



HAL
open science

Du phénomène quantique au dispositif macroscopique, transport électronique dans les détecteurs inter-sousbandes.

Alexandre Delga

► **To cite this version:**

Alexandre Delga. Du phénomène quantique au dispositif macroscopique, transport électronique dans les détecteurs inter-sousbandes.. Electronique. Université Paris-Diderot - Paris VII, 2012. Français. NNT: . tel-00769454v1

HAL Id: tel-00769454

<https://theses.hal.science/tel-00769454v1>

Submitted on 1 Jan 2013 (v1), last revised 2 Jan 2013 (v2)

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 PARIS SORBONNE CITÉ

THÈSE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR de l'Université Paris Diderot

Spécialité : **Physique**

préparée au laboratoire **Matériaux et Phénomènes Quantiques**

dans le cadre de l'École Doctorale **Physique de la région parisienne**

présentée et soutenue publiquement

par

Alexandre Delga

le 19 Décembre 2012

Titre:

**Du phénomène quantique au dispositif macroscopique,
transport électronique dans les détecteurs inter-sousbandes**

Directeur de thèse: **Vincent Berger**

Encadrants de thèse: **Mathieu Carras, Laetitia Doyennette, Virginie Trinité**

Jury

Pr. Emmanuel Rosencher,	Président du jury
Pr. Philippe Christol,	Rapporteur
Dr. Jean-Yves Duboz,	Rapporteur
Dr. Angela Vasanelli,	Examinatrice
Dr. Robson Ferreira,	Examineur
Pr. Vincent Berger,	Directeur de thèse
Dr. Mathieu Carras,	Encadrant de thèse
Dr. Laetitia Doyennette,	Invitée
Dr. Virginie Trinité,	Invitée

Remerciements

Cette thèse est comme un léviathan, elle a mille visages. Je voudrais rendre ici hommage tous ceux qui l'ont rendue possible et ont contribué à la faire aboutir.

Merci aux membres de mon jury d'avoir accepté de juger ce travail, et de l'avoir fait avec une telle attention. Au Professeur Rosencher, pour avoir allumé la flamme du dispositif chez l'élève Delga, par votre enthousiasme et votre dynamisme. A Jean-Yves Duboz, pour la rigueur et la précision de votre lecture de ces travaux. A Philippe Christol, car notre discussion à QSIP m'a permis de beaucoup avancer dans ma réflexion sur le bruit. A Angela Vasanelli, pour avoir toujours pris le temps de discuter et de répondre à des questions parfois évidentes. A Robson Ferreira, pour m'avoir rendu plus intelligible la magie de l'effet Purcell.

Un immense merci au quatuor de mes encadrants pour avoir, chacun dans sa tessiture, emmené ces travaux. A Vincent, la basse, pour avoir tissé la toile de fond sur laquelle je me suis appuyé. Tes questions, trop rares à mon goût, ont été un véritable aiguillon pour mon travail. Si seulement nous avions pu interagir plus... A Mathieu, le ténor, dont l'énergie m'a si souvent redonné la foi. J'aime discuter de science avec toi, parce que ça fuse, c'est vrai, c'est faux, c'est novateur. Et à chaque fois que j'en sors, je suis épuisé, mais je tiens une idée simple et belle. Merci parce que cette maxime de vie te va encore mieux qu'à moi : noyer la qualité des blagues sous la quantité. Pour Virginie, l'alto, les mercis sont très nombreux : pour ton caractère entier, ta passion, ta curiosité, ton dévouement, ta culture. Travailler avec toi est une chance rare. Il y a équivalence entre un raisonnement juste et un raisonnement *Virginie approved*©. A Laetitia enfin, la soprano. De tout ce que tu as fais pour moi, je retiendrai deux choses. Merci de m'avoir si bien enseigné la rigueur. Les longues négociations ont porté leur fruit : j'ai maintenant une petite voix dans la tête qui demande toujours si le discours s'enchaîne bien. Merci aussi d'avoir été un tensio-actif si efficace pour abaisser l'énergie de surface entre moi et le monde administratif, et de t'être battue bec et ongles pour ma cause parfois perdue.

Merci à l'ensemble du laboratoire MPQ pour son accueil. J'ai pu y travailler dans un environnement scientifique et humain à la fois riche, dynamique et varié. En particulier merci à Carlo Sirtori et Sylvie Rousset, à Anne Servouze (la garantie AAA du labo), à Joëlle et Jocelyne, à Patrick et Martial. Merci aux permanents de l'équipe DON, Giuseppe, Ivan et Sara (ce fut un plaisir d'enseigner avec toi). Le III-V Lab a été un second laboratoire d'accueil très chaleureux. Un grand merci à Philippe Bois, Eric Costard, Bruno Gérard et Dominique Pons, qui ont contribué à construire le pont entre les mondes universitaire et industriel qu'il ma été très fructueux d'arpenter.

Je tiens à rendre la paternité scientifique qui leur est due, ainsi que mes remerciements sincères, à toutes les personnes avec qui j'ai collaboré. Merci à Louis-Anne

de Vaultier et François-Régis Jasnot. Merci à Alexandre Nedelcu, Vincent Gériaux, Olivier le Guilcher et Arnaud Bérurier. Merci H.C Liu. Un merci particulier à Harald Schneider, l'homme qui ne donne jamais son avis mais dont les questions sont si judicieusement choisies et porteuses de sens.

Sur les épaules d'un géant. Merci à tous mes prédécesseurs, dont les expériences transmises oralement ou par manuscrit interposé ont été très nourrissantes : Vincent, Emmanuel, Amandine, Aurore, Thomas. Merci aux stagiaires que j'ai pu accompagner. J'ai aussi beaucoup appris d'eux, en même temps que je les exploitais : Abdel, Manuel, Giovanni, Serigne.

On les appellera comme on voudra, compagnons d'infortunes ou complices dans le crime. Merci aux habitants de notre thésarium pour tous ces moments de galère et de joies partagées. Aux trois mousquetaires d'abord, Marc, Chris et David, la liste des raisons serait trop longue. J'espère que nous nous reverrons. A Adeline, il n'y a pas que Tim Burton comme bon cinéaste de moins de 50 ans. A Alessio, essaye de manger un peu. A Silvia, je te paye un café à Madrid. A Greg, café à 6h. A Mael, calme toi. Aux anciens, Xavier, Erwan, Alberto. Aux nouveaux, Cécile, Guillaume et Julien, bon courage.

Merci à Cosette, pour l'appel de la forêt.

Merci à mes parents, pour tout.

Merci à mes amis, pour le reste.

Merci à Anne Laure.

Organisation du manuscrit

L'objet de ce travail de thèse est l'étude du transport électronique dans les détecteurs inter-sousbandes pour les grandes longueurs d'onde, en particulier les détecteurs à cascade quantique (QCD) dans la gamme spectrale de l'infrarouge. Un effort particulier est déployé pour identifier, contextualiser et articuler l'ensemble des échelles spatiales et temporelles qui régissent la physique de ces composants et interviennent dans la compréhension du transport.

Le chapitre 1 pose le contexte applicatif, technologique et physique dans lequel s'inscrit ce travail.

Le changement d'échelle au coeur du chapitre 2 est l'articulation, en fonction de la température, des régimes cohérent et diffusif du transport électronique dans un QCD opérant à $15 \mu\text{m}$. Les limites des modèles de hopping Wannier-Stark et de tunnel séquentiel sont analysées en profondeur, faisant émerger la nécessité d'un modèle hybride. Ce dernier permet de calculer *a priori* les grandeurs liées au signal dans les QCDs (courant d'obscurité et réponse), avec une précision quantitative.

Le chapitre 3 est consacré à l'étude d'une transition de phase hors équilibre dans des QWIPs THz, caractérisée par des discontinuités de résistivité qui atteignent cinq ordres de grandeur. L'approche par la loi \mathcal{D} de discontinuité introduit une échelle intermédiaire entre les phénomènes microscopiques d'ionisation par impact inter-sousbandes, et les figures d'hystérésis dans les mesures I-V macroscopiques. Elle pose un regard éclairant sur les effets de charges d'espace à l'origine de l'ampleur du changement de régime de transport. Les limitations de la démarche sont analysées et une interprétation complémentaire en termes de filamentation est proposée.

Le chapitre 4 est consacré à la compréhension du bruit dans les détecteurs inter-sousbandes. Il souligne les confusions d'échelle qui obscurcissent l'analyse de cette quantité fondamentale pour les composants. Deux modèles rigoureux sont proposés et permettent de calculer *a priori* le bruit avec une précision quantitative, pour la première fois dans les structures à puits quantiques. Les contributions thermique et grenaille, usuellement considérées comme des sources indépendantes de bruit, sont unifiées au sein d'une vision simple.

Le chapitre 5 discute des potentialités de la technologie QCD. L'exploitation d'un modèle décrivant l'ensemble du transport QCD permet de dessiner des composants dont les performances devraient doubler l'état de l'art. On introduit l'approche du QCD idéal qui permet de cerner dès l'amont le potentiel de cette filière pour l'imagerie. La pertinence du QCD pour les applications de long temps d'intégration par rapport aux QWIPs est justifiée quantitativement. Une discussion montre en quoi le QCD est un candidat particulièrement prometteur pour des cellules de spectroscopie intégrées, ou encore en interactions avec des systèmes plasmoniques.

Avant propos

L'homme est un infirme, prisonnier de ses dimensions. Sa noblesse est d'avoir admis son infirmité et d'être parfois pareil à un paralytique rêvant qu'il court. Notre prison n'a que trois murs et c'est contre le quatrième mur que le prisonnier s'acharne, sur ce quatrième mur invisible qu'il écrit ses amours et ses rêves.

Jean Cocteau

Qui a déjà essayé d'expliquer le paradoxe du chat de Schrödinger à un non initié mesure à quel point l'homme est prisonnier de sa dimension spatiale. La noblesse de la physique réside dans sa faculté à décrire les phénomènes à des échelles très différentes, depuis le vertige quantique jusqu'à l'expansion des galaxies. Elle nous rend le monde intelligible au delà des limites de notre intuition sensible, grâce au langage mathématique. Je me souviens comme d'une révélation du cours où j'ai découvert le formalisme de Dirac et les espaces de Hilbert.

Etre capable d'appréhender des échelles spatiales et temporelles très différentes de l'expérience sensible permet un contrôle accru sur le réel. Feynman, dans son discours de 1959 "There is plenty of room at the bottom", prophétisait que l'exploitation des phénomènes à l'échelle microscopique allait bouleverser la technologie. Depuis la démonstration des premiers super-réseaux par Esaki dans les années 70 [1], l'utilisation du confinement optique, électronique ou mécanique à l'échelle atomique a donné naissance à de nombreux dispositifs quantiques qui ont révolutionné notre quotidien : diodes laser, MEMS...

C'est sur ce mur invisible de l'infiniment petit que j'ai choisi d'écrire mes rêves. Je me suis donc lancé dans une thèse sur le transport électronique pour la photodétection infrarouge et THz grâce aux structures à puits quantiques, sous la direction de Vincent Berger au laboratoire Matériaux et Phénomènes Quantiques de l'Université Paris Diderot ¹.

La plus grande difficulté de ces trois années de travail fut d'interroger l'évidence, de remettre en perspective les présupposés qui abondent dans ce sujet déjà très mature. Par exemple, les états renvoyés par la résolution de l'équation de Schrödinger sont une base qui donnent une vision déjà très biaisée du transport. Ou encore, le bruit thermique n'a finalement pas beaucoup d'autre sens physique que sa formulation par le théorème de Nyquist. J'y ai développé une certaine défiance pour

1. Cela, et un certain pragmatisme selon lequel ce type de recherche à potentielle retombée industrielle trouvera toujours financeur, même en ces temps de disette budgétaire. Désolé pour les autres...

la formule mathématique et l'emploi de formalismes, qui souvent formatent l'esprit plutôt qu'ils ne nourrissent l'intuition physique.

Ce manuscrit est destiné à quelqu'un qui débiterait une thèse. L'accent est mis sur la discussion physique et la remise en contexte des modèles et des savoirs. Les introductions sont longues, et le lecteur ne trouvera souvent ma contribution effective que dans les dernières sections des chapitres. La logique est celle de l'allusion : dans cet effort de recontextualisation, je ne peux tout détailler, mais me contente souvent de citer, sans forcément l'expliquer, l'argument principal du raisonnement en cours. Le soin est laissé au lecteur d'approfondir le cas échéant. Ce manuscrit veut ressembler à une table d'orientation.

La faculté de recul et la capacité d'orientation sont en effet les qualités que je place en plus haute estime chez un scientifique, en particulier physicien. L'histoire de ce doctorat montre clairement le chemin qu'il me reste à parcourir dans cette direction. La première année et demie a été consacrée à l'étude de la transition de phase dans les QWIPs THz (chapitre 3), qui finalement occupe très peu de pages de ce manuscrit. Dans le cadre de cette étude, je me suis jeté, un peu à corps perdu et sourd aux réserves de mes encadrants, dans la démonstration d'une idée séduisante qui m'était venue pour expliquer ce phénomène. Ma négligence de la littérature et des alternatives scientifiques m'a empêché de sortir à temps de ce qui allait devenir une impasse. Fort de cette leçon, et dans l'attente d'échantillons qui pourraient étayer ou invalider mon hypothèse, je me suis consacré aux QCDs, et notamment à la compréhension du bruit (chapitre 4), et des phénomènes de transport cohérent (chapitre 2). Avec la volonté de changer ma méthodologie.

Pour finir, la faible représentation de la composante expérimentale dans cet ouvrage a deux explications. Premièrement, un certain déficit d'approvisionnement en échantillons a fait que j'ai dû créer du savoir à partir des dispositifs existants (qui pour les QCDs et les QWIP THz ne sont pas forcément abondants). Deuxièmement, le montage d'un banc complet de caractérisation à Paris Diderot au cours de ma première année, ne comporte pas d'originalité particulière si ce n'est un travail certain sur la réduction du bruit. D'autres l'ont présenté mieux que moi.²

2. Une seule leçon : qui veut faire des mesures électriques fines n'utilise pas de cryostat en circuit fermé d'Hélium sans dispositif d'atténuation des vibrations.

Table des matières

Remerciements	iii
Organisation du manuscrit	v
Avant propos	vii
Table des matières	ix
1 Détection et Imagerie Infrarouge	1
1 L'infrarouge	1
1.1 Rayonnement du corps noir	1
1.2 Thermographie	4
1.3 Autres applications	5
2 Système de détection infrarouge	6
2.1 Système d'imagerie	6
2.2 Hybride	7
2.3 Couches actives	8
3 Filières technologiques	11
3.1 Détecteurs thermiques	11
3.2 Détecteurs quantiques	11
3.3 Bilan et perspectives	14
4 Physique des détecteurs intrabandes	15
4.1 Transition optique dans les puits quantiques	15
4.2 QWIP	18
4.3 QCD	19
4.4 QDIPs	23
5 Bilan : du phénomène quantique au dispositif macroscopique	24
2 Transport électronique dans les détecteurs à puits quantiques	27
1 Caractère multi-échelle du transport	27
1.1 Longueurs caractéristiques	28
1.2 Hiérarchie des modèles de transport	29
1.3 Vision lagrangienne et vision eulerienne	33
2 Choix du modèle de transport dans les structures à puits quantiques .	34
2.1 Hamiltonien du problème	34
2.2 Bases quantiques et visions du transport	37
2.3 Processus diffusifs	42
3 Courant et réponse QCD	45
3.1 Hopping Wannier-Stark pour le courant	47
3.2 Hopping Wannier-Stark pour la réponse	58
3.3 Du tunnel séquentiel au modèle hybride	63

4	Bilan	71
4.1	Approximations et présupposés de la modélisation du transport	71
4.2	Résultats pour le modèle hybride	72
4.3	Vers la matrice densité	73
3	Transition de phase dans les QWIPs THz	75
1	Système de détection THz à très fort gain	75
1.1	Contexte	75
1.2	Mise en évidence expérimentale d'une transition métal-isolant dans les QWIPs THz	76
1.3	Interprétation par l'ionisation par impact inter-sousbandes	78
1.4	La loi de discontinuité $\mathcal{D}(F)$, une échelle intermédiaire micro-macro	79
2	Ajuster la loi $\mathcal{D}(F)$: effets de charges d'espace	81
2.1	Modèle du contact d'injection	81
2.2	Optimisation sur un QWIP THz @ 30 μm	82
3	Ionisation par impact pour calculer la loi $\mathcal{D}(F)$	84
4	Discussion	87
4.1	Argument qualitatif en faveur de l'ionisation par impact inter-sousbandes	88
4.2	Limitations de la démarche	90
4.3	Interprétations alternatives	91
5	Bilan	92
5.1	Résultats	92
5.2	Perspectives	93
4	Bruit électronique dans les détecteurs inter-sousbandes	95
1	Sources de bruit en physique du solide	96
1.1	Bruit thermique	97
1.2	Bruit de grenaille	101
1.3	Autres types de bruit	102
2	Etat de l'art dans les détecteurs inter-sousbandes	104
2.1	Historique : élaboration du modèle QWIP	104
2.2	Le poids de l'Histoire : limitations du modèle QWIP	107
3	Doit-on additionner bruits thermique et grenaille ?	110
3.1	Cas général	111
3.2	Dans les dispositifs inter-sousbandes	112
3.3	Du cahier de doléances au cahier des charges	113
4	Equation Maître et Théorème de Ramo-Schokley	114
4.1	Théorie	114
4.2	Comparaison avec l'expérience	124
4.3	Effet des corrélations	130
5	Circuit électrique équivalent	133
5.1	Théorie	133
5.2	Application aux QCDs	136
5.3	QWIPs : retour sur le gain de bruit	143
6	Bilan	146
6.1	Méthodologie	146

6.2	Résultats pour les détecteurs inter-sousbandes	147
6.3	Perspectives	149
5	Perspectives pour la filière QCD	153
1	Nouveau paradigme pour le dessin des QCDs	154
1.1	Idée du dessin	154
1.2	Résultats	155
2	QCD idéal pour l'imagerie, un outil décisionnel	157
2.1	Approche théorique	158
2.2	Implémentation numérique	161
2.3	Règles de dessin QCD	164
2.4	Prospectives d'applications	171
3	Nouvelles fonctionnalités pour le QCDs	174
3.1	QCDs pour la spectroscopie	175
3.2	Plasmonique et QCDs pour l'infrarouge	181
4	Bilan : QCD vs QWIPs	183
	Conclusion	187
	Bibliographie	189
	Annexes	207
A	Choix de la statistique électronique	207
B	Dérivation de la loi $F_0(i)$	208
C	Calcul des corrélateurs de l'équation maîtresse	210
D	QCD idéal : paramètres de couplage optique	211
E	Liste des publications	212
E.1	Journaux à comités de lectures	212
E.2	Conférences	213

Chapitre 1

Détection et Imagerie Infrarouge

La vision est l'art de voir les choses invisibles
Johnatan Swift

1 L'infrarouge

L'oeil humain n'est sensible qu'à une infime partie du rayonnement électromagnétique (cf figure 1.1). En effet la rétine réagit uniquement aux ondes dont la fréquence est comprise entre 400 et 800 nm. Le maximum d'émission du Soleil et la transparence atmosphérique parfaite dans la bande du visible expliquent pourquoi l'évolution a majoritairement sélectionné les êtres vivants dotés de photorécepteurs sensibles à ces longueurs d'ondes. Il est cependant regrettable que la Nature ait doté l'Homme d'une acceptation spectrale aussi réduite.

Voir une même scène dans des gammes spectrales différentes, c'est la voir chaque fois avec des yeux nouveaux, et accéder à chaque fois à de nouvelles informations. Regarder un visage grâce aux seuls bâtonnets de la rétine donne une image en niveaux de gris, où l'on distingue les formes et les contours de la surface. En allumant les cônes, les subtilités de la couleur enrichissent considérablement l'image. C'est ce paradigme qui motive le développement de sources et de détecteurs couvrant l'intégralité du spectre électromagnétique. L'exemple d'application le plus connu est la radiographie : en captant les rayons X, c'est alors la morphologie interne du squelette qui apparaît.

Dans cette perspective, que voit-on spécifiquement dans l'infrarouge ? Et quel infrarouge ?

1.1 Rayonnement du corps noir

Le rayonnement infrarouge fut découvert en 1800 par Sir Frederick William Herschel, un astronome anglais. Voulant quantifier la chaleur propre portée par les couleurs du spectre solaire, qu'il avait dispersées au moyen d'un prisme, il constata que la température la plus élevée était atteinte au delà de la zone de lumière visible, du côté du rouge. Il en conclut l'existence d'une lumière invisible porteuse de chaleur [2].

Le lien entre lumière et chaleur est contenu dans la théorie du corps noir. Cet objet physique idéal introduit par Gustav Kirchhoff en 1860 a la propriété d'absorber

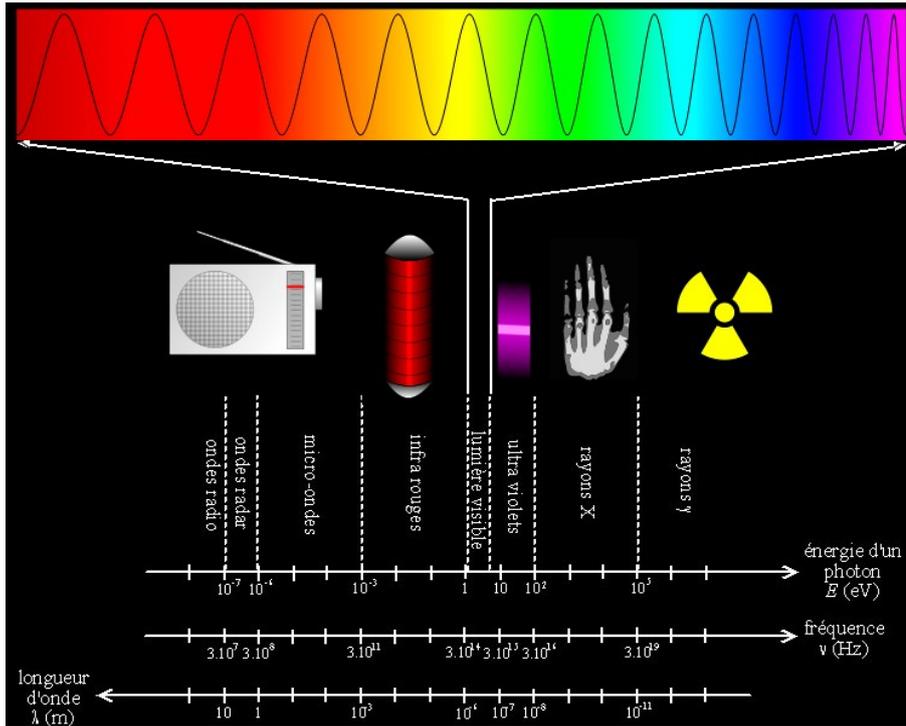


FIGURE 1.1 – Spectre électro-magnétique, divisé en six grandes catégories par énergie décroissante : les rayons Gamma, les rayons X, l’ultraviolet, le visible, l’infrarouge et les ondes radiométriques. L’infrarouge couvre le domaine de longueurs d’ondes s’étendant de 750 nm à 1 mm.

l’intégralité de la lumière incidente [3]. A l’équilibre thermodynamique, sous l’effet de la redistribution de l’entropie, il émet alors spontanément une lumière dont le spectre continu en fréquence ne dépend que de la température. L’interprétation théorique de ce spectre et l’explication de l’effet photo-électrique conduisirent au développement de la physique quantique.

En effet, au début du XXe siècle, Lord Rayleigh et Sir Jeans montrèrent que l’énergie portée par le spectre du corps noir telle que prédite par la théorie classique divergeait pour les hautes fréquences¹. Cette "catastrophe ultra-violette" fut résolue par Max Planck² en introduisant la quantification de la lumière [4–6]. Chaque mode ne pouvant porter qu’un nombre entier de photons, la statistique de peuplement des modes devient bosonique et la divergence disparaît. La loi de Planck d’émission du corps noir (dans le vide) s’écrit

$$B_\nu(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{e^{h\nu/(k_B T)} - 1} \quad \text{en } W.m^{-2}.sr^{-1}.Hz^{-1} \quad (1.1)$$

$$B_\lambda(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/(\lambda k_B T)} - 1} \quad \text{en } W.m^{-2}.sr^{-1}.m^{-1} \quad (1.2)$$

1. L’argument physique est simple. On considère tous les modes électromagnétiques admis par une cavité cubique représentant un corps noir. Le théorème d’équipartition stipule que chaque mode porte une énergie distribuée selon la statistique classique de Boltzmann, qui vaut en moyenne $k_B T$. Dès lors, l’énergie diverge à haute fréquence.

2. Qui, ne croyant pas au théorème d’équipartition, ne se souciait guère de cette divergence !

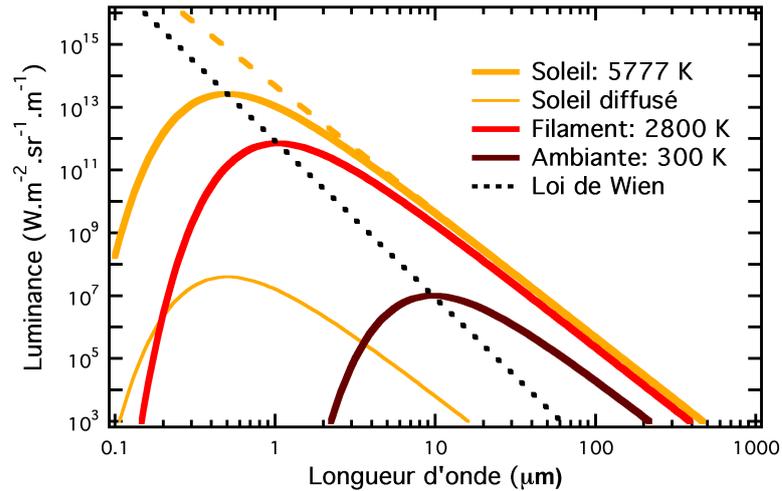


FIGURE 1.2 – Loi de Planck pour le rayonnement du corps noir, pour différentes températures de surface. 5777 K correspond à la température de la surface du soleil, 2800 K à celle du filament d’une ampoule incandescente, et 300K à la température ambiante. La loi de Rayleigh-Jeans est montrée en tirets jaunes pour le soleil. La courbe "soleil diffusé" correspond à la luminance des objets terrestres par diffusion de la lumière du jour.

où B est la luminance énergétique monochromatique, *ie* le flux d’énergie par unité de surface émettrice, d’angle solide d’émission pour une fréquence (longueur d’onde) donnée. L’émission est homogène et isotrope, la lumière est incohérente et non polarisée. Cette loi est illustrée sur la figure 1.2 pour plusieurs température du corps noir. Notons que les courbes ne se croisent jamais. Pour une longueur d’onde donnée c’est le corps noir le plus chaud qui émettra le plus.

Deux lois se déduisent de la loi de Planck. La loi de Stefan donne la puissance totale émise dans un demi-espace par le corps noir $M = \sigma T^4$ avec σ la constante de Stefan $\sigma = \frac{2\pi^5 k_B^4}{15c^2 h^3} = 5.67 \times 10^{-8} W.m^{-2}.K^{-4}$. La loi du déplacement de Wien positionne le maximum de luminance en fonction de la température $\lambda_{max} = 2898/T$, avec λ_{max} en μm . Ces deux lois ont été introduite empiriquement en 1879 et 1896 respectivement [7,8], avant la formulation générale de Planck.

Dans la nature il n’existe pas de corps noir³. L’absorption n’est jamais totale pour toutes les longueurs d’ondes et angles d’incidence. Il y a toujours en pratique de la lumière réfléchiée, et parfois transmise. De plus, la surface des objets réels n’émet jamais aussi bien que la théorie du corps noir le prédit. Ce rapport à l’idéalité est appelé émissivité, et varie selon les matériaux, les états de surface, et la longueur d’onde considérée. Une bonne absorption est liée à une bonne émissivité, à l’inverse un matériau réfléchissant ou transparent a une émissivité faible.

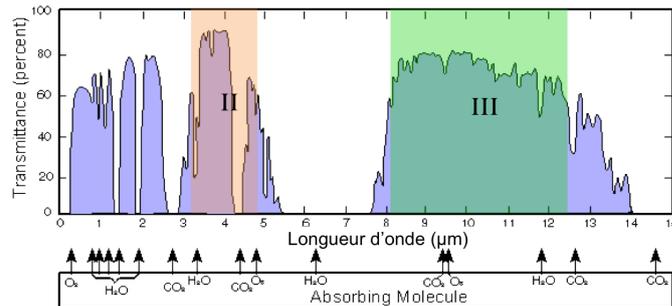


FIGURE 1.3 – Transmission de l’atmosphère dans l’infrarouge, et position des raies d’absorption de ses molécules consécutives.

1.2 Thermographie

Tous les corps qui nous entourent diffusent et réfléchissent la lumière visible. Ils sont en revanche des sources primaires qui émettent leur propre lumière dans l’infrarouge : le maximum de luminance se situe vers $10 \mu m$. La figure 1.2 montre que la luminance émanant des corps à température ambiante est même dominée par le rayonnement primaire à partir de $3 \mu m$. En négligeant la lumière diffusée, le contraste lumineux est une image directe de la différence de température entre les objets de la scène⁴. On voit la chaleur des corps. L’homogénéité des températures de surface des objets qui nous entourent implique que dans l’imagerie infrarouge, le signal est porté par une faible variation qui vient se surimposer à un fond lumineux. Le contraste ne varie plus entre 0 et 100% comme dans le visible, mais plutôt entre 95 et 100%. La situation est analogue à l’imagerie dans le visible des taches à la surface du soleil.

Une fois le signal optique généré, il doit pouvoir se propager jusqu’au récepteur. Or nombre de molécules constitutives de l’atmosphère terrestre (principalement l’eau et le CO_2) présentent des raies d’absorption dans l’infrarouge. L’imagerie thermique n’est possible qu’à l’intérieur des bandes de transmission de l’atmosphère montrées sur la figure 1.3. Leur nomenclature varie selon les communautés (cf table 1.1) ; les principales bandes utilisées sont la bande II ou MW ($3 - 5 \mu m$) et la bande III ou LW ($8 - 12 \mu m$).

La thermographie a pendant longtemps été l’apanage des militaires. Les intérêts sont multiples : vision nocturne, détection de fantassins, d’engins, guidage missile. Mais le champ des applications est beaucoup plus vaste :

- vision dans de mauvaises conditions atmosphériques (assistance à l’atterrissage des avions)
- détection de défauts sur des chaînes industrielles (point chaud sur des lignes électriques)
- détection de fuites de gaz (grâce à la différence d’émissivité)
- diagnostic non invasif de cancers du sein ou de la peau [10]
- performances énergétiques des bâtiments (identification des fuites thermiques)

3. Quelques objets réels en sont néanmoins une bonne approximation. Les cavités à trou, source expérimentale historique de rayonnement thermique encore utilisées aujourd’hui, les nanotubes de carbone [9], les étoiles. Il a été prédit théoriquement que les trous noirs sont de parfaits corps noirs, l’émission étant due à la radiation d’Hawking.

4. A convoluer avec les différences d’émissivité.

longueur d'onde (μm)	Astronomie	Optronique	
0.8 - 0.9	I	NIR	bande I
1.0 - 1.1	Y	SW	
1.2 - 1.3	J		
1.5 - 1.8	H		
2.0 - 2.4	J		
3.0 - 4.2	L	MW	bande II
4.5 - 5.0	M		
7.5 - 14.0	N	LW	bande III
16.5 - 25.0	Q	VLW	

TABLE 1.1 – Nomenclature des différentes fenêtres de transmission atmosphérique. Dans la nomenclature optronique, les bandes correspondent à Near InfraRed, Short Wave (InfraRed), Mid Wave (InfraRed), Long Wave (InfraRed) et Very Long Wave (InfraRed).

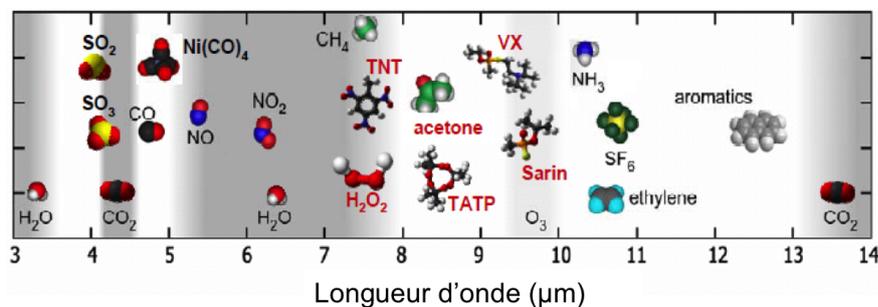


FIGURE 1.4 – Molécules présentant des signatures spectroscopiques dans l'infrarouge.

1.3 Autres applications

L'imagerie IR est aussi exploitée pour des applications spatiales. Stratégiquement, la reconnaissance de missiles balistiques en VLW embarqué sur satellites nécessite d'imager des scènes à des températures de l'ordre de 50 K [11]. En astronomie, les missions Darwin [12] et METIS [13] de l'ESA ont pour but d'identifier des exoplanètes par imagerie directe et coronagraphie. Dans l'infrarouge le rapport entre le rayonnement de la planète et de celui son étoile est de $1/10^5$, configuration très exigeante mais néanmoins bien plus favorable que dans le visible ($1/10^9$).

Une autre application, à mi-chemin entre l'imagerie et la spectroscopie, est l'imagerie hyperfréquence qui permet d'obtenir l'image d'une scène résolue à la fois spatialement et spectralement. Le domaine de la géosurveillance est riche de projets fondés sur cette idée [14, 15]. La forte absorption IR du CO_2 devient alors un avantage dans la perspective d'études environnementales.

La spectroscopie IR est également un domaine très riche, car de très nombreuses molécules présentent des signatures dans ce domaine spectral (cf figure 1.4). La détection de gaz nocifs, de drogues ou d'explosifs présente un potentiel d'applications considérable. La spectroscopie peut se faire localement sur des cellules intégrées, ou bien à distance dans des montages DIAL. La communication en espace libre est aussi un domaine d'application potentiel pour les photo-détecteurs IR.

Cette liste est non exhaustive, et le lecteur intéressé pourra consulter les réfè-

rences [16,17]. Nous reviendrons sur certaines de ces applications dans le chapitre 5. La chaîne optronique est constituée de la source du signal, du milieu de propagation et du système de détection. Les deux premiers éléments ayant été présentés, nous allons caractériser le dernier : le détecteur.

2 Système de détection infrarouge

La science des détecteurs est un domaine particulièrement multi-échelle, multi-paramètres, multi-disciplinaire. Cette partie est dévolue à en présenter les idées forces, avec le souci particulier de mettre en évidence les nombreux critères de mérites permettant d'évaluer les performances des systèmes. La démarche partira du besoin applicatif et des questions d'ingénierie relatives au système complet, pour aboutir au coeur du transducteur et aborder la physique qui lui est propre. Dans un souci de clarté, nous allons supposer que le signal généré par le détecteur est un photocourant. D'autres solutions existent et seront mentionnées plus tard. Afin d'éviter d'introduire trop tôt un formalisme, nous ne présenterons pas de formule dans cette partie. Le lecteur intéressé se reportera au chapitre 5 pour celles relatives au QCD.

2.1 Système d'imagerie

Un système de détection se conçoit dès le départ pour adresser une application donnée. C'est elle qui va fixer le cahier des charges et arbitrer parmi la multitude de facteurs de mérite que nous allons introduire. En particulier elle impose deux paramètres : la **bande spectrale d'imagerie** (position et largeur), ainsi que la fréquence de rafraîchissement des images qui nous allons le voir définit le **temps d'intégration** τ_{int} **maximal**. Par exemple on peut considérer le scénario suivant : imagerie vidéo (25 images par seconde) à $8.5 \mu m$ d'une scène à température ambiante avec des points chauds (entre 293 K et 343 K). L'utilisateur qui cherche à obtenir une image sera sensible aux critères suivants :

- **Coût** : Le coût de fabrication unitaire et le rendement de la chaîne de production découlent directement de la maturité de la technologie, de sa simplicité et de la reproductibilité du process industriel.
- **Consommation** : Elle contrôle le coût de fonctionnement, et est notamment critique dans les applications spatiales où la ressource énergétique est limitée.
- **NETD** : "noise equivalent temperature difference", acronyme anglais désignant la plus petite différence de température détectable par le système dans ce scénario. C'est le rapport entre le bruit du système et sa réponse. Une variation de température de la scène inférieure à cette valeur sera noyée dans le bruit. C'est principalement au niveau de ce paramètre qu'on retrouve les effets décrits par la physique du détecteur.
- **Uniformité** : l'ensemble des pixels constitutifs de l'image renvoient-ils un signal similaire quand ils sont soumis à la même excitation ? Ce bruit spatial, à ajouter au bruit de chaque pixel, limite d'autant plus fortement les performances du système que dans l'imagerie infrarouge l'information n'est portée que par environ 5% du signal.
- **Stabilité** : les performances changent-elles au cours du temps ? En particulier pour la vidéo, des dérives et fluctuations basse fréquence nécessitent-elles de ré-

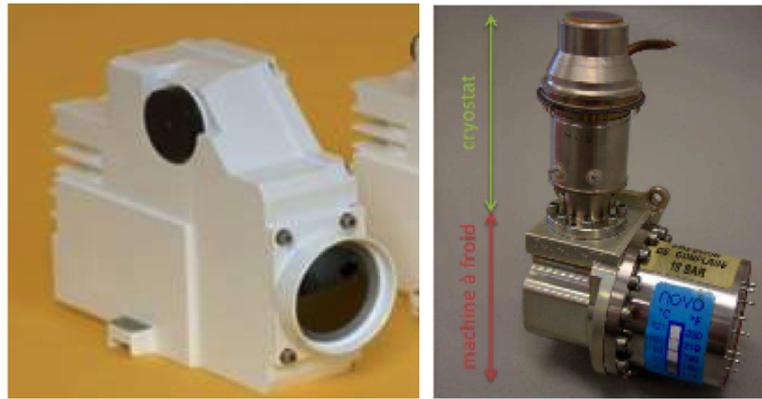


FIGURE 1.5 – Vue du système complet (gauche) et du bloc détecteur (droite) de la caméra catherine XP de Thales R&T.

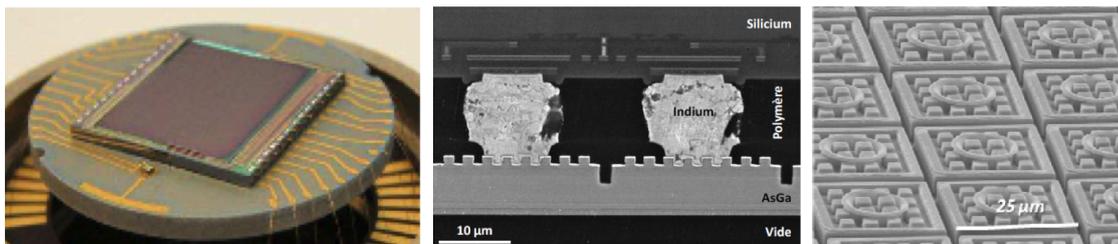
étalonner régulièrement l'imageur ? Cette problématique est particulièrement importante pour les composants bipolaires, pour lesquels une passivation est nécessaire afin d'éviter les divers mécanismes de génération-recombinaison des paires électrons-trous. Elle ne se pose pas pour les composants unipolaires.

- **Robustesse** : en particulier pour les systèmes embarqués dans le spatial, qui subissent de très fortes contraintes mécaniques au décollage et des rayonnements ionisants en altitude.

Une caméra IR est représentée sur la figure 1.5. Elle est composée de quatre éléments fonctionnels principaux : le système optique, le système de refroidissement, l'électronique de traitement et l'hybride composé de la matrice de détecteurs et du circuit de lecture. Les matériaux utilisés pour les optiques dédiées IR [18] sont en général chers et ne couvrent pas l'intégralité du spectre. Le système de refroidissement est le poste principal de consommation énergétique. Augmenter la **température de fonctionnement** T_{op} du détecteur (la plupart des technologies hautes performances fonctionnent à température cryogénique) est un enjeu crucial pour baisser les coûts de fonctionnement, augmenter la robustesse et diminuer le temps de démarrage de la caméra. Pour faciliter le refroidissement on isole thermiquement l'hybride de l'extérieur en le plaçant sous vide, afin diminuer la masse calorifique à refroidir et couper les flux convectifs de chaleur. L'hybride est de plus isolé par un cache à froid réfléchissant destiné à éteindre le rayonnement thermique vers le détecteur : on supprime signal et chaleur parasites. Noter aussi que le refroidissement peut engendrer du bruit, notamment par des effets électro-mécaniques.

2.2 Hybride

L'hybride, montré en figure 1.6, est composé de la matrice de plan focal (ou "focal plane array" FPA), lieu de conversion photon-électron, et du circuit de lecture ("read-out integrated circuit" ROIC). Il fonctionne sur le principe de la caméra CMOS : les photo-électrons générés dans le transducteur viennent charger les capacités de lecture. Le terme hybride provient du fait que le ROIC et le FPA sont issus de technologies différentes : Silicium pour le premier, III-V ou II-VI pour le second. La jonction entre les deux, ou processus d'hybridation, peut se faire au moyen de billes d'indium ou par collage moléculaire.



(a) Vue de la face avant de l'hybride monté sur la céramique d'inter-connection. (b) Vue en coupe de l'hybride. En haut le ROIC en Si, au centre les billes d'In, en bas le plan focal en GaAs/AlGaAs. (c) Vue de dessus du plan focal montrant la couronne d'accueil de la bille d'In et le réseau de diffraction.

FIGURE 1.6 – Vues de l'hybride et de ses éléments constitutifs

Pour le ROIC trois paramètres principaux sont à optimiser. Le premier paramètre est le bruit du ROIC, qui doit être inférieur à celui du transducteur. Le deuxième est la tension nominale de polarisation qui doit correspondre à un optimum de fonctionnement du détecteur. Le troisième est la capacité de chaque condensateur, qui fixe le temps d'intégration τ_{int} . Ce dernier est une grandeur utile à maximiser, car le rapport signal à bruit est proportionnel à sa racine carrée. τ_{int} est défini comme le minimum de deux limites. La première est atteinte lorsqu'un pixel qui regarde la température maximale de la scène remplit totalement sa capacité de lecture. Intégrer plus longtemps et on sature l'image. Le régime de fonctionnement est dit limité par le système, c'est le cas défavorable. La seconde limite donnée par le taux de rafraîchissement de l'image, et est imposée par l'application. La configuration optimale correspond en général à la jonction de ces deux limites.

La matrice de pixels est obtenue à partir d'un wafer de couches actives par divers procédés technologiques gravure de mesa (ou implantation sélective ionique de contacts, solution dont nous ne parlerons pas). C'est en général à ce niveau que l'uniformité de l'image finale se joue. L'**opérabilité** donne la fraction de pixels dont les performances sont dans un intervalle de confiance autour de la valeur nominale. La matrice est placée dans le plan focal du système optique afin d'y conjuguer l'image d'un objet. Le "**cross-talk**" évalue dans quelle mesure un photon incident sur un pixel donné va générer un signal électrique dans les pixels-voisins. Ce phénomène est en général quantifié par des mesures de MTF [19] ("modulation transfer function", méthode qui peut en fait être utilisée à tous les étages de la chaîne de détection). Il faut le réduire dans la mesure où il limite la résolution spatiale.

2.3 Couches actives

La zone active (cf Fig. 1.7) constitue le transducteur où s'effectue la transformation du photon en électron. On distingue deux grandes familles de composants [20]. Les photoconducteurs sont des structures dans lesquelles l'application de lumière génère un excédent de porteurs. Sous tension, un photocourant vient s'ajouter au courant d'obscurité. Ces structures peuvent présenter du gain. Les photovoltaïques présentent une asymétrie de champ interne même en l'absence de tension appliquée, qui permet d'extraire les photoporteurs même à tension nulle. L'exemple le plus

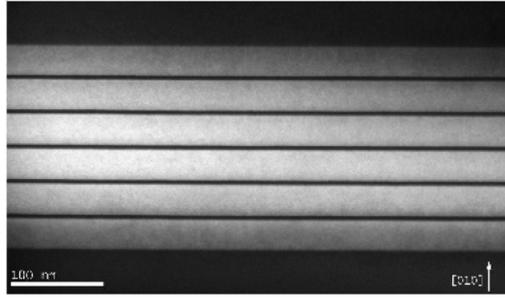


FIGURE 1.7 – Vue TEM des couches actives pour une structure photoconductrice à puits quantiques.

célèbre est la jonction p-n. Cette différence structurelle ne doit pas être confondue avec les différences de mode de fonctionnement : en photovoltage ou en photocourant, en tension nulle ou non nulle. Les grandeurs qui les caractérisent et qu'étudie l'opto-électronicien sont les suivantes⁵ :

- **Courant d'obscurité** I_{dark} : dû à la génération non radiative de paires électron-trou. Il vient remplir les condensateurs du circuit de lecture sans porter de signal, et générer du bruit. C'est son augmentation exponentielle avec la température qui limite en général la température de fonctionnement. Idéalement l'énergie d'activation de ce processus doit être l'énergie de la transition optique. Exprimé en général en $A.cm^{-2}$
- **Absorption** α : nombre de photons absorbés dans la couche active par photon incident, toujours inférieur à 1. Cette définition non usuelle mais plus intuitive pourra être remplacée par les représentations habituelles en cm^{-1} ou s^{-1} .
- **Efficacité quantique** η : plusieurs définitions sont possibles, nous prendrons la plus simple. C'est le nombre de porteurs collectés dans le circuit de lecture par photon incident. Elle décrit la convolution de l'absorption et de la collection des porteurs. Dans les dispositifs à gain, η peut dépasser l'unité⁶.
- **Réponse** R : rapport du photo-courant I_{opt} au flux de photons incidents. Exprimée en $A.W^{-1}$.
- **Bruit** B : généré par la structure. Il peut être limité par les processus d'obscurité ou par les processus optiques. Exprimé en $A.cm^{-1}Hz^{-1/2}$.
- **Température BLIP** T_{BLIP} : ("background limited infrared photodetector") température à partir de laquelle les mécanismes d'obscurité prennent le pas sur les mécanismes optiques et dominant le bruit. En deçà, le bruit est limité par la scène, et diminuer la température du détecteur n'améliore pas significativement les performances. Au delà, le bruit d'obscurité augmente exponentiellement avec la température du détecteur, réduisant d'autant les performances. T_{BLIP} et un bon ordre de grandeur de la température de fonctionnement du système complet.

5. Dès que cela est pertinent, les grandeurs ci-dessous sont à considérer normalisées par la surface.

6. L'explication courante consiste à dire que les photo-porteurs sont réinjectés dans la structure. Ce point de vue me semble très suspect, dans la mesure où le porteur disparaît quand il passe dans le circuit extérieur. Il ne peut *a fortiori* pas voyager à travers tout le circuit pour être réinjecté. Les explications du type appel de courant supplémentaires par modification du champ électrique sont plus crédibles.

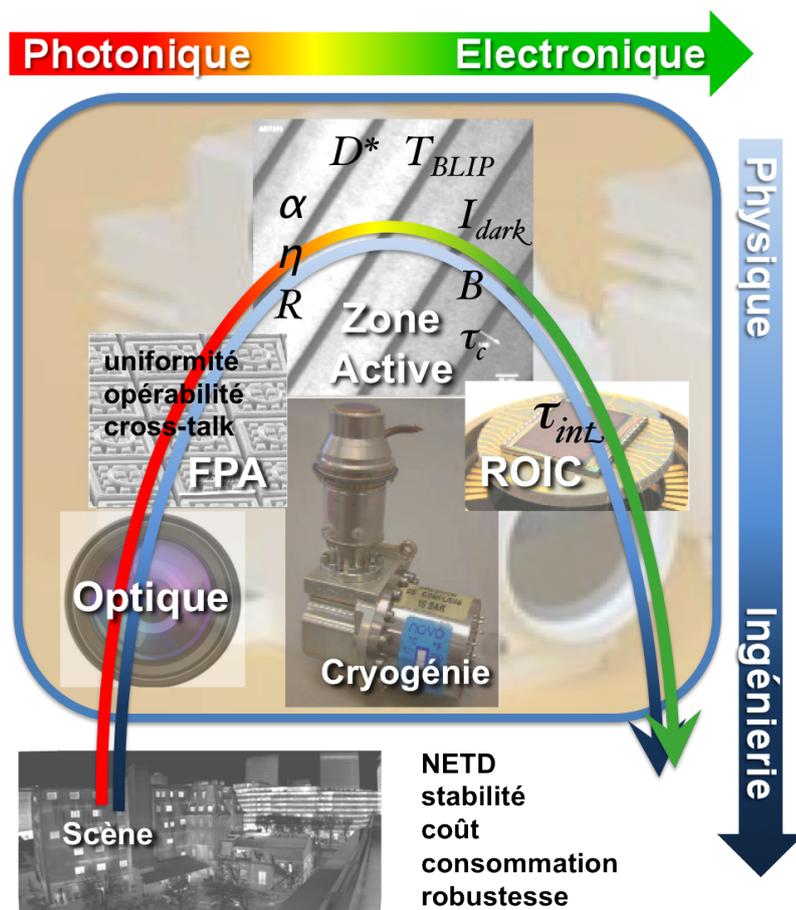


FIGURE 1.8 – Schéma résumé des principales figures de mérite intervenant dans la conception d'un système d'imagerie IR. La double flèche suit le trajet des porteurs de signal, et leur transformation de photons en électrons. Le type de compétences associées et représenté sur les échelles de couleur.

- **Délectivité D^*** : rapport signal à bruit et donc critère principal de performance du détecteur nu. C'est le ratio de la réponse sur le bruit. Elle est exprimée en *Jones* ($cm.Hz^{1/2}.W^{-1}$). Pour maximiser D^* , il s'agit de trouver le meilleur compromis entre la maximisation de la réponse et la minimisation du bruit, *via* un travail sur l'absorption, l'efficacité quantique, ou les mécanismes de transport. Il est néanmoins intéressant de noter que cette figure de mérite ne prend pas en compte le temps d'intégration. En pratique les performances maximales du systèmes complets seront obtenues pour une configuration de compromis différente de celle qui maximise D^* .
- **Temps de réponse τ_c et Saturation** : ces grandeurs ne sont pas forcément pertinentes en imagerie. Cependant, la fréquence de coupure que peut atteindre un détecteur (en général limitée par le temps d'extraction des photo-porteurs), et donc sa capacité à ne pas saturer sous fort flux revêt toute son importance pour la spectroscopie et la communication en espace libre.

La figure 1.8 illustre la richesse de la physique des détecteurs IR en brossant un portrait d'ensemble des critères présentés au dessus. Tout l'enjeu réside dans le fait que l'optimisation des performances d'un système donné n'est fondamentalement pas un processus séquentiel, mais au contraire un compromis multi-factoriel, dont

les paramètres sont décrits à des échelles très différentes.

3 Filières technologiques

Cette partie est dévolue à dresser un état de l'art technologique des solutions existantes et potentielles des détecteurs IR, et se focalisera sur les couches actives. Il existe deux grandes classes de dispositifs : les détecteurs thermiques et les détecteurs quantiques.

3.1 Détecteurs thermiques

Le dispositif de Herschel (monochromateur et thermomètre) constitue le premier exemple historique de cette classe de composants fondée sur les effets thermoélectriques. La conversion optique-électronique est indirecte. L'absorption d'un photon provoque un échauffement qui modifie alors une grandeur électrique. Malgré des performances inférieures à celles des détecteurs quantiques, les détecteurs thermiques sont utilisés dans la quasi-totalité des applications grand public, car ils sont bien moins chers et fonctionnent à température ambiante. L'emploi de températures cryogéniques permet cependant d'augmenter leur sensibilité. Le temps de réponse est intrinsèquement long : c'est le produit RC thermique, celui de l'évacuation de la chaleur vers un réservoir thermalisé. Il est typiquement de l'ordre de 10-100 ms. Ces dispositifs sont classés selon le mécanisme physique de conversion de la chaleur en grandeur électrique [21, 22].

Pour les bolomètres [23] la résistance change lorsque la température est modifiée. Les matériaux employés sont des semiconducteurs ou des supraconducteurs. Ces derniers tirent parti de la très forte variation de la résistance du matériau près de la transition de phase, et sont de bons candidats pour les applications astronomiques. En effet, ils sont sensibles non seulement aux photons, mais à tout rayonnement porteur d'énergie, même l'énergie noire. Les microbolomètres montés en plans focaux pour l'imagerie infrarouge sont en général en Si amorphe ou en oxyde de vanadium.

Pour les thermocouples, l'élévation de température en un point d'une jonction entre deux matériaux (en général des alliages métalliques) va créer par effet Seebeck une différence de potentiel aux contacts laissés à une température de référence. Mis en série, on peut fabriquer des thermopiles qui transforment la chaleur en électricité.

Les détecteurs pyroélectriques sont réalisés dans des matériaux qui présentent une polarisation spontanée dépendant de la température. Une absorption IR va donc générer une fluctuation de charge électrique détectable. Ils sont utilisés dans les capteurs de présence IR passifs.

3.2 Détecteurs quantiques

Le principe des détecteurs quantiques est fondé sur le couplage entre la lumière et une transition électronique dans la matière, dans le but de créer et collecter des photoporteurs. Ces détecteurs hautes performances doivent néanmoins fonctionner à des températures cryogéniques : la thermodynamique impose que $k_B T$ soit faible devant l'énergie de transition. Les alliages ternaires et quaternaires de semi-conducteurs se

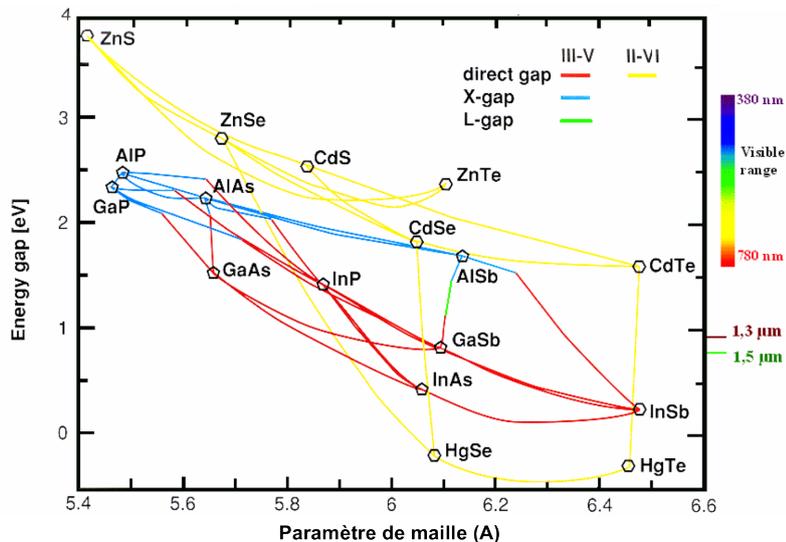


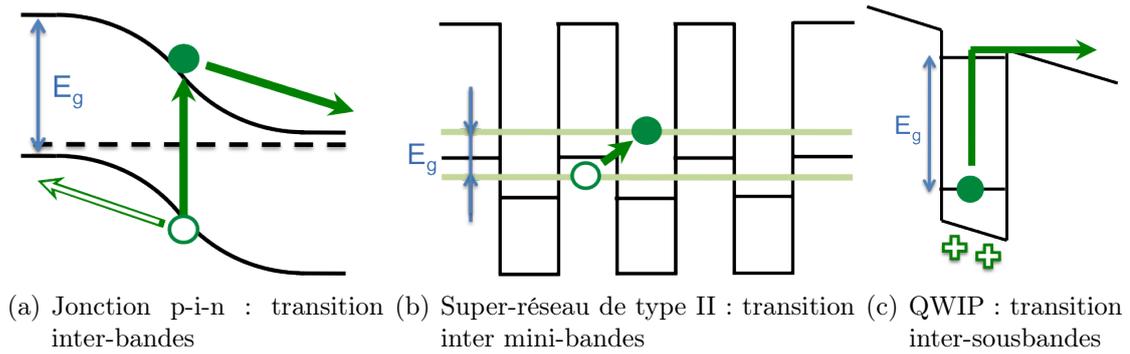
FIGURE 1.9 – Energie de gap en fonction de la constante de maille des principaux semi-conducteurs III-V et II-VI pour l'opto-électronique IR. C'est principalement la faisabilité technologique qui détermine l'émergence des filières en présence : HgCdTe, InSb, InAsGaSb, InGaAlAs, AlGaAs. Source [24]

sont imposés comme les matériaux de références car l'énergie du gap⁷ est accordable sur toute la gamme infrarouge en faisant varier la proportion du mélange (cf Fig. 1.9). Trois filières principales fondées sur les transitions interbandes se partagent le marché : InSb, InGaAs et HgCdTe. Pour dépasser les limitations liées au gap, deux grandes familles mettant à profit le confinement quantique ont émergé : les super-réseaux de type II en InAs/InGaSb, et les détecteurs inter-sousbandes. Nous brosserons ici à gros traits les filières en présence, le lecteur pourra se reporter aux nombreuses revues existantes [17, 25, 26]. Le point de vue adopté ici est celui d'un ingénieur qui compare les performances des technologies en concurrence.

La technologie InSb est fondée sur le principe des jonctions p-n (cf Fig. 1.10(a)). Limitée par l'énergie du gap, elle présente une longueur de coupure vers $5 \mu\text{m}$ et fonctionne à 77K. Elle est aujourd'hui commercialisée sous forme de matrices 1280×1024 dans les gammes $3\text{-}5 \mu\text{m}$ [27]. Les diodes InGaAs sont employées à température ambiante pour des applications entre 0.8 et $1.7 \mu\text{m}$ [28, 29]

HgTe étant un semi-métal, la filière MCT ("Mercury Cadmium Telluride") est beaucoup plus versatile en longueur d'onde : il suffit d'ajuster la proportion de Hg pour aller vers les gaps faibles. C'est la technologie dominante qui couvre des applications du SW au VLWIR [30, 31]. Les diodes p-i-n présentent des performances inégalées en termes de courant d'obscurité (standard Rule 07 [32]) et d'efficacité quantique (supérieure à 75%). Les limitations sont d'ordre technologique : coût des substrats CdZnTe et désaccord de maille de 19% avec les substrats Si, extrême sensibilité de l'épitaxie aux variations de température (mauvaise uniformité lorsque la longueur d'onde de coupure dépasse $12 \mu\text{m}$), difficultés de la passivation (avec de nets progrès récents). Pour les derniers développements de ces technologies, voir les références [33, 34].

7. On s'autorisera cet anglicisme ainsi que celui de "bandgap" pour parler de la bande interdite électronique entre bande de valence et bande de conduction.


 FIGURE 1.10 – E_g est l'énergie du gap

Les SLS ("Strained Superlattices"), super-réseaux de type II en InAs/InGaSb, proposés par Smith en 1987 [35] sont les seuls candidats connus qui présentent des performances théoriquement supérieures aux MCT. La zone absorbante est constituée d'hétérojonctions à gap brisé : la transition électronique se fait entre deux minibandes (cf Fig. 1.10(b)). On reconstruit de façon versatile une bande interdite électronique qui peut être bien inférieure à celle des matériaux utilisés. L'efficacité quantique atteint 50%, et adresse l'ensemble des gammes spectrales du SW au LW. Ce sont en général des jonctions p-n. Le faible taux de recombinaison Auger ouvre la voie aux hautes températures de fonctionnement. Les principaux challenges de cette filière relativement jeune sont les suivants : le calcul fin des structures de bandes permet d'envisager des hétérojonctions avec des couches intrinsèques en matériaux de large gap pour éviter les transitions non radiatives propres aux homojonctions [36]. Mais des modèles de transport dédiés manquent encore à ce jour. D'un point de vue technologique [37], la passivation [38,39] et l'augmentation du temps de vie des porteurs minoritaires [40] sont limitantes pour cette technologie qui devrait entrer sur le marché dans la décennie à venir. Des matrices $1K \times 1K$ [41] et multi-spectrales [42,43] ont déjà été démontrées.

Le représentant principal de la filière inter-sousbandes est le QWIP ("Quantum Well Infrared Photodetector"), composant photoconducteur unipolaire [44]. L'énergie de la transition peut être sub-bande interdite en structurant la bande de conduction pour former des puits quantiques (cf Fig. 1.10(c)). Contrairement aux technologies interbandes, la détection se fait autour d'une longueur d'onde choisie. La longueur d'onde de détection est accordable en faisant varier la composition des couches épitaxiales, et les démonstrations s'étendent de 3 à 80 μm . Ces composants bénéficient de l'extrême maturité de la technologie GaAs, ce qui leur permet de présenter des uniformités et stabilités supérieures à leurs concurrents. Ils souffrent néanmoins d'une faible efficacité quantique (de l'ordre de 10%) et de performances médiocres à haute température. Haute résolution et multi-spectrabilité [45] sont accessibles. De tous les concurrents, c'est cette filière qui présente les temps de réponse les plus rapides, avec des fréquences de coupure de plusieurs dizaines de GHz démontrées [46]. La physique de ces systèmes sera plus détaillée dans la section suivante.

Critère	InSb	MCT	SLS	QWIP
Marché	B (A)	A (B)	B (A)	A (B)
Gamme spectrale	MW	MW LW (VLW)	MW LW VLW	MW LW VLW
Rendement quantique	> 70%	> 70%	~ 50%	~ 10%
Uniformité	+++	+	++	+++
HOT	-	+	++	-
Définition	1K×1K	4K×4K	1K×1K	1K×1K
Multispectral	-	+	+	++
Maturité technologique	+++	++	+	+++

TABLE 1.2 – Comparaison des performances des différentes filières technologiques d’imageurs infrarouge.

3.3 Bilan et perspectives

Il existe trois types de marchés pour l’imagerie l’infrarouge (cf table 1.2) :

- **Marché A : >100 k€, faible volume.** C’est le domaine des applications militaires (aviation, chars et balistique), spatiales et des laboratoires. La performance doit être maximale.
- **Marché B : 5-100 k€, volume intermédiaire.** On trouve dans ce domaine des applications militaires où l’exigence de performance est moindre et le prix une contrainte plus forte, ainsi que de nombreuses applications civiles comme les diagnostics non-invasifs, l’aide à la vision en milieu hostile (pompiers, avions) ou la surveillance.
- **Marché C : <5 k€, fort volume.** Ce domaine est la chasse gardée des détecteurs thermiques avec des applications très diverses : industrielles, sécurité, environnement...

Nous nous intéressons aux marchés A et B où les détecteurs quantiques sont les solutions technologiques dominantes. Quatre grands enjeux pour l’avenir se dégagent :

- **Haute définition :** le format 1K×1K devient un standard, avec des démonstrations à 4K×4K [47]. L’uniformité et la maturité de la technologie sont déterminants.
- **Haute température :** de nombreux efforts sont déployés pour se rapprocher de la température ambiante ("HOT", high operating temperature), avec des températures BLIP qui dépassent les 180K pour certains SLS [48].
- **Multi-spectral, polarimétrie :** les exemples d’imageurs bicolores ou sensibles à la polarisation de la lumière se multiplient. L’idée est de capter un maximum de données et d’intégrer leur traitement au niveau même du détecteur.

Pour clore cette partie, la table 1.2 présente un avis subjectif sur les performances et la potentialité des filières en présence vis à vis des principaux enjeux et figures de mérite définis au dessus. Le point de vue va devenir moins ingénieur, et nous allons détailler la physique de détecteurs fondés sur le confinement quantique.

4 Physique des détecteurs intrabandes

Avec la réalisation expérimentale du premier super-réseau en 1973 [49], *Esaki* a sorti la physique des systèmes de basse dimensionnalité des cartons des théoriciens. Le développement des techniques de croissances comme l'épitaxie par jets moléculaires (MBE) ou l'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (MOCVD) a rendu accessible aux expérimentateurs une zoologie entière de nouveaux systèmes et phénomènes. 70 ans après leur conceptualisation, les notions de barrière de potentiel, de puits, de fil, et de boîte quantiques ont pris corps grâce à la possibilité de fabriquer des hétérostructures contrôlées à la monocouche atomique près. Si dans ce manuscrit la question de la technologie (croissance et traitement des wafers) n'est pas abordée, c'est parce que les travaux menés au cours de cette thèse ont traité d'autres questions. Il convient cependant de noter que c'est souvent lorsque des verrous technologiques ont sauté que des pans entiers de la physique ont pu se développer. Cet hommage rendu, nous allons dégager les principes qui sous-tendent l'intérêt des filières intrabandes pour la détection infrarouge.

4.1 Transition optique dans les puits quantiques

L'absorption intrabande dans un semiconducteur permet de s'affranchir des limitations imposées par l'énergie du gap, et de détecter des longueurs d'ondes plus élevées que la longueur de coupure interbandes. Mais l'absorption intrabande possède un autre atout fondamental : elle peut être plus efficace que l'absorption interbandes. Pour le comprendre, il faut rappeler quelques résultats fondamentaux de physique des hétérostructures.

Une hétérostructure semiconductrice peut être décrite par un hamiltonien contenant deux types de potentiel : V_c le potentiel du cristal, et V un potentiel lentement variable par rapport à la maille cristalline :

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V_c(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

Le théorème de Bloch stipule que pour $V = 0$ la base des états de Bloch diagonalise l'équation de Schrödinger stationnaire. Ces états s'écrivent :

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.4)$$

avec $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ possédant la même périodicité que la maille cristalline. n est l'indice de bande, \mathbf{k} le moment cristallin et Ω le volume du cristal. L'approximation de la fonction enveloppe consiste à dire que les états propres du hamiltonien complet s'écrivent sous la forme :

$$\Psi_n(\mathbf{r}) = \zeta_n(\mathbf{r}) u_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r}) \quad (1.5)$$

où $\zeta_n(\mathbf{r})$ est appelée la fonction enveloppe, et vérifie l'équation de Schrödinger lentement variable :

$$\left[\frac{p^2}{2m_n^*} + V(\mathbf{r}) \right] \zeta_n(\mathbf{r}) = (E - E_n) \zeta_n(\mathbf{r}) \quad (1.6)$$

Toute l'information liée à la maille cristalline se trouve résumée à l'intérieur d'une seule masse effective de bande m_n^* , et tout se passe comme si les électrons étaient

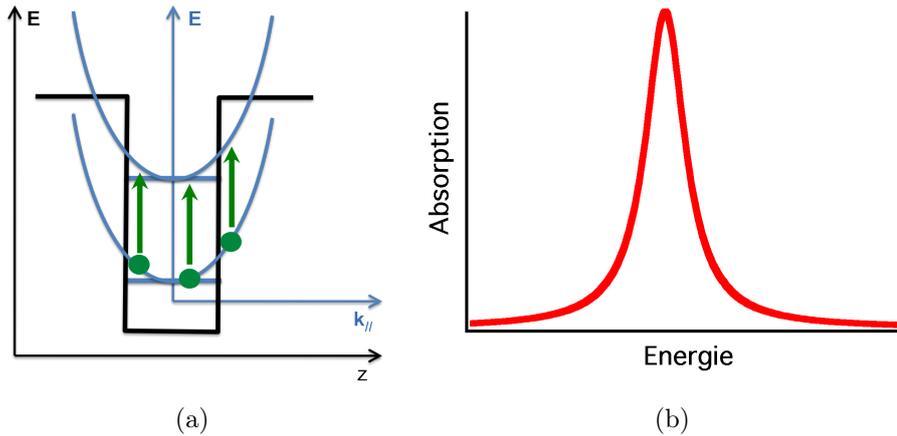


FIGURE 1.11 – (a) Diagramme de bande mixte $E(z) E(k_{//})$ de l'absorption dans un puits quantique. Toutes les transitions verticales échangent la même énergie. (b) Spectre d'absorption inter-sousbande avec élargissement homogène

soumis à un mouvement de particules dans un potentiel de confinement lentement variable⁸. Le succès de cette hypothèse de découplage des fréquences spatiales est un bon contre-exemple à l'idée d'intrication inter-échelles qui traverse ce manuscrit. Les principales hypothèses du raisonnement sont ici la prépondérance des états de faible moment cristallin et la dispersion parabolique de la bande considérée (découplage des bandes). Le lecteur intéressé par les formulations plus générales, et notamment par le fait surprenant que l'approximation de l'enveloppe lentement variable tienne même dans le cas d'interfaces abruptes (de l'ordre d'une monocouche)⁹, pourra se reporter aux travaux de *Bastard* [50, 51].

La qualité du couplage entre une transition électronique (entre $|1\rangle$ et $|2\rangle$) et la lumière décrite par un hamiltonien dipolaire est donnée en régime de couplage faible par la force d'oscillateur [52] :

$$f_{21} = \frac{2m}{\hbar^2} E_{21} |\langle 1 | \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | 2 \rangle|^2 \quad (1.7)$$

avec m la masse de l'électron (ce peut être la masse effective), E_{21} l'énergie de la transition, et $\boldsymbol{\epsilon}$ la direction de polarisation de la lumière. f_{21} est une grandeur sans dimension. Pour améliorer l'absorption d'un photodétecteur à une énergie donnée, on peut donc jouer sur deux paramètres : la masse électronique m et l'élément dipolaire $r_{21} = |\langle 1 | \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\epsilon} | 2 \rangle|^2$. Dans le cas des transitions interbandes, m est la masse réduite valence-conduction. La partie significative des fonctions d'ondes $|1\rangle$ et $|2\rangle$ qui intervient dans le moment dipolaire est la composante cristalline $u_{n\mathbf{0}}$: r_{21}^{inter} est de l'ordre de la taille de la maille cristalline. Dans le cas intrabande, m est la masse effective de la bande considérée¹⁰, et r_{21}^{intra} est principalement lié aux fonctions enveloppe, donc beaucoup plus grand que dans le cas interbandes : on passe de la maille atomique à la taille des puits quantiques.

La résolution de l'équation (1.6) dans le cas où le potentiel $V(\mathbf{r})$ dessine un puits quantique est représentée sur la figure 1.11(a). Le mouvement est libre dans le plan

8. On généralise à une masse effective par matériau dans le cas d'hétérostructures.

9. Plus étonnant encore est le cas des hétérocouches plus fines que la maille atomique

10. Sa diminution est une des raisons de l'attrait de la filière antimoine [53]

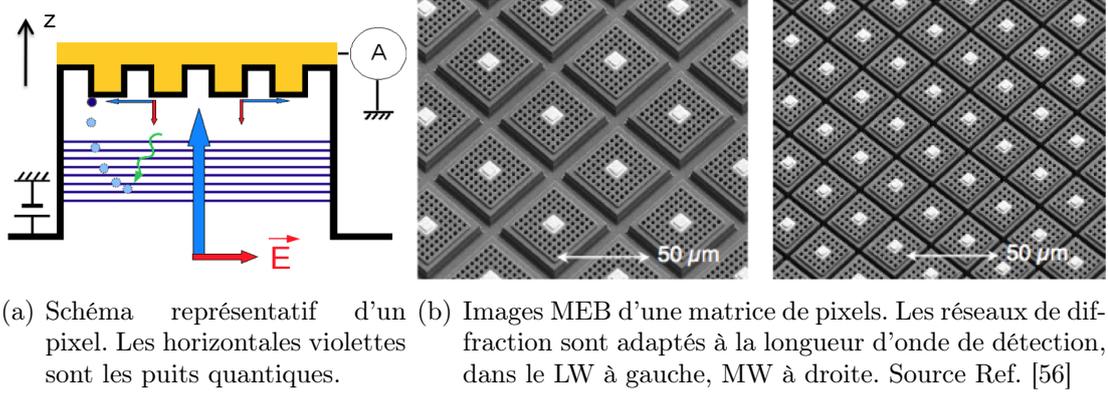


FIGURE 1.12

des couches épitaxiales $\mathbf{r}_{//}$, avec une dispersion parabolique formant des sousbandes. Les fonctions d'ondes sont celles d'ondes planes. Dans la direction de confinement z , les énergies propres forment des niveaux discrets ε_n^p , et les fonctions d'ondes correspondantes sont liées à l'intérieur des puits. La fonction enveloppe s'écrit donc $\zeta_n(\mathbf{r}_{//}, z) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{A}}} e^{i\mathbf{k}_{//} \cdot \mathbf{r}_{//}} \xi_n^p(z)$. \mathcal{A} est l'aire de normalisation dans le plan des couches.

Dans la mesure où l'impulsion du photon est très faible devant le moment cristallin des électrons, les transitions optiques sont verticales sur les diagrammes $E(\mathbf{k}_{//})$. L'absorption intra-sousbande est donc impossible (en première approximation, voir la Ref [54] pour plus de détails), et ce sont les transitions inter-sousbandes (ISBT) qui interagissent avec la lumière. Il faut respecter la règle de sélection qui transparait dans l'expression de la force d'oscillateur (1.7). Les fonctions d'ondes $|1\rangle$ et $|2\rangle$ sont dans ce cas $\xi_n^p(z)$, et la lumière doit être polarisée selon z pour qu'il y ait ISBT. La composante polarisée dans le plan des couches va simplement accélérer les électrons à l'intérieur des sousbandes.

Les sousbandes présentent la même dispersion parabolique, toutes les transitions optiques se font à la même énergie. Le spectre d'absorption est lorentzien, convolution du dirac attendu avec un élargissement homogène dû au temps de vie fini des électrons sur les états $|n, \mathbf{k}_{//}, p\rangle$, en vertu du principe d'incertitude d'Heisenberg. L'élargissement est homogène si un mécanisme dominant diffuse tous les électrons avec le même temps caractéristique. Si plusieurs mécanismes de diffusion entrent en jeu ou que le temps dépend de l'énergie $\hbar^2 k_{//}^2 / 2m^*$, l'élargissement est inhomogène et l'absorption est gaussienne.

La figure 1.12(a) présente l'allure schématique d'un pixel d'un détecteur à puits quantiques. En configuration FPA, la lumière, décrite par le champ électrique E est injectée par le substrat en incidence normale et est donc uniquement polarisée dans le plan des couches. Le dispositif est aveugle dans cette configuration, *modulo* la diffraction par les bords du pixel et les défauts résiduels [55]. Une structure de couplage est donc nécessaire afin d'induire une polarisation suivant z dans le matériau.

La solution la plus répandue est le réseau de diffraction, qui consiste à graver un réseau périodique au sommet de chaque pixel avant un dépôt métallique [57–59]. Les courants de surface du métal vont injecter le mode incident vers les modes guidés sensibles aux puits quantiques. La période du réseau doit correspondre à la longueur d'onde de la lumière dans le diélectrique, et on place moins d'une dizaine de

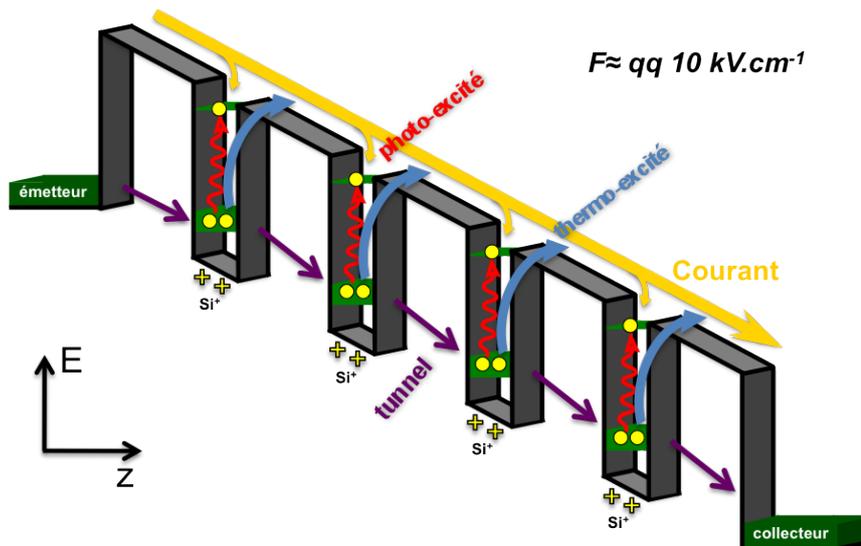


FIGURE 1.13 – Principe de fonctionnement d'un QWIP.

périodes sur chaque pixel (cf Fig. 1.12(b)). Non contents de jouer le rôle de couplage, les réseaux de diffraction permettent en outre d'adresser des fonctionnalités originales, comme la concentration de la lumière pour réduire le rapport aire électrique / aire optique, ou bien le contraste polarimétrique [60, 61]. Leur acceptation spectrale intrinsèquement résonante est bien adaptée à l'absorption fine des structures intrabande. Dans la mesure où la diffraction est calculée en champ proche, des calculs de FDTD ("finite difference time domain") numériquement lourds sont nécessaires.

La question du couplage a récemment pris énormément d'ampleur avec la montée en puissance de la nanophotonique sub-longueur d'onde et de la plasmonique [62]. Le chapitre 5 reviendra sur les potentialités de cette physique qui regarde désormais le photodétecteur comme un ensemble de cavités couplées.

4.2 QWIP

Le détecteur QWIP, présenté pour la première fois par *Levine et al* en 1987 [63] est une structure photoconductrice extrinsèque. Il est composé d'une succession de puits quantiques dopés n par des impuretés Si, et placés sous tension, voir Fig. 1.13. Les électrons situés dans le niveau fondamental des puits, sont photo-excités vers le second niveau du puits quantique, placé en résonance avec le haut des barrières. Il faut un grand nombre de puits pour avoir une efficacité quantique significative. En effet avec des niveaux de dopage standards (quelques 10^{11} cm^{-2}), l'absorption par puits d'une lumière incidente à 45° est de l'ordre du %. Le QWIP est photoconducteur, ce signal optique vient donc se surimposer à un mécanisme d'obscurité : à haute température les électrons liés sont excités par l'agitation thermique (absorption de phonon), et à basse température ils transitent de puits en puits par effet tunnel.

Plusieurs modèles coexistent pour expliquer le transport dans l'obscurité à haute température (voir Ref. [44] pour une revue plus complète). La plupart sont de type photo-émissifs et se fondent sur l'égalisation du flux sortant des puits quantiques avec le flux entrant [64, 65]. Le flux sortant est causé par la photo-absorption ou la thermo-ionisation des porteurs confinés dans les puits. La nature bi-dimensionnelle

des électrons sur ces niveaux permet un calcul simple. Le problème surgit lorsqu'on veut calculer la capture des électrons par les puits, due principalement à l'émission de phonon LO [66]. La description 3D d'électrons en transit au dessus des barrières s'accommode mal de la nature 2D des états d'arrivée. La probabilité de capture p_c reste la plupart du temps un paramètre ajustable dans ces structures. Des modèles auto-cohérents ont été proposés [67–69], prenant en compte les inhomogénéités du champ électrique le long de la structure par la résolution de l'équation de Poisson.

A basse température, le transport d'obscurité se fait sans interaction avec le continuum d'état au dessus des barrières, et le passage d'électrons d'un puits à l'autre est souvent traité par l'approximation WKB. De nombreux autres modèles plus complexes existent, dont certains seront détaillés dans le chapitre 2

La photo-réponse est plus complexe à modéliser. D'abord car la répartition du champ électromagnétique dans les couches actives est une quantité non triviale à calculer. L'approximation de premier ordre consiste à considérer une illumination homogène sur tous les puits. Ensuite, car l'émission d'un photo-électron laisse une impureté ionisée non écrantée dans le puits correspondant. L'équation de Poisson implique qu'à tension constante, un abaissement de la barrière d'injection est induit, ce qui génère un supplément de courant. C'est l'origine du gain de ces structures [70, 71].

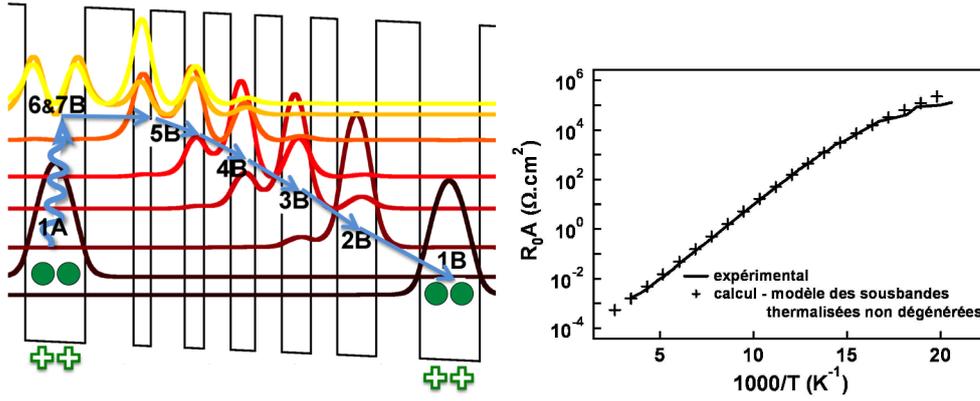
La modélisation du bruit est un problème qui occupera une partie entière de ce manuscrit, et un état de l'art plus complet est disponible dans le chapitre 4. Les régimes transitoires très fugaces, puisque limités par le temps de rechargement des puits (typiquement de 1 – 10 ps), ont été étudiés par méthode Monte Carlo [72]. Il n'existe à l'heure actuelle, 25 ans après la première démonstration d'un QWIP, aucun modèle complètement satisfaisant pour décrire le transport dans ces structures. Le verrou conceptuel est l'intrication entre des visions 2D et 3D du transport. Le formalisme de la matrice densité a tous les atouts du parfait candidat, et des efforts ont été menés dans ce domaine [73, 74]. Mais le chemin à parcourir est encore long.

4.3 QCD

Le détecteur QCD (Quantum Cascade Detector) est le croisement réussi entre le QWIP et le laser à cascade quantique (QCL) [76]. Comme pour les QWIPs, il s'agit de mettre en série une multitude de périodes composées d'un puits principal, lieu de la transition optique, et d'un extracteur dont le rôle est ici joué par une cascade de niveaux liés dans des puits quantiques. Le schéma de principe est représenté sur la figure 1.14(a). Les électrons sont promus par absorption de photon du niveau $1A$ vers le niveau $7B$, puis rapidement extraits par transfert résonant ou émission de phonon LO le long de la cascade pour atteindre le réservoir suivant $1B$. Pour transférer un photo-électron entre les contacts, il faut autant d'absorptions de photons qu'il y a des périodes. L'efficacité quantique est (encore) plus faible que dans les QWIPs.

D'un point de vue applicatif, l'anisotropie de la structure de bande permet au dispositif de fonctionner à tension nulle, laissant espérer des temps d'intégrations plus long et des températures de fonctionnement plus élevées que les QWIPs¹¹.

11. Dans les QWIPs le courant d'obscurité habituellement est responsable de 50 à 95% du remplissage des capacités de lecture.



- (a) Principe de fonctionnement d'une période QCD. Le puits optiquement actif est dopé Si, et la quasi-totalité des électrons en peuplent le niveau fondamental. Le trajet des photo-électrons est matérialisé en bleu. La thermo-excitation peut se faire vers n'importe quel niveau de la cascade B .
- (b) Comparaison entre l'expérience et le modèle des sousbandes thermalisées pour la résistance à l'équilibre d'un QCD @ $8\mu\text{m}$. L'accord est quantitatif sur 9 ordres de grandeur entre 40K et 300K. Source Ref. [75]

FIGURE 1.14

D'un point de vue théorique, le transport étant entièrement 2D, le cadre formel est beaucoup mieux défini sans interaction avec le continuum 3D. L'intégralité des performances des dispositifs sont calculables *a priori* à partir des principes quantiques. D'autant que l'analogie formelle entre un QCD et un QCL permet au premier de bénéficier de tous les efforts conceptuels développés pour le second.

Depuis les premières démonstrations InGaAs/InAlAs en MW et LW en 2002 [77] et GaAs/AlGaAs en MW en 2004 [78], des dispositifs ont été présentés dans toute la gamme de $1\ \mu\text{m}$ à $16.5\ \mu\text{m}$ [79–85], ainsi que dans le THz [86]. Le champ piezo-électrique interne est exploité dans les structures GaN/AlGaN qui adressent le proche infrarouge [87, 88]. Aucun plan focal n'a été réalisé à ce jour.

La modélisation du transport dans les QCDs est fondée sur l'approche diffusive entre états de Wannier-Stark, et sera largement développée dans la suite. Pour le courant d'obscurité, cette approche a vu le succès du modèle de la cascade thermalisée [89], raffiné en modèle des sousbandes thermalisées [75]¹². Fondés sur le phonon LO comme mécanisme principal de diffusion [90], ils ont montré qu'une période de QCD pouvait être vue comme la mise en parallèle de diodes tête-bêches ; un couple pour chaque transition $1A - jB$ entre le niveau fondamental 1 d'une cascade A et un niveau j de la cascade suivante B . Le calcul de la résistance à tension nulle R_0A présente un accord quantitatif avec l'expérience sur 9 ordres de grandeurs (voir Fig. 1.14(b)) :

$$R_0A = \frac{k_B T}{q^2 \sum_{j=1}^N \eta_j \times G_{j1}(0)} \quad (1.8)$$

Une analogie encore plus simple et étonnamment très robuste consiste à voir une période QCD comme une diode Schottky. Le rôle du métal réservoir d'électrons est

12. Cet avancement des connaissances correspond au moment de mon arrivée en thèse.

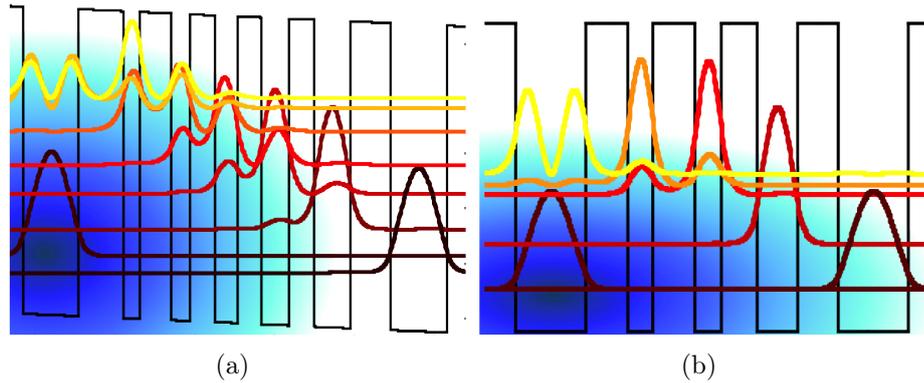


FIGURE 1.15 – "Règle de la patate" pour le courant d'obscurité. Le dégradé de bleus correspond aux iso-courants. 1.15(a) Haute température (typiquement 100K) dans un QCD @ $8\mu\text{m}$: la patate est allongée verticalement. 1.15(b) Basse température (typiquement 50K) dans un QCD @ $15\mu\text{m}$: la patate est tassée horizontalement.

joué par le niveau fondamental du puits optiquement actif, et la cascade thermalisée joue le rôle du semiconducteur. Le modèle des sousbandes thermalisées, cas particulier du modèle diffusif, est valide à haute température et à tension nulle, mais échoue loin de l'équilibre, ainsi qu'à basse température où les phénomènes de tunnel résonant dominant le transport [91].

La compréhension du photocourant est un problème encore plus ouvert, dans le mesure où l'extraction résonante est mal décrite par l'approche purement diffusive. Le rôle des diffusions résonantes, notamment celles par les impuretés ionisées devient prépondérant [92], et la question de leur articulation avec les phénomènes de tunnel résonant reste irrésolue. Ces questions feront l'objet d'un examen attentif au chapitre suivant.

Un très grand nombre de paramètres entre en jeu dans le dessin d'une période QCD : la taille de tous les puits et des barrières, la hauteur des barrières¹³, et le niveau et l'emplacement du dopage. Deux règles empiriques président au dessin de structures performantes. La "règle de la patate"¹⁴ pour gérer le transport d'obscurité, et la "règle des 90-10" pour optimiser la réponse.

"Règle de la patate" (Fig. 1.15). Une remarque liminaire. Il peut sembler surprenant qu'on s'intéresse au courant d'obscurité dans une structure censée fonctionner à l'équilibre thermodynamique. Si le flux électronique net est toujours nul à l'équilibre, il est composé microscopiquement d'une multitude de flux contrapageants égaux deux à deux. Ces flux microscopiques sont à l'origine du bruit, et il convient de les réduire au maximum. Autrement dit, on cherche à augmenter la résistance du dispositif pour réduire le bruit thermique. La cascade étant bien thermalisée, les transitions critiques qui entrent en jeu dans le transport d'obscurité sont les transitions inter-cascades $1A - jB$. Idéalement, le chemin emprunté par les électrons dans l'obscurité doit être le même que celui emprunté par les photo-électrons, pour maximiser l'énergie d'activation. En particulier, il faut s'arranger pour éteindre

13. Pour des raisons de simplicité et de robustesse du processus d'épitaxie, on se limite en général à deux matériaux seulement, un pour le puits, un pour les barrières. Mais des solutions plus exotiques sont envisagées, notamment pour la détection multi-spectrale.

14. Une bonne règle empirique doit avoir un nom accrocheur. "Règle de la patate" me semble plus percutant que "règle des iso-courants".

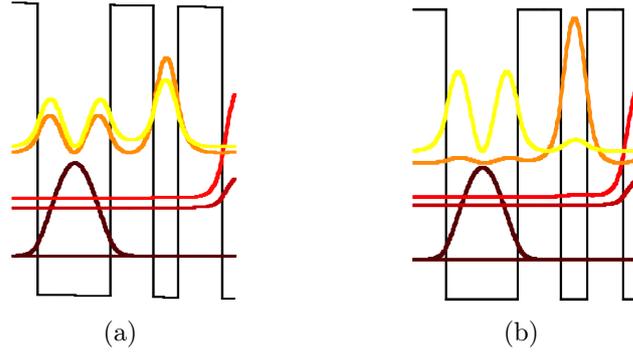


FIGURE 1.16 – "Règle des 90-10" pour la réponse. Focus sur la première transition d'extraction dans un QCD @ $15\mu m$. (a) Niveaux trop résonants, l'électron est trop délocalisé par des aller-retours sur les deux niveaux, et inefficacement extrait. (b) Schéma optimal, l'asymétrie énergétique favorise les transitions résonantes vers la droite.

toutes les transitions diagonales au profit de la seule transition verticale. Les électrons présents dans le réservoir $1A$ voient les différents niveaux de la cascade B à une "distance" $(\Delta E, \Delta z)$. ΔE correspond à la différence des énergies propres, et Δz est l'écart entre les barycentres des fonctions d'onde¹⁵. Le courant de $1A$ vers jB s'écrit comme

$$J_{1A \rightarrow jB} \propto \exp\left(-\frac{\Delta E}{k_B T}\right) \exp(-\kappa \Delta z) \quad (1.9)$$

où κ décrit le caractère évanescents de la fonction d'onde autour du niveau $1A$, et est proportionnel à la hauteur des barrières. La dépendance en ΔE donne le nombre de porteurs suffisamment énergétiques pour effectivement contribuer à la transition considérée. Les iso $\frac{\Delta E}{k_B T} + \kappa \Delta z$ forment des ellipses qui forment la carte des isocourants issus de $1A$. Le courant $1A - jB$ prend la valeur de la ligne de niveau qui passe par le point E_{jB}, z_{jB} . La situation idéale est donc atteinte quand le niveau haut de la transition optique intersecte la ligne de niveau le plus élevé. Les structures à faible longueur d'onde peuvent fonctionner à haute température, avec une patate allongée verticalement. La cascade est abrupte et profite dès les premiers puits d'une extraction efficace par émission de phonon LO. A l'inverse dans les structures à grandes longueurs d'ondes et donc basse température, la patate est plus large que haute. L'extraction reste résonante plus longtemps avant de pouvoir bénéficier du phonon.

"Règle des 90-10" (Fig. 1.16). Le respect de la "règle de la patate" ne présume en rien d'une bonne extraction. Cette dernière est efficace dès que les niveaux de la cascade sont espacés de l'énergie d'un phonon LO. Cette condition ne pouvant pas toujours être satisfaite (à cause de la règle précédente ou dans les structures THz), l'extraction se fait en partie par des transitions résonantes. La règle empirique des 90-10 consiste à dire que le niveau extracteur doit être dans ce cas situé environ 5meV sous le niveau donneur, et que le couplage entre les deux doit donner des

15. On suppose dans cette règle du pouce que la fonction d'onde est bien localisée au niveau d'un seul puits. Les fonctions multi-localisées, lors d'anticroisements par exemple, prennent cette règle simple en défaut.

fonctions d'ondes localisées à 90% sur leur puits, et 10% sur l'autre¹⁶. Dans ce cas l'énergie est assez résonante pour que le passage par effet tunnel résonant soit efficace, et assez asymétrique pour éviter une trop grande remontée des électrons. Ce réglage est particulièrement crucial entre le niveau haut de la transition optique et le premier niveau extracteur de la cascade.

L'optimisation du dopage et du nombre de périodes nécessite des outils de calcul plus avancés, et doit se faire en regard d'un schéma de couplage optique, d'un scénario, et d'un circuit de lecture. Augmenter le dopage améliorera l'absorption par période donc la réponse, mais il existe un compromis car le courant et donc le bruit d'obscurité augmentent aussi. Avec le nombre de périodes on augmente l'absorption totale, et on diminue le bruit, mais on impacte négativement la réponse. Voir le chapitre 5 pour plus de détails dans le cas du modèle du QCD idéal.

Dans les QWIPs à haute température, les électrons peuvent passer au dessus d'un puits sans interagir avec lui. Cela génère une inhomogénéité du champ électrique le long de la structure. Tel n'est pas le cas dans le QCD où le transport est réellement séquentiel entre les périodes. L'approximation de champ homogène est très robuste dans ces structures¹⁷. Le temps de réponse est lui aussi de l'ordre de la picoseconde (c'est le temps de transport dans la cascade), laissant espérer des bandes passantes de l'ordre de plusieurs dizaines de GHz.

4.4 QDIPs

Le détecteur QDIP (Quantum Dot Infrared Photodetector) absorbe la lumière non plus dans des puits quantiques 2D, mais dans des boîtes quantiques 0D (QDs)¹⁸. Deux idées majeures justifient l'intérêt théorique de pousser plus avant la réduction de la dimensionnalité [93]. Tout d'abord, le rétablissement d'une certaine isotropie de la structure de bande modifie la règle de sélection de couplage optique : la lumière en incidence normale peut être absorbée. Ensuite, la discrétisation de la densité d'états permet de supprimer des mécanismes de relaxation. Pour une structure similaire aux QWIPs, on s'attend à un "phonon bottleneck" : la capture par émission de phonon LO est éteinte, ce qui amplifie le gain. Le temps de vie des photo-électrons vis à vis de la relaxation vers le niveau fondamental est aussi augmenté, permettant une meilleure extraction. Enfin, alors que dans les QWIPs l'énergie d'activation du courant d'obscurité est toujours inférieure à l'énergie optique (la différence est l'énergie de Fermi du niveau fondamental), dans les boîtes quantiques la localisation spatiale des orbitales électroniques permet qu'elles soient égales. Une augmentation significative des températures de fonctionnement par rapport aux QWIPs / QCDs est attendue.

Cette filière très prometteuse doit encore faire sauter un grand nombre de verrous technologiques pour se rapprocher des performances théoriques. La solution

16. Ces proportions sont données à titre indicatif, dans le but de donner à voir une image qualitative. Elle peut évidemment significativement varier selon la température, la forme de la cascade, l'énergie de transition...

17. Des inhomogénéités de champ sont en revanche observées à basse température à cause des phénomènes de tunnel résonant : des dents de scie apparaissent sur les courbes I(V)

18. Quelques dispositifs nanofils 1D existent mais aucune filière majeure ne s'est encore développée pour la photodétection infrarouge.

technologique principale est l'auto-assemblage de boîtes InAs sur un substrat GaAs par croissance Stranski-Krastanow [94]. Les problèmes majeurs sont :

- Forme des boîtes : alors qu'on souhaiterait des boîtes sphériques ou cubiques, on obtient en général des galettes aplaties de 3 nm de haut pour 20 nm de diamètre. La règle de sélection n'est pas réellement modifiée par rapport aux détecteurs 2D, et si des sensibilités à l'incidence normale ont été reportées, les structures de couplage sont toujours nécessaires.
- Densité des boîtes : une couche de QDs ne contient jamais assez de boîtes pour absorber plus qu'un puits quantique (de l'ordre du % du flux incident). C'est ce critère, et non le dopage de la zone active qui est limitant en terme d'absorption puisqu'il ne peut y avoir que deux électrons par niveau dans les boîtes. Dans les QDIPs plusieurs dizaines de couches de QD sont en général empilées pour obtenir une sensibilité suffisante [95].
- Dispersion de la taille des boîtes : les spectres d'absorption des QDIPs sont en général larges car la taille des boîtes n'est pas unique. Cela peut être vu comme un avantage pour de l'absorption large bande.
- Courant d'obscurité, phonon bottleneck : aucun des effets escomptés de la discrétisation de la densité d'état n'a été observé. Le courant d'obscurité est bien plus important que dans les structures à puits, et l'augmentation nette du gain reste encore à démontrer. La longueur du temps de rechargement est parfois même préjudiciable.

Les stratégies de travail sont nombreuses. La plus mature est la variante DWELL (pour "dot in a well"), qui consiste à piéger les boîtes dans des puits quantiques. Un meilleur contrôle des transitions et du temps de rechargement sont disponibles [96]. La seconde consiste à contrôler le site de nucléation des boîtes par des techniques de gravure et reprise de croissance. Le contrôle de la forme et de la densité des QDs devient accessible, et des dispersions de taille record ont été démontrées [97]. La dernière filière est celle de la croissance de nanoparticules colloïdales par voie chimique. Cette solution très prometteuse en termes de température de fonctionnement et de prix a débuté dans la gamme du SW. Elle commence à pousser la porte du moyen infrarouge [98].

5 Bilan : du phénomène quantique au dispositif macroscopique

Dans ce chapitre de contexte, le regard s'est d'abord porté sur le besoin applicatif, avant de remonter vers les solutions technologiques et d'aboutir vers la physique du dispositif étudié. La diversité des facettes de la physique des photodétecteurs façonne le profil du physicien qui s'y consacre, et oriente sa démarche. C'est la spécificité de cette problématique que nous voulons mettre en avant pour clore ce chapitre.

Dans le cadre général de la physique quantique des solides, on peut distinguer deux classes principales de métiers pour le physicien. La visée première d'un "physicien des phénomènes" est de mettre en évidence des effets physiques nouveaux, de les comprendre et de les caractériser : régimes de couplage lumière-matière, phase exotique d'un matériau, intrication quantique, effet Kondo... Les systèmes réalisés doivent être les plus épurés possible, dans le but d'isoler le phénomène qu'on cherche

à étudier.

La visée première d'un "physicien des dispositifs" est d'exploiter ces phénomènes nouveaux pour adresser des besoins applicatifs. Le critère de mérite des systèmes développés n'est plus la qualité avec laquelle le phénomène apparaît dans les mesures, mais plutôt les performances pour répondre au cahier des charges d'une application donnée. En ce sens, le dispositif peut être un objet très complexe. Dans le cadre de cette thèse, l'attention s'est portée sur les détecteurs inter-sousbandes, en particulier les QCDs. Pour ces détecteurs, le chemin est long entre la transition optique dans un puits quantique et les images produites par le système embarqué sur un satellite géostationnaire.

Le métier du physicien des dispositifs est donc de comprendre comment tirer un maximum de profit du phénomène quantique pur pour concevoir le système opérationnel le plus performant possible. Sa dialectique est celle de l'articulation entre l'échelle microscopique des phénomènes et l'échelle macroscopique de leur utilisation. Son travail est de comprendre et maîtriser le passage de la première à la seconde.

Ce manuscrit est traversé par la question du lien micro-macro. Le transport électronique est une discipline particulièrement féconde en échelles de description, modèles et visions diverses. Trouver la bonne focale pour décrire un système, et la bonne façon de passer d'une focale à l'autre constitue le coeur des problèmes rencontrés dans cette thèse. Relisons un instant le plan à la lumière de cette problématique. L'essentiel du chapitre 2 consiste à articuler la vision résonante avec la vision diffuse du transport dans les QCDs. Dans le chapitre 3 une échelle intermédiaire sera introduite entre le phénomène local d'ionisation par impact et la transition de phase globale dans les QWIPs THz. Le chapitre 4 montre que les difficultés inhérentes à la modélisation du bruit dans les détecteurs inter-sousbandes naissent d'une confusion d'échelles. Elles sont résolues par un passage micro-macro rigoureux.

Chapitre 2

Transport électronique dans les détecteurs à puits quantiques

Toute Pensée émet un Coup de Dés
Stéphane Mallarmé

Ce chapitre est consacré à la présentation du modèle de transport électronique pour le courant et la réponse dans les détecteurs inter-sousbandes. Entre l'échelle microscopique du confinement quantique et l'échelle macroscopique de la mesure, s'articulent une multitude de visions et théories ayant chacune leur pertinence selon le régime de transport étudié. La première section dresse un tableau d'ensemble de ces visions et de leur organisation. La seconde section identifie et présente les descriptions privilégiées pour les détecteurs à puits quantiques. Les différents modèles identifiés sont utilisés pour calculer les caractéristiques opto-électroniques d'un détecteur QCD @ 15 μm dans la troisième section.

1 Caractère multi-échelle du transport

¹La description complète du transport électronique dans un dispositif semi-conducteur passe par la résolution autocohérente des équations du transport pour les porteurs de charges et des équations de Maxwell pour les champs électromagnétiques. Ces systèmes sont couplés par le phénomène de charge d'espace. Par exemple, à partir d'une configuration de champ donnée, la résolution de l'équation de Schrödinger et d'une équation du transport permet de déterminer la configuration spatiale de la densité électronique. Cette répartition des porteurs induit, *via* l'équation de Poisson, une modification de la distribution du champ électromagnétique, qui à son tour change l'équation de Schrödinger et ainsi de suite.

Les électroniciens disent parfois sur le ton de la boutade que l'opticien se contente de résoudre les équations de Maxwell. Cette unicité du formalisme de l'optique linéaire fait face à un vaste entrelas d'équations décrivant le transport. Avant d'en introduire les grandes classes, nous allons mettre en évidence les différents régimes de transport qu'elles veulent modéliser.

1. Cette section s'inspire largement de l'introduction de la Ref. [99]

1.1 Longueurs caractéristiques

Les propriétés électroniques d'une nanostructure dépendent de la façon dont se comparent les dimensions du système avec les différentes longueurs caractéristiques qui gouvernent la physique des électrons. Ces dernières varient énormément selon le matériau considéré, la température, les champs électriques et magnétiques, la concentration en dopants... Les principaux représentants en sont :

Le **libre parcours moyen** l_m est la distance moyenne que parcourt l'électron entre deux diffusions élastiques. Si v est la vitesse moyenne des électrons, alors le temps caractéristique $\tau_m = l_m/v$ est celui de la relaxation de l'impulsion. La distribution des vitesses électroniques est réinitialisée tous les τ_m en moyenne. Dans les matériaux haute mobilité à basse température ($< 4K$) le libre parcours moyen peut atteindre $10 - 100 \mu m$.

La **longueur de relaxation de la phase** l_ϕ correspond au libre parcours moyen inélastique. C'est la distance moyenne parcourue entre deux collisions inélastiques qui détruisent la cohérence quantique de l'état électronique. Citons par exemple les diffusions électron-phonon ou électron-électron. Elle est de la même façon reliée au temps de relaxation de la phase quantique τ_ϕ . Ce dernier est par définition supérieur à τ_m . Il peut lui être égal dans certains systèmes dégénérés à très haute mobilité. On vérifie alors que $\tau_\phi = l_\phi/v_F$, avec v_F la vitesse au niveau de Fermi. A l'inverse dans des semiconducteurs à très basse mobilité, il peut y avoir un très grand nombre de diffusions élastiques entre deux diffusions inélastiques. Dans ce cas, longueur et temps de relaxation de la phase sont liés par une relation diffusive : $l_\phi^2 = D\tau_\phi$, avec le coefficient de diffusion dû aux collisions élastiques $D = v_F^2\tau_m/2$.

La **longueur de de Broglie** $\lambda = h/p$ donne l'extension spatiale de la fonction d'onde pour un électron d'impulsion p . C'est la longueur caractéristique sur laquelle les effets quantiques sont notables et la nature ondulatoire des électrons se manifeste. Pour un gaz bi-dimensionnel dégénéré avec une densité de porteurs de $10^{11} cm^{-2}$, cette longueur vaut $75 nm$.

La **longueur thermique** $l_T = \sqrt{\hbar D/(k_B T)}$ est liée à l'excès d'énergie thermique portée par les électrons lorsque leur température est finie. C'est la longueur qui détermine la transition entre un comportement classique et un comportement quantique pour les interactions entre les porteurs. Si la distance typique inter-électrons est supérieure à l_T , les fonctions d'ondes électroniques ne se voient pas et le comportement est classique, décrit par une statistique de Maxwell-Boltzmann. Dans le cas inverse la distance inter-électrons est comparable à la longueur de de Broglie moyenne, alors le principe d'exclusion de Pauli entre en jeu : la statistique est celle de Fermi-Dirac. Dans le GaAs, l_T vaut typiquement $250 nm$ à température ambiante. Pour un gaz bi-dimensionnel dégénéré avec une densité de porteurs de $10^{11} cm^{-2}$, la distance inter-électrons vaut typiquement $30 nm$.

La **longueur magnétique** $l_B = \sqrt{\hbar/qB}$ définit l'extension de l'orbite cyclotron lorsqu'un champ magnétique est appliqué.

Selon comment les dimensions caractéristiques L du système étudié se comparent avec ces longueurs physiques, plusieurs régimes de transport sont distinguables :

- **Régime diffusif classique** : $L \gg l_m, l_\phi$. Le système est grand devant les longueurs caractéristiques du transport. Les porteurs subissent de très nom-

breuses diffusions élastiques et inélastiques lors de leur transfert d'une électrode à l'autre. L'énergie et l'impulsion sont relaxées. Ce régime est bien décrit par des modèles de dérive-diffusion.

- **Régime cohérent** : $L < l_\phi$. Dans ce cas l'information de phase quantique est conservée au cours du transport. Ce régime, terrain de jeu de prédilection des mésoscopistes, est parfois observable dans les super-réseaux.
- **Régime ballistique** : $L < l_m$. Aucune diffusion ne vient alors perturber le transfert des électrons entre les contacts. Leur impulsion est graduellement augmentée par le champ électrique.
- **Régime de confinement quantique** : $L < \lambda$. Quand une dimension caractéristique du dispositif devient plus faible que l'extension spatiale des fonctions d'ondes, le confinement quantique intervient. Le transport dans la direction de confinement change de nature, et la densité d'états est modifiée.

Dans un système donné, il peut y avoir décorrélation entre les régimes de transport associés à des directions perpendiculaires. Ainsi, comme nous allons le voir plus tard, une structure à puits quantiques est dans le régime de confinement quantique dans la direction d'épitaxie, alors qu'elle est bien décrite par un régime diffusif classique dans le plan des couches. Une analyse similaire peut être menée sur les temps caractéristiques. De la même façon il peut y avoir des ordres de grandeur de différence entre les temps associés à des dimensions orthogonales de l'espace. Le transport peut être en quasi-équilibre (extrêmement relaxé) dans une dimension, et en régime cohérent selon une autre dimension.

1.2 Hiérarchie des modèles de transport

Le paradigme de l'électronicien est de trouver le modèle de transport le plus simple possible qui décrit l'ensemble des phénomènes du système étudié. De nombreux modèles de transport décrivent la diversité des régimes identifiés : transport quantique, équation de Boltzmann, formalisme hydrodynamique, dérive-diffusion². L'organisation de ces modèles entre eux a une double structure hiérarchique : à mesure qu'on remonte du plus quantique au plus macroscopique, les modèles gagnent en simplicité mais perdent en généralité. Chaque modèle correspond à un échelon qui se déduit de l'échelon inférieur par un certain nombre d'approximations et de simplifications. Par souci de clarté dans l'exposé de cette hiérarchie, nous allons nous placer dans le cadre d'un semiconducteur homogène et isotrope, et considérer seulement le transport dans la bande de conduction.

Transport quantique

Le niveau le plus fondamental, le plus complet et le plus complexe est celui de la mécanique quantique. Le hamiltonien \mathcal{H} des électrons peut être séparé entre une contribution décrivant la dynamique des particules isolées \mathcal{H}_0 , une contribution décrivant l'interaction avec un champ électromagnétique externe \mathcal{H}_{ef} , et une contribution décrivant les interactions entre porteurs \mathcal{H}_{ee} .

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{ef} + \mathcal{H}_{ee} + \dots \quad (2.1)$$

2. Cette liste n'est évidemment pas exhaustive, mais est constituée des plus importants modèles décrivant les systèmes à grand nombre de porteurs

\mathcal{H}_0 contient le potentiel du cristal parfait. D'autres termes peuvent être pris en compte (phonons, non idéalités du cristal). Mais ils ne changent pas l'argument développé ici.

Pour détailler ces termes, on introduit une base d'états à une particule $\{\phi_n(\mathbf{r})\}$, qui diagonalise tout ou une partie de \mathcal{H} , et vérifie automatiquement certaines symétries du système. Le nombre quantique générique n peut être discret ou continu. Le choix de la base quantique est une question cruciale que nous aborderons ultérieurement dans le cas spécifique des détecteurs. En effet, la formulation générale de la mécanique quantique est indépendante de la base considérée. Cette équivalence est brisée par les approximations introduites au cours du raisonnement. La robustesse de chaque approximation dépend beaucoup de la base considérée. Pour notre exemple, la base des états de Bloch de la bande de conduction $\{\phi_{\mathbf{k}}\}$ diagonalise entièrement \mathcal{H}_0 . Le nombre quantique n devient dans cette base le moment cristallin \mathbf{k} . On introduit alors les opérateurs création c_n^\dagger et annihilation c_n d'un électron dans l'état quantique n . Les composantes du hamiltonien s'écrivent :

$$\mathcal{H}_0 = \sum_n \epsilon_n c_n^\dagger c_n \quad (2.2)$$

$$\mathcal{H}_{ef} = \sum_{m,n} q\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}_{mn} c_n^\dagger c_m \quad (2.3)$$

$$\mathcal{H}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{n_1, n_2, m_1, m_2} V_{n_1 n_2 m_1 m_2} c_{n_1}^\dagger c_{n_2}^\dagger c_{m_1} c_{m_2} \quad (2.4)$$

où ϵ_n sont les énergies propres du hamiltonien à une particule \mathcal{H}_0 . $c_n^\dagger c_n$ est l'opérateur nombre dans l'état n . Le champ électromagnétique a été traité en première quantification avec un hamiltonien dipolaire : \mathbf{E} est le champ électrique, et \mathbf{D}_{mn} le dipôle entre les états m et n . $V_{n_1 n_2 m_1 m_2}$ est le potentiel coulombien. Il décrit comment deux électrons dans les états m_1 et m_2 rentrent en collision coulombienne et diffusent vers les états d'arrivée n_1 et n_2 .

Le formalisme de la matrice densité [100] est adapté à la description d'un grand nombre de particules. La statistique quantique des porteurs est décrite par les moyennes d'ensemble $\langle \rangle$ sur les combinaisons des opérateurs création et annihilation. En particulier les matrices densités à une particule s'écrivent

$$f_{nm} = \langle c_n^\dagger c_m \rangle \quad (2.5)$$

Si $n = m$ la moyenne d'ensemble se fait sur l'opérateur nombre. f_{nn} décrit la population du niveau quantique n . Si $n \neq m$, f_{nm} donne la polarisation (ou cohérence) entre les deux niveaux. Les équations du mouvement se déduisent de l'évolution temporelle de ces quantités donnée dans la représentation d'Heisenberg par leur commutateur de la fonction à une particule $c_n^\dagger c_m$ avec le hamiltonien complet \mathcal{H} :

$$i\hbar \frac{df_{nm}}{dt} = i\hbar \frac{d\langle c_n^\dagger c_m \rangle}{dt} = \langle [c_n^\dagger c_m, \mathcal{H}] \rangle \quad (2.6)$$

En se restreignant à la commutation avec \mathcal{H}_0 , la dynamique de l'interaction avec le cristal parfait

$$i\hbar \left. \frac{df_{nm}}{dt} \right|_0 = (\epsilon_n - \epsilon_m) f_{nm} \quad (2.7)$$

décrit la rotation des polarisations entre les niveaux quantiques d'énergies différentes, tout en laissant les populations stationnaires (par construction de la base).

La commutation avec le hamiltonien de couplage au champ \mathcal{H}_{ef} illustre comment les termes non diagonalisés du hamiltonien total lui font perdre son caractère stationnaire. Cet effet introduit une variation des populations f_{nm} assistée par les polarisations f_{nm} :

$$i\hbar \frac{df_{nm}}{dt} \Big|_{ef} = q\mathbf{E} \cdot \sum_m \mathbf{D}_{mn} f_{nm} - \mathbf{D}_{nm} f_{mn} \quad (2.8)$$

La commutation avec le hamiltonien d'interactions \mathcal{H}_{ee} fait apparaître une dépendance des matrices densités à une particule f_{nm} par rapport aux matrices densités à deux particules $f_{n_1 n_2 m_1 m_2} = \langle c_{n_1}^\dagger c_{n_2}^\dagger c_{m_1} c_{m_2} \rangle$. La dynamique des matrices densités à deux particules fait apparaître à son tour les matrices densités à trois particules. On obtient ainsi une pyramide infinie d'équation couplées qu'il faut tronquer. C'est la première approximation que l'on fait, celle de type Hartree. On suppose que les matrices densités à deux particules sont égales au produit des matrices à une particule correspondantes. Autrement dit la valeur moyenne d'un produit d'opérateurs est égal au produit de leurs valeurs moyennes. Les particules deviennent indépendantes, moyennant une renormalisation des énergies propres.

Un autre formalisme permet le traitement entièrement quantique du transport, celui de la fonction de Green hors équilibre [101]. Contrairement au formalisme de la matrice densité dans lequel tous les opérateurs sont considérés à un temps fixé, on s'intéresse ici au propagateur qui régit l'évolution du système depuis un état q au temps t vers un état q' au temps t' .

Equation de Boltzmann

Le transport semi-classique se fonde sur l'équation de Boltzmann pour décrire la dynamique des porteurs soumis à un champ électrique statique \mathbf{F} et à un champ magnétique \mathbf{B} . La grandeur dont on écrit l'évolution est la fonction de distribution $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$. Elle décrit comment les électrons peuplent l'espace des phases en position et en impulsion au cours du temps.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nu_g \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{q}{\hbar} (\mathbf{F} + \nu_g \times \mathbf{B}) \nabla_{\mathbf{k}} f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (2.9)$$

ν_g est la vitesse de groupe (dérivée de la relation de dispersion). Notons que les termes $\nu_g \nabla_{\mathbf{r}} f + \frac{q}{\hbar} (\mathbf{F} + \nu_g \times \mathbf{B}) \nabla_{\mathbf{k}} f$ supposent que la fonction de distribution varie peu sur la longueur de de Broglie. Ces termes sont incompatibles avec une structure confinée au niveau quantique. L'intégrale de collision $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$ inclut tous les processus de diffusion significatifs : phonons, impuretés... Ils s'écrivent sous la forme

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \int \rho(\mathbf{k}') d\mathbf{k}' (W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{r}, \mathbf{k}', t) - W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)) \quad (2.10)$$

où ρ est la densité d'état dans l'espace des \mathbf{k} et $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ la probabilité de diffusion de l'état \mathbf{k} vers l'état \mathbf{k}' par unité de temps. L'analogie formelle entre les équations (2.8) et (2.10) n'est pas fortuite. Dans le cas quantique, les termes supplémentaires

du hamiltonien *couplent* les états stationnaires entre eux. Dans le cas semi-classique, le couplage devient *diffusion*.

Cette transformation de nature correspond à un changement d'échelle dans les temps caractéristiques avec lequel on regarde le transport. Dans le formalisme quantique, le temps de couplage est celui qui gouverne les équations d'évolution de la matrice densité : c'est le temps de rotation des polarisations $\tau = \hbar/(\epsilon_n - \epsilon_m)$. Dans la vision semi-classique, le temps de diffusion est instantané, comparé au temps entre deux diffusions. Le formalisme de Boltzmann regarde le transport à des temps beaucoup plus longs que celui de la matrice densité.

Le traitement semi-classique traite uniquement les termes diagonaux de la matrice densité, *ie* les populations. Le changement d'échelle de temps se fait en intégrant formellement les équations d'évolution des polarisations, afin de faire disparaître ces variables purement quantiques. Pour ce faire on "désintrique" les équations d'évolution des termes non diagonaux de la matrice densité au moyen d'une approximation de Markov. On suppose en effet que les polarisations dépendent uniquement et instantanément des valeurs des populations, et pas de leur valeur à des temps antérieurs. Autrement dit le temps d'évolution des populations est considéré très long devant le temps d'évolution (de rotation) des polarisations. Ainsi, aux temps très grands (*ie* ceux de l'évolution des populations), les couplages seront significatifs uniquement quand l'énergie est conservée, sinon leur moyenne temporelle est nulle. Les termes rotatoires en $\exp(i(\epsilon_n - \epsilon_m)t/\hbar)$ pour les polarisations deviennent les diracs de la règle d'or de Fermi lorsqu'ils sont intégrés sur des temps très longs :

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}) \quad (2.11)$$

Formalisme hydrodynamique

Dans le formalisme hydrodynamique, on se place à des temps tels que la dynamique des porteurs dans l'espace \mathbf{k} est vue en champ moyen car extrêmement rapide. Seuls certains moments de l'équation de Boltzmann sont considérés : la densité moyenne de porteurs, $n(\mathbf{r}, t) = \int f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d\mathbf{k}$, l'impulsion moyenne par porteur $\mathbf{p}(\mathbf{r}, t) = \langle \hbar \mathbf{k} \rangle$, et l'énergie moyenne par porteur $w(\mathbf{r}, t) = \langle \epsilon(\mathbf{k}) \rangle$, où $\langle \rangle$ dénote la valeur moyenne sur l'espace \mathbf{k} .

Puisque la dynamique dans l'espace du moment cristallin est quasi-instantanée, le système rejoint un état de quasi-équilibre thermodynamique et on peut définir une température électronique T_e et un flux de chaleur selon la loi de Fourier de coefficient κ . Les moments de l'intégrale de collision donnent lieu respectivement à un terme de génération-recombinaison G pour la densité, un temps de relaxation de l'impulsion τ_p et de relaxation de l'énergie τ_w respectivement. On obtient ainsi trois équations de continuité pour n , \mathbf{p} et w :

$$\frac{dn}{dt} + \nabla_{\mathbf{r}}(n\mathbf{u}) = G(n, w) \quad (2.12)$$

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} + \nu \nabla_{\mathbf{r}} \mathbf{p} + \frac{1}{n} (nk_B T_e) - q(\mathbf{F} + \nu \times \mathbf{B}) = -\frac{\mathbf{p}}{\tau_p} \quad (2.13)$$

$$\frac{dw}{dt} + \nu \nabla_{\mathbf{r}} w + \frac{1}{n} (nk_B T_e \mathbf{v}) - \frac{\kappa}{n} \Delta T_e - q\nu \mathbf{F} = -\frac{w - w_0}{\tau_w} \quad (2.14)$$

Dérive-diffusion

Le formalisme le plus simple est celui de la dérive-diffusion, qui considère seulement l'équation d'évolution de la densité de porteurs, sous l'hypothèse que l'impulsion et l'énergie moyennes relaxent beaucoup plus rapidement. En éliminant adiabatiquement l'équation sur l'impulsion (2.13) et pour un champ magnétique nul, on obtient l'expression classique des courants de dérive et de diffusion :

$$\mathbf{j} = qn\mu\mathbf{F} + eD\nabla_{\mathbf{r}}n \quad (2.15)$$

où l'on a introduit la mobilité $\mu = (q/m)\tau_p$ et le coefficient de diffusion $D = 1/q\mu k_B T_e$ par la relation d'Einstein.

A chaque franchissement d'un échelon dans la hiérarchie des modèles de transport correspond un changement de focale à travers laquelle on regarde les temps caractéristiques du transport. Le formalisme quantique est celui qui traite de l'évolution la plus rapide, *ie* celle des polarisations quantiques. Ce phénomène est regardé comme instantané dans le formalisme de l'équation de Boltzmann qui ne traite que les termes diagonaux de la matrice densité au temps caractéristique de leur évolution. C'est la dynamique dans l'espace des impulsions qui est considérée comme très rapide dans le formalisme hydrodynamique, avec l'hypothèse qu'on peut travailler sur les valeurs moyennes de la densité, de l'impulsion et de l'énergie des porteurs. Ces deux dernières quantités sont supposées varier très rapidement au regard de la densité dans le traitement en dérive-diffusion.

Il est fondamental pour un traitement rigoureux du transport de ne pas mélanger ces focales, car la validité des arguments et des hypothèses dépend foncièrement des échelles spatiale et temporelle, et des approximations faites lors de leur introduction. Un argument introduit dans une image de dérive-diffusion peut n'avoir plus aucun sens vu sous la focale quantique. Une idée introduite dans le cadre du formalisme de Boltzmann peut être totalement invalidée par les hypothèses simplificatrices qui mènent à la vision hydrodynamique. Nous garderons comme règle d'or de toujours nous restreindre à un seul cadre formel pour décrire entièrement le transport au niveau microscopique. Dans la suite, nous allons identifier lequel est le plus approprié pour décrire les processus propres aux structures inter-sousbandes.

Auparavant une remarque supplémentaire sur l'articulation micro-macro.

1.3 Vision lagrangienne et vision eulerienne

La plupart des descriptions du fonctionnement des détecteurs introduites dans le chapitre 1 obéissent à une logique lagrangienne. Dans cette description, on suit les particules au cours de leur mouvement. C'est selon cette vision que l'on décrit intuitivement le système. A l'inverse, toutes les équations du transport détaillées ci dessus obéissent à une logique eulerienne : l'observateur est fixe et fait le bilan de ce qui rentre et sort d'un sous-système donné. Cette seconde logique, moins intuitive, est beaucoup plus efficace en général. Pour un champ f donné (par exemple la densité d'électrons), la dérivée lagrangienne Df/Dt et la dérivée eulerienne df/dt sont reliées par la relation $\frac{Df}{Dt} = \frac{df}{dt} + \mathbf{V} \cdot \nabla f$, avec \mathbf{V} le vecteur vitesse. Cette terminologie correspond bien au formalisme hydrodynamique, mais est aussi valide dans

l'équation de Boltzmann (hydrodynamique de la fonction de distribution f), ou la matrice densité (équation de Liouville pour ρ).

Illustrons le genre de problèmes soulevés par cette dichotomie grâce à cette question simple : dans un QCD à 40 périodes, faut-il que des photons incidents atteignent la dernière période pour qu'il y ait photo-courant ? Un premier élément corroboré par les deux descriptions est qu'il faut absorber 40 photons pour faire passer un photo-électron. Selon la vision lagrangienne (caricaturée), l'absorption d'un photon sur la première période promet un électron vers la seconde période, qui est alors photo-excité et transite vers la troisième période, et ainsi de suite... On ne change rien au raisonnement en supposant que ce n'est plus le même électron qui est photo-excité d'une période à l'autre. Il faut donc qu'une des 40 absorptions s'effectue sur chaque période de la structure, sans quoi le photocourant ne peut pas passer. Selon cette vision, le champ électromagnétique doit être non nul sur la dernière période de la structure pour qu'il y ait du photo-courant.

Ce raisonnement est faux : les 40 photo-absorptions peuvent avoir lieu sur la première période. En effet, on a oublié que le photo-courant vient se surimposer sur un courant d'obscurité important (qui même s'il peut être macroscopiquement nul, ne l'est jamais microscopiquement !). Il est beaucoup plus fructueux de voir de façon eulerienne une photo-absorption comme une perturbation locale à l'échelle microscopique de l'équilibre stationnaire. Cette perturbation va alors être propagée d'une période à l'autre par le courant. On peut même aller au delà. Le photo-courant, qui a un sens évident au niveau macroscopique (on éclaire le détecteur et on voit un changement dans le courant), n'a pas de sens microscopiquement : le flux électronique n'est pas séparable à ce niveau.

2 Choix du modèle de transport dans les structures à puits quantiques

Dans cette section, le regard est porté sur les structures à puits quantiques. Nous allons discuter des différentes approches spécifiques à ces systèmes et justifier l'emploi du modèle choisi pour les QCDs.

2.1 Hamiltonien du problème

On cherche à décrire le comportement à l'équilibre et hors équilibre des électrons dans la bande de conduction d'une hétérostructure à puits quantiques. Le hamiltonien d'un tel système peut être décomposé comme suit :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}' \quad (2.16)$$

\mathcal{H}_0 est le hamiltonien idéal à une particule, et \mathcal{H}' exprime les non idéalités du potentiel. Il sera détaillé dans la partie 2.3. \mathcal{H}_0 s'écrit :

$$\mathcal{H}_0 = \frac{(i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} - (e/c)\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2}{2m_0} + e\Phi(\mathbf{r}, t) + V_l(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

Le terme $V_l(\mathbf{r}) = V_{at}(\mathbf{r}) + V_{het}(z)$ décrit le potentiel du cristal parfait. Il est composé de la variation atomique du potentiel $V_{at}(\mathbf{r})$, et du potentiel de l'hétérostructure

$V_{het}(z)$. Le hamiltonien contient aussi l'interaction avec le champ électromagnétique au travers du potentiel scalaire $\Phi(\mathbf{r}, t)$ et du potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$. La définition de \mathbf{A} et Φ se fait à une liberté de jauge près puisque les grandeurs physiques qu'ils décrivent sont le champ électrique \mathbf{F} et magnétique \mathbf{B} , au travers de :

$$\mathbf{F} = \nabla_{\mathbf{r}}\Phi + \frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} \quad (2.18)$$

$$\mathbf{B} = \nabla_{\mathbf{r}} \times \mathbf{A} \quad (2.19)$$

En physique du solide, la jauge de Coulomb est couramment utilisée. Dans notre cas cette jauge fait disparaître le potentiel vecteur \mathbf{A} , et on obtient alors $\Phi = \mathbf{F} \cdot \mathbf{r}$. Cette jauge conduit à l'équation de Poisson, qui lie la distribution des charges ρ au potentiel : $\Delta\Phi + \rho/\epsilon_r = 0$. ϵ_r est la permittivité diélectrique du milieu. D'autres choix de jauge sont possibles et correspondent à des visions du transport qui peuvent être très différentes. C'est notamment ce choix qui exprime la divergence de point de vue entre les oscillations de Bloch et le hopping inter-sousbandes que nous allons développer dans la suite [102]. De même que pour la base quantique, tant qu'aucune approximation n'est faite les résultats de la mécanique quantique doivent être invariants de jauge.

Le champ électromagnétique peut être décomposé en deux parties. La partie statique du potentiel correspond au champ électrique $\mathbf{F}_1(z)$ appliqué sur la structure dans la direction d'épitaxie. Le champ électromagnétique des photons de cavité, traité dans cette jauge en approximation dipolaire, est considéré comme une perturbation et sorti de \mathcal{H}_0 . Ce dernier est alors calculé dans l'approximation de la fonction enveloppe et de la bande parabolique³, qui rassemble toute l'information liée au potentiel cristallin dans une seule masse effective constante en énergie. Pour les fonctions d'onde, le terme de Bloch du potentiel cristallin étant identique pour tous les états à l'intérieur de la bande de conduction, il sera passé sous silence dans la suite. Le hamiltonien devient :

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_0^{r//} + \mathcal{H}_0^z \quad (2.20)$$

$$\mathcal{H}_0^{r//} = \frac{(i\hbar\nabla_{\mathbf{r}//})^2}{2m^*(z)} \quad (2.21)$$

$$\mathcal{H}_0^z = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right) + e\mathbf{F}_1 z + V_{het}(z) + V_{Hartree}(z) \quad (2.22)$$

$V_{Hartree}$ est la correction du potentiel liée à la résolution de l'équation de Poisson. La base de diagonalisation du hamiltonien est factorisable en un terme d'onde plane de moment cristallin \mathbf{k} dans le plan des couches, et d'une fonction enveloppe dans la direction d'épitaxie z . Les fonctions d'onde s'écrivent :

$$\phi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}//, z) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{A}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}//} \psi_n(z) \quad (2.23)$$

où \mathcal{A} est l'aire de normalisation dans le plan des couches.

3. L'approximation des bandes paraboliques, qui consiste à dire que tout le transport s'effectue au voisinage du point Γ de la première zone de Brillouin, ne sera pas discutée dans ce manuscrit. Nous considérerons que les diffusions vers les vallées L et X sont négligeables, et n'approfondirons pas sur les effets de non-parabolicité. Voir les références [103–105] pour plus de détails.

	$\tau_r, \tau_E \ll \tau_z$	$\tau_r \ll \tau_z, \tau_E \geq \tau_z$	$\tau_r \geq \tau_z$
Thermalisation	oui	oui	non
Relaxation	oui	non	pas de sens
Températures	$T_e = T_l$	$T_e \neq T_l$	pas de T_e
Traitement	Sousbandes thermalisées	Sousbandes thermalisées	Pas de découplage intra-inter

TABLE 2.1 – Récapitulatif des différentes situations possibles pour l’articulation des dynamiques incohérentes intra et inter-sousbandes. Nous considérerons dans la suite seulement la première situation.

Ainsi, sur chaque niveau d’énergie n dans la direction d’épitaxie vient se déployer une densité d’états bi-dimensionnelle, formant des sousbandes, comme montré sur la figure 1.11(a). La dynamique du transport *intra-sousbande*, qui décrit le gaz d’électrons libres dans le plan des couches, est beaucoup plus rapide que celle du transport *inter-sousbandes* dans la direction d’épitaxie. En effet, à l’intérieur d’une sousbande, les couplages (description quantique) ou la diffusion (formalisme de Boltzmann) entre les niveaux sont très efficaces. On distingue deux temps caractéristiques : le temps de perte de cohérence τ_ϕ , contrôlé principalement par les effets de rugosités d’interfaces entre les couches de matériaux différents [106–108], et le temps de fermionisation ou thermalisation τ_r pour que les électrons d’une sousbande se redistribuent selon une statistique de Fermi-Dirac. Ce dernier est dominé par les interactions électrons-électrons [109].

Au regard des temps caractéristiques du transport inter-sousbandes τ_z , la rapidité de la dynamique intra-sousbande est telle que l’on suppose que les sousbandes ont le temps de relaxer vers un état de quasi-équilibre thermodynamique, décrit par une température électronique T_e . C’est l’hypothèse de thermalisation intra-sousbande, valide dès que $\tau_r \leq \tau_z$. Typiquement, dans les structures à puits quantiques, $\tau_\phi \approx 20\text{--}100\text{ fs}$, $\tau_r \approx 200\text{ fs}$, et $\tau_z \approx 1\text{ ps}$. La robustesse de l’hypothèse de thermalisation s’appuie sur une différence inférieure à un ordre de grandeur. Cela peut sembler faible, mais cette hypothèse s’est révélée étonnamment efficace dans les modèles de la littérature [109].

A noter qu’on peut définir un dernier temps caractéristique intra-sousbande, celui de thermalisation avec le réseau : c’est le temps caractéristique des échanges énergétiques entre les électrons et le réseau τ_E . Si $\tau_E \ll \tau_z$, la dynamique inter-sousbandes est tellement lente qu’à l’intérieur d’une sousbande les électrons ont non seulement le temps de se fermioniser, mais de plus la distribution électronique revient à la température du réseau $T_e = T_l$. Si $\tau_E \gg \tau_z$, on peut encore définir une température électronique, mais elle est différente de celle du réseau : les électrons changent de sousbande avant d’avoir le temps d’échanger de l’énergie avec le réseau. Le tableau 2.1 résume les différentes situations possibles. Les structures QCD fonctionnent près de l’équilibre thermodynamique, et l’hypothèse $T_e = T_l$ est bien vérifiée. D’autres auteurs ont cependant montré, notamment dans les QCLs THz, que la température électronique diffère significativement de celle du réseau [110, 111].

L’hypothèse de thermalisation intra-sousbande permet de considérer que le transport dans le plan des couches $\mathbf{r}_{//}$ est découplé de la dynamique électronique dans la

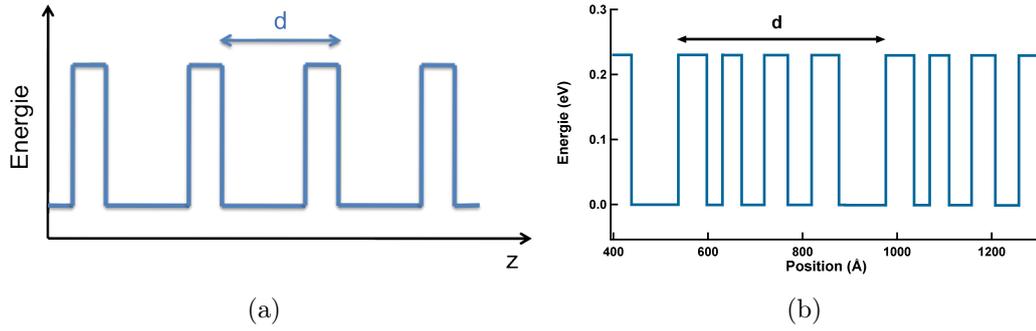


FIGURE 2.1 – (a) : Structure de bande d'un super-réseau idéal. (b) : Structure de bande du QCD15 étudié. Deux périodes y sont visibles. Ce QCD est composé de 30 périodes. Les *puits* sont en GaAs, les *barrières* en AlGaAs. L'épaisseur des couches sur une période vaut (en Å) : 99 60 22 41 47.5 50 50 58. Le puits de 99Å est dopé en Si à $2.2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

direction d'épitaxie z^4 . Nous nous sommes ramenés à un problème unidimensionnel que nous détaillons dans la partie suivante.

2.2 Bases quantiques et visions du transport

Dans cette section, nous allons discuter des bases possibles de diagonalisation de \mathcal{H}_0^z , et des différentes visions du transport induites par le choix de base. La discussion se fonde en grande partie sur les travaux de *Wacker* [112,113]. Il considère le système modèle d'un super-réseau faiblement couplé, dont le potentiel d'hétérostructure V_{het} est représenté sur la figure 2.1(a). C'est un système infini. La maille élémentaire est constituée d'un seul puits quantique, on note d la période. Jusqu'à la fin de ce chapitre, nous allons adapter cette discussion à notre système modèle : un QCD à $14.5 \mu\text{m}$ (qu'on nommera QCD 15) [85], dont le potentiel d'hétérostructure V_{het} est représenté sur la figure 2.1(b). A la différence du super-réseau classique, la maille est ici composée de plusieurs puits quantiques. Formellement, un QCD serait donc un réseau extrêmement faiblement couplé. Le rôle de deux mailles consécutives chez *Wacker* va donc plutôt être joué dans les QCDs par deux puits consécutifs au sein d'une même maille. L'accent est porté sur la compréhension qualitative ; les détails calculatoires sont disponibles dans la Ref. [113].

Réécrivons le hamiltonien de fonction enveloppe que nous cherchons à diagonaliser :

$$\mathcal{H}_0^z = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right) + eF_1 z + \sum_n \sum_{j \in \text{maille}} U_n^j(z) \quad (2.24)$$

où le potentiel de Poisson $V_{Hartree}(z)$ a été négligé (il sera réintroduit plus tard), et le potentiel de l'hétérostructure a été réécrit comme la somme sur toutes les mailles n du potentiel de chaque puits j dans la maille. Dans le super-réseau standard, $j = 1$ et dans le QCD 15, $j = 4$.

Pour les super-réseaux, on distingue trois bases dans lesquelles exprimer le hamiltonien : les états de Bloch, les états de Wannier et les états de Wannier-Stark. Dans chaque base, certains phénomènes sont traités exactement, alors que les autres sont

4. *Modulo* la dépendance en z de la masse effective.

considérés comme des corrections. On aboutit alors à trois visions du transport qui peuvent être très différentes. Trois énergies caractéristiques sont mises en regard : Ω le couplage tunnel entre les différents puits quantiques, eFd la chute de potentiel entre deux périodes (ou deux puits adjacents), et Γ l'élargissement des niveaux dû à la diffusion intra-sousbande. En effet aux temps caractéristiques du transport inter-sousbandes, la dynamique intra-sousbande est considérée comme instantanée, d'où la validité de son traitement en diffusion.

Etats de Bloch et transport minibandes

De façon analogue au traitement du cristal, on peut construire des états de Bloch $\phi_q^j(z)$ de vecteur d'onde $q \in [-\pi/d; \pi/d]$ qui diagonalisent le hamiltonien à champ électrique nul. Ces états forment des minibandes indicées par j , dont la largeur dépend du couplage Ω entre les mailles du réseau. Ces états sont facilement calculables dans des formalismes de matrice de transfert [114, 115]. Dans cette base, le champ électrique F va accélérer les électrons selon la loi $\hbar\dot{q} = eF$. Sans diffusion, les électrons devraient atteindre le bord de la zone de Brillouin en $q = \pi/d$, et donc y rentrer de l'autre côté en $q - \pi/d$. C'est le mécanisme des oscillations de Bloch⁵ qui dans l'idéal ne transporte pas de courant⁶. En pratique la diffusion (principalement intra-sousbande) des porteurs vient briser la symétrie, et est donc responsable du transport. On décrit bien cette vision dans le formalisme de Boltzmann :

$$\frac{\partial f(q, \mathbf{k}, j, t)}{\partial t} + \frac{eF}{\hbar} \frac{\partial f}{\partial q} = \left(\frac{\partial f}{\partial q} \right)_{diff} \quad (2.25)$$

avec j l'indice de la mini-bande dans la maille.

Selon cette vision, nous aurions ici cinq minibandes extrêmement fines dans notre QCD, ce qui n'est pas très adapté au transport dans ce système. En effet, elle met l'accent sur le caractère périodique et bien couplé des mailles élémentaires. Dans cette vision délocalisée du transport, l'accent est mis sur le couplage Ω . La diffusion, qui est le phénomène localisant, a une importance moindre. C'est exactement le contraire dans le cas du QCD où nous avons une structure très peu couplée avec beaucoup de niveaux, et une diffusion intra-sousbande conséquente.

Etats de Wannier et tunnel séquentiel

Les problèmes conceptuels posés par la délocalisation des états de Bloch sont résolus par les états de Wannier $\Psi^j(z - nd)$ qui en constituent l'orthogonal formel. Les fonctions d'ondes ressemblent à celles des puits isolés : elles sont chacune localisée sur un puits quantique donné. On les calcule à partir des états de Bloch selon

$$\Psi^j(z - nd) = \sqrt{\frac{d}{2\pi}} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} dq e^{-mqd} \phi_q^j(z) \quad (2.26)$$

5. Comme d est très grand devant la maille atomique, q est très petit devant les vecteurs de Bloch cristallins. Cet argument a suscité beaucoup d'intérêt pour les super-réseaux, où les oscillations de Bloch devraient être beaucoup plus faciles à observer que dans les cristaux.

6. Une correction due à la taille finie et un traitement des contacts peut néanmoins corriger ce résultat contre-intuitif.

Ces états ne constituent pas une base orthogonale du hamiltonien de champ électrique nul. Ainsi le couplage Ω entre les états localisés sur des puits adjacents est un terme non diagonal. Ce couplage est directement lié à la largeur de la minibande, et augmente avec la transparence de la barrière tunnel. Ω est grand dès que la barrière est fine, et que l'énergie des niveaux considérés est proche du sommet du puits.

Traité en perturbation au premier ordre, ce couplage va produire des oscillations de Rabi entre les niveaux des puits adjacents. Le temps Rabi, temps de vie des états de Wannier, est $\tau_\Omega = \frac{\hbar}{2\Omega}$. Ce phénomène est résonant, et donc d'une efficacité maximale lorsque les niveaux adjacents ont la même énergie. Le champ électrique vient désaccorder la résonance en renormalisant l'énergie de chaque niveau.

Encore une fois, en l'absence de diffusion, on n'observe aucun transport. Il faut que la diffusion intra-sousbande vienne détruire la symétrie des oscillations de Rabi, projetant alors l'électron dans un puits défini. Comme nous le verrons plus tard, cette vision où le tunnel transporte les électrons et la diffusion les localise, est bien adaptée aux transitions entre niveaux proches en énergie dans les QCDs.

Etats de Wannier-Stark et hopping

Les états de Wannier-Stark diagonalisent le hamiltonien \mathcal{H}_0^z complet, avec le champ électrique. Ces états s'étendent sur tous les puits qui possèdent un niveau localisé à l'énergie considérée. Dans cette base, la délocalisation des électrons par effet tunnel est considérée comme instantanée. τ_Ω est considéré comme nul devant τ_ϕ et tout se passe comme si l'électron explorait simultanément tous les états de Wannier résonants. La localisation des électrons par la diffusion intra-sousbande est négligée.

Le mécanisme de transfert des électrons entre ces états est la diffusion *inter-sousbandes*, qui fait sauter les porteurs entre les niveaux. D'où le nom "hopping Wannier-Stark". Contrairement aux deux visions précédentes où la diffusion intra-sousbande brise la symétrie d'un processus de transport pré-existant (champ électrique ou tunnel), c'est ici sa contrepartie inter-sousbandes qui est directement responsable du transfert électronique.

Le grand problème de cette vision est qu'elle ne considère pas l'élargissement des niveaux de Wannier-Stark. La cohérence des états est illimitée. Le hopping Wannier-Stark va donc être valide lorsque les effets de transfert tunnel sont négligeables, *ie* lorsque les niveaux sont très peu couplés, et/ou très désaccordés en énergie. Le dessin des fonctions d'ondes dans les QCDs correspond dans l'ensemble assez bien à ce critère dès que les transitions sont non résonantes. L'avantage de ce modèle est qu'il est très intuitif : une période de QCD correspond à un ensemble de réservoirs électroniques qui s'échangent des électrons par diffusion. C'est le modèle historique choisi par mon équipe d'accueil, et qui constitue le point de départ de mon travail de thèse.

Bilan

La différence de point de vue entre le tunnel séquentiel entre états localisés d'une part, et le hopping entre états de Wannier-Stark d'autre part est explicitée sur la figure 2.2(a). Lorsque deux niveaux de puits adjacents sont résonants en énergie, on

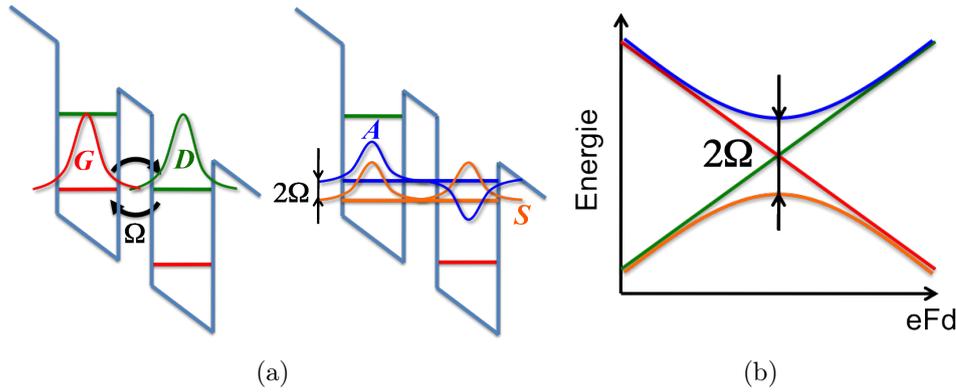


FIGURE 2.2 – (a) : Fonctions d’ondes localisées et délocalisées autour d’une résonance. Pour un temps de cohérence infiniment long, les fonctions A et S décrivent la même probabilité de présence que les fonctions G et D explorées avec un nombre infini d’oscillations de Rabi. (b) : Variation des énergies propres au passage de la résonance.

peut les représenter de deux façons différentes. Soit en états localisés à gauche G et à droite D , soit en prenant leur superposition symétrique S et antisymétrique A . La première vision considère que la diffusion intra-sousbande localise les électrons dans un puits donné, sans que ceux ci n’aient le temps d’être transférés par effet tunnel : $\Gamma \gg \Omega$. Dans la seconde, la délocalisation tunnel est beaucoup plus efficace que la localisation par diffusion $\Gamma \ll \Omega$. L’électron explore les deux puits en effectuant un très grand nombre d’oscillations de Rabi sans être diffusé. Sa probabilité de présence est bien décrite par le carré des fonctions délocalisées.

Les énergies propres correspondant à ces deux bases lorsque la tension varie autour de la résonance sont tracées sur la figure 2.2(b). Les énergies des fonctions G et D se croisent, alors que celles des fonctions A et S anti-croisent. La largeur de l’anticroisement vaut deux fois le couplage entre les niveaux localisés Ω .

Nous avons vu précédemment que le choix du modèle de transport pour décrire une structure impliquait des hypothèses dont il faut se garder qu’elles ne deviennent des présupposés. De la même façon, il faut être ici capable de mettre en perspective le choix de base et de la vision du transport qu’il induit. Chaque base correspond au traitement exact d’une partie du hamiltonien et d’approximations sur le reste, comme résumé dans le tableau 2.2. Chaque vision du transport est valide dans un domaine restreint, selon l’importance relative du couplage Ω , de l’élargissement Γ et de l’effet du champ électrique eFd (ou désaccord en énergie Δ). Ces domaines sont délimités sur la figure 2.3.

Sur la figure 2.4 sont représentées les énergies propres du hamiltonien \mathcal{H}_0^z pour 5 périodes du QCD15, en fonction du champ électrique. On cherche à identifier comment se comparent Ω, Γ, Δ pour tous les couples de niveaux. On considère que $\Gamma \approx 10 \text{ meV}$, à cause de la diffusion intra-sousbande. L’amplitude des anti-croisements (entre les courbes noires) vaut deux fois le couplage entre les niveaux considérés. Elle est en général très faible (de l’ordre de 1 meV). En effet, les périodes sont très larges avec beaucoup de puits, et les niveaux similaires dans des périodes différentes sont très peu couplés.

A l’intérieur des périodes, les anti-croisements peuvent être plus importants, dénotant des couplages plus forts. C’est le cas des niveaux 1 et 2, ainsi que 3 et

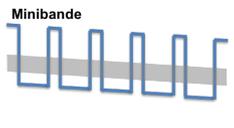
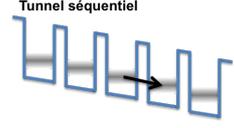
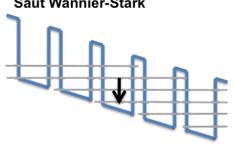
	Couplage Ω	Champ électrique eFd	Elargissement Γ
 <p>Minibande</p>	Exact : minibande	Accélération $\hbar\dot{q} = eF$	Règle d'or de Fermi
 <p>Tunnel séquentiel</p>	Perturbation au premier ordre	Désaccord en énergie ΔE	Règle d'or de Fermi
 <p>Saut Wannier-Stark</p>	Exact : états de Wannier-Stark		Non pris en compte

TABLE 2.2 – Comparaison des trois bases quantiques de travail, et des visions de transport qui en découlent.

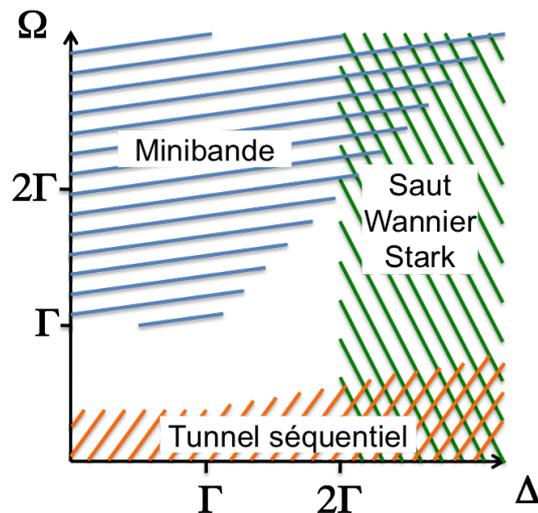


FIGURE 2.3 – Domaines de validité des visions du transport dans un super-réseau. Le traitement en minibande requiert un couplage important : $\Omega \gg \Gamma, \Delta$. Le tunnel séquentiel correspond à un couplage faible $\Omega \ll \Delta, \Gamma$. Les sauts entre états de Wannier-Stark nécessitent un désaccord en énergie important devant l'élargissement intrasousbande $\Delta \gg \Gamma$. Source : Ref. [112].

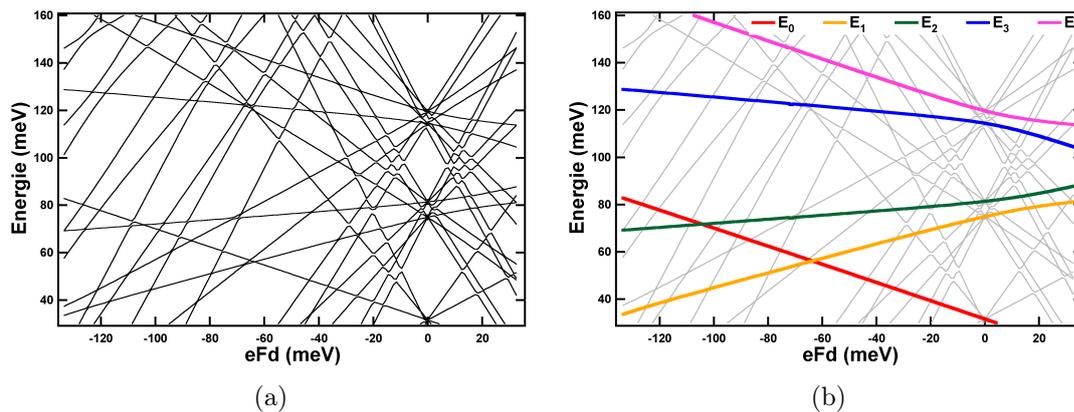


FIGURE 2.4 – (a) Energies propres du hamiltonien \mathcal{H}_0^z pour 5 périodes du QCD15. (b) Mise en évidence des énergies associées aux cinq niveaux localisés sur une même période. Deux anti-croisements intra-période 1/2 et 3/4 sont visibles pour les faibles tensions positives. Ils valent environ $2\Omega = 5 \text{ meV}$.

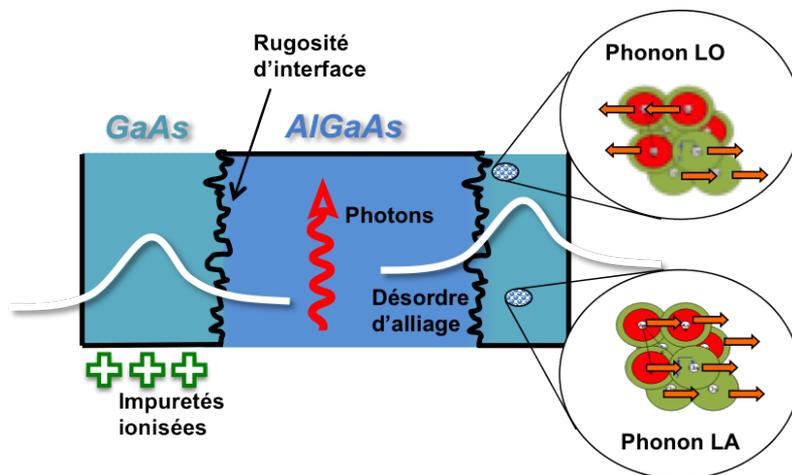


FIGURE 2.5 – Non idéalités du potentiel traitées en perturbation au moyen de la règle d'or de Fermi.

4 respectivement, dont les anti-croisements sont mis en lumière sur la figure de droite. Dans ces cas là, Ω atteint 5 meV. Dans la mesure où $\Omega < 0.5\Gamma$, les niveaux d'un QCD se situent près de l'axe des abscisses de la figure 2.3. Selon la tension appliquée, l'écart en énergie entre les niveaux Δ peut donc être inférieur ou supérieur à l'élargissement Γ . Chaque paire de niveaux tombe alors dans le domaine de validité du tunnel séquentiel ou des sauts entre états de Wannier-Stark. Ce sont ces deux modèles que nous allons utiliser dans la suite, après avoir détaillé les composantes du hamiltonien \mathcal{H}' de non idéalités.

2.3 Processus diffusifs

Que ce soit pour calculer l'élargissement intra-sousbande en tunnel séquentiel ou la diffusion inter-sousbandes en hopping Wannier-Stark, les non idéalités du potentiel sont traitées comme des termes diffusifs. Nous allons détailler les différentes contributions du hamiltonien \mathcal{H}' , illustrées sur la figure 2.5. Le but de cette discus-

sion est de présenter qualitativement l'origine physique et l'influence de ces termes dans le transport, en portant l'accent sur les processus *inter*-sousbandes. Pour les détails de calcul, le lecteur se reportera aux références [74, 106, 116, 117].

Les termes non diagonaux du hamiltonien s'écrivent :

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H}_{el} + \mathcal{H}_{ep} + \mathcal{H}_{ri} + \mathcal{H}_{da} + \mathcal{H}_{ee} + \mathcal{H}_{ii}\dots \quad (2.27)$$

\mathcal{H}_{el} : Photons de cavité. L'absorption et l'émission stimulée d'un photon peut faire transiter un électron d'une sousbande à l'autre. Pour cela, le photon doit avoir sa polarisation électrique dans la direction z . L'impulsion du photon étant négligeable devant celle des électrons, cette transition se fait en conservant le moment cristallin des porteurs : c'est une transition verticale dans l'espace $(E, \mathbf{k}_{//})$. Le taux de transitions optiquement assistées entre les niveaux 1 et 2 est proportionnel au nombre de photons dans la cavité $n_{h\nu}$, à la force d'oscillateur de la transition électronique f_{12} , et à la différence du nombre d'électrons dans les deux sousbandes $n_1 - n_2$. Cette interaction est énergétiquement résonante ($E_{21} \approx h\nu$), indépendante de la température électronique, et en général faible dans les détecteurs soumis aux flux optiques typiques du corps noir à 300K. A fort flux, par exemple sous illumination d'un laser ou concentration de lumière, cette interaction peut saturer la transition optique des détecteurs, et \mathcal{H}_{el} n'est plus linéaire avec le nombre de photons. A encore plus fort flux, il n'est plus possible de traiter \mathcal{H}_{el} en perturbation. Nous reviendrons spécifiquement sur ce terme plus tard dans ce chapitre lors de la modélisation de la réponse.

\mathcal{H}_{ep} : Phonons. A température finie, les atomes de la matrice cristalline vibrent autour de leur position dans le cristal idéal. Ces modes de vibrations sont décrits par des quasi-particules, les phonons. Dans un cristal binaire (structure ZnS), les hétéroatomes d'une même maille peuvent vibrer en phase : ce sont les phonons acoustiques. Les vibrations en opposition de phase sont décrites par les phonons optiques. Seuls les modes longitudinaux interagissent avec les transitions inter-sousbandes, d'autant plus efficacement que le transfert de moment cristallin entre le réseau et les électrons est faible.

On peut considérer la relation de dispersion $\omega_{LO}(k)$ comme constante. Alors dans le GaAs l'absorption ou émission de phonons LO (longitudinaux optiques) correspond à un échange d'énergie de $\hbar\omega_{LO} = 36 \text{ meV}$ entre les électrons et le réseau. C'est l'interaction dominante dans les hétérostructures dès que les niveaux sont espacés de plus de $\hbar\omega_{LO}$ [66, 117]. L'interaction avec les phonons LA (longitudinaux acoustiques) est moins efficace, et se fait préférentiellement pour les faibles énergies (peu de transfert de moment cristallin). On considère en général que les phonons forment des bains de bosons sans interaction, suivant les modes du matériau massif. L'intensité de ces interactions augmente fortement avec la température, puisque le nombre de phonons suit alors une statistique de Bose : $n_{ph} = (1 - \exp((\hbar\omega_{LO})/(k_B T)))^{-1}$. Pour une discussion complète sur ce sujet, voir la Ref. [118].

\mathcal{H}_{ri} : Rugosités d'interface. La transition entre le matériau de puits et celui de barrière n'est en général pas parfaitement abrupte. Elle se fait en général sur une monocouche atomique typiquement, ce qui induit de la rugosité aux interfaces. Du point de vue électronique, cette rugosité génère des diffusions élastiques. Elles sont très efficaces en intra-sousbande, et sont les principales responsables de la perte de cohérence. τ_ϕ est en général limité par ce mécanisme. En inter-sousbandes, cette

condition impose que les sousbandes soient assez résonantes.

On décrit en général le potentiel perturbatif induit par la rugosité d'interfaces comme le produit de la discontinuité de bande entre le matériau puits et le matériau barrière V_b , par une fonction de corrélation gaussienne, d'amplitude Δ égale à l'épaisseur d'inter-diffusion des matériaux puits et barrières (de l'ordre de la monocouche), et de longueur de corrélation ζ égale à la distance moyenne entre deux défauts (de l'ordre de 50Å). Ces dernières grandeurs sont estimées expérimentalement par des mesures de champ magnétique pour un bâti d'épitaxie donné [119], et comparées aux valeurs standard de la littérature [106, 120].

Ce terme du hamiltonien est une contribution de surface. Elle est d'autant plus importante que le nombre d'interfaces est grand, et que leur recouvrement avec les fonctions d'onde électroniques est important. Les rugosités d'interface ont donc une contribution plus élevée dans le transport des QCDs et des QCLs que pour les QWIPs par exemple.

\mathcal{H}_{da} : **Désordre d'alliage**. La qualité des matériaux obtenus par épitaxie par jets moléculaires est telle que la densité de défauts et de dislocations est faible dans les hétérostructures considérées dans cette thèse. Néanmoins, dans les alliages ternaires, par exemple $Al_{1-x}Ga_xAs$, la répartition aléatoire des atomes Al et Ga crée une fluctuation aléatoire du potentiel, responsable de diffusions élastiques des électrons. C'est l'équivalent en volume du traitement des rugosités d'interface, décrit par une fonction de corrélation gaussienne. Dans les structures $GaAs$, le désordre d'alliage est confiné aux barrières et est négligeable. Dans les structures $InGaAs$, les puits sont aussi composés d'alliages ternaires et cette contribution est plus significative.

\mathcal{H}_{ii} : **Impuretés ionisées**. A température finie, les impuretés donneuses Si sont ionisées, et les électrons peuplent les niveaux liés dans les puits quantiques de la bande de conduction. Les noyaux Si possèdent une charge positive qui n'est plus directement écrantée par les électrons atomiques. Ce potentiel diffuse élastiquement les électrons entre les états propres du hamiltonien, *via* une interaction coulombienne [117]. Encore une fois ce mécanisme est d'autant plus efficace que l'amplitude des fonctions d'onde est importante au niveau des dopants. On peut utiliser par exemple la diffusion par les impuretés ionisées pour améliorer l'extraction des photo-électrons dans les QCDs, en plaçant les dopants dans le puits optiquement actif.

\mathcal{H}_{ee} : **Electron-électron**. Formellement, les diffusions coulombiennes entre les électrons peuvent être traitées en perturbation, exactement comme les interactions électron-impuretés [121, 122]. Les électrons diffusés échangent moment cristallin et énergie. En ce sens, ces diffusions sont élastiques pour le gaz électronique, et inélastiques pour chacun des porteurs. Les interactions électrons-électrons sont d'autant plus efficaces que le nombre de porteurs est élevé, et que l'échange de moment cristallin est faible. De plus, on peut introduire des potentiels effectifs issus de l'approximation de Hartree-Fock qui traitent, en champ moyen pour des particules indépendantes, des effets liés à la nature fermionique des électrons et à la troncature de la hiérarchie des matrices densités. Ces effets, difficiles à calculer car très consommateurs en temps machine, sont en général négligés dans l'infrarouge, mais deviennent importants dans le THz, comme nous le détaillerons dans le chapitre 3.

Le tableau 2.3 achève cette partie, en présentant un résumé des différents termes présentés au dessus, et de leur importance relative. Les idées sont très générales et qualitatives. La composante inter-sousbandes sera illustrée dans la partie suivante.

Mécanisme	ΔE	Variation	Magnitude	
			Intra	Inter
\mathcal{H}_{el}	$\hbar\omega_l$	$n_{ph} f_{12}$	+	+ à +++
\mathcal{H}_{ep} LO	$\hbar\omega_{LO}$	T	+	+++
\mathcal{H}_{ep} LA	$\hbar\omega_{LA}$	T	++	+
\mathcal{H}_{ri}	0	nb interfaces	+++	++
\mathcal{H}_{da}	0		+	+
\mathcal{H}_{ii}	0	nb Si^+	++	+++
\mathcal{H}_{ee}	quelconque	nb e^-	+++	+

TABLE 2.3 – Résumé des non-idéalités du potentiel traitées en perturbation dans la suite. ΔE est l'énergie échangée dans la diffusion, "Variation" indique le paramètre essentiel avec lequel varie chaque contribution.

En conclusion, nous avons identifié les deux modèles pertinents pour décrire le transport dans les QCDs : le hopping Wannier-Stark et le transport par tunnel résonant. La section suivante détaille les potentialités et limitations du premier pour prédire le courant et la réponse des QCDs, et propose un modèle hybride capable de gérer l'articulation entre les régimes de transport dans ces structures.

3 Courant et réponse QCD

Le modèle historique développé pour les QCDs est un modèle diffusif fondé sur un traitement proche de l'équilibre thermodynamique du hopping de Wannier-Stark (lui même cas particulier du formalisme de l'équation de Boltzmann). Ce modèle ("cascade thermalisée" [89], raffiné en "sousbandes thermalisées" [75]) a permis de bien interpréter les performances du QCD @ $8.5 \mu m$, avec notamment la prédiction du $R_0 A$ sur plus de 9 ordres de grandeurs de température. Cependant, les caractéristiques de cet échantillon à basse température, et l'étude du QCD 15 en ont fait apparaître les limitations. Un modèle entièrement cohérent de tunnel séquentiel fondé sur l'approche de *Kazarinov* et *Suris* (modèle "KS") [91] a permis d'expliquer la caractéristique $I(V)$ à basse température pour ces deux systèmes.

C'est dans ce cadre que mes travaux de thèse sur ce sujet s'inscrivent. Les limitations des modèles précédents se résument en deux questions critiques qui constituent le coeur de ce travail : l'articulation des régimes cohérents et diffusifs pour le courant, et la modélisation de la réponse (variation en tension et gabarit spectral). Le modèle hopping Wannier-Stark simple sera tout d'abord rappelé, et utilisé pour une analyse détaillée du comportement du QCD en terme de courant (première partie) et de réponse (seconde partie). Enfin nous verrons comment intégrer la vision KS dans le modèle diffusif : la vision hybride résultante sera éprouvée. Le support expérimental sur lequel ce fonde cette étude est constitué des courbes $J(V)$ à l'obscurité, des spectres de réponse $R(\lambda)$ et des courbes du maximum de la réponse $R_{max}(V)$ pour le QCD 15 présentés sur la figure 2.6, qui seront analysées au fil du texte.

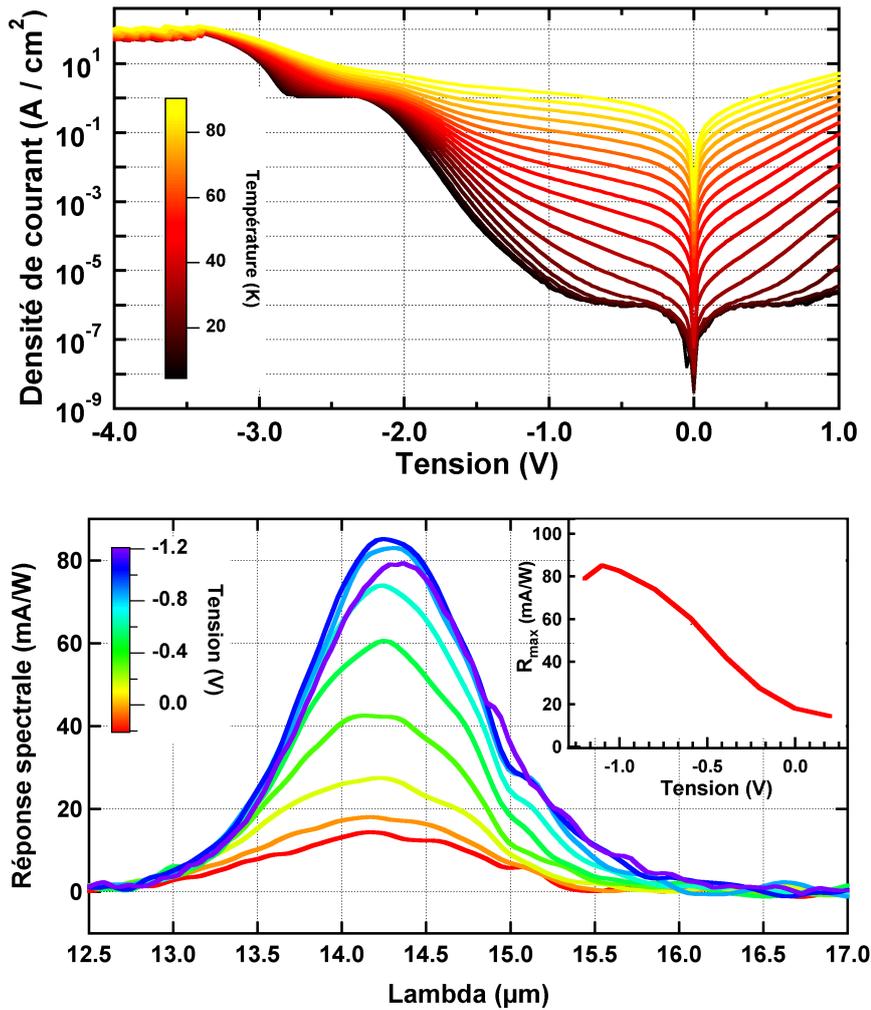


FIGURE 2.6 – Courbes expérimentales pour le QCD @ 15 μm dont la modélisation est l'objet de ce chapitre. En haut : densité de courant d'obscurité en fonction de la tension pour différentes températures. En bas : gabarits spectraux pour la réponse, pour différentes tensions appliquées sur la structure. En insert : valeur au pic en fonction de V , pour une température d'environ 20K.

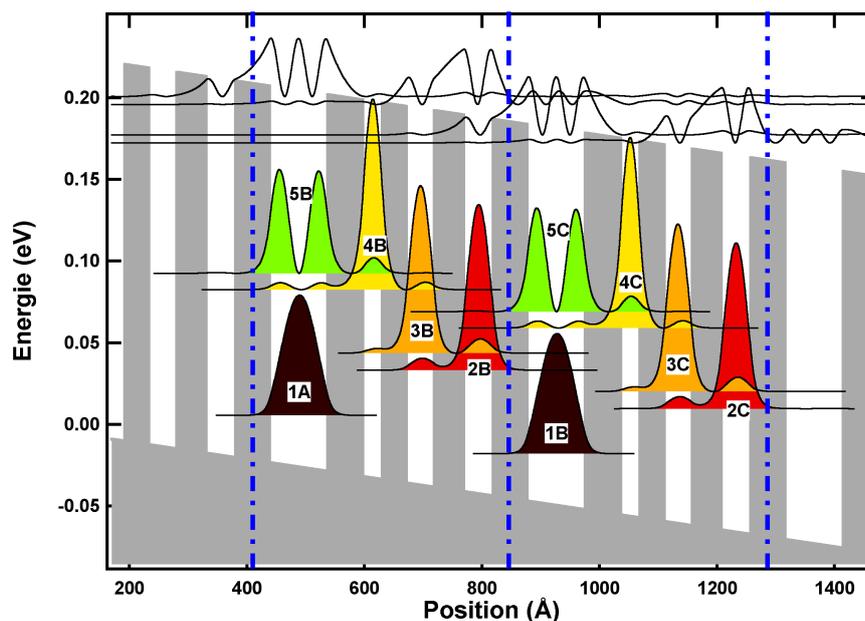


FIGURE 2.7 – Représentation des fonctions d’ondes associés à deux périodes consécutives du QCD 15 pour une tension de 23.5 mV par période. Le potentiel est tracé en gris, la limite entre les périodes en pointillés bleus. Le puits optiquement actif contient le niveau fondamental 1A d’une cascade A, et le niveau haut 5B de la cascade suivante B.

3.1 Hopping Wannier-Stark pour le courant

Le modèle de hopping Wannier-Stark considère que le transport est généré par les diffusions entre états propres du hamiltonien complet, comprenant notamment le champ électrique et l’hétérostructure complète. Ce modèle, largement utilisé dans les hétérostructures [73,123], a fait l’objet d’une implémentation numérique à Thales R&T sous le nom de code METIS, que j’ai utilisé et ai contribué à améliorer. C’est cette implémentation qui sera décrite dans la suite. Voir la Ref. [74] pour plus de détails.

Calcul de la base

A partir d’une hétérostructure donnée (*ie* une alternance de matériaux choisie par l’utilisateur), on calcule le potentiel de discontinuité de bande de conduction $V_{het}(z)$, ainsi que la masse effective prenant en compte la non-parabolicité $m^*(E, z)$, en utilisant un modèle $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ détaillé dans la Ref. [105].

Pour chaque point de tension, on peut tracer un profil de potentiel appliqué sur l’hétérostructure. On suppose que la tension se répartit de façon homogène sur la structure : le champ F est constant. Cette hypothèse est bien vérifiée pour les QCD car le transport se fait en série entre les périodes : les électrons ne passent pas par le continuum, contrairement aux QWIPs. Par conservation du courant, la chute de potentiel est la même sur chaque période de la structure⁷.

Le potentiel de Poisson, correction due à la différence de répartition spatiale entre

⁷ Ceci est vrai aux régimes de résistance différentielle négative près. De tels régimes sont observés dans ces structures, mais leur prise en compte dépasse le cadre du modèle METIS.

les charges positives et les charges négatives sera en général négligé. En effet, les impuretés Si donneuses sont localisées dans le puits principal de chaque période, puits qui contient également la quasi totalité des électrons sur son niveau fondamental en régime standard d'opération (proche de $V = 0$).

On cherche les états stationnaires de \mathcal{H}_0^z , définis par l'énergie propre E_i et la fonction d'onde $\phi_i(z)$ en résolvant l'équation de Schrödinger :

$$\mathcal{H}_0^z \phi_i(z) = \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*(E, z)} \frac{\partial}{\partial z} \right) + eF_1 z + V_{het}(z) \right) \phi_i(z) = E_i \phi_i(z) \quad (2.28)$$

En pratique un tel potentiel périodique infini est impossible à implémenter numériquement, et on applique des conditions de bord de type grande boîte à quelques périodes du QCD (typiquement 5). Les effets de bord sont négligeables pour des états liés situés sur la période centrale, et ce sont ces fonctions d'onde qu'on sélectionne. Elles sont représentées sur la figure 2.7, ainsi que les fonctions correspondantes de la période voisine. Les périodes sont matérialisées par les pointillés bleus. On considère qu'une fonction d'onde appartient à la période qui contient son barycentre⁸. Au dessus d'une certaine énergie, les fonctions d'ondes ne sont pas sélectionnées car les états correspondants ne participent pas au transport : c'est le cas des deux états (en noir sur la figure) quasi-résonants avec le haut des barrières

Chaque période contient des fonctions d'ondes liées à deux cascades consécutives, indexées ici par A, B et C . Noter que dans cette base étendue, le recouvrement entre niveaux situés dans des puits adjacents est fort : *eg* entre $3B$ et $2B$. Il est d'autant plus important que la barrière est fine et les niveaux résonants. En base localisée, la première condition donne une forte pulsation de Rabi, la seconde un faible désaccord en énergie (ou detuning ΔE). L'étendue de la plage de tension sur laquelle ce recouvrement est significatif est donc directement l'image en base étendue de la capacité des électrons à effectuer des oscillations de Rabi entre les deux niveaux considérés, tout processus de localisation par diffusion étant exclu. De plus, l'énergie de ces niveaux est parfaitement définie : aucun élargissement n'est pris en compte.

Taux de diffusion

Ces états étant stationnaires, le mécanisme générateur du courant est la diffusion inter-sousbandes par tous les termes non idéaux du hamiltonien, et qu'on traite en perturbation par la règle d'or de Fermi :

$$\tilde{\Gamma}_{ij}^{diff}(n_i, n_j) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{k, k'} \left| \langle \phi_i | \mathcal{H}_{k, k'}^{diff} | \phi_j \rangle \right|^2 \delta(E_i^k - E_j^{k'} - \Delta E_{ech}) \quad (2.29)$$

$$n_i = \frac{m_i^*}{\pi \hbar^2} \int_0^\infty f(E_i + \epsilon_k - \mu_i, T_e) d\epsilon_k \quad (2.30)$$

8. Cela peut poser problème en cas d'anticroisement de fonctions d'ondes appartenant à des périodes différentes : pour certains points de tension, une des fonctions d'onde de la période peut ne pas être sélectionnée par le solveur.

où n_i est la densité d'électrons dans la sousbande i ⁹, \mathcal{H}^{diff} est le hamiltonien du mécanisme de diffusion considéré, $E_i^k = E_i + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} = E_i + \epsilon_k$ est l'énergie dans la sousbande i avec le moment k dans le plan des couches. ΔE_{ech} est l'énergie gagnée ou perdue par le système électronique dans la transition (par exemple 36 meV pour une transition LO, 0 meV pour une diffusion sur la rugosité d'interface).

$f(E_i^k - \mu_i, T_e)$ est la fonction de distribution électronique dans la sousbande i , étant donné le quasi-niveau de Fermi μ_i et la température électronique T_e . L'existence d'un quasi-niveau de Fermi repose sur l'hypothèse de thermalisation de la sousbande. La fonction de distribution f pour des fermions est la statistique de Fermi-Dirac : $f_{FD}(E_i^k - \mu_i, T_e) = \left(1 + \exp\left(\frac{E_i^k - \mu_i}{k_B T_e}\right)\right)^{-1}$.

Selon cette convention, $\tilde{\Gamma}_{ij}^{diff}(n_i, n_j)$ est homogène à une densité de courant particulaire. Le taux de diffusion, donné par $\Gamma_{ij}^{diff}(n_i, n_j) = \tilde{\Gamma}_{ij}^{diff}(n_i, n_j)/n_i$, est lui homogène à l'inverse d'un temps. Ce temps est le temps moyen pour que chaque électron de la sousbande i soit diffusé par le mécanisme *diff* vers la sousbande j . Pour rajouter à la confusion de terminologie, ce temps est souvent décrit par la lettre τ . Dans la suite on parlera respectivement de courant de diffusion $\tilde{\Gamma}$, de taux de diffusion Γ et de temps de diffusion τ .

Pour une période de QCD avec une tension appliquée faible et à basse température, quasiment tous les électrons d'une période peuplent le niveau fondamental $1A, 1B...$ Dans ce cas tous les autres niveaux de la cascade sont très faiblement peuplés et leur niveau de Fermi est positionné loin sous le bas de la sousbande $E_i \gg \mu_i$, comparativement à $k_B T$. Hormis le niveau fondamental, la distribution de Fermi-Dirac est alors bien approximée par une distribution de Maxwell-Boltzmann pour des particules classiques : $f_{MB} = \exp\left(-\frac{E_i^k - \mu_i}{k_B T_e}\right)$. Pour de telles particules il n'y a pas d'exclusion de Pauli, et on peut montrer que la population de l'état initial se factorise et la population de l'état final disparaît de l'expression du taux de diffusion :

$$\tilde{\Gamma}_{ij}^{diff}(n_i, n_j) \xrightarrow{MB} n_i \Gamma_{ij}^{diff} = \frac{n_i}{\tau_{ij}} \quad (2.31)$$

Sur la figure 2.8 sont calculés les différents taux de diffusion Γ_{ij}^{diff} entre le niveau $1A$ et $3B$ en fonction de la différence d'énergie $\Delta E = E_{1A} - E_{3B}$, pour une température de 90K (réseau et électrons). Une fois affranchi des populations, la symétrie des rôles des états i et j implique que $\Gamma_{ij}^{diff}(\Delta E) = \Gamma_{ji}^{diff}(-\Delta E)$. C'est ce qu'on vérifie puisque chaque courbe est en fait la concaténation de $\Gamma_{1A,3B}(\Delta E)$ à gauche, et $\Gamma_{3B,1A}(-\Delta E)$ à droite. Si le recouvrement entre les deux parties est très bon, les erreurs sont expliquées par la variation des fonctions d'onde avec le voltage.

Cette figure est à mettre en regard de la colonne "Inter" de la table 2.3. Tous les mécanismes résonants (désordre d'alliage, rugosité d'interface et impuretés ionisées) et quasi-résonants (phonons LA) sont pratiquement parallèles sur toute la gamme de tension explorée. 3 régimes peuvent être identifiés pour la variation du taux de diffusion, selon comment ΔE se compare à $2\Gamma = 20 \text{ meV}$. Cette valeur¹⁰ représente

9. Cette définition est vraie à l'ordre 0, mais la densité d'état 2D n'est plus constante lorsque la non-parabolicité des sousbandes est prise en compte.

10. Le relief correspondant sur les courbes de 2.8 est une coïncidence malheureuse avec un bruit numérique.

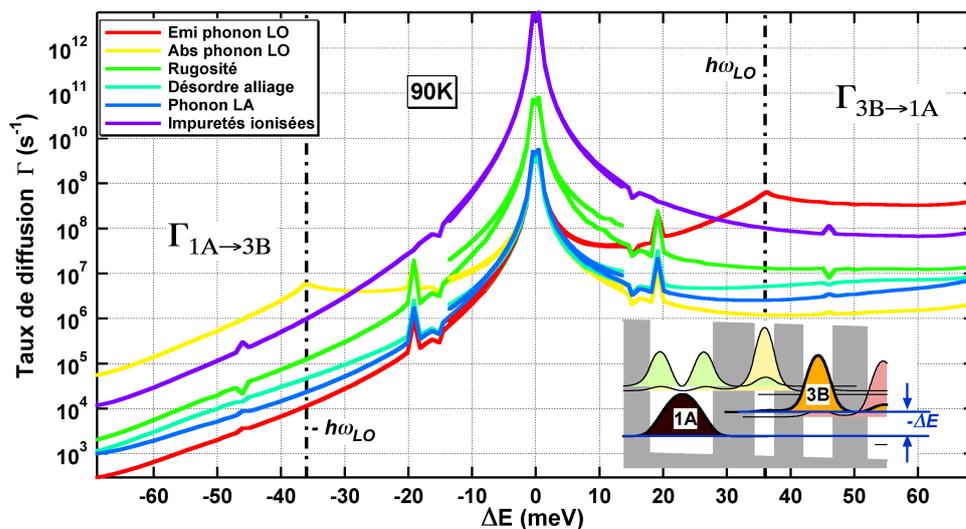


FIGURE 2.8 – Comparaison des taux de diffusions du niveau 1A vers 3B en fonction de la tension, pour différents mécanismes de diffusion. Les pics à -19 et 19 meV n'ont pas de signification physique.

la limite de validité du hopping Wannier-Stark selon la figure 2.3, étant donné un élargissement intra-sousbande $\Gamma = 10 \text{ meV}$.

- $\Delta E < -20 \text{ meV}$: l'évolution de Γ est l'image directe du nombre d'électrons dans la sousbande de départ assez énergétiques pour diffuser élastiquement dans la sousbande d'arrivée.
- $-20 < \Delta E < 20 \text{ meV}$: Ici la résonance entre i et j est explorée. L'augmentation dramatique du recouvrement entre les fonctions d'ondes (la base est le couple symétrique/antisymétrique) crée un pic de diffusion. Dans la mesure où les niveaux ont un élargissement d'environ 10 meV à 90K, cette zone est hors du domaine de validité du hopping de Wannier-Stark défini sur la figure 2.3. La prédiction erronée de telles résonances est la limitation principale du modèle diffusif : tous les artefacts qui seront analysés dans la suite résultent de ce type d'erreur.
- $\Delta E > 20 \text{ meV}$. Dans la mesure où tous les électrons de la sousbande de départ peuvent être diffusés dans la sousbande d'arrivée, le taux de transition ne varie plus significativement sur la gamme de désaccord étudiée¹¹.

Les mécanismes d'émission et d'absorption de phonon LO suivent une évolution similaire, *modulo* l'énergie du phonon¹². En effet, la condition de conservation de l'énergie est dans ce cas modifiée par le transfert d'énergie au réseau. Pour qu'il y ait émission de phonon LO possible, il faut que les électrons de 1A soient 36 meV au dessus de 3B d'où un décalage de la courbe. La résonance à l'énergie du phonon a bien été décrite théoriquement [66].

La hauteur absolue de l'ensemble des taux de diffusions dépend du recouvrement

11. On pourrait s'attendre à une diminution de l'efficacité de diffusion, car le transfert de moment cristallin est de plus en plus important. Mais cet argument n'est pas valable ici puisque l'impureté brise l'invariance par translation dans l'espace. Le cas est différent lors de la collision avec des modes massifs de phonon.

12. En désaccord positif le fait que la diffusion ne diminue pas est dû à la faible gamme d'énergie considérée.

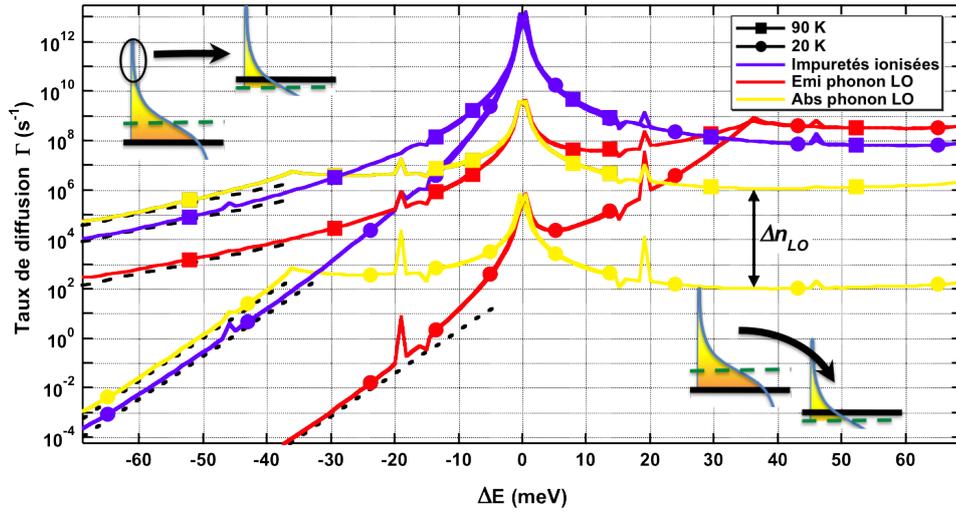


FIGURE 2.9 – Comparaison des taux de diffusions du niveau 1A vers 3B en fonction de la tension, pour différentes températures (identique pour le réseau et les électrons). En insert la configuration des deux sousbandes (avec une statistique FD) selon la tension. En pointillés noirs sont les asymptotes $\propto \exp \Delta E/k_B T$ liées à la population des porteurs chauds. Δn_{LO} est la différence d'efficacité de l'absorption de phonon LO à cause de la variation de population du bain de phonons LO entre 20 et 90K.

entre les deux fonctions d'ondes, par le biais du terme $\left| \langle \phi_i | \mathcal{H}_{k,k'}^{diff} | \phi_j \rangle \right|^2$ dans la règle d'or de Fermi. A recouvrement égal avec les impuretés et les interfaces, ce terme décroît exponentiellement avec la distance entre les deux fonctions d'ondes considérées. C'est le terme $\propto \exp(-\kappa \Delta z)$ de la "règle de la patate" du chapitre 1. C'est notamment parce que ces niveaux sont situés sur des puits non adjacents que les valeurs des taux de diffusion sont faibles. On considère usuellement que le temps d'émission d'un phonon LO est inférieur à 2 ps, alors qu'ici plus de quelques ns sont atteintes.

Pour une transition donnée, à fort désaccord énergétique l'émission ou l'absorption de phonon LO domine, et en deçà de $\hbar\omega_{LO}$, ce sont les mécanismes résonants, en particulier les impuretés ionisées et la rugosité d'interface qui sont prépondérantes. Noter que la large prééminence des impuretés ionisées provient en partie du fait qu'on a considéré le niveau 1A, en fort recouvrement avec les impuretés dans le puits principal. La contribution relative est plus équilibrée en prenant les taux entre 3B et 2B par exemple.

Malheureusement le calcul des impuretés ionisées ralentit considérablement les simulations numériques. Le temps pour calculer un point de tension passe d'environ 30 secondes à 30 minutes quand on allume le calcul de ce mécanisme. Dans la mesure où l'on cherche à avoir un modèle efficace pour le dessin de dispositifs, cette chronophage devient rédhibitoire. La configuration standard des calculs se fera donc sans impuretés ionisées, avec des vérifications occasionnelles des changements induits par leur prise en compte. Voir les Ref. [92, 124] pour des études complémentaires sur l'impact des impuretés dans les structures inter-sousbandes.

La figure 2.9 montre comment ces taux de diffusion évoluent avec la température, pour un mécanisme élastique (les impuretés ionisées), et les mécanismes LO. Soit E_{ech} l'énergie échangée lors d'une diffusion ($E_{ech} = \hbar\omega_{LO}$ ou 0). Dans le régime de

$\Delta E < \Delta E_{ech}$, on est limité par la population des porteurs. Ceci est bien marqué par les asymptotes $\propto \exp \Delta E/k_B T$ tracées à 20K et 90K en pointillés noirs, qui donnent directement le nombre de porteurs de 1A suffisamment énergétiques pour diffuser dans 3B. Dans le régime $\Delta E > \Delta E_0$, la température ne change rien aux mécanismes d'émission LO et de diffusion résonante, car on a négligé tout phénomène d'exclusion de Pauli. Par contre l'efficacité de la diffusion par absorption de phonon LO est directement réduite par la diminution de la population du bain de phonons. L'écart entre les deux courbes jaunes est donné par le rapport des populations de Bose-Einstein à 20K et 90K. La convolution du nombre de phonon LO disponibles pour l'absorption et du nombre d'électrons suffisamment chauds dans le niveau 1A donnent la dépendance en température $\propto \exp(-\Delta E/k_B T)$ de la "règle de la patate" du chapitre 1.

Courant

L'hypothèse de périodicité qui sous-tend l'application d'un champ homogène sur la structure (étayée par le caractère "série" du transport dans les QCD), permet de se restreindre au calcul des taux de diffusions entre tous les niveaux de deux périodes consécutives N et $N + 1$. En effet, pour calculer le courant dans la structure on a besoin de connaître la population de chaque niveau dans l'état stationnaire. Elle est identique pour le même niveau d'une période à l'autre. Ainsi, pour chaque niveau i de la période N , on écrit l'équation bilan suivante :

$$\frac{dn_i}{dt} = \sum_{j \neq i} \tilde{\Gamma}_{ji}(n_j, n_i) - \tilde{\Gamma}_{ij}(n_i, n_j) \quad (2.32)$$

où $\tilde{\Gamma}_{ji}(n_j, n_i) = \sum_{diff} \tilde{\Gamma}_{ij}^{diff}(n_i, n_j)$ est le courant de diffusion total entre i et j , en prenant en compte tous les mécanismes. En faisant une approximation de plus proches voisins (parfaitement vérifiée au vu de la taille des périodes), les états j avec lesquels i échange des électrons sont ceux de la période précédente $N - 1$, de la même période (excepté lui même), et de la période suivante N . Par périodicité $\tilde{\Gamma}_{i \in N, j \in N-1} = \tilde{\Gamma}_{i \in N+1, j \in N}$.

Il apparaît alors clairement que nous nous sommes placés dans le cadre du formalisme de l'équation de Boltzmann. Les termes de gradient $\nabla_{\mathbf{r}}$ et $\nabla_{\mathbf{k}}$ sont nuls à cause de la quantification des niveaux dans la direction z (la largeur des puits est inférieure à la longueur de de Broglie). On considère directement l'évolution des populations des sousbandes, termes diagonaux de la matrice densité. Les cohérences sont supposées évoluer beaucoup plus vite que les temps caractéristiques qui gouvernent le transport à l'échelle du temps de hopping inter-sousbandes, ce qui se traduit par le fait que les diffusions apparaissent ici comme instantanées.

Dans l'état stationnaire, $dn_i/dt = 0$, et on veut résoudre un système non linéaire avec pour inconnues les densités de populations n_i . Ce système n'est pas univalué, dans la mesure où la somme des lignes vaut zéro. Il faut rajouter une équation supplémentaire, qui stipule que la densité de porteurs par période est égale au dopage introduit : $\sum_{i \in N} n_i = n_{dop}$. On fait l'hypothèse que l'ensemble des donneurs sont ionisés. En pratique, il y a une grosse incertitude expérimentale sur le niveau réel du dopage, qu'on peut considérer comme un paramètre ajustable.

Le cas particulier de la statistique de Maxwell-Boltzmann est plus simple, car alors le système devient linéaire. En posant $\Gamma_i = \sum_{j \neq i} \Gamma_{ij}$, l'inverse du temps de vie dans la sousbande i , on obtient pour une période contenant p niveaux :

$$\begin{pmatrix} -\Gamma_1 & \Gamma_{2,1} & \Gamma_{3,1} & \cdots & \cdots & \Gamma_{p,1} \\ \Gamma_{1,2} & -\Gamma_2 & \Gamma_{3,2} & \cdots & \cdots & \Gamma_{p,2} \\ \Gamma_{1,3} & \Gamma_{2,3} & -\Gamma_3 & \cdots & \cdots & \Gamma_{p,3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \Gamma_{1,p-1} & \Gamma_{2,p-1} & \Gamma_{3,p-1} & \cdots & -\Gamma_{p-1} & \Gamma_{p,p-1} \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ \vdots \\ n_{p-1} \\ n_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ n_{dop} \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

dans lequel chaque terme non diagonal contient également la diffusion depuis la même période, la période précédente et la période suivante. Ce système linéaire est simple à résoudre, toute la difficulté et la lourdeur numérique se situent dans le calcul des taux de diffusion. La résolution du système non-linéaire associé à la statistique de Fermi-Dirac se fait par des algorithmes plus complexes de descente de gradient.

Le courant total dans la structure est calculé en comptabilisant les courants de diffusions inter-sousbandes qui passent à travers n'importe quelle interface dessinée dans l'espace (E, z) . Les fonctions d'ondes sont partagées selon que leur barycentre se situe à gauche ou à droite de l'interface choisi. Les flux de gauche à droite sont comptés positivement, et ceux de droite à gauche négativement. La loi de conservation de la charge garantit que n'importe quel interface peut être choisi : par exemple entre deux cascades successives, ou entre deux périodes successives.

La conservation du courant en régime stationnaire et l'hypothèse d'homogénéité sont les éléments clés qui permettent de passer de l'échelle des puits quantiques à l'échelle de la mesure expérimentale. De plus, tous les raisonnements sont ici menés en valeur moyenne. Si le temps moyen pour qu'un électron de l'état i soit diffusé vers l'état j vaut τ_{ij} , le courant inter-sousbandes de i vers j ne vaut n_i/τ_{ij} qu'en moyenne. Sa valeur instantanée fluctue autour de cette valeur moyenne (dans le modèle de Boltzmann, la durée de la diffusion est considérée comme beaucoup plus faible que le temps moyen τ_{ij}). Cette fluctuation est passée sous silence dans les raisonnements mettant seulement en jeu la valeur moyenne du courant. Elle est au moins en partie, responsable des phénomènes de bruit électronique dans les détecteurs, de bruit de photons dans les lasers, *etc...* Derrière la simplicité apparente de la conservation du courant se cache une étape non triviale du raisonnement.

Sur la figure 2.10 est représentée la comparaison entre les courbes $J(V)$ expérimentales et théoriques à l'obscurité, dans le cas du calcul dit standard : base étendue pour le calcul des fonctions d'ondes, statistique de Maxwell-Boltzmann pour les sousbandes, température électronique égale à celle du réseau, pas d'impuretés ionisées, paramètres de structures nominaux.

Analyse des courbes expérimentales : Le faisceau des courbes expérimentales montre l'articulation d'un régime cohérent du transport et d'un régime diffusif en fonction de la température. Les courbes sont tracées tous les 10K de 20 à 90K. Les tensions positives nous intéresseront peu dans ce système : elles correspondent en effet à des régimes de polarisation en direct des diodes QCD avec de forts courants, donc peu utiles en détection. Noter que ces régimes sont bien décrits par les mo-

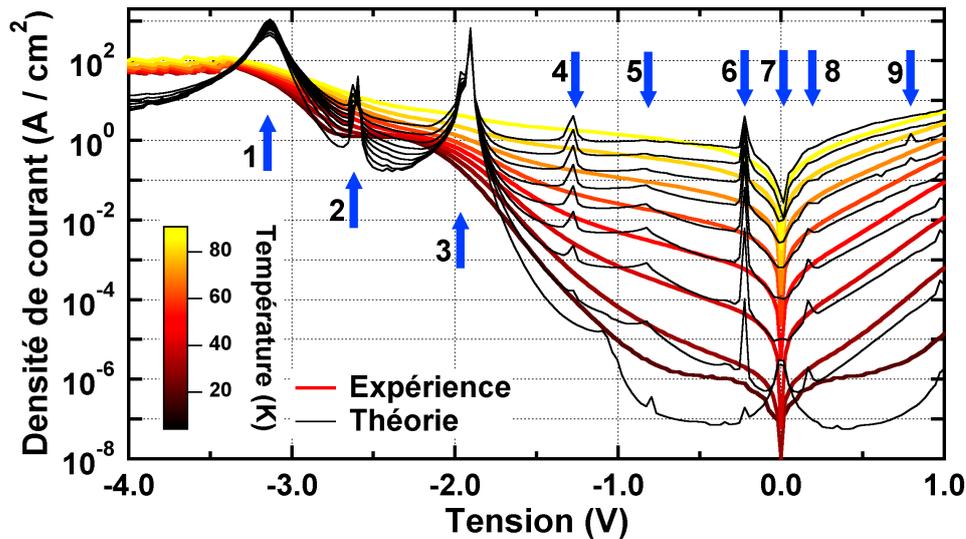


FIGURE 2.10 – Comparaison des courbes théoriques (noir) et expérimentales (couleur) pour le courant d’obscurité dans le QCD 15, pour des températures de 20K à 90K. Le dopage théorique n’est pas ajusté par rapport à la valeur nominale de $\rho = 2.2 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$. Les pics de résonances sur les courbes théoriques sont indexées de 1 à 9.

dèles purement diffusifs. Nous nous concentrerons principalement sur les tensions négatives.

A basse température ($T < 25\text{K}$), le courant ne dépend pas de T . Toutes les courbes se superposent à celle, représentée sur la figure 2.10, correspondant à 20K. Dans la suite, ce régime sera dénommé *cohérent*. Trois épaulements et plateaux sont identifiables : entre -0.2V et -0.7V , entre -2.1V et -2.8V , et au delà de -3.2V . Un agrandissement sur les plateaux, non représenté ici, montre des motifs de dents de scie sur le courant.

Dès que la température se met à influencer la valeur du courant, on s’éloigne du régime purement cohérent pour entrer dans le régime *diffusif*. En particulier à haute température ($T > 80\text{K}$), les bosses et plateaux ont pratiquement disparu. Dans ce régime la mesure des énergies d’activation liée à la dépendance en température peut être utilisée pour déterminer quelle transition inter-sousbandes contrôle le transport. La température rend les diffusions intra et inter-sousbandes plus efficaces en étalant les distributions électroniques, et peuplant le bain de phonons (notamment pour l’absorption LO).

Analyse des courbes théoriques : Sur la figure 2.10, les courbes théoriques correspondantes sont tracées en noir. Sur l’ensemble de la gamme de tension et de températures, l’accord est qualitatif, voir quantitatif entre -1V et 1V aux températures intermédiaires (40-70K). Noter que ni la température ni le dopage n’ont été ajustés. Ces deux grandeurs, dont la valeur peut varier autour de la valeur nominale, ont globalement pour effet de traduire verticalement l’ensemble des courbes sans les déformer. Hormis cette erreur systématique peu gênante en terme d’ingénierie quantique, on distingue trois grandes classes de désaccords intéressantes :

Fort désaccord à 20K : Le modèle METIS diffusif décrit très mal les basses températures du régime dit cohérent. La courbe théorique se situe bien en dessous de

Indice	Voltage (V)	Anticroisement
1	-3.1	1A-3B
2	-2.6	1A-5C
3	-1.9	1A-2B
4	-1.3	3B-4C
5	-0.8	1A-3B LO
6	-0.2	2B-3C
7	0	*A-*B
8	0.15	3B-2C
9	0.8	5B-2C

TABLE 2.4 – Niveaux mis en jeu dans les anticroisements indiqués sur la figure 2.10. Noter que le pic 5 ne correspond pas à un anticroisement, mais à une résonance d’absorption de phonon LO pour la diffusion de 1A vers 3B.

la courbe expérimentale, notamment autour de 0V. Ceci montre bien que la vision du hopping Wannier-Stark est une vision partielle du transport. D’autres mécanismes de passage du courant, alternatifs ou complémentaires, doivent être considérés.

Saturation de la théorie à haute température : Particulièrement dans la gamme entre -1.5V et 0V, la prédiction théorique sature en dessous de la valeur expérimentale. La plus haute des courbes théoriques correspond en effet à une température de 100K, alors que l’expérience est à 90K. Le plateau n’est pas observé expérimentalement.

Pics de résonance : C’est la principale source d’erreur entre la théorie et l’expérience. Ces pics, indexés de 1 à 9 sur la figure 2.10, correspondent tous à une résonance entre deux (ou plus) niveaux de la structure, qui se retrouvent à la même énergie. La base de diagonalisation qui émane de la résolution de l’équation de Schrödinger est la base étendue symétrique / antisymétrique, chaque fonction d’onde étant délocalisée sur les deux puits. Tout se passe comme si l’électron diffusé dans le puits de gauche, était instantanément transporté vers le puits de droite. Ce court circuit génère une augmentation artificielle du courant. La largeur du pic de résonance est une image directe de la force du couplage entre les deux états qui anticroisent : un pic fin indique un anticroisement entre deux niveaux assez éloignés dans la structure, un pic large réfère à un anticroisement d’états plus couplés. La hauteur du pic est fonction de l’écartement entre les deux niveaux, et de la quantité de courant qui passe effectivement par la transition. En première approximation, le courant est proportionnel à la population du niveau amont. A courant égal, plus la délocalisation est importante, plus le pic sera élevé. Ceci explique que les pics, quand ils apparaissent, sont toujours observés à la même tension (ils émanent de la structure de bande), mais pas avec la même intensité selon la température, car cela met en jeu la répartition électronique des électrons sur les sousbandes.

Pour tous les pics de résonance observés sur la figure 2.10, le tableau 2.4 identifie quels niveaux sont concernés par l’anticroisement. Deux anticroisements impactent particulièrement le transport : le cas **1** et le cas **3**, pour lesquels les structures de bandes associées sont représentées sur la figure 2.11. Dans le cas **1**, la transition 1A-3B qui limitait le courant devient court-circuitée, et le flux des électrons est alors limité par la transition normalement plus efficace 2B-1B, puisqu’elle bénéficie de

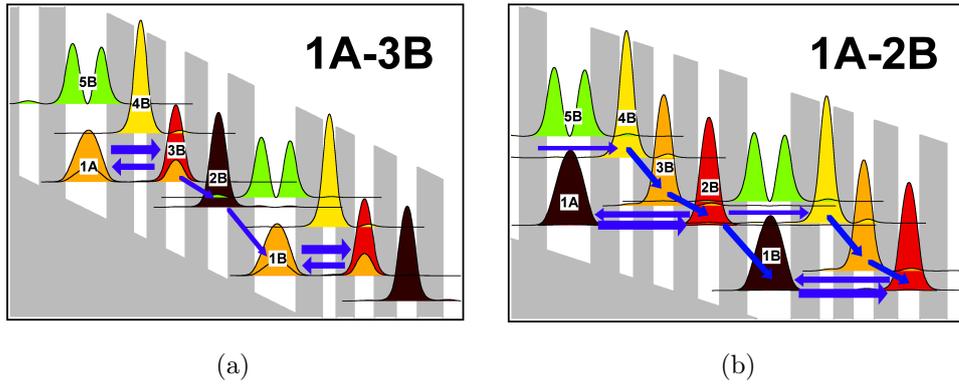


FIGURE 2.11 – Structures de bande correspondant aux deux anticroisements. En (a), anticrossing 1 entre 1A et 3B, et en (b), anticrossing 3 entre 1A et 2B. Les flèches bleues représentent les principaux courants inter-sousbandes. Leur épaisseur donne une image relative de l’amplitude du flux considéré.

l’émission du phonon LO. Le cas de la résonance **3** est plus complexe, car il résulte d’un double anticrossing, entre 1A et 2B d’une part, et entre 2B et 4C d’autre part. Ceci mène à un court-circuit plus long qu’une période, d’où l’intensité du pic associé. Le flux théorique du courant suit alors deux chemins principaux : 2B-1B-2C, et 2B-4C-3C-2C.

Ces anticrossings ont le vice et la vertu de s’engouffrer dans la faille et d’exploiter au maximum la grande approximation du modèle de hopping Wannier-Stark : la diffusion intra-sousbande est totalement ignorée dans le calcul de la base. Cette diffusion est en réalité le facteur de localisation spatiale des électrons. La négliger permet alors aux électrons de se délocaliser instantanément par effet tunnel sur tous les états accessibles à une énergie donnée. Et on arrive à des aberrations lorsque le temps de délocalisation devient comparable aux temps inter-sousbandes.

Contrairement aux autres artefacts, les cas **1** et **3** ont un écho dans la mesure expérimentale. Les tensions auxquelles ils apparaissent correspondent aux épaulements et plateaux expérimentaux à basse température. Une description appropriée du régime résonant en modèle de tunnel séquentiel permettrait donc de mieux interpréter des aspects du transport QCD. C’est donc par un travail sur la base quantique et sur la prise en compte des temps tunnels que la modélisation du courant peut être améliorée. C’est l’objet de la section 3.3.

Retour sur deux hypothèses

Avant de passer à la réponse spectrale, il convient d’explicitier deux hypothèses que nous avons faites dans le calcul du courant : la non prise en compte des impuretés ionisées, et le choix d’une statistique de Maxwell-Boltzmann au détriment d’une statistique de Fermi-Dirac. Les courbes $J(V)$ calculées avec les impuretés ionisées et la statistique fermionique sont comparées au modèle dit standard et à l’expérience sur la figure 2.12.

La figure 2.8, ainsi que des mesures de magnéto-transport [92], indiquent que parmi les diffusions inter-sousbandes résonantes, les impuretés ionisées dominent les autres processus. La figure 2.12 justifie pourquoi, d’un point de vue opérationnel,

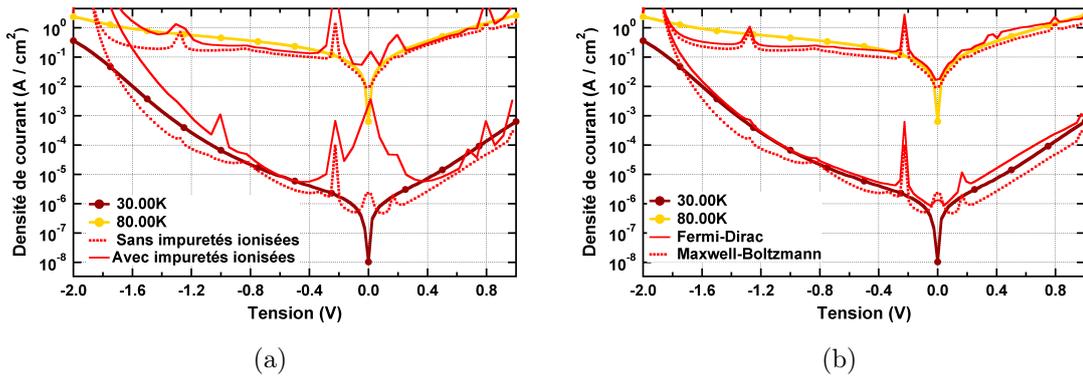


FIGURE 2.12 – Comparaison du courant d’obscurité expérimental avec la théorie en configuration standard, dans le cas où on prend en compte (a) les impuretés ionisées, et (b) la statistique de Fermi-Dirac. Température et dopage ne sont pas ajustés.

on choisit pour le moment de les négliger. Que ce soit à 30K ou 80K, prendre en compte ces interactions aggrave tous les artefacts résonants produits par le modèle, sans gain notable en terme de précision générale. Et au prix d’un temps de calcul multiplié par 60. Avant de s’interroger sur la pertinence de leur prise en compte, il est absolument nécessaire de régler les problèmes de base.

Plus pertinente est la question de la statistique. En effet, que ce soit à 30K en tension négative, ou à 80K en tension positive, l’amélioration apportée par la distribution de Fermi-Dirac permet d’atteindre un accord quantitatif avec l’expérience (tous les paramètres sont nominaux). Certains artefacts sont même gommés, comme le pic d’absorption de phonon LO à $-0.8V$ par l’effet de l’exclusion de Pauli. Le gros problème est numérique : lors d’un anticroisement, les flux de courant qui passent entre les deux états résonants sont très supérieurs aux autres flux dans la structure. Cette dichotomie rend l’algorithme de résolution de l’équation bilan non linéaire instable.

Néanmoins, on remarque qu’en régime purement diffusif (à 80K), les courbes théoriques pour les deux statistiques semblent varier d’un facteur constant sur toute la gamme de tension représentée, qui vaut à peu près 2. Dans ce régime proche de 0V, on a mentionné que seul le niveau 1A est dégénéré et mal décrit par une statistique de Maxwell-Boltzmann. Dans la mesure où ce niveau est beaucoup plus bas en énergie que les niveaux vers lesquels il envoie des électrons, il s’agit de voir quelle erreur dans le nombre d’électrons chauds de cette sousbande on introduit par la distribution de particules classiques. L’annexe A montre que cette erreur s’exprime analytiquement par un ratio ϵ qui dépend du dopage par période ρ :

$$\epsilon(\rho) = \frac{\exp\left(\beta \frac{\pi \hbar^2}{m^*} \rho\right)}{\log\left[1 + \exp\left(\beta \frac{\pi \hbar^2}{m^*} \rho\right)\right]} \quad (2.34)$$

où $\beta = 1/k_B T$. Cela donne bien le rapport de $\epsilon = 130$ observé sur la figure 22 pour un niveau de Fermi de 30 meV, et on trouve un facteur $\epsilon = 2.21$ pour un dopage de $2.2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, à comparer au facteur d’environ 2 pour la translation des courants calculés. L’écart entre les deux valeurs pourrait être dû aux effets de blocage de Pauli, l’autre aspect du changement de statistique.

La section suivante s'intéresse à la modélisation de la réponse. On peut s'attendre à rencontrer des problèmes en vision Wannier-Stark, dans la mesure où le dessin du QCD repose précisément sur une extraction résonante des photo-électrons.

3.2 Hopping Wannier-Stark pour la réponse

Modèle

La réponse spectrale d'un QCD exprime foncièrement le nombre d'électrons qui traversent la structure par photon incident. Ces photons, en incidence normale, ne peuvent être absorbés dans les puits quantiques, et une structure de couplage est nécessaire pour transférer ces photons vers des modes optiques ayant une polarisation non nulle dans la direction z . Etant donné un flux incident sur une structure donnée, la connaissance (et l'ingénierie) des modes optiques de cavité, de leur population et de leur recouvrement avec les couches actives est un métier à part entière [61, 125], complémentaire direct du sujet traité dans ce chapitre. Voir le chapitre 5, pour une vision complète photonique/électronique d'un détecteur QCD.

Par souci de cohérence, dans la suite on considèrera un mode de cavité donné, dont la population photonique et le recouvrement avec les couches actives est connu : ils seront respectivement normalisés à 1. Cela implique que la valeur des réponses données ici n'a de sens que relativement : on s'intéressera plus à la variation des gabarits spectraux avec la tension qu'à leur valeur absolue. Celle-ci donne déjà un bon ordre de grandeur de la réponse réelle, mais on ne cherche pas ici un accord quantitatif.

Dans ce cas, le calcul de la réponse par l'algorithme METIS est très simple. Pour chaque point de tension, on calcule le courant d'obscurité en prenant en compte tous les mécanismes de diffusion désirés, sauf l'absorption/émission stimulée par les photons de cavité. Puis, pour chaque longueur d'onde du spectre étudié, on injecte des photons dans la cavité, allume l'interaction photon-électron et recalcule le courant résultant. La différence entre le courant sous illumination et le courant d'obscurité, normalisée par le flux de photons injectés dans la cavité donne la valeur de la réponse spectrale. Contrairement à un laser, le nombre de photons dans la cavité est faible et on peut ignorer la résolution de l'équation bilan sur la population photonique. Le régime de couplage lumière-matière étant faible, le taux d'absorption pour chaque transition inter-sousbandes est calculé par la règle d'or de Fermi, comparable à l'équation (2.30) :

$$\Gamma_{ij}^{abs}(n_i, n_j, \hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar n_i} \sum_{k,k'} |\langle \phi_i | \mathