème

Dans la majorité des études sur l'interaction électron–électron par la méthode de Monte Carlo, on considère le cas, bien pratique, de bandes paraboliques. La difficulté de l'interaction électron–électron tient au fait que la conservation du moment et de l'énergie des deux particules ne peut se traiter de manière analytique que dans le cas de bandes paraboliques. Dans le cas contraire, seules les méthodes purement numériques sont capables d'aboutir. Ces méthodes sont, comme on pouvait s'en douter, extrêmement coûteuses en ressources informatiques, car elles nécessitent l'exploration de l'espace des phases afin de trouver ce que nous appellerons les « nappes solution », c'est–à–dire les lieux de l'espace des phases qui vérifient les lois de

conservation du moment parallèle et de l'énergie. Les explorations systématiques de l'espace des phases ne font qu'augmenter le coût calcul de l'interaction électron–électron qui est, ne serait–ce qu'à cause des nombreuses réjections qu'elle nécessite ou du calcul des éléments de matrice du potentiel coulombien, déjà prohibitif. Dans cette section, nous allons donc présenter la méthode numérique que nous avons développée. Mais avant cela, nous procédons à une rapide description de l'état de l'art des procédures déjà existantes.

F.1.2 État de l'art

Dans la littérature, seul un petit nombre d'auteurs ont développé une méthode efficace pour inclure la non–parabolicité dans l'interaction électron–électron. Abramo *et al.* ont proposé un schéma Monte Carlo permettant de considérer une structure de bande non–parabolique dans le cas tridimensionnel [257]. Leur méthode permet de tenir compte de la densité d'états de la sous–bande d'arrivée de l'électron principal. Cette méthode est particulièrement adaptée au cas de structures de bandes $E(\mathbf{k})$ calculées numériquement sur un maillage discret de l'espace des phases. Cependant, leur méthode n'est pas aisément généralisable aux gaz électroniques bidimensionnels, car elle est tributaire du modèle d'écrantage adopté. Dans un autre esprit, Fischetti *et al.* ont proposé une méthode plus systématique du traitement de la non–parabolicité, ici encore dans le cas tridimensionnel [258]. Pour chaque particule subissant une interaction électron–électron, ils procèdent à la détermination systématique des nappes solution en listant tous les vecteurs d'ondes finaux vérifiant les lois de conservation de l'énergie et du moment. Parmi cette collection d'états quantiques finaux, ils déterminent l'électron partenaire ainsi que l'état final de la paire d'électrons par un tirage aléatoire. Ils emploient, afin d'optimiser le temps d'exécution, des algorithmes complexes permettant de stocker les états finaux possibles de chaque électron.

Notre méthode s'inspire de celle développée par Fischetti *et al.* pour un gaz tridimensionnel. Cependant, l'algorithme que nous proposons est applicable pour les gaz bidimensionnels et *ne dépend pas* du maillage de l'espace des phases retenu ni de la relation de dispersion $E_\mu(\mathbf{K})$ adoptée. Le détail de la méthode est exposé dans le paragraphe suivant.

F.1.3 Principe de la méthode

L'objectif de ce paragraphe est d'expliquer la méthode que nous avons développée afin d'introduire la non–parabolicité dans la conservation du moment et de l'énergie de la paire d'électrons. Rappelons les deux équations qui doivent être simultanément satisfaites (on conserve les notations de la figure 4.2) :

$$\mathbf{K} + \mathbf{P} = \mathbf{K}' + \mathbf{P}', \tag{F.1a}$$

et

$$\Delta E \equiv E_\mu(\mathbf{K}) + E_\nu(\mathbf{P}) - E_{\mu'}(\mathbf{K}') - E_{\nu'}(\mathbf{P}') = 0. \tag{F.1b}$$

On pose $\mathbf{T} \equiv \mathbf{K}+\mathbf{P}$ et on réinjecte la conservation du moment dans l'équation de conservation de l'énergie :

$$E_\mu(\mathbf{K}) + E_\nu(\mathbf{P}) - E_{\mu'}(\mathbf{T} - \mathbf{P}') - E_{\nu'}(\mathbf{P}') = 0. \tag{F.2}$$

Il est donc équivalent de rechercher $\mathbf{K}'$ ou $\mathbf{P}'$, étant donné qu'ils sont reliés par l'équation de conservation du moment (F.1a). Si on reprend le calcul complet de la probabilité électron–

électron, on aboutit au calcul de la quantité suivante[1] :

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{\mu\nu\mu'\nu'} &= \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\Phi \int P'\mathrm{d}P' |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)|^2 \delta\left[E_\mu(\mathbf{K}) + E_\nu(\mathbf{P}) - E_{\mu'}(\mathbf{T}-\mathbf{P}') - E_{\nu'}(\mathbf{P}')\right], \\ &= \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\Phi P'_0(\Phi) |M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)|^2 \left|\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}P'}\right|^{-1}_{P'=P'_0(\Phi)}, \end{aligned} \tag{F.3}$$

où Φ est l'angle du vecteur $\mathbf{P}'$ avec $\mathbf{T}$ et $P'_0(\Phi)$ est solution de $\Delta E(\mathbf{T}, \Phi, P'_0) = 0$. La densité d'états finale $\gamma'_{\nu'}(\mathbf{P}')$ « non–parabolique » est contenue dans le terme $(\mathrm{d}E/\mathrm{d}P')^{-1}$.

Voyons maintenant les modifications qu'il faut apporter à l'algorithme décrit au paragraphe 4.2.3 pour calculer $\mathcal{E}_{\mu\nu\mu'\nu'}$. Comme majorant de la probabilité électron–électron, on utilise, suivant en cela Fischetti *et al.* [258], un multiple[2] judicieusement choisi du majorant de la probabilité évaluée dans l'hypothèse de bandes paraboliques $\Lambda^{\mathrm{NP}}_{\mu\mu'} = x \times \Lambda^{\mathrm{e/e}}_{\mu\mu'}$ donné par l'équation (4.16). Supposons alors qu'un électron $|\mu\mathbf{K}\rangle$ subisse une interaction électron–électron l'amenant dans la sous–bande μ'. On tire au hasard un électron partenaire dans l'état $|\nu\mathbf{P}\rangle$. Le principe de la méthode est de trouver, dans un premier temps, l'ensemble des couples $(\nu', \mathbf{P}')$ vérifiant $\Delta E(\mathbf{T}, \Phi, P', \nu') = 0$, puis de déterminer ν' et $\mathbf{P}'$ selon la distribution adéquate, c'est–à–dire selon la distribution donnée par l'intégrande de l'équation (F.3).

Élimination des sous–bandes finales ν'

On parcourt les sous–bandes finales pour l'électron partenaire ν' et, à l'intérieur de cette boucle, on discrétise à nouveau la variable Φ. On comprend rapidement que le coût calcul de la méthode peut devenir excessivement prohibitif dès que le nombre de sous–bandes est élevé (typiquement à partir de cinq sous–bandes). En effet, il ne faut pas perdre de vue qu'*in fine* on effectue une réjection sur l'élément de matrice coulombien, ce qui conduit à rejeter de nombreuses interactions pour lesquelles on a calculé de manière exhaustive l'ensemble des nappes solution. La méthode doit donc, pour être efficace, *éliminer rapidement* les sous–bandes ν' pour lesquelles l'équation $\Delta E(\mathbf{T}, \Phi, P', \nu') = 0$ ne peut pas être satisfaite quel que soit P'. Pour cela, on vérifie les conditions suivantes :

1. Si l'énergie μ' est telle que $E_{\mu'} > E_\mu(\mathbf{K}) + E_\nu(\mathbf{P})$ alors l'interaction est refusée ;
2. Dans le cas contraire on procède à une nouvelle série de tests. Si l'une des trois conditions suivantes n'est pas vérifiée, alors l'interaction est refusée :

[1] La probabilité d'interaction électron–électron de l'état $|\mu\mathbf{K}\rangle$ vers l'état $|\mu'\mathbf{K}'\rangle$ s'écrit :

$$\lambda_{\mu\mu'}(\mathbf{K}) = \frac{1}{2\mathcal{A}\pi\hbar} \sum_{\nu\nu'\mathbf{P}} f_\nu(\mathbf{P}) \mathcal{E}_{\mu\nu\mu'\nu'}.$$

[2] La *masse de densité d'états* s'écrit :

$$m^*_\mu(\varepsilon) = \pi\hbar^2 \rho_\nu \gamma'_\nu(\varepsilon).$$

C'est–à–dire, avec la relation de dispersion de l'équation (3.17) :

$$m^*_\mu(\varepsilon) = m^*_\mu \times (\mathcal{Q}_\mu + 2\langle\alpha\rangle_\mu \varepsilon),$$

Pour estimer ce facteur multiplicateur, on utilise non plus une masse électronique commune m^*_{e} [voir Éq. (4.16)], mais un majorant de la masse de densité d'états $m^*_\mu(\varepsilon = V_{\max})$, où $V_{\max}$ est la valeur maximale du potentiel électrostatique, ou bien $E_F + x \times k_B\theta_{\mathrm{res}}$. Si au cours de l'algorithme, une énergie dépassant ce maximum est utilisée alors on procède à un nouveau choix du multiple et à une nouvelle tabulation des probabilités.

(a) $E_{\mu'} + E_{\nu'} \leq E_\mu(\mathbf{K}) + E_\nu(\mathbf{P})$;

(b) $E_{\mu'}[(1-\xi)\mathbf{T}] + E_{\nu'}(\xi\mathbf{T}) \leq E_\mu(\mathbf{K}) + E_\nu(\mathbf{P})$ avec $\xi \equiv m^*_{\nu'}/(m^*_{\nu'} + m^*_{\mu'})$;

(c) $\mathbf{G}^2 + \Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'} \geq 0$.

Si le couple (ν', Φ) satisfait à ces conditions, on continue alors l'algorithme de détermination de P'.

F.1.3.1 Résolution itérative de $\Delta E(\mathbf{T}, \Phi, P', \nu') = 0$

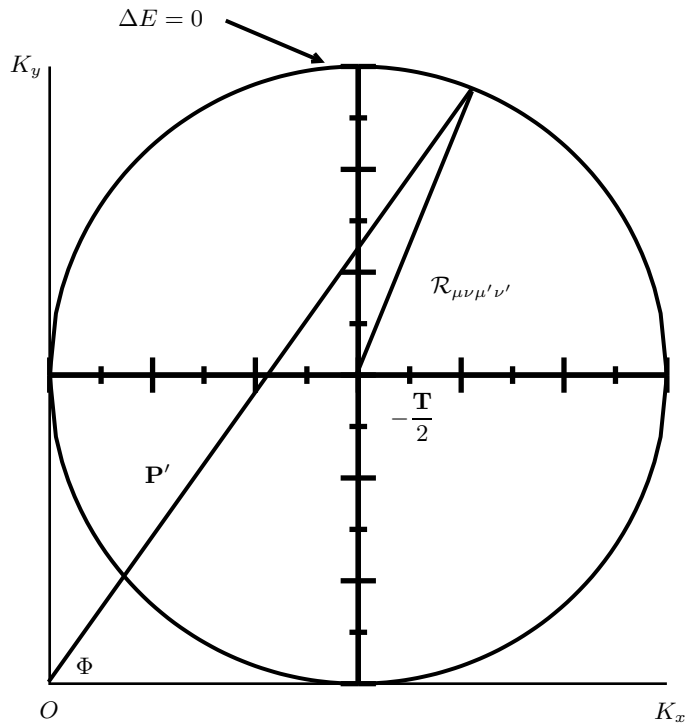


FIG. F.1 – Tracé du lieu des points vérifiant $\Delta E(\mathbf{T}, \Phi, P', \nu') = 0$ dans le cas de bandes paraboliques. Il s'agit d'un cercle centré en $-\mathbf{T}/2$ et de rayon $\mathcal{R}_{\mu\nu\mu'\nu'}$ [voir l'équation (F.4)].

La figure F.1 schématise un exemple de nappe solution dans l'espace des phases et résume les notations utilisées dans ce paragraphe. Pour résoudre $\Delta E(\mathbf{T}, \Phi, P', \nu') = 0$, on utilise une méthode de dichotomie sur le module P' du vecteur d'onde de l'électron partenaire, les grandeurs ν' et Φ étant fixées. Pour ce faire, on utilise la valeur de P' donnée dans l'hypothèse de bandes paraboliques :

$$\left(\mathbf{P}' + \frac{\mathbf{T}}{2}\right)^2 = \mathcal{R}^2_{\mu\nu\mu'\nu'}. \tag{F.4}$$

Le lieu des vecteurs $\mathbf{P}'$ est dans ce cas un cercle centré en $-\mathbf{T}/2$ et de rayon :

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{\mu\nu\mu'\nu'} &= \left[\frac{m^*_{\mathrm{e}}}{\hbar^2}(E_\mu + E_\nu - E_{\mu'} - E_{\nu'}) + \frac{1}{4}\mathbf{G}^2\right]^{1/2}, \\ &= \frac{1}{2}(\Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'} + \mathbf{G}^2)^{1/2}. \end{aligned} \tag{F.5}$$

Comme bornes initiales de la dichotomie, on peut choisir $P'_{\max} = \zeta\mathcal{R}_{\mu\nu\mu'\nu'}$ et $P'_{\min} = \mathcal{R}_{\mu\nu\mu'\nu'}/\zeta$, où ζ est assez grand pour s'éloigner de la « solution parabolique ». Typiquement les valeurs $\zeta = 8$, 16 ou 32 donnent de bons résultats. Une fois déterminées les nappes solution « non–paraboliques », on effectue une réjection sur le majorant, c'est–à–dire[3] :

$$r\sum_{\nu'}\mathcal{M}^2_{\mu\nu\mu'\nu'}\frac{2\pi m^*_{\nu'}(V_{\max})}{\hbar^2} < \sum_{\nu'}\mathcal{E}_{\mu\nu\mu'\nu'}, \tag{F.6}$$

où r est un nombre aléatoire uniformément distribué entre 0 et 1. Si l'interaction est acceptée, on détermine ensuite le triplet (ν', P', Φ) à l'aide de r, selon la distribution des états finaux donnée par l'intégrande de l'équation (F.3). Ainsi, on a la pleine connaissance de l'état final, i.e., $|\nu'\mathbf{P}'\rangle$ et, à l'aide de la conservation du moment, de $\mathbf{K}' = \mathbf{T} - \mathbf{P}'$.

F.1.3.2 Résumé de l'algorithme

À ce stade, il n'est pas inutile de résumer l'algorithme qui vient d'être présenté. Supposons qu'un électron, dans l'état $|\mu\mathbf{K}\rangle$, subisse une interaction électron–électron d'après le majorant $\Lambda^{\mathrm{NP}}_{\mu\mu'}$:

0 : **Début de la routine**
1 : Tirage de l'électron partenaire $|\nu\mathbf{P}\rangle$ au hasard
2 : **si** $E_{\mu'} > E_\mu(\mathbf{K}) + E_\nu(\mathbf{P})$ **alors**
3 : **aller à** étiquette **20**
4 : **sinon**
5 : **pour** $\nu' = 0, \ldots, N_{\mathrm{sb}}$ **faire**
6 : **si** $E_{\mu'} + E_{\nu'} > E_\mu(\mathbf{K}) + E_\nu(\mathbf{P})$ **ou si** $\Delta^0_{\mu\nu\mu'\nu'} + \mathbf{G}^2 < 0$ **alors**
7 : **aller à** étiquette **5** en faisant $\nu' \to \nu' + 1$
8 : **sinon**
9 : **pour** $\Phi = 0, \ldots, 2\pi$ **faire**
10 : Recherche des P' tels que $E_\mu(\mathbf{K}) + E_\nu(\mathbf{P}) = E_{\mu'}(\mathbf{K} + \mathbf{P} - \mathbf{P}') + E_{\nu'}(\mathbf{P}')$ par une méthode de dichotomie à l'aide de $\mathcal{R}_{\mu\nu\mu'\nu'}$ [Eq. (F.4)]
11 : **fin pour**
12 : **fin si**
13 : **fin pour**
14 : **si** la condition (F.6) de réjection sur la probabilité est satisfaite **alors**
15 : Détermination de ν', Φ, et P' selon l'intégrande de (F.3)
16 : **sinon**
17 : **aller à** étiquette **20**
18 : **fin si**
19 : **fin si**
20 : **fin de la routine**

[3]Cette réjection est effectuée afin de tenir compte de la majoration suivante :

$$\sum_{\mathbf{P}} f_\nu(\mathbf{P})\mathcal{E}_{\mu\nu\mu'\nu'} \leq \frac{m^*_{\nu'}(V_{\max})}{\hbar^2}2\pi n_\nu \mathcal{M}^2_{\mu\nu\mu'\nu'}.$$

F.2 Premiers exemples

Dans cette section, nous présentons quelques exemples d'application de la méthode exposée dans la précédente partie. Nous avons été limité par des questions purement matérielles et c'est pourquoi la non–parabolicité n'a été incluse que dans un nombre restreint de simulations.

F.2.1 Premiers tests dans le GaAs

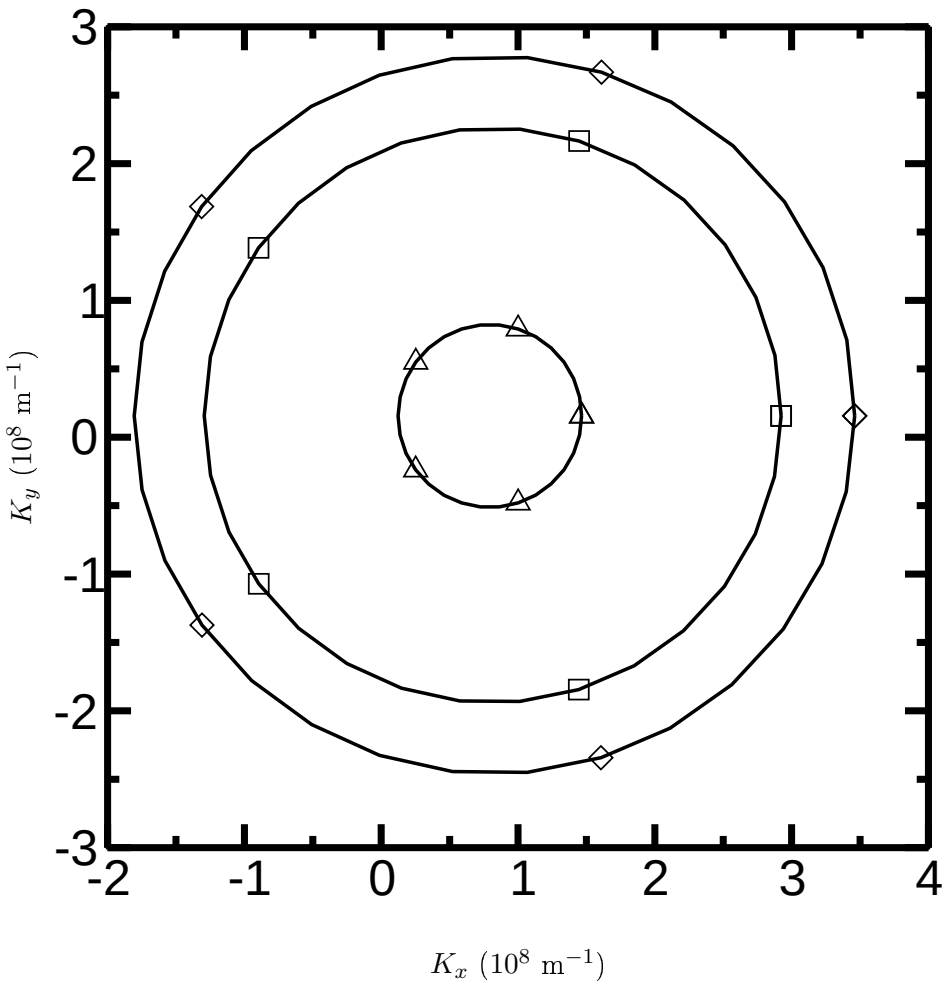


FIG. F.2 – Exemple numérique de nappes solution $\mathscr{L}(\mathbf{P}')$ obtenues en faisant varier la sous–bande finale ν' d'un des deux électrons pour la transition (3, 3, 3, ν').
Symbole $\triangle$: $\nu' = 3$; Symbole $\square$: $\nu' = 2$; Symbole $\Diamond$: $\nu' = 1$. La structure servant de test est un puits de GaAs de 200 Å entre deux barrières de 400 Å de $Al_{0,15}Ga_{0,85}As$.

Nous avons tracé sur les figures F.2 et F.3 des nappes solution, notées $\mathscr{L}(\mathbf{P}')$, obtenues dans une structure « test » d'un puits quantique de 200 Å en GaAs. On constate sur la figure F.2 que plus l'énergie propre $E_{\nu'}$ est grande, plus les vecteurs $\mathbf{P}'$ de $\mathscr{L}(\mathbf{P}')$ sont faibles. On remarque par ailleurs sur la figure F.3, que plus le coefficient de non–parabolicité augmente, plus les vecteurs d'onde $\mathbf{P}'$ doivent être importants pour appartenir à $\mathscr{L}(\mathbf{P}')$.

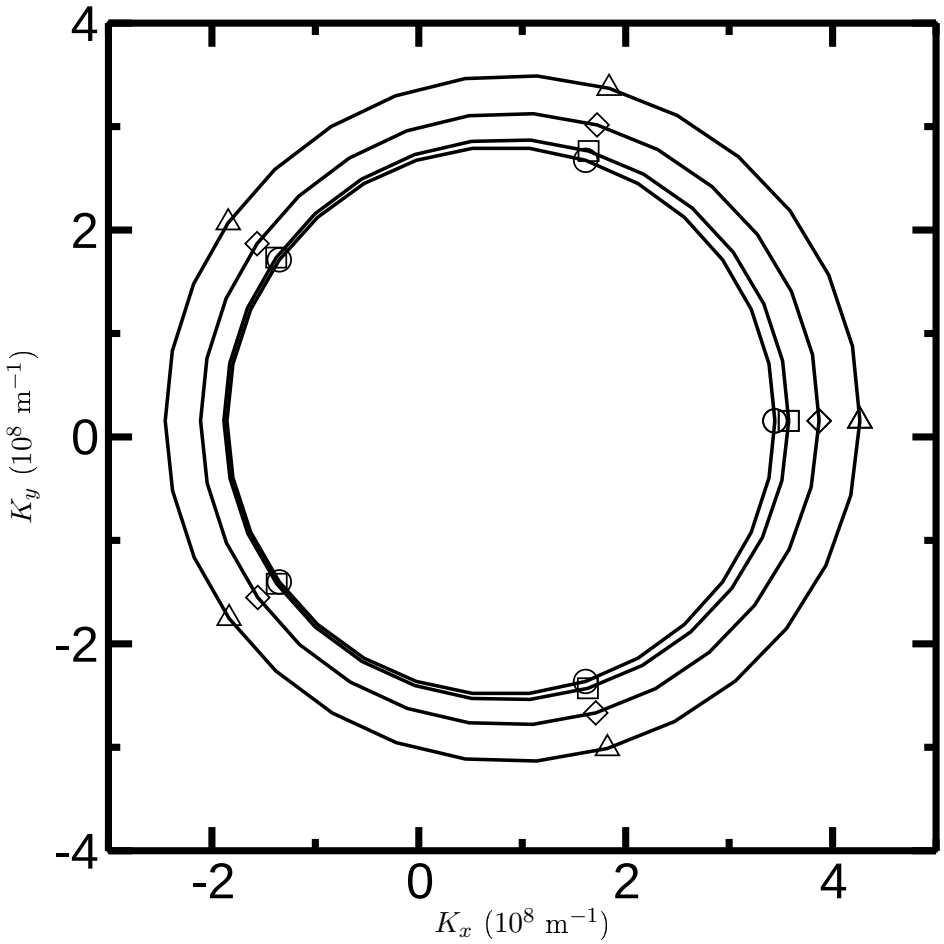


FIG. F.3 – Exemple numérique de nappes solution $\mathscr{L}(\mathbf{P}')$ obtenues en faisant varier artificiellement le coefficient de non–parabolicité du GaAs ($\alpha \simeq 0{,}6$ eV^{-1}) pour la transition (3, 3, 3, 1) en maintenant constant $E_\mu(\mathbf{K})$ et $E_\nu(\mathbf{P})$.
Symbole ○ : $\alpha = 0$ et $\alpha = 0{,}6$ eV^{-1} ; Symbole □ : $\alpha = 1{,}2$ eV^{-1} ; Symbole ◊ : $\alpha = 3$ eV^{-1} ; Symbole △ : $\alpha = 6$ eV^{-1}. La structure est identique celle de la figure F.2.

F.2.2 Laser à cascade quantique à DPRP à 3,4 THz

Nous avons repris l'étude du LCQ à dépopulation par résonance de phonon, émettant à 3,4 THz, afin de discuter de l'hypothèse des bandes paraboliques, hypothèse faite pour tous les résultats du chapitre 7. Pour ce faire, nous reprenons la modélisation de l'interaction inter–porteurs proposée au chapitre 7, à savoir, un modèle d'écrantage MSB par la sous–bande fondamentale, le calcul de la polarisabilité hors de l'équilibre par une température électronique de sous–bande, l'inclusion du terme d'échange dû aux spins des électrons et du principe de Pauli. Les paramètres numériques sont identiques à ceux du paragraphe 7.2.1. Afin de donner au lecteur un ordre de grandeur, les résultats que nous présentons maintenant sont issus de simulations qui nécessitent environ 150 heures de temps calcul.

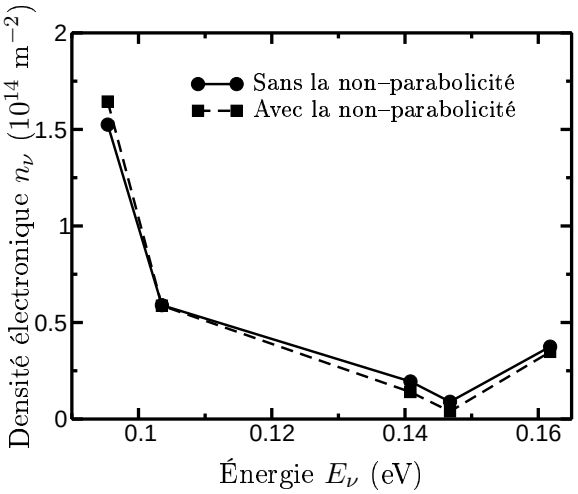


FIG. F.4 – Répartition de la densité électronique en fonction des différentes sous–bandes du LCQ de la figure 7.1 avec (trait plein) et sans (trait tireté) l'inclusion de la non–parabolicité dans l'interaction électron–électron. Le champ électrique est de 12,2 kV/cm et la température de 44 K.

Nous avons tracé sur la figure F.4 la répartition des densités électroniques en fonction des sous–bandes. On constate que la non–parabolicité a peu d'influence sur les populations par sous–bande et sur l'inversion de population qui reste voisine de 3×10^{13} m^{-2}.

Si les résultats globaux ne sont pas modifiés, nous allons voir que les paramètres de la distribution électronique sont quand même influencés par la non–parabolicité. On constate sur la figure F.5, qui représente l'énergie cinétique moyenne en fonction du temps, que le gaz électronique semble plus chaud lorsque la non–parabolicité est incluse dans la modélisation de l'interaction électron–électron. Effectivement, on remarque en observant le tableau F.1 que les températures de sous–bandes sont nettement plus élevées lorsque la non–parabolicité est incluse. D'ailleurs, on obtient un courant plus élevé lorsque la non–parabolicité est prise en compte dans les simulations. Cela traduit le fait qu'il y a plus de transitions inter–étages, ce qui est logique car la probabilité d'interaction électron–électron augmente du fait de la densité d'états de bandes non–paraboliques.

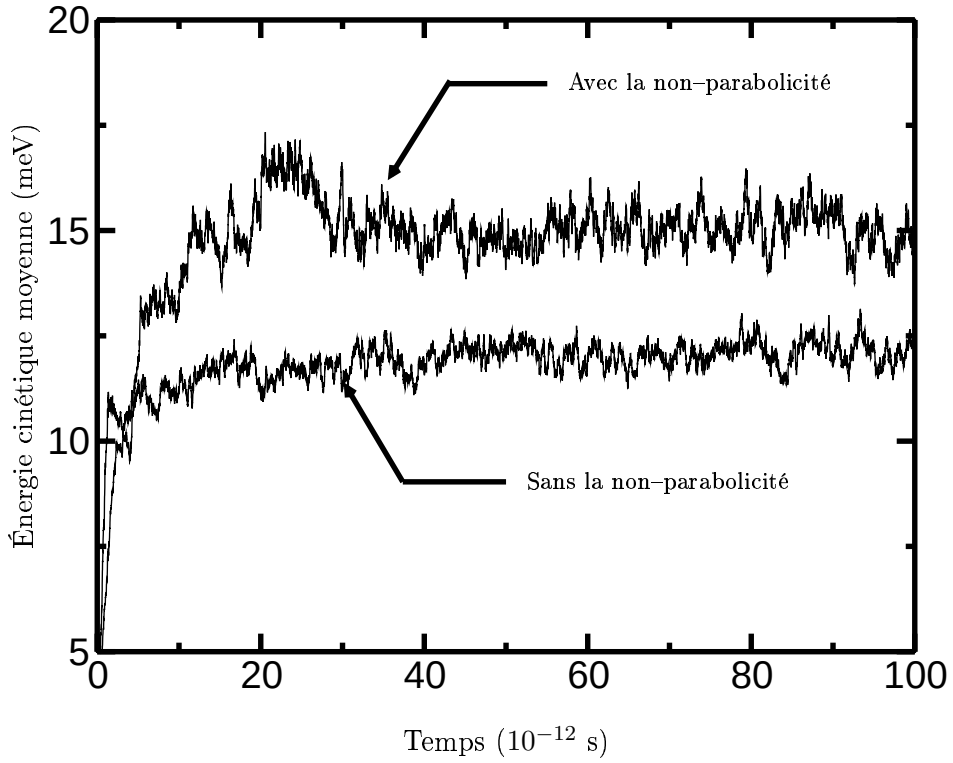


FIG. F.5 – Évolution temporelle de la moyenne d'ensemble de l'énergie cinétique du LCQ de la figure 7.1 en traitant ou non la non–parabolicité dans l'interaction électron–électron.

TAB. F.1 – Comparaison des températures électroniques θ_ν des différentes sous–bandes de la structure de la figure 7.1 en incluant ou non la non–parabolicité dans l'interaction électron–électron. La température de réseau est $\theta = 44$ K. Les grandeurs sont données en Kelvin.

	Sans la non–parabolicité dans l'interaction électron–électron	Avec la non–parabolicité dans l'interaction électron–électron
1	127	157
2	125	146
3	93	113
4	60	45
5	94	121

Conclusion

Dans cette annexe, nous avons présenté une méthode afin de tenir compte de la non–parabolicité éventuelle des bandes dans l'interaction électron–électron. Notre méthode est très générale et elle ne fait pas d'hypothèse sur le modèle d'écrantage ainsi que sur la relation de dispersion $E_\mu(\mathbf{K})$. Nous avons appliqué cette méthode à un LCQ basé sur le GaAs/AlGaAs. Nos simulations montrent que les résultats obtenus dans l'approximation des bandes paraboliques sont raisonnables pour cet exemple.

Symboles utilisés

Dans l'ensemble de ce mémoire nous avons utilisé les règles typographiques suivantes :

- Les lettres graissées représentent les vecteurs : $\mathbf{k} = \overrightarrow{k}$;
- Les vecteurs directeurs sont surmontés d'un châpeau, comme par exemple $\hat{z}$;
- Les modules des vecteurs sont écrits en italique : $|\mathbf{K}| = K$;
- Les tenseurs sont graissés et surmontés d'une barre pour les différencier des vecteurs : tenseur de polarisabilité $\overline{\mathbf{\Pi}}$.

TAB. F.2 – Liste des acronymes utilisés.

Acronyme	Signification
USSB	Modèle d'écrantage à **U**ne **S**eule **S**ous–**B**ande
MSB	Modèle d'écrantage **M**ulti **S**ous–**B**ande
TESB	**T**empérature **É**léctronique de **S**ous–**B**ande

TAB. F.3 – Liste des symboles utilisés.

Symboles	Signification
Chapitre 1	
λ (resp. ν)	Longueur d'onde (resp. fréquence)
E	Énergie
k_B	Constante de Boltzmann
θ	Température de réseau
P	Puissance
h (resp. $\hbar$)	Constante de Planck (resp. réduite)
z	Abscisse dans la direction quantifiée
$\varphi_\nu(z)$	Fonction d'onde du ν–ième état lié
E_ν	Énergie (propre) du ν–ième état lié
ΔE_g	Gap
$\langle z_{\nu\mu} \rangle$ (resp. $g_{\nu\mu}$)	Élément de matrice dipolaire de la transition radiative $\nu \rightarrow \mu$ (resp. le couplage optique)
n_μ	Densité électronique de la sous–bande μ
j (resp. $N_{\text{ét}}$)	Indice d'étage (resp. nombre d'étages du LCQ)
N_s	Densité électronique surfacique
$\Delta E_{\nu\mu}$	Écart énergétique entre les sous–bandes ν et μ
$\hbar\omega_{\text{op}}$	Énergie du phonon optique polaire
F	Champ électrique appliqué
Chapitre 2	
$-e$	Charge élémentaire de l'électron
$\mathbf{r}$ (resp. $\mathbf{v}$)	Vecteur position (resp. vecteur vitesse) de l'électron
t	Variable de temps
$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$	Fonction de distribution électronique
$\lambda^\eta(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$	Probabilité de transition de l'état $\lvert\mathbf{k}\rangle$ à l'état $\lvert\mathbf{k}'\rangle$ par le mécanisme d'interaction indicé par η
$\mathbf{F}$	Force de Lorentz
$\mathbf{E}$ (resp. $\mathbf{B}$)	Champ électrique (resp. champ magnétique)
Δt	Pas de temps
$V(z)$	Potentiel de confinement
$\hat{\mathcal{H}}$	Hamiltonien du système
$\hat{\rho}$	Opérateur densité

Suite des symboles utilisés.

Symboles	Signification
$\mathbf{G}(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t')$	Fonction de Green
$\mathbf{\Sigma}$	Self–énergie
f_W	Fonction de Wigner
Chapitre 3	
$\mathbf{R} = (x, y)$	Vecteur position transverse $\mathbf{r} = (x, y, z) = (\mathbf{R}, z)$
$\mathbf{k}$	Vecteur d'onde tridimensionnel
$\mathbf{K}$	Vecteur d'onde bidimensionnel selon le plan parallèle
$\Psi(\mathbf{r})$	Fonction d'onde électronique « totale »
$V(\mathbf{r})$	Potentiel cristallin
$\varphi_{c,\mu\mathbf{K}}(z)$	Fonction d'onde enveloppe de la bande c et de la sous–bande μ
$\mathcal{A}$	Aire de normalisation dans le plan parallèle
$u_{n,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$	Fonction de Bloch de la bande n
$m^*(z, \varepsilon)$	Masse effective
$\hat{\mathcal{H}}_{\mathrm{B}}$	Hamiltonien de BenDaniel–Duke
E_μ	Énergie propre
$E_\mu(\mathbf{K})$	Énergie de l'état $\lvert\mu\mathbf{K}\rangle$
α	Coefficient de non–parabolicité
$V(z)$	Potentiel de confinement
$\phi(z)$	Potentiel électrostatique
$v_{\mathrm{d}}(z)$	Potentiel dû aux discontinuités de bande de conduction
$\kappa = \kappa_0\kappa_r$	Constante diélectrique statique du matériau
N_{D} (resp. N_{A})	Densité de donneurs (resp. d'accepteurs) ionisés
$f_\mu(\mathbf{K})$	Fonction de distribution de l'état $\lvert\mu\mathbf{K}\rangle$
ρ_μ	Densité d'états de la sous–bande μ
E_F	Niveau de Fermi
η_μ	Rapport entre le niveau de Fermi E_F de la sous–bande μ et l'énergie thermique $k_B\theta$
$\mathcal{F}_\zeta$	Fonction de Fermi d'ordre ζ
m^*_μ	Masse effective de la sous–bande μ
$\varepsilon_\mu(\mathbf{K})$	Énergie cinétique
$\gamma_\mu(\varepsilon_\mu)$	Polynôme approximant la loi de dispersion transverse ε_μ
$\mathcal{G}_{\nu\mu}(\mathbf{K}, \mathbf{K}')$	Facteur de Bloch entre les sous–bandes ν et μ
$\hbar\omega(\mathbf{q})$	Énergie du phonon de vecteur $\mathbf{q}$
$M_{\nu\mu}(\mathbf{Q})$	Élément de matrice entre les sous–bandes ν et μ

Suite des symboles utilisés.

Symboles	Signification
N_{sb}	Nombre de sous–bandes
$\Gamma_{\mu}(\mathbf{K})$	Densité totale de probabilité pour l'électron dans l'état $\lvert\mu\mathbf{K}\rangle$
β	Angle de déviation entre les vecteurs $\mathbf{K}$ et $\mathbf{K}'$
$\mathcal{P}_{\mu\nu}(\beta)$	Distribution de l'angle de déviation β
$\mathcal{T}_{\nu\mathbf{K}}$	Taux d'occupation de l'état $\lvert\nu\mathbf{K}\rangle$
$N_{\mathbf{q}}$	Nombre de phonons de vecteur $\mathbf{q}$
θ_{res}	Tenpérature de réseau
D	Période du LCQ
Δ	Chute de potentiel par période D du LCQ
J	Densité de courant traversant le LCQ
Chapitre 4	
$\lvert\nu\mathbf{P}\rangle$	État de l'électron partenaire
$\hat{V}_{\mathrm{e/e}}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$	Potentiel d'interaction coulombienne
$\mathbf{G}$ (resp. $\mathbf{G}'$)	Vecteur d'onde relatif initial (resp. final) de la paire des deux électrons
$\Delta^{0}_{\mu\nu\mu'\nu'}$	Variation d'énergie potentielle dans l'interaction électron–électron
ψ	Angle entre $\mathbf{G}$ et $\mathbf{G}'$
m^{*}_{e}	Masse effective dans l'hypothèse de bandes paraboliques
$M_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)$ (resp. $\mathcal{M}^{\max}_{\mu\nu\mu'\nu'}$)	Élément de matrice de l'interaction électron–électron (resp. valeur maximale de cet élément de matrice)
$\Lambda_{\mu\mu'}$	Majorant de la probabilité électron–électron
Chapitre 5	
$\mathbf{D}$	Vecteur déplacement
$\kappa(\mathbf{q},\omega)$ (resp. $\overline{\boldsymbol{\kappa}}(\mathbf{Q},\omega)$)	Fonction diélectrique (resp. tenseur diélectrique bidimensionnel)
$\pi(\mathbf{q},\omega)$ (resp. $\overline{\boldsymbol{\Pi}}(\mathbf{Q},\omega)$)	Fonction de polarisabilité (resp. tenseur de la polarisabilité bidimensionnelle)
$V^{\mathrm{nu}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)$ (resp. $V^{\mathrm{ecr}}_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)$)	Élément de matrice du potentiel coulombien nu (resp. écranté)
g_{ν}	Indice de dégénérescence de la sous–bande ν
ω_{P}	Fréquence plasmon
$F_{\mu\nu\mu'\nu'}(Q)$	Facteur de recouvrement électron–électron

Suite des symboles utilisés.

Symboles	Signification
$\Xi_{\mu\mu'}(z)$	Produit hermitique des deux fonctions d'onde $\varphi_\mu(z)$ et $\varphi_{\mu'}(z)$
N_{H}	Nombre d'harmoniques de la série de Fourier de $\Xi_{\mu\mu'}(z)$
Υ	Angle entre les vecteurs $\mathbf{K}$ et $\mathbf{Q}$
θ_μ	Température électronique de la sous–bande μ
S_ν (resp. $\widetilde{S}_\nu$)	Élément diagonal du tenseur de polarisabilité en Joule^{-1} mètre^{-2} (resp. en mètre $^{-1}$)
Π^0	Polarisabilité à température nulle
Φ	Fonction plasma
$\beta^\eta_{\mu\nu\mu'\nu'}$	Moment d'ordre η
g	Sous–bande écrantante dans le modèle USSB
$\kappa_{\mathrm{g}}(Q)$	Fonction diélectrique dans le modèle USSB
Γ_ν	Élargissement énergétique de la fonction de distribution
Chapitre 6	
$\tau^\eta_{\nu\mu}$	Taux de transition entre les sous–bandes ν et μ par le mécanisme d'interaction indicé par η
$g_{\nu\mu}$	Gain optique entre les sous–bandes ν et μ
$f_{\nu\mu}$	Force d'oscillateur entre les sous–bandes ν et μ
$\gamma^{-1}_{\nu\mu}$	Temps de cohérence de phase entre les états ν et μ
n_{op}	Indice optique du matériau
c	Vitesse de la lumière
Chapitre 7	
$\mathscr{F}(\varepsilon)$	Fonction de distribution totale
θ_0	Température de mérite
J_{th}	Courant de seuil
Chapitre 8	
$G_{\nu\mu}$	Gain réduit entre les sous–bandes ν et μ
Annexe E	
$\langle\varepsilon\rangle_\nu$	Énergie moyenne de la sous–bande ν
Annexe F	

Suite des symboles utilisés.

Symboles	Signification
$\mathcal{R}_{\mu\nu\mu'\nu'}$	Rayon de la nappe solution dans le cas de bandes paraboliques
Φ	Angle entre le vecteur d'onde final de l'électron partenaire $\mathbf{P}'$ et le vecteur $\mathbf{T} \equiv \mathbf{K} + \mathbf{P}$

Table des figures

1.1 Représentation du spectre électromagnétique voisin de la région de l'infrarouge moyen et lointain. 10

1.2 Laser à cascade quantique utilisé comme capteur chimique. D'après [13] : Kosterev *et al.*, *IEEE Journ. Quant. Electron.*, **38**, p. 582 (2002). 12

1.3 Spectre d'émission d'un HEMT InGaAs pour trois tensions source/drain U_{sd}. . 14

1.4 Allure typique d'une impulsion térahertz. D'après [23] : Desplanque *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **84**, p. 2049 (2004). 14

1.5 Représentation schématique de la bande de conduction d'un laser à cascade quantique. Chaque étage est généralement composé d'une *région active* et d'un *injecteur/collecteur*. 18

1.6 Comparaison schématique de la *densité d'états joints* $\mathscr{D}$ dans le cas d'une transition inter-sous–bande et de transitions inter–bandes. 19

1.7 Représentation de l'émission stimulée de quanta de photon de fréquence $h\nu = E_2 - E_1$ (symbole $\rightsquigarrow$) entre deux niveaux placés dans une cavité délimitée par deux miroirs plan parallèles. 20

1.8 États quantifiés de la bande de conduction d'une double hétérostructure en $\mathrm{GaAs/Al_{0,18}Ga_{0,82}As}$. 21

1.9 Représentation des niveaux laser (une sous–bande de la bande de conduction et une de la bande de valence) dans un laser à puits quantique inter–bandes. . . 22

1.10 Schématisation des énergies propres dans le cas d'une région active à superréseau à pas variable. Les régions énergétiques permises, formant des quasi–continuum appelées mini–bandes, ont été grisées. 27

1.11 Performances comparées des LCQ sur substrat InP et GaAs aux longueurs d'ondes dans la gamme 7,5–13 μm. D'après [55] : Sirtori *et al.*, *IEEE Journ. Quant. Electron.*, **38**, p. 547 (2002). 28

1.12 Potentiel et principales fonctions d'onde d'un étage du laser à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon décrit dans la référence [5]. 31

1.13 Potentiel et principales fonctions d'onde d'un étage du laser à cascade quantique à superréseaux décrit dans la référence [4]. 33

1.14 Potentiel et principales fonctions d'onde d'un étage du LCQ à cascade entrelacée de photons et phonons décrit dans la référence [72]. 34

1.15 Exemple d'un laser à cascade de type II. D'après [78] : Yang *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **71**, p. 2409 (1997). 37

2.1 Exemple d'un profil de potentiel d'un composant, à géométrie unidimensionnelle, soumis à l'action de deux contacts extérieurs à l'origine d'un courant J selon la direction de quantification. 41

3.1 Représentation schématique [dans une seule direction $(O\hat{z})$] de la modulation des fonctions de Bloch par un terme exponentiel plus lent, appelé terme enveloppe. 54
3.2 Système de coordonnées adapté au découplage des mouvements des porteurs dans le plan transverse (x, y), où le système conserve sa périodicité et l'axe de quantification $(O\hat{z})$, qui est l'axe de croissance des couches. 55
3.3 Comparaison des énergies propres et fonctions d'onde obtenues par la méthode aux valeurs propres itérées (VPI) et par la méthode de la matrice de transmission. 62
3.4 Détermination de la nature de l'interaction par tirage d'un nombre aléatoire r uniformément distribué entre 0 et 1. 65
3.5 Représentation schématique de la périodisation des états électroniques localisés dans l'étage central afin de déterminer ceux des étages adjacents (dans cet exemple $2p + 1 = 3$). 69
3.6 Exemple d'une fonction d'onde $\varphi_{j=1,\nu}(z)$ obtenue par périodisation, mais ayant « perdu » de la norme de par le décalage d'un étage. 70

4.1 Différentes « classes » de transitions par interaction coulombienne mutuelle mettant en jeu uniquement deux sous–bandes ν et μ. 74
4.2 Notations utilisées pour décrire l'interaction coulombienne électron–électron par le potentiel coulombien $\hat{V}_{\mathrm{e/e}}$. Le prime désigne l'état final. 76
4.3 Tracé de l'élément de matrice $|M_{1212}(G, \psi)|^2$ avec et sans facteur d'échange. . . 81
4.4 Détermination de la nature de l'interaction d'un électron dans l'état $|\mu\mathbf{K}\rangle$ par l'intermédiaire du tirage aléatoire d'un nombre r. 82
4.5 Organigramme de l'algorithme de l'interaction électron–électron dans la simulation de Monte Carlo. 84

5.1 Facteurs de recouvrement électron–électron en fonction du vecteur d'onde échangé Q en échelle semi–logarithmique. 90
5.2 Tracé en échelle logarithmique du facteur d'écran en fonction de la densité pour différentes températures de sous–bande dans l'hypothèse des bandes paraboliques. 93
5.3 Tracé en échelle semi-logarithmique de la polarisabilité $\widetilde{\Pi}_{\nu\nu}$ obtenue par un calcul numérique en fonction du vecteur Q pour différentes températures de sous–bande θ_ν. 94
5.4 Comparaison pour différentes températures de la polarisabilité de la sous–bande fondamentale obtenue par intégration numérique (trait plein), sous l'hypothèse de la faible déviation (trait pointillé), par l'approximation de Debye–Hückel (trait tireté court) et celle de Thomas–Fermi (trait tireté long). 96
5.5 Application de la formule de Maldague au calcul de $\Pi_{\nu\nu}(Q, \theta_\nu)$ pour différentes températures de sous–bande θ_ν. La polarisabilité a été normalisée par rapport à $\Pi^0(Q \to 0, \theta_\nu = 0\ \mathrm{K})$. 97
5.6 Comparaison entre la polarisabilité calculée par le modèle de Fetter (trait plein), le modèle de la faible déviation (trait tireté) et le modèle entièrement numérique (trait pointillé). La structure est celle utilisée pour le calcul de la figure 5.1. . . 99

5.7 Influence de la non–parabolicité sur la polarisabilité de la sous–bande fondamentale pour différents matériaux et pour différentes valeurs de densités électroniques et de températures. 100
5.8 Exemple d'élément de matrice du potentiel nu pour les faibles déviations. . . . 103
5.9 Structure de la bande de conduction et fonctions d'onde du « véhicule test » afin de valider notre modèle d'écrantage. 105
5.10 Deux éléments de matrice du potentiel coulombien en fonction du vecteur d'onde échangé Q pour différents modèles d'écrantage à $\theta = 4$ K. 106
5.11 Deux éléments de matrice du potentiel coulombien en fonction du vecteur d'onde échangé Q pour différents modèles d'écrantage à $\theta = 77$ K. 107
5.12 Deux éléments de matrice du potentiel coulombien en fonction du vecteur d'onde échangé Q pour différents modèles d'écrantage à $\theta = 200$ K. 108

6.1 Structure de la bande de conduction et principales fonctions d'onde de l'étage central du LCQ conçu par Scamarcio *et al.* [3] et basé sur le système de matériaux $Al_{0,48}In_{0,52}As/Ga_{0,47}In_{0,53}As$. 118
6.2 Répartition de la densité électronique par sous–bande du LCQ de la figure 6.1. 119
6.3 Caractéristique courant–tension $J(F)$ du LCQ de la figure 6.1 en échelle semi–logarithmique. La température a été maintenue constante à 77 K. 121
6.4 Répartition de la densité électronique n_ν par sous–bande du LCQ de la figure 6.1 pour différents champs électriques F. La température de réseau a été maintenue constante à $\theta = 77$ K. 121
6.5 Répartition de la densité électronique n_ν par sous–bande du LCQ de la figure 6.1 pour différentes températures de réseau θ. Le champ a été maintenu constant à $F = 25$ kV cm^{-1}. 122
6.6 Structure de la bande de conduction et principales fonctions d'onde de l'étage central du LCQ décrit par Köhler *et al.* dans la référence [4]. 124
6.7 Répartition de la densité électronique n_ν par sous–bande pour le LCQ de la figure 6.6. 126

7.1 Potentiel et principales fonctions d'onde de l'étage central (trait plein) du laser à cascade quantique à dépopulation par résonance de phonon fabriqué dans le système de matériaux $GaAs/Al_{0,15}Ga_{0,85}As$ [5]. 132
7.2 Probabilité totale par sous–bande en fonction de l'énergie cinétique ε pour les cinq sous–bandes de l'étage central du LCQ de la figure 7.1. 136
7.3 Évolution temporelle de la proportion des interactions électron–électron rejetées. 138
7.4 Influence de l'interaction électron–électron sur l'occupation des sous–bandes du laser à cascade quantique de la figure 7.1. 139
7.5 Fonctions de distribution par sous–bande $f_\nu(\varepsilon)$ et totale $\mathscr{F}(\varepsilon)$ en fonction de l'énergie cinétique ε avec (trait plein) et sans (trait tireté) l'interaction électron–électron à $\theta = 44$ K. 141
7.6 Répartition de la densité électronique n_ν en fonction des différentes énergies E_ν des niveaux quantiques de la figure 7.1 pour différentes modélisations de l'interaction électron–électron. 144
7.7 Influence de l'interaction électron–électron sur la densité de courant J en fonction du champ appliqué F. La température de réseau a été maintenue constante à $\theta_{\text{res}} = 44$ K. 146

7.8 Caractéristiques courant/tension $J(F)$ avec et sans les transitions inter–étages (1,2) $\rightarrow$ (1′,2′) déclarées comme « parasites ». L'interaction électron–électron n'a pas été inclus dans ces calculs. La température de réseau a été maintenue constante à $\theta_{\text{res}} = 44$ K. 147
7.9 Position des fonctions d'onde par rapport au niveau laser haut de l'étage adjacent (trait tireté) pour différentes polarisations extérieures. La température de réseau est $\theta_{\text{res}} = 44$ K. 147
7.10 Évolution des densités électroniques n_ν pour différents champs électriques F. La température de réseau a été maintenue constante à 44 K. 149
7.11 Fonction de distribution totale $\mathscr{F}(\varepsilon)$ en fonction de l'énergie pour différents champs électriques F. La température a été maintenue constante à 44 K. 150
7.12 Évolution des densités électroniques de sous–bandes n_ν et du courant pour différentes températures de réseau. Le champ a été maintenu constant à 12,2 kV cm^{-1}.152
7.13 Fonction de distribution totale $\mathscr{F}(\varepsilon)$ en fonction de l'énergie ε pour différentes températures de réseau. Le champ électrique a été maintenu constant à 12,2 kV/cm. 154
7.14 Tracé du facteur de Bose–Einstein pour la probabilité de phonon optique polaire dans le GaAs (i.e. $\hbar\omega_{\text{op}} \approx 35$ meV). 154

8.1 Fonctions d'onde (modules au carré) de la « variante » du LCQ à DPRP en considérant deux périodes élémentaires de la structure de la figure 7.1. 159
8.2 Répartition de la densité électronique par sous–bandes du LCQ de la figure 8.1 pour différents modèles d'écrantage. 161
8.3 Éléments de matrice du potentiel coulombien en fonction du vecteur d'onde Q obtenus en début de simulation pour différents modèles d'écrantage. Les sous–bandes sont celles de la structure de la figure 7.1. 162
8.4 Répartition de la densité électronique par sous–bande pour la structure de la figure 8.1 avec (trait plein) et sans (trait tireté) l'interaction électron–électron. . 164
8.5 Structure de bande et principales fonctions d'onde du LCQ à DPRP basse fréquence à 2,1 THz [7]. 165
8.6 Densité électronique par sous–bande pour le LCQ de la figure 8.5. 166
8.7 Évolution des énergies en fonction de la composition en aluminium des barrières en $\text{Al}_{x_{\text{Al}}}\text{Ga}_{1-x_{\text{Al}}}\text{As}$ de 31 et 34 Å du LCQ de la figure 8.5 sous un champ électrique de 8,5 kV cm^{-1}. 167
8.8 Amplitude de l'inversion de population (en pourcentage de la densité électronique totale N_s) en fonction de la composition en aluminium x_{Al} des barrières d'$\text{Al}_{x_{\text{Al}}}\text{Ga}_{1-x_{\text{Al}}}\text{As}$ de 31 et 34 Å du LCQ de la figure 8.5. 168
8.9 Structure de bande et principales fonctions d'onde du LCQ à DPRP, dont la composition en aluminium des barrières de 31 et 34 Å a été fixée à 32 %. 168
8.10 Amplitude de l'inversion de population (en proportion de la charge totale disponible N_s) en fonction du champ électrique F, avec (trait plein) et sans (trait tireté) l'interaction électron–électron. Le LCQ simulé est celui de la figure 8.9. . 169
8.11 Évolution de la fréquence et de l'élément de dipôle de la transition térahertz $5 \rightarrow 4$ en fonction du champ électrique F. Le LCQ simulé est celui de la figure 8.9.170
8.12 Évolution du courant J en fonction du champ électrique F du LCQ de la figure 8.9, avec (trait plein) et sans (trait tireté) l'interaction électron–électron. 170

8.13 Facteur de mérite $G_{54} \propto \langle z_{54} \rangle^2 \times (n_5 - n_4)$ en fonction du champ électrique F pour le LCQ de la figure 8.9. Les calculs ont été effectués avec (trait plein) et sans (trait tireté) l'interaction électron–électron. 171

D.1 Exemple de spectre de Fourier de la fonction $\Xi_{24}(z) = \varphi_2(z)\varphi_4^*(z)$ dans une structure à simple puits quantique. 190
D.2 Exemple de décomposition en séries de Fourier de la fonctions d'onde $\varphi_4(z)$. . 191

E.1 Évolution du facteur de d'écran S_1 de la sous–bande fondamentale de la structure de la figure 7.1 en fonction du temps t. Deux méthodes de calcul ont été employées. Trait plein : S_1 déterminé à l'aide du paramètre $f_1(0)$; Trait pointillé : S_1 déterminé à l'aide de θ_1 et Γ_1. 195

F.1 Tracé du lieu des points vérifiant $\Delta E(\mathbf{T}, \Phi, P', \nu') = 0$ dans le cas de bandes paraboliques. Il s'agit d'un cercle centré en $-\mathbf{T}/2$ et de rayon $\mathcal{R}_{\mu\nu\mu'\nu'}$ [voir l'équation (F.4)]. 200
F.2 Exemple numérique de nappes solution $\mathscr{L}(\mathbf{P}')$ obtenues en faisant varier la sous–bande finale ν' d'un des deux électrons pour la transition (3, 3, 3, ν'). . . 202
F.3 Exemple numérique de nappes solution $\mathscr{L}(\mathbf{P}')$ obtenues en faisant varier artificiellement le coefficient de non–parabolicité du GaAs ($\alpha \simeq 0{,}6$ eV^{-1}) pour la transition (3, 3, 3, 1) en maintenant constant $E_\mu(\mathbf{K})$ et $E_\nu(\mathbf{P})$. 203
F.4 Répartition de la densité électronique en fonction des différentes sous–bandes du LCQ de la figure 7.1 avec (trait plein) et sans (trait tireté) l'inclusion de la non–parabolicité dans l'interaction électron–électron. Le champ électrique est de 12,2 kV/cm et la température de 44 K. 204
F.5 Évolution temporelle de la moyenne d'ensemble de l'énergie cinétique du LCQ de la figure 7.1 en traitant ou non la non–parabolicité dans l'interaction électron–électron. 205

Liste des tableaux

1.1 Comparaison des performances des diverses méthodes de génération d'ondes électromagnétiques térahertz. 17
1.2 Plages de longueurs d'onde atteintes par les diodes laser en fonction des matériaux semi–conducteurs utilisés. 23
1.3 Résumé de l'évolution et de la chronologie des différentes conceptions des lasers à cascade quantique avec les principaux faits marquants. 29
1.4 Récapitulatif des performances de quelques lasers à cascade quantique dans le domaine de l'infrarouge lointain. 35

3.1 Comparaison des énergies liées obtenues par la méthode aux valeurs propres itérées (VPI) et par la matrice de transmission. La structure est celle des figures 3.3(a) et 3.3(b). 61
3.2 Performances comparées entre la méthode aux valeurs propres itérées (VPI) et la méthode de la matrice de transmission. 61

5.1 Influence de la non–parabolicité sur les éléments diagonaux de la polarisabilité $\widetilde{\Pi}_{\nu\nu}$ pour différents matériaux. 99
5.2 Influence de la non–parabolicité sur les éléments non–diagonaux de la polarisabilité pour différents matériaux. 101
5.3 Comparaison des valeurs de $V_{3333}(Q = 0)$ obtenues par les différents modèles d'écrantage pour différentes températures. Les valeurs sont extraites des courbes 5.10, 5.11 et 5.12. 109

7.1 Énergies propres E_ν, populations initiales ainsi que les majorants électron–électron des sous–bandes représentées par la figure 7.1. 133
7.2 Majorants électron–électron $\Lambda^{\mathrm{e/e}}_{\nu\to\mu}$ intra- et inter-sous–bandes pour les cinq sous–bandes principales du LCQ de la figure 7.1. 135
7.3 Comparaison des durées de vie totales τ_ν des sous–bandes de la structure de la figure 7.1 obtenues avec et sans l'interaction électron–électron. 140
7.4 Comparaison des températures électroniques θ_ν des sous–bandes de la structure de la figure 7.1 en incluant ou non l'interaction électron–électron. 142
7.5 Températures des sous–bandes de la structure de la figure 7.1 pour différentes valeurs du champ externe appliqué F, la température de réseau étant de 44 K. 150
7.6 Taux de transition mettant en jeu la sous–bande laser bas, pour la température de réseau de 44 K et de 200 K. 153
7.7 Températures des sous–bandes de la structure de la figure 7.1 pour différentes températures de réseau θ_{res}. 153

8.1 Écarts énergétiques et éléments de dipôle des transitions de classe A et B du LCQ de la figure 8.1. 158
8.2 Comparaison du nombre de processus inter-sous–bandes pour différents modèles d'écrantage. 163

C.1 Formulaire des différentes expressions du tenseur de polarisabilité. 185

F.1 Comparaison des températures électroniques θ_ν des différentes sous–bandes de la structure de la figure 7.1 en incluant ou non la non–parabolicité dans l'interaction électron–électron. La température de réseau est $\theta = 44$ K. Les grandeurs sont données en Kelvin. 205
F.2 Liste des acronymes utilisés. 207
F.3 Liste des symboles utilisés. 208

Bibliographie

[1] R. F. Kazarinov et R. Suris : « Electric and electromagnetic properties of semiconductors with a superlattice », *Soviet Physics Semiconductors*, **6**(1), pp. 120–131 (Juil. 1972), [Traduction anglaise de *Fizika i Tekhnika Poluprovodnikov*, **6**(1), pp. 148–162 (Jan. 1972)].

[2] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson et A. Y. Cho : « Quantum cascade laser », *Science*, **264**(5158), pp. 553–556 (Avr. 1994).

[3] G. Scamarcio, C. Gmachl, F. Capasso, A. Tredicucci, A. L. Hutchinson, D. L. Sivco et A. Y. Cho : « Long-wavelength ($\lambda \cong 11$ μm) interminiband Fabry-Pérot and distributed feedback quantum cascade lasers », *Semiconductor Science and Technology*, **13**(11), pp. 1333–1339 (Nov. 1998).

[4] R. Köhler, A. Tredicucci, F. Beltram, H. E. Beere, E. H. Linfeld, A. G. Davies, D. A. Richtie, R. C. Iotti et F. Rossi : « Terahertz semiconductor-heterostructure laser », *Nature*, **417**, pp. 156–159 (Mai 2002).

[5] B. S. Williams, H. Callebaut, S. Kumar et Q. Hu : « 3.4-THz quantum cascade laser based on longitudinal-optical-phonon scattering for depopulation », *Applied Physics Letters*, **82**(7), pp. 1015–1017 (Fev. 2003).

[6] S.-C. Lee et A. Wacker : « Theoretical analysis of spectral gain in a terahertz quantum-cascade laser : Prospects for gain at 1 THz », *Applied Physics Letters*, **83**(13), pp. 2506–2508 (Sep. 2003).

[7] B. S. Williams, S. Kumar, Q. Hu et J. L. Reno : « Resonant-phonon terahertz quantum-cascade laser operating at 2.1 THz ($\lambda \simeq 141$ μm) », *Electronics Letters*, **40**(7), pp. 431–432 (Avr. 2004).

[8] A. G. Davies, E. H. Linfield et M. B. Johnston : « The development of terahertz sources and their applications », *Physics in Medicine and Biology*, **47**(21), pp. 3679–3689 (Nov. 2002).

[9] B. B. Hu et M. C. Nuss : « Imaging with terahertz waves », *Optics Letters*, **20**(16), pp. 1716–1718 (Août 1995).

[10] The International Society for Optical Engineering, réd. : *Terahertz for Military and Security Applications*, tm. 5070, Orland (2003).

[11] R. Martini, C. Gmachl, J. Falciglia, F. G. Curti, C. G. Bethea, F. Capasso, E. A. Whittaker, R. Paiella, A. Tredicucci, A. L. Hutchinson, D. L. Sivco et A. Y. Cho : « High-speed modulation and free-space optical audio/video transmission using quantum cascade lasers », *Electronics Letters*, **37**(3), pp. 191–193 (Fev. 2001).

[12] J. Faist, D. Hofstetter, M. Beck, T. Allen, M. Rochat et S. Blaser : « Bound-to-Continuum and Two-Phonon Resonance Quantum-Cascade Lasers for High Duty

Cycle, High-Temperature Operation », *IEEE Journal of Quantum Electronics*, **38**(6), pp. 533–546 (Juin 2002).

[13] A. A. Kosterev et F. K. Tittel : « Chemical sensors based on quantum cascade lasers », *IEEE Journal of Quantum Electronics*, **38**(6), pp. 582–591 (Juin 2002).

[14] F. Podevin : *Composants Schottky à hétérostructures de semiconducteurs en technologie InP pour le mélange de fréquences à 560 GHz*, Thèse de doctorat, Université de Lille 1 (Oct. 2001).

[15] E. Peytavit : *Génération et propagation aux fréquences terahertz*, Thèse de doctorat, Université de Lille 1 (Oct. 2002).

[16] L. Desplanque : *Caractérisation électro–optique de composants térahertz par échantillonnage Franz–Keldysh subpicoseconde*, Thèse de doctorat, Université de Lille 1 (Nov. 2003).

[17] J. D. Crowley, C. Hang, R. E. Dalrymple, D. R. Tringali, F. B. Fank, L. Wandiger et H. B. Wallace : « 140 GHz Indium phosphide Gunn Diode », *Electronics Letters*, **30**(6), pp. 499–500 (Mars 1994).

[18] H. Eisele et G. I. Haddad : « D-band InP Gunn devices with second-harmonic power extraction up to 290 GHz », *Electronics Letters*, **30**(23), pp. 1950–1951 (Nov. 1994).

[19] M. Tschernitz et J. Freyer : « 140 GHz GaAs double-Read IMPATT diodes », *Electronics Letters*, **31**(7), pp. 582–583 (Mars 1995).

[20] E. R. Brown, J. R. Söderström, C. D. Parker, L. J. Mahoney, K. M. Molvar et T. C. McGill : « Oscillations up to 712 GHz in InAs/AlSb resonant-tunneling diodes », *Applied Physics Letters*, **58**(20), pp. 2291–2293 (Mai 1991).

[21] W. Knap, J. Lusakowski, T. Parenty, S. Bollaert, A. Cappy, V. V. Popov et M. S. Shur : « Terahertz emission by plasma waves in 60 nm gate high electron mobility transistors », *Applied Physics Letters*, **84**(13), pp. 2331–2333 (Mars 2004).

[22] M. Dyakonov et M. Shur : « Shallow water analogy for a ballistic field effect transistor : New mechanism of plasma wave generation by dc current », *Physical Review Letters*, **71**(15), pp. 2465–2468 (Oct. 1993).

[23] L. Desplanque, J. F. Lampin et F. Mollot : « Generation and detection of terahertz pulses using post-process bonding of low-temperature-grown GaAs and AlGaAs », *Applied Physics Letters*, **84**(12), pp. 2049–2051 (Mars 2004).

[24] S. Slivken, Z. Huang, A. Evans et M. Razeghi : « High-power ($\lambda \sim 9$ μm) quantum cascade lasers », *Applied Physics Letters*, **80**(22), pp. 4091–4093 (Juin 2002).

[25] S. Kumar, B. S. Williams, S. Kohen, Q. Hu et J. L. Reno : « Continuous-wave operation of terahertz quantum-cascade lasers above liquid-nitrogen temperature », *Applied Physics Letters*, **84**(14), pp. 2494–2496 (Avr. 2004).

[26] E. Starikov, P. Shiktorov, V. Grunžinskis, L. Reggiani, L. Varani, J. C. Vaissière et J. H. Zhao : « Monte Carlo simulation of terahertz generation in nitrides », *Journal of Physics : Condensed Matter*, **13**(32), pp. 7159–7168 (Août 2001).

[27] E. Starikov, P. Shiktorov, V. Grunžinskis, L. Reggiani, L. Varani, J. C. Vaissière et J. H. Zhao : « Monte Carlo calculations of Thz generation in wide gap semiconductor », *Physica B : Condensed Matter*, **314**(1–4), pp. 171–175 (Mars 2002).

[28] L. Varani, J. C. Vaissière, E. Starikov, P. Shiktorov, V. Grunžinskis, L. Reggiani et J. H. Zhao : « Monte Carlo Calculations of THz Generation in Nitrides », *Physica Status Solidi (a)*, **190**(1), pp. 247–256 (Mars 2002).

[29] E. R. Mueller et J. Waldman : « Power and spatial mode measurements of sideband generated, spatially filtered, submillimeter radiation », *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, **42**(10), pp. 1891–1895 (Oct. 1994).

[30] D. Lippens : « Génération aux fréquences térahertz : approches électronique et photonique », *Revue de l'Électricité et de l'Électronique*, **1**, pp. 25–31 (Jan. 2003).

[31] X. Mélique, A. Maestrini, P. Mounaix, M. Favreau, O. Vanbésien, J. M. Goutoule, G. Beaudin, T. Nähri et D. Lippens : « Record performance of a 250 GHz InP-based heterostructure barrier varactor tripler », *Electronics Letters*, **35**(11), pp. 938–939 (Mai 1999).

[32] A. Maestrini, J. Bruston, D. Pukala, S. Martin et I. Mehdi : « Performance of a 1.2 THz frequency tripler using a GaAs frameless membrane monolithic circuit », *2001 IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest*, **3**, pp. 1657–1660 (Mai 2001).

[33] F. Maiwald, S. Martin, J. Bruston, A. Maestrini, T. Crawford et P. H. Siegel : « 2.7 THz waveguide tripler using monolithic membrane diodes », *2001 IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest*, **3**, pp. 1637–1640 (Mai 2001).

[34] E. Shiktorov, E. Starikov, V. Grunžinskis, L. Reggiani, L. Varani et J. C. Vaissière : « Monte Carlo calculation of electronic noise under high-order harmonic generation », *Applied Physics Letters*, **80**(25), pp. 4759–4761 (Juin 2001).

[35] E. Peytavit, S. Arscott, D. Lippens, G. Mouret, S. Matton, P. Masselin, R. Bocquet, J. F. Lampin, L. Desplanque et F. Mollot : « Terahertz frequency difference from vertically integrated low-temperature-grown GaAs photodetector », *Applied Physics Letters*, **81**(7), pp. 1174–1176 (Août 2002).

[36] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, A. L. Hutchinson, S.-N. G. Chu et A. Y. Cho : « Short wavelength ($\lambda \sim 3.4\ \mu$m) quantum cascade laser based on strained compensated InGaAs/AlInAs », *Applied Physics Letters*, **72**(6), pp. 680–682 (Fev. 1998).

[37] E. Rosencher et B. Vinter : *Optoélectronique*, Masson, Paris Milan Barcelone (1998), ISBN 2-225-82935-7.

[38] J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori, D. L. Sivco et A. Y. Cho : *Quantum Cascade Lasers*, pp. 1–83, dans [39] (1999).

[39] H. C. Liu et F. Capasso : *Semiconductors and Semimetals Volume 66 : Intersubband Transitions in Quantum Wells : Physics and Device Applications II*, Academic Press, San Diego (2000), ISBN 0-127-52175-5.

[40] T. H. Maiman : « Optical and Microwave-Optical Experiments in Ruby », *Physical Review Letters*, **4**(11), pp. 564–566 (Juin 1960).

[41] A. L. Schwalow et C. H. Townes : « Infrared and Optical Masers », *Physical Review*, **112**(6), pp. 1940–1949 (Dec. 1958).

[42] B. Lax, J. G. Mavroides, H. J. Zeiger et R. J. Keyes : « Infrared magnetoreflection in bismuth. I. High fields », *Physical Review Letters*, **5**(6), pp. 241–243 (Sep. 1960).

[43] L. Esaki et R. Tsu : « Superlatticve and Negative Differential Conductivity in Semiconductors », *IBM Journal of Research and Development*, **14**(1), pp. 61–65 (Jan. 1970).

[44] T. C. L. G. Sollner, W. D. Goodhue, P. E. Tannenwald, C. D. Parker et D. D. Peck : « Resonant tunneling through quantum wells at frequencies up to 2.5 THz », *Applied Physics Letters*, **43**(6), pp. 588–590 (Sep. 1983).

[45] L. C. West et S. J. Eglash : « First observation of an extremely large-dipole infrared transition within the conduction band of a GaAs quantum well », *Applied Physics Letters*, **46**(12), pp. 1156–1158 (Juin 1985).

[46] F. Capasso, K. Mohammed et A. Y. Cho : « Sequential resonant tunneling through a multiquantum wells superlattice », *Applied Physics Letters*, **48**(7), pp. 478–480 (Fev. 1986).

[47] J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori, D. L. Sivco, A. L. Hutchinson, S. N. G. Chu et A. Y. Cho : « Measurement of the intersubband scattering rate in semiconductor quantum wells by excited state differential absorption spectroscopy », *Applied Physics Letters*, **63**(10), pp. 1354–1356 (Sep. 1993).

[48] C. Sirtori, F. Capasso, J. Faist et S. Scandolo : « Nonparabolicity and a sum rule associated with bound-to-bound and bound-to-continuum intersubband transitions in quantum wells », *Physical Review B*, **50**(12), pp. 8663–8674 (Sep. 1994).

[49] C. Gmachl, F. Capasso, D. L. Sivco et A. Y. Cho : « Recent progress in quantum cascade lasers and applications », *Reports on Progress in Physics*, **64**, pp. 1533–1601 (Nov. 2001).

[50] F. Capasso, R. Paiella, R. Martini, R. Colombelli, C. Gmachl, T. L. Myers, M. S. Taubman, R. M. Williams, C. G. Bethea, K. Untertainner, H. Y. Hwang, D. L. Sivco, A. Y. Cho, A. M. Sergent, H. C. Liu et E. A. Whittaker : « Quantum cascade lasers : Ultrahigh-speed operation, optical wireless communication, narrow linewidth, and far-infrared emssion », *IEEE Journal of Quantum Electronics*, **38**(6), pp. 511–529 (Juin 2002).

[51] J. Faist, F. Capasso, C. Sirtori, D. L. Sivco, J. N. Baillargeon, A. L. Hutchinson, S.-N. G. Chu et A. Y. Cho : « High power mid-infrared ($\lambda \sim 5$ μm) quantum cascade lasers operating above room temperature », *Applied Physics Letters*, **68**(26), pp. 3680–3682 (Juin 1996).

[52] G. Scamarcio, F. Capasso, C. Sirtori, J. Faist, A. L. Hutchinson, D. L. Sivco et A. Y. Cho : « High-Power Infrared (8-Micrometer Wavelength) Superlattice Lasers », *Science*, **276**(5313), pp. 773–776 (Mai 1997).

[53] A. Tredicucci, F. Capasso, C. Gmachl, D. L. Sivco, A. L. Hutchinson et A. Y. Cho : « High performance interminiband quantum cascade lasers with graded superlattices », *Applied Physics Letters*, **73**(15), pp. 2101–2103 (Oct. 1998).

[54] C. Gmachl, A. M. Sergent, A. Tredicucci, F. Capasso, A. L. Hutchinson, D. L. Sivco, J. N. Baillargeon, S. N. G. Chu et A. Y. Cho : « Improved CW operation of quantum cascade lasers with epitaxial-side heat-sinking », *IEEE Photonics Technology Letters*, **11**(11), pp. 1369–1371 (Nov. 1999).

[55] C. Sirtori, H. Page, C. Becker et V. Ortiz : « GaAs-AlGaAs quantum Cascade Lasers : Physics, Technology, and Prospects », *IEEE Journal of Quantum Electronics*, **38**(6), pp. 547–558 (Juin 2002).

[56] C. Sirtori, P. Kruck, S. Barbieri, P. Collot, J. Nagle, M. Beck, J. Faist et U. Oesterle : « GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ quantum cascade lasers », *Applied Physics Letters*, **73**(24), pp. 3486–3488 (Dec. 1998).

[57] M. Beck, D. Hofstetter, T. Aellen, J. Faist, U. Oesterle, M. Ilegems, E. Gini et H. Melchior : « Continuous Wave Operation of a Mid-Infrared Semiconductor Laser at Room Temperature », *Science*, **295**(5553), pp. 301–305 (Jan. 2002).

[58] J. Faist, M. Beck et T. Aellen : « Quantum-cascade lasers based on a bound-to-continuum transition », *Applied Physics Letters*, **78**(2), pp. 147–149 (Jan. 2001).

[59] M. Rochat, J. Faist, M. Beck, U. Oesterle et M. Ilegems : « Far-infrared ($\lambda = 88\ \mu$m) electroluminescence in a quantum cascade structure », *Applied Physics Letters*, **73**(25), pp. 3724–3726 (Dec. 1998).

[60] M. Rochat, L. Ajili, H. Willenberg et J. Faist : « Low-threshold terahertz quantum-cascade lasers », *Applied Physics Letters*, **81**(8), pp. 1381–1383 (Août 2002).

[61] C. Sirtori, J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, A. L. Hutchinson et A. Y. Cho : « Quantum cascade laser with plasmon-enhanced waveguide operating at 8.4 μm wavelength », *Applied Physics Letters*, **66**(24), pp. 3242–3244 (Juin 1998).

[62] C. Kittel : *Physique de l'état solide, 7ème édition*, Dunod, Paris (1998), ISBN 2-100-03267-4.

[63] S. Dhillon, C. Sirtori, J. Alton, S. Barbieri, H. E. Beere, E. H. Linfield, D. A. Ritchie, M. Calligaro et A. D. Rossi : « Buried heterostructure 2.9 THz quantum cascade lasers operating up to 77 K in continuous wave using two-dimensional surface plasmon confinement », dans *LEOS 2004* (2004).

[64] B. S. Williams, S. Kumar, H. Callebaut, Q. Hu et J. L. Reno : « 3.4 THz quantum cascade laser operating above liquid nitrogen temperature », *Electronics Letters*, **39**(12), pp. 915–916 (Juin 2003).

[65] B. S. Williams, S. Kumar, H. Callebaut et Q. Hu : « Terahertz quantum-cascade laser operating up to 137 K », *Applied Physics Letters*, **83**(25), pp. 5142–5144 (Dec. 2003).

[66] B. S. Williams, S. Kumar, H. Callebaut et Q. Hu : « Terahertz quantum-cascade laser at $\lambda \approx 100\ \mu$m using metal waveguide for mode confinement », *Applied Physics Letters*, **83**(11), pp. 2124–2126 (Sep. 2003).

[67] H. Callebaut, S. Kumar, B. S. Williams et Q. Hu : « Analysis of transport properties of tetrahertz quantum cascade lasers », *Applied Physics Letters*, **83**(2), pp. 207–209 (Juil. 2003).

[68] H. Callebaut, S. Kumar, B. S. Williams, Q. Hu et J. L. Reno : « Importance of electron-impurity scattering for electron transport in terahertz quantum-cascade lasers », *Applied Physics Letters*, **84**(5), pp. 645–647 (Fev. 2004).

[69] L. Ajili, G. Scalari, D. Hofstetter, M. Beck, J. Faist, H. Beere, G. Davies, E. Linfield et D. Ritchie : « Continuous-wave operation of far-infrared quantum cascade lasers », *Electronics Letters*, **38**(25), pp. 1675–1676 (Dec. 2002).

[70] R. Köhler, A. Tredicucci, F. Beltram, H. E. Beere, E. H. Linfield, A. G. Davies et D. A. Ritchie : « Low-threshold quantum-cascade lasers at 3.5 THz ($\lambda = 85\ \mu$m) », *Optics Letters*, **28**(10), pp. 810–812 (Mai 2003).

[71] G. Scalari, L. Ajili, J. Faist, H. Beere, E. Linfield, D. Ritchie et G. Davies : « Far-infrared ($\lambda \simeq 87\ \mu$m) bound-to-continuum quantum-cascade lasers operating up to 90 K », *Applied Physics Letters*, **82**(19), pp. 3165–3167 (Mai 2003).

[72] R. Köhler, A. Tredicucci, C. Mauro, F. Beltram, H. E. Beere, E. H. Linfield, A. G. Davies et D. A. Ritchie : « Terahertz quantum-cascade lasers based on an interlaced photon-phonon cascade », *Applied Physics Letters*, **84**(8), pp. 1266–1268 (Fev. 2004).

[73] R. Köhler, A. Tredicucci et F. Beltram : « High-performance continuous-wave operation of superlattice terahertz quantum-cascade lasers », *Applied Physics Letters*, **82**(10), pp. 1518–1520 (Mars 2003).

[74] L. Friedman, R. A. Soref et G. Sun : « Silicon-based interminiband infrared laser », *Journal of Applied Physics*, **83**(7), pp. 3480–3485 (Avr. 1998).

[75] L. Friedman, R. A. Soref, G. Sun et Y. Lu : « Theory of the strain-symmetrized silicon-based Ge-Si superlattice laser », *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, **4**(6), pp. 1029–1034 (Nov.–Déc. 1998).

[76] L. Diehl, S. Mentese, E. Muller, D. Grutzmacher, H. Sigg, U. Gennser, I. Sagnes, Y. Campidelli, O. Kermarrec, D. Bensahel et J. Faist : « Electroluminescence from strain-compensated $Si_{0.2}Ge_{0.8}/Si$ quantum-cascade structures based on a bound-to-continuum transition », *Applied Physics Letters*, **81**(25), pp. 4700–4702 (Dec. 2002).

[77] R. Bates, S. A. Lynch, D. J. Paul, Z. Ikonic, R. W. Kelsall, P. Harrison, S. L. Liew, D. J. Norris, A. G. Cullis, W. R. Tribe et D. D. Arnone : « Interwell intersubband electroluminescence from Si/SiGe quantum cascade emitters », *Applied Physics Letters*, **83**(20), pp. 4092–4094 (Nov. 2003).

[78] R. Q. Yang, B. H. Yang, D. Zhang, C.-H. Lin, S. J. Murry, H. Wu et S. S. Pei : « High power mid-infrared interband cascade lasers based on type-II quantum wells », *Applied Physics Letters*, **71**(17), pp. 2409–2411 (Oct. 1997).

[79] R. Tessier, D. Barate, A. Vicet, D. A. Yarekha, C. Alibert, A. N. Baranov, X. Marcadet, M. Garcia et C. Sirtori : « InAs/AlSb quantum cascade lasers operating at 6.7 μm », *Electronics Letters*, **39**(17), pp. 1252–1254 (Août 2001).

[80] K. Ohtani et H. Ohno : « InAs/AlSb quantum cascade lasers operating at 10 μm », *Applied Physics Letters*, **82**(7), pp. 1003–1005 (Fev. 2003).

[81] C. Sirtori : « Material systems for quantum cascade lasers », dans *Proceedings of The International Workshop on Quantum Cascade Lasers*, Seville, 4–8 Janvier 2004 (2004).

[82] C. Gmachl, H. M. Ng et A. Y. Cho : « Intersubband absorption in GaN/AlGaN multiple quantum wells in the wavelength range of $\lambda \sim 1.75 - 4.2$ μm », *Applied Physics Letters*, **77**(3), pp. 334–336 (Juil. 2000).

[83] C. Gmachl, H. M. Ng et A. Y. Cho : « Intersubband absorption in degenerately doped $GaN/Al_xGa_{1-x}N$ coupled double quantum wells », *Applied Physics Letters*, **79**(11), pp. 1590–1592 (Sep. 2001).

[84] J. Alton, S. Barbieri, J. Fowler, H. E. Beere, J. Muscat, E. H. Linfield, D. A. Ritchie, G. Davies, R. Köhler et A. Tredicucci : « Magnetic field in-plane quantization and tuning of population inversion in a THz superlattice quantum cascade laser », *Physical Review B*, **68**, pp. 081303(R) (2003).

[85] N. Owschimikow, C. Gmachl, A. Belyanin, V. Kocharovsky, D. L. Sivco, R. Colombelli, F. Capasso et A. Y. Cho : « Resonant Second-Order Nonlinear Optical

Processes in Quantum Cascade Lasers », *Physical Review Letters*, **90**(4), pp. 043902 (Jan. 2003).

[86] C. Gmachl, N. Owschimikow, A. Belyanin, A. M. Sergent, D. L. Sivco, M. L. Peabody, A. Y. Cho et F. Capasso : « Temperature dependence and single-mode tuning behavior of second-harmonic generation in quantum cascade lasers », *Applied Physics Letters*, **84**(15), pp. 2751–2753 (Avr. 2004).

[87] C. Jacoboni et L. Reggiani : « The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials », *Reviews of Modern Physics*, **55**(3), pp. 645–705 (Jul. 1983).

[88] L. Baudry : *Étude théorique du transport électronique dans des structures à dimensionnalité réduite. Application à la simulation Monte Carlo d'hétérostructures pseudomorphiques*, Thèse de doctorat, Université de Lille 1 (Juil. 1993).

[89] O. Mouton : *Modèle de structure de bande et transport électronique en champ fort. Application aux matériaux GaAs et InP*, Thèse de doctorat, Université de Lille 1 (Juil. 1996).

[90] A. Sleiman : *Simulation Monte Carlo du transport électronique et des phénomènes de diffusion dans les hétérostructures III-V. Application aux structures MODFET et DMT*, Thèse de doctorat, Université de Lille 1 (Dec. 1996).

[91] M. Badirou : *Simulation Monte Carlo en régimes statique et dynamique de HEMT de la filière InP*, Thèse de doctorat, Université de Lille 1 (Dec. 1998).

[92] F. Dessenne : *Étude théorique et optimisation de transistors à effet de champ de la filière InP et de la filière GaN*, Thèse de doctorat, Université de Lille 1 (Fev. 1998).

[93] J.-L. Thobel : *Simulation Monte Carlo du transport électronique et des phénomèmes de diffusion dans les systèmes à base de semi-conducteur III-V*, Habilitation à diriger des recherches, Université de Lille 1 (Mars 200).

[94] M. V. Fischetti : « Master-equation approach to the study of electronic transport in small semiconductor devices », *Physical Review B*, **59**(7), pp. 4901–4917 (Feb. 1999).

[95] M. V. Fischetti : « Theory of electron transport in semiconductor devices using the Pauli master equation », *Journal of Applied Physics*, **83**(1), pp. 270–291 (Jan. 1998).

[96] W. Kohn et J. M. Luttinger : « Quantum theory of Electrical Transport Phenomena », *Physical Review*, **108**(3), pp. 590–611 (Nov. 1957).

[97] R. Brunetti, C. Jacoboni et F. Rossi : « Quantum theory of transient transport in semiconductors : A Monte Carlo approach », *Physical Review B*, **39**(15), pp. 10781–10790 (Mai 1989).

[98] C. Jacoboni : « Comparison between quantum and classical results in hot-electron transport », *Semiconductor Science and Technology*, **7**(3B), pp. B6–B11 (Mars 1992).

[99] F. Rossi, A. D. Carlo et P. Lugli : « Microscopic theory of quantum-transport phenomena in mesoscopic systems : a Monte Carlo Approach », *Physical Review Letters*, **80**(15), pp. 3348–3351 (Avr. 1998).

[100] R. P. Zaccaria et F. Rossi : « On the problem of generalizing the semiconductor Bloch equation from a closed to an open system », *Physical Review B*, **67**(11), pp. 113311 (Mars 2003).

[101] R. P. Zaccaria, R. C. Iotti et F. Rossi : « Monte Carlo simulation of hot-carrier phenomena in open quantum devices : A kinetic approach », *Applied Physics Letters*, **84**(1), pp. 139–141 (Jan. 2004).

[102] S. Datta : *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge University Press, Cambridge NewYork Melbourne (1995), ISBN 0-521-41604.

[103] W. R. Frensley : « Boundary Conditions for Open Quantum Systems Driven Far from Equilibrium », *Reviews of Modern Physics*, **62**, pp. 745–761 (1990).

[104] H. L. Grubin, D. K. Ferry et R. Akis : « Dissipation and quantum transport simulations in nanoscale devices », *Superlattices and Microstructures*, **20**(4), pp. 531–534 (1996).

[105] H. L. Grubin et D. K. Ferry : « Interfaces, boundaries and quantum device transport », *Semiconductor Science and Technology*, **13**(8A), pp. 44–46 (Aug. 1998).

[106] S. Datta : « Nanoscale device modeling : the Green's function method », *Superlattices and Microstructures*, **28**(4), pp. 253–278 (Avr. 2000).

[107] R. Lake et S. Datta : « Nonequilibrium Green's-function method applied to double-barrier resonant tunneling diodes », *Physical Review B*, **45**(12), pp. 6670–6685 (Mars 1992).

[108] S. Sadri : *Simulation du phénomène de transport perpendiculaire en régime statique dans des hétérostructures à puits quantique par le formalisme des fonctions de Green*, Thèse de doctorat, Université de Lille 1 (Jan. 1996).

[109] A. Wacker : « Semiconductor superlattices : a model system for nonlinear transport », *Physics Reports*, **357**(Issue 1), pp. 1–111 (Jan. 2002).

[110] G. D. Mahan : *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York London (1981), ISBN 0-306-40411-7.

[111] R. Lake : « Quantum device modeling with non-equilibrium Green functions », dans *Proceedings of the 3rd International Workshop on Computational Electronics*, Portland, May 18–20 1995 (1995).

[112] R. Lake, G. Klimeck, R. C. Bowen et D. Jovanovic : « Single and multiband modeling of quantum electron transport through layered semiconductor devices », *Journal of Applied Physics*, **81**(12), pp. 7845–7869 (Juin 1997).

[113] S.-C. Lee et A. Wacker : « Nonequilibrium Green's function theory for transport and gain properties of quantum cascade structures », *Physical Review B*, **66**, pp. 245314 (Dec. 2002).

[114] M. F. Pereira Jr., S.-C. Lee et A. Wacker : « Controlling many-body effects in the midinfrared gain and terahertz absorption of quantum cascade laser structures », *Physical Review B*, **69**(20), pp. 205310 (Mai 2004).

[115] E. Wigner : « On the quantum correction for termodynamique equilibrium », *Physical Review*, **40**(5), pp. 749–759 (Juin 1932).

[116] C. Jacoboni, A. Bertoni, P. Bordone et R. Brunetti : « Wigner-function formulation for quantum transport in semiconductors : theory and Monte Carlo approach », *Mathematics and Computers in Simulations*, **55**, pp. 67–78 (2001).

[117] F. Rossi, C. Jacoboni et M. Nedjalkov : « A Monte Carlo solution of the Wigner transport equation », *Semiconductor Science and Technology*, **9**(5S), pp. 934–936 (Mai 1994).

[118] R. Brunetti, C. Jacoboni et P. J. Price : « Time-resolved quantum theory of real-space transfer », *Semiconductor Science and Technology*, **9**(5S), pp. 844–848 (Mai 1994).

[119] R. Brunetti et C. Jacoboni : « Wave-packet analysis of electron-phonon interaction in the Wigner formalism », *Physical Review B*, **57**(3), pp. 1723–1730 (Jan. 1998).

[120] M. Pascoli, P. Bordone, R. Brunetti et C. Jacoboni : « Wigner Paths for electrons interacting with phonons », *Physical Review B*, **58**(7), pp. 3503–3506 (Août 1998).

[121] P. Bordone, M. Pascoli, R. Brunetti, A. Bartoni, C. Jacoboni et A. Abramo : « Quantum transport of electrons in open nanostructures with the Wigner-function formalism », *Physical Review B*, **59**(4), pp. 3060–3069 (Jan. 1999).

[122] A. Bertoni, P. Bordone, R. Brunetti et C. Jacoboni : « The Wigner Function for electron transport in mesoscopic systems », *Journal of Physics : Condensed Matter*, **11**, pp. 5999–6012 (1999).

[123] L. Demeio, L. Barletti, A. Bertoni, P. Bordone et C. Jacoboni : « Wigner-function approach to multiband transport in semiconductors », *Physica B*, **314**(1–4), pp. 104–107 (Mars 2002).

[124] C. Jacoboni, R. Brunetti et S. Monastra : « Quantum dynamics of polaron formation with the Wigner-function approach », *Physical Review B*, **68**(12), pp. 125205 (200).

[125] F. A. Buot : « On the quantum theory of electron transport in the Wigner formalism », *Journal of Applied Physics*, **68**(7), pp. 3418–3424 (Oct. 1990).

[126] F. A. Buot et K. L. Jensen : « Lattice Weyl-Wigner formulation of exact many-body quantum-transport theory and applications to novel solid-state quantum-based devices », *Physical Review B*, **42**(15), pp. 9429–9457 (Nov. 1990).

[127] K. L. Jensen et A. K. Ganguly : « Numerical simulation of field emission and tunneling : A comparison of the Wigner function and transmission coefficient approaches », *Journal of Applied Physics*, **73**(9), pp. 4409–4427 (Mai 1993).

[128] K.-Y. Kim et B. Lee : « Effect of transverse-longitudinal kinetic energy coupling at heterostructures boundaries on quantum transport under Wigner function formulation », *Journal of Applied Physics*, **85**(10), pp. 7252–7255 (Mai 1999).

[129] K.-Y. Kim et B. Lee : « Simulation of quantum transport by applying second-order differencing scheme to Wigner function model including spatially varying effectiv mass », *Solid-State Electronics*, **43**(1), pp. 81–86 (Jan. 1999).

[130] K.-Y. Kim et B. Lee : « Wigner-function formulation in anisotropic semiconductor quantum wells », *Physical Review B*, **64**, pp. 115304 (2001).

[131] T. Kuhn : *Density matrix theory of coherent ultrafast dynamics*, pp. 173–214, dans Schöll [202] (1998).

[132] F. Rossi : « Ultrafast carrier dynamics in semiconductor nanostructures : interplay between coherence and relaxation », *Superlattices and Microstructures*, **26**(2), pp. 129–140 (Août 1999).

[133] F. Rossi : *Bloch oscillation and Wannier-Stark localization in semiconductor superlattices*, pp. 283–320, dans Schöll [202] (1998).

[134] S. Haas, F. Rossi et T. Kuhn : « Generalized Monte Carlo approach for the study of the coherent ultrafast carrier dynamics in photoexcited semiconductors », *Physical Review B*, **53**(9), pp. 12855–12868 (Mai 1996).

[135] F. Rossi : « Coherent phenomena in semiconductors », *Semiconductor Science and Technology*, **13**(2), pp. 147–168 (Fev. 1998).

[136] F. Rossi et T. Kuhn : « Theory of ultrafast phenomena in photoexcited semiconductors », *Reviews of Modern Physics*, **74**(3), pp. 895–950 (Juil. 2002).

[137] R. C. Iotti et F. Rossi : « Nature of Charge Transport in Quantum-Cascade Lasers », *Physical Review Letters*, **87**(14), pp. 146603–146606 (Oct. 2001).

[138] R. C. Iotti et F. Rossi : « Hot-carrier relaxation and thermalization in quantum-cascade lasers : phase coherence versus energy relaxation », *Physica B*, **314**(1–4), pp. 232–326 (Mars 2002).

[139] R. C. Iotti et F. Rossi : « Microscopic modelling of semiconductor-based quantum devices : a predictive simulation strategy », *Physica Status Solidi (b)*, **238**(3), pp. 462–469 (Août 2003).

[140] G. B. Serapiglia, E. Paspalakis, C. Sirtori, K. L. Vodopyanov et C. C. Phillips : « Laser-induced Quantum Coherence in a Semiconductor Quantum Well », *Physical Review Letters*, **84**(5), pp. 1019–1022 (Jan. 2000).

[141] F. Eickemeyer, K. Reimann, M. Woerner, T. Elsaesser, S.-C. Lee, A. Wacker, S. Barbieri et J. Nagle : « Ultrafast coherent electron transport in GaAs/AlGaAs quantum cascade structures », *Physica B*, **314**(1–4), pp. 314–322 (Mars 2002).

[142] F. Eickemeyer, K. Reimann, M. Woerner, T. Elsaesser, S. Barbieri, C. Sirtori, G. Strasser, T. Müller, R. Bratschitsch et K. Unterrainer : « Ultrafast Coherent Electron Transport in semiconductor Quantum Cascade Structures », *Physical Review Letters*, **89**(4), pp. 047402–047405 (Juil. 2002).

[143] V. M. Axt et T. Kuhn : « Femtosecond spectroscopy in semiconductors : a key to coherences, correlations and quantum kinetics », *Reports on Progress in Physics*, **67**(4), pp. 433–512 (Avr. 2004).

[144] M. Woerner, K. Reimann et T. Elsaesser : « Coherent charge transport in semiconductor quantum cascade structures », *Journal of Physics : Condensed Matter*, **16**(4), pp. R25–R48 (Fev. 2004).

[145] D. Indjin, P. Harrison, R. W. Kelsall et Z. Ikonic : « Self-consistent scattering theory of transport and output characteristics of quantum cascade lasers », *Journal of Applied Physics*, **91**(11), pp. 9019–9026 (Juin 2002).

[146] D. Indjin, P. Harrison, R. W. Kelsall et Z. Ikonić : « Self-consistent scattering carrier dynamic simulations of quantum cascade devices », dans *Proceedings of 13th Workshop on Physical Simulation of Semiconductor Devices*, Ikley West Yorkshire, 25–26 Mars 2002 (2002).

[147] D. Indjin, P. Harrison, R. W. Kelsall et Z. Ikonić : « Influence of leakage current on temperature performance of GaAs/AlGaAs quantum cascade lasers », *Applied Physics Letters*, **81**(3), pp. 400–402 (Juil. 2002).

[148] D. Indjin, P. Harrison, R. W. Kelsall et Z. Ikonić : « Mechanims of temperature performance degradation in terahertz quantum-cascade lasers », *Applied Physics Letters*, **82**(9), pp. 1347–1349 (Mars 2003).

[149] P. Harrison et R. W. Kelsall : « Population inversion in optically pumped asymmetric quantum well terahertz lasers », *Journal of Applied Physics*, **81**(11), pp. 7135–7140 (Juin 1997).

[150] P. Harrison : « Engineering the electron-phonon scattering rates in the active regions of quantum cascade lasers operating beyond 30 μm », *Semiconductor Science and Technology*, **12**(11), pp. 1487–1490 (Nov. 1997).

[151] P. Harrison : « The nature of the electron distribution functions in quantum cascade lasers », *Applied Physics Letters*, **75**(18), pp. 2800–2802 (Nov. 1999).

[152] P. Harrison et R. W. Kelsall : « The relative importance of electron-electron and electron-phonon scattering in terahertz quantum cascade lasers », *Solid-State Electronics*, **42**(7–8), pp. 1449–1451 (Juil. 1998).

[153] P. Harrison, D. Indjin et R. W. Kelsall : « Electron temperature and mechanisms of hot carrier generation in quantum cascade lasers », *Journal of Applied Physics*, **92**(11), pp. 6921–6923 (Dec. 2002).

[154] P. Kinsler, P. Harrison et R. W. Kelsall : « Intersubband electron-electron scattering in asymmetric quantum wells designed for far-infrared emission », *Physical Review B*, **58**(8), pp. 4771–4778 (Août 1998).

[155] P. Kinsler, P. Harrison et R. W. Kelsall : « Intersubband terahertz lasers using four-level asymmetric quantum wells », *Journal of Applied Physics*, **85**(1), pp. 23–28 (Jan. 1999).

[156] P. Kinsler, R. W. Kelsall et P. Harrison : « Nonequilibrium electron heating in inter-subband terahertz lasers », *Journal of Applied Physics*, **91**(3), pp. 904–910 (Fev. 2002).

[157] K. Donovan, P. Harrison, P. Kinsler et R. W. Kelsall : « Maximizing the population inversion by optimizing the depopulation rate in far-infrared quantum cascade lasers », *Superlattices and Microstructures*, **25**(1/2), pp. 373–376 (Jan. 1999).

[158] K. Donovan, P. Harrison et R. W. Kelsall : « Comparison of the quantum efficiencies of interwell and intrawell radiative transitions in quantum cascade lasers », *Applied Physics Letters*, **75**(14), pp. 1999–2001 (Oct. 1999).

[159] K. Donovan, P. Harrison et R. W. Kelsall : « Self-consistent solutions to the intersubband rate equations in quantum cascade lasers : Analysis of a GaAs/Al_xGa_{1-x}As device », *Journal of Applied Physics*, **89**(6), pp. 3084–3090 (Mars 2001).

[160] D. Bohm et D. Pines : « A Collective Description of Electron Interactions. I. Magnetic Interactions », *Physical Review*, **82**(5), pp. 625–634 (Juin 1951).

[161] D. Pines : *Elementary excitations in solids*, W. A. Benjamin, Inc., New York Amsterdam (1963).

[162] D. Pines et D. Bohm : « A collective description of electron interactions : II. Collective vs Individual particle aspects of the interactions », *Physical Review*, **85**(2), pp. 338–353 (Jan. 1952).

[163] M. A. Osman et D. K. Ferry : « Monte Carlo investigation of the electron–hole–interaction effects on the ultrafast relaxation of hot photoexcited carriers in GaAs », *Physical Review B*, **36**(11), pp. 6018–6032 (Oct. 1987).

[164] M. Dür, S. M. Goodnick et P. Lugli : « Monte Carlo simulation of intersubband relaxation in wide, uniformly doped GaAs/Al_x/Ga_{1-x} quantum wells », *Physical Review B*, **54**(24), pp. 17794–17804 (Dec. 1996).

[165] W. H. Knox, D. S. Chemla, G. Livescu, J. E. Cunningham et J. E. Henry : « Femtosecond Carrier Thermalization in Dense Fermi Seas », *Physical Review Letters*, **61**(11), pp. 1290–1293 (Sep. 1988).

[166] H. Nansei, S. Tomimoto, S. Saito et T. Suemoto : « Femtosecond luminescence from partly redistributed nonequilibrium electrons in InAs », *Physical Review B*, **59**(12), pp. 8015–8018 (Mars 1999).

[167] K. W. Sun, T. S. Song, C.-K. Sun, J. C. Wang, M. G. Kane, S. Y. Wang et C. P. Lee : « Carrier-carrier scattering in GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ quantum wells », *Physical Review B*, **61**(23), pp. 15592–15595 (Juin 2000).

[168] G. Bastard : *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*, Les Editions de Physique, Les Ullis (1988), ISBN 2-86883-092-7.

[169] J. Slater : « Electrons in perturbed periodic lattices », *Physical Review*, **76**(11), pp. 1592–1601 (Dec. 1949).

[170] D. J. BenDaniel et C. B. Duke : « Space-charge effects on electron tunneling », *Physical Review*, **152**(2), pp. 683–692 (Dec. 1966).

[171] J.-L. Thobel, O. Bonno, F. Dessenne et H. Boutry : « Monte Carlo simulation of electron transport in narrow gap heterostructures », *Journal of Applied Physics*, **92**(9), pp. 5286–5294 (Nov. 2002).

[172] M. A. Littlejohn, J. R. Hauser et T. H. Glisson : « Velocity-fiel characteristics of GaAs with Γ_6^c-L_6^c-X_6^c conduction-band ordering », *Journal of Applied Physics*, **48**(11), pp. 4587–4590 (Nov. 1977).

[173] J.-L. Thobel, L. Baudry, F. Dessenne et M. Charef : « Monte Carlo modelling of high-field transport in III-V heterostructures », *Journal of Applied Physics*, **74**(10), pp. 6274–6280 (Nov. 1993).

[174] F. Stern : « Image potential near a gradual interface between two dielectrics », *Physical Review B*, **17**(12), pp. 5009–5015 (Juin 1978).

[175] T. Ando : « Density-functional calculation of sub-band structure in accumulation and inversion layers », *Physical Review B*, **13**(8), pp. 3468–3477 (Avr. 1976).

[176] B. Vinter : « Many-body effects in n-type Si inversion layers. I. Effects in the lowest subband », *Physical Review B*, **13**(10), pp. 4447–4456 (Mai 1976).

[177] F. Stern et S. D. Sarma : « Electron energy levels in GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ heterojunctions », *Physical Review B*, **30**(2), pp. 840–848 (Juil. 1984).

[178] O. Bonno : *Étude théorique de transistors à canal en InAs par la méthode de Monte Carlo*, Diplôme d'études approfondies en électronique, Université de Lille 1 (Juil. 2001).

[179] B. K. Ridley : *Quantum Processes in semiconductors*, Oxford University Press, Oxford (1999), ISBN 0-19-850-580-9.

[180] R. K. Mains et G. I. Haddad : « Time-dependent modeling of resonant-tunneling diodes from direct solution of the Schrödinger equation », *Journal of Applied Physics*, **64**(7), pp. 3564–3569 (Oct. 1988).

[181] H. R. Frohne, M. J. McLennan et S. Datta : « An efficient method for the analysis of electron waveguides », *Journal of Applied Physics*, **66**(6), pp. 2699–2705 (Sep. 1989).

[182] C. S. Lent et D. J. Kirkner : « The quantum transmitting boundary method », *Journal of Applied Physics*, **67**(10), pp. 6353–6359 (May 1990).

[183] G. Ji, T. Henderson, C. K. Peng, D. Huang et H. Morkoç : « Analysis of energy states in modulation doped multiquantum well heterostructures », *Solid-State Electronics*, **33**(2), pp. 247–258 (1990).

[184] P. J. Price : « Quasi-bound states and resonances in heterostructures », *Microelectronic Journal*, **30**(10), pp. 925–934 (Oct. 1999).

[185] P. Harrison : *Quantum wells, wires, and dots : theoretical and computational physics*, John Wiley & Sons Ltd., Chichester New York Weinheim (2000), ISBN 0-471-98495-7.

[186] S. F.-P. Paul et H. Fouckhardt : « An improved shooting approach for solving the time-independent Schrödinger equation for III/V QW structures », *Physics Letters A*, **286**, pp. 199–204 (Jul. 2001).

[187] G. Ji, W. Dobbelaere, D. Huang et H. Morkoç : « Optical transitions involving unconfined energy states in $In_xGa_{1-x}As/GaAs$ multiple quantum welles », *Physical Review B*, **39**(5), pp. 3216–3222 (Feb. 1989).

[188] Z. Yang, B. L. Weiss et E. H. Li : « The eigenstates and tunneling time in an interdiffused AlGaAs/GaAs quantum well by the transfer matrix method », *Superlattices and Microstructures*, **17**(2), pp. 177–186 (1995).

[189] T. Worren, K. B. Ozanyan et O. Hunderi : « Above-barrier states in $In_xGa_{1-x}/GaAs$ multiple quantum wells with a thin cap layer », *Physical Review B*, **58**(7), pp. 3977–3988 (Aug. 1998).

[190] A. Kaszynski : *Étude des phénomènes de transport dans les matériaux semi-conducteurs par la méthode de Monte Carlo : Application à l'arséniure de gallium de type N*, Thèse de docteur ingénieur, Université de Lille 1 (Juil. 1979).

[191] S. Bosi et C. Jacoboni : « Monte Carlo high field transport in degenerate GaAs », *Journal of Physics C : Solid State Physics*, **9**(2), pp. 315–319 (Jan. 1976).

[192] P. Lugli et D. K. Ferry : « Degeneracy in the ensemble Monte Carlo methode for high-field transport in semiconductors », *IEEE Transactions on Electron Devices*, **ED–32**(11), pp. 2431–2437 (Nov. 1985).

[193] J.-L. Thobel, A. Sleiman, P. Bourel et F. Dessenne : « Monte Carlo study of electron transport in III-V heterostructures with doped quantum wells », *Journal of Applied Physics*, **80**(2), pp. 928–935 (Juil. 1996).

[194] J.-L. Thobel, A. Sleiman et R. Fauquembergue : « Determination of diffusion coefficients in degenerate electron gas using Monte Carlo simulation », *Journal of Applied Physics*, **82**(3), pp. 1220–1226 (Août 1997).

[195] P. Borowik et J.-L. Thobel : « Improved Monte Carlo method for the study of electron transport in degenerate semiconductors », *Journal of Applied Physics*, **84**(7), pp. 3706–3709 (Oct. 1998).

[196] P. J. Price : « Two-dimensionnal Electron Transport In Semiconductor Layers, I. Phonon Scattering », *Annals Of Physics*, **133**, pp. 217–239 (1981).

[197] P. J. Price : « Comment on "Electron mobility in modulation-doped heterostructures" », *Physical Review B*, **32**(4), pp. 2643–2644 (Août 1985).

[198] W. Walukiewicz, H. E. Ruda, J. Lagowski et H. C. Gatos : « Response to "Comment on 'Electron mobility in modulation-doped heterostructures' " », *Physical Review B*, **32**(4), pp. 2645–2646 (Août 1985).

[199] M. V. Fischetti et S. E. Laux : « Monte Carlo study of electron transport in silicon inversion layers », *Physical Review B*, **48**(4), pp. 2244–2273 (Juil. 1993).

[200] S. Yu, K. W. Kim, M. A. Stroscio, G. J. Iafrate, J.-P. Sun et G. I. Haddad : « Transfer matrix method for interface optical-phonon modes in multiple-interface heterostructure systems », *Journal of Applied Physics*, **82**(7), pp. 3363–3367 (Oct. 1997).

[201] B. S. Williams et Q. Hu : « Optimized energy separation for phonon scattering in three-level terahertz intersubband lasers », *Journal of Applied Physics*, **90**(11), pp. 5504–5511 (Déc. 2001).

[202] E. Schöll : *Theory of transport properties of semiconductor nanostructures*, Chapman & Hall, London Weinheim New York (1998), ISBN 0-412-73100-2.

[203] C. Jacoboni, R. Brunetti et P. Bordone : *Monte Carlo simulation of semiconductor transport*, pp. 59–101, dans Schöll [202] (1998).

[204] J.-L. Thobel : *Simulation monte Carlo de composants submicroniques à effet de champ et à hétérojonctions. Application au T.E.G.F.E.T. et à ses structures dérivées*, Thèse de doctorat, Université de Lille 1 (Avr. 1988).

[205] S. M. Goodnick, D. K. Ferry, C. W. Wilmsen, Z. Liliental, D. Fathy et O. L. Krivanek : « Surface roughness at the Si(100)-SiO_2 interface », *Physical Review B*, **32**(12), pp. 8171–8186 (Déc. 1985).

[206] R. C. Iotti et F. Rossi : « Carrier thermalization versus phonon-assisted relaxation in quantum-cascade lasers : A Monte Carlo approach », *Applied Physics Letters*, **78**(19), pp. 2902–2904 (Mai 2001).

[207] S.-C. Lee et I. Galbraith : « Intersubband and intrasubband electronic scattering rates in semiconductor quantum wells », *Physical Review B*, **59**(24), pp. 15796–15805 (Juin 1999).

[208] P. Borowik : *Monte Carlo study of electron transport in highly doped GaAs*, PhD thesis, Warsaw University (Dec. 1998).

[209] M. Fischetti, S. E. Laux et E. Crabbé : « Understanding hot-electron transport in silicon devices : Is there a shortcut ? », *Journal of Applied Physics*, **78**(2), pp. 1058–1087 (Juil. 1995).

[210] M. Moško, A. Mošková et V. Cambel : « Carrier-carrier scattering in photoexcited intrinsic GaAs quantum wells and its effect on femtosecond plasma thermalization », *Physical Review B*, **51**(23), pp. 16860–16866 (Juin 1995).

[211] N. Takenaka, M. Inoue et Y. Inuishi : « Influence of inter-carrier scattering on hot electron distribution function in GaAs », *Journal of the Physical Society of Japan*, **47**(3), pp. 861–868 (Sep. 1979).

[212] K. Hess, B. Tuttle, F. Register et D. K. Ferry : « Magnitude of the threshold energy for hot electron damage in metal–oxide–semiconductor field effect transistors by hydrogen desorption », *Applied Physics Letters*, **75**(20), pp. 3147–3149 (Nov. 1999).

[213] M. Moško et A. Mošková : « Ensemble Monte Carlo simulation of electron-electron scattering : Improvements of conventional methods », *Physical Review B*, **44**(19), pp. 10794–10803 (Nov. 1991).

[214] L. Rota, P. Lugli, T. Elsaesser et J. Shah : « Ultrafast thermalization of photoexcited carriers in polar semiconductors », *Physical Review B*, **47**(8), pp. 4226–4237 (Fev. 1993).

[215] S. M. Goodnick et P. Lugli : « Effect of electron-electron scattering on nonequilibrium transport in quantum-well systems », *Physical Review B*, **37**(5), pp. 2578–2588 (Fev. 1988).

[216] R. Brunetti, C. Jacoboni, A. Matulionis et V. Dienys : « Effect of interparticle collisions on energy relaxation of carriers in semiconductors », *Physica B+C*, **134**(1–3), pp. 369–373 (Nov. 1985).

[217] M. Moško, V. Cambel et A. Mošková : « Electron-electron drag between parallel two-dimensionnal gases », *Physical Review B*, **46**(8), pp. 5012–5015 (Août 1992).

[218] A. Mošková et M. Moško : « Exchange carrier-carrier scattering of photoexcited spin-polarized carriers in GaAs quantum wells : Monte Carlo study », *Physical Review B*, **49**(11), pp. 7443–7452 (Mars 1994).

[219] M. Moško et A. Mošková : « Exchange carrier-carrier scattering of spin-polarized two-dimensional electron-hole plasma : Monte Carlo study », *Semiconductor Science and Technology*, **9**(5S), pp. 478–481 (Mai 1994).

[220] J. H. Collet : « Screening and exchange in the theory of the femtosecond kinetics of the electron-hole plasma », *Physical Review B*, **47**(16), pp. 10279–10291 (Avr. 1993).

[221] D. W. Snoke : « Theory of electron-electron scattering at low density », *Physical Review B*, **47**(20), pp. 13346–13352 (Mai 1993).

[222] D. W. Snoke : « Density dependence of electron scattering at low density », *Physical Review B*, **50**(16), pp. 11583–11591 (Oct. 1994).

[223] S.-C. Lee et I. Galbraith : « Influence of exchange scattering and dynamic screening on electron-electron scattering rates in semiconductor quantum wells », *Physical Review B*, **62**(23), pp. 15327–15330 (Dec. 2000).

[224] K. Kalna et M. Moško : « Electron capture in quantum wells via scattering by electrons, holes and optical phonons », *Physical Review B*, **54**(24), pp. 17730–17737 (Dec. 1996).

[225] H. Ehrenreich et M. H. cohen : « Self-consistent Field Approach to the Many-Electron Problem », *Physical Review*, **115**(4), pp. 786–790 (Août 1959).

[226] E. D. Siggia et P. C. Kwok : « Properties of Electrons in Semiconductor Inversion Layer with Many Occupied Electric Subbands. I. Screening and Impurity Scattering », *Physical Review B*, **2**(4), pp. 1024–1036 (Août 1970).

[227] J. Lee et H. N. Spector : « Dielectric function for a quasi-two-dimensional semiconducting system », *Journal of Applied Physics*, **54**(12), pp. 6989–6994 (Dec. 1983).

[228] J. Lee, H. N. Spector et V. K. Arora : « Impurity scattering limited mobility in a quantum well heterojunction », *Journal of Applied Physics*, **54**(12), pp. 6995–7004 (Dec. 1983).

[229] M. V. Fischetti : « Long-range Coulomb interactions in small Si devices. Part II. Effective electron mobility in thin-oxide structures », *Journal of Applied Physics*, **89**(2), pp. 1232–1250 (Jan. 2001).

[230] F. Stern et W. E. Howard : « Properties of Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit », *Physical Review*, **163**(3), pp. 816–163 (Nov. 1967).

[231] K. Yokoyama et K. Hess : « Monte Carlo study of electronic transport in $Al_{1-x}Ga_xAs$/GaAs single-well heterostructures », *Physical Review B*, **33**(8), pp. 5595–5606 (Avr. 1986).

[232] P. Maldague : « Many-body corrections to the polarizability of the two-dimensionnal electron gas », *Surface Science*, **73**, pp. 296–302 (1978).

[233] F. Stern : « Polarizability of a two-dimensional electron gas », *Physical Review Letters*, **18**(14), pp. 546–548 (Avr. 1967).

[234] M. V. Fischetti et S. E. Laux : « Long-range Coulomb interactions in small Si devices. Part I : Performance and reliability », *Journal of Applied Physics*, **89**(2), pp. 1205–1231 (Jan. 2001).

[235] F. Monsef, P. Dollfus, S. Galdin-Retailleau, H.-J. Herzog et T. Hackbarth : « Electron transport in Si/SiGe modulation-doped heterostructures using Monte Carlo simulation », *Journal of Applied Physics*, **95**(7), pp. 3587–3593 (Avr. 2004).

[236] A. L. Fetter : « Electrodynamics and thermodynamics of a classical electron surface layer », *Physical Review B*, **10**(9), pp. 3739–3745 (Nov. 1974).

[237] W. H. Press : *Numerical recipes in C : the art of scientific computing*, Cambridge University Press, New York (1992), ISBN 0-521-43108-5.

[238] M. Abramowitz et I. Stegun : *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables,* 9ième *édition*, Dover Publications Inc., New York (1972), ISBN 486-61272-4.

[239] S. Rott, K. Schrüfer, C. Metzner, S. Müller, T. Schmidt et G. H. Döhler : « Screening in a δ-doped semiconductor », *Superlattices and Microstructures*, **23**(2), pp. 315–321 (Jan. 1998).

[240] M. Artaki et K. Hess : « Transient and steady-state electron transport in $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ heterojunctions at low temperature : The effects of electron-electron interactions », *Physical Review B*, **37**(6), pp. 2933–2945 (Fev. 1988).

[241] J.-L. Thobel, L. Baudry, F. Dessenne, M. Charef et R. Fauquembergue : « Theoretical investigation of impurity scattering limited mobility in quantum wells : The influence of wave functions modeling », *Journal of Applied Physics*, **73**(1), pp. 233–238 (Jan. 1993).

[242] S. M. Goodnick et P. Lugli : « Subpicosecond dynamics of electron injection into GaAs/AlGaAs quantum wells », *Applied Physics Letters*, **51**(8), pp. 584–586 (Août 1987).

[243] K. Kalna, M. Moško et F. M. Peeters : « Electron capture in GaAs quantum wells via electron-electron and optic phonon scattering », *Applied Physics Letters*, **68**(1), pp. 117–119 (Jan. 1996).

[244] K. Kalna : *Theoretical Study of Carrier Capture into Semiconductor Quantum Wells*, Ph.D. thesis, Institut of Electrical Engineering, Slovakia (Oct. 1997).

[245] R. C. Iotti et F. Rossi : « Microscopic theory of quantum-cascade lasers », *Semiconductor Science and Technology*, **19**(4), pp. 323–326 (Avr. 2004).

[246] R. Kölher, R. C. Iotti, A. Tredicucci et F. Rossi : « Design and simulation of terahertz quantum cascade lasers », *Applied Physics Letters*, **79**(24), pp. 3920–3922 (Dec. 2001).

[247] J. H. Smet, C. G. Fonstad et Q. Hu : « Intrawell and interwell intersubband transitions in multiple quantum wells for far-infrared sources », *Journal of Applied Physics*, **79**(12), pp. 9305–9320 (Juin 1996).

[248] B. Gelmont, V. Gorfinkel et S. Luryi : « Theory of the spectral line shape and gain in quantum wells with intersubband transitions », *Applied Physics Letters*, **68**(16), pp. 2171–2173 (Avr. 1996).

[249] K. Kalna, C. Y. L. Cheung, I. Pierce et K. A. Shore : « Self-consistent analysis of carrier-transport and carrier-capture dynamics in quantum cascade intersubband semiconductor lasers », *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, **48**(4), pp. 609–614 (Avr. 2000).

[250] D. Hofstetter, M. Beck et J. Faist : « Quantum-cascade-laser structures as photodetectors », *Applied Physics Letters*, **81**(15), pp. 2683–2685 (Oct. 2002).

[251] M. Graf, G. Scalari, D. Hofstetter, J. Faist, H. Beere, E. Linfield, D. Ritchie et G. Davies : « Terahertz range quantum well infrared photodetector », *Applied Physics Letters*, **84**(4), pp. 475–477 (Jan. 2004).

[252] W. Yen : *Étude des phénomènes de transport dans les gaz d'électrons à deux dimensions dans les hétérojonctions par la méthode de Monte Carlo*, Thèse de doctorat, Université de Lille 1 (Nov. 1988).

[253] B. K. Ridley : « The electron-phonon interaction in quas-two-dimensionnal semiconductor quantum-well structures », *Journal of Physics C : Solid state Physics*, **15**(28), pp. 5899–5917 (Oct. 1982).

[254] K. Kalna, C. Y. L. Cheung et K. A. Shore : « Electron transport process in quantum cascade intersubband semiconductor lasers », *Journal of Applied Physics*, **89**(4), pp. 2001–2005 (Fev. 2001).

[255] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë : *Mécanique quantique, Vols. I et II*, John Wiley, New York (1977), ISBN 2-7056-6074-7 (vol. I) et 2-7056-6121-2 (vol. II).

[256] L. Couture et R. Zitoun : *Physique statistique*, Ellipses, Paris (1992), ISBN 2-7298-9262-1.

[257] A. Abramo, R. Brunetti, C. Jacoboni, F. Venturi et E. Sangiorgi : « A multiband Monte Carlo approach to Coulomb interaction for device analysis », *Journal of Applied Physics*, **76**(10), pp. 5786–5794 (Nov. 1994).

[258] M. V. Fischetti et S. E. Laux : « Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band–structure and space–charge effects », *Physical Review B*, **38**(14), pp. 9721–9745 (Nov. 1988).

RÉSUMÉ

Les sources optiques appelées *lasers à cascade quantique* (LCQ) présentent des potentialités très intéressantes pour l'émission en infrarouge et, tout particulièrement, aux fréquences térahertz. Ces dispositifs, qui utilisent à la fois des phénomènes quantiques et optiques, suscitent actuellement une intense activité de recherche. Ce travail vise à mieux comprendre les phénomènes physiques à l'origine du transport quantique dans les LCQ. Dans ce but, nous avons utilisé la simulation Monte Carlo qui permet à la fois d'étudier les effets miscroscopiques et de déterminer les performances des composants. Le mémoire est divisé en trois parties.

Dans une première partie, nous présentons les différentes sources optoélectroniques émettant dans l'infrarouge. Nous détaillons en particulier le principe de fonctionnement des LCQ et leurs performances dans la gamme des fréquences térahertz. Nous précisons le formalisme de l'équation Maîtresse que nous avons adopté pour modéliser le transport quantique dans ces dispositifs.

La deuxième partie est consacrée à la présentation du modèle théorique adapté au transport inter-sous–bandes dans les LCQ. L'inclusion de l'interaction coulombiennne électron–électron dans le simulateur est présentée. À l'aide d'un algorithme numérique, nous optimisons la phase de calcul des éléments de matrice de l'interaction électron–électron. Ensuite, nous développons un modèle complet de l'interaction inter–porteurs, en tenant compte des phénomènes d'écrantage dans un cadre multi-sous–bandes.

Dans la troisième partie, nous examinons des LCQ émettant en infrarouge moyen et lointain. Il ressort de nos études que l'interaction électron–électron joue un rôle prépondérant dans la dynamique des LCQ aux fréquences térahertz. Nous envisageons ensuite deux voies afin de diminuer la fréquence jusqu'à 1 THz, en utilisant le concept de dépopulation par résonance de phonon. Dans cette gamme de fréquences, nos résultats montrent que l'interaction électron–électron est un des mécanismes non–radiatifs qui influencent le plus les performances.

MOTS CLEFS :

TRANSPORT QUANTIQUE
INTERACTION ÉLECTRON–ÉLECTRON
LASERS À CASCADE QUANTIQUE
SIMULATION MONTE CARLO
ÉCRANTAGE
TÉRAHERTZ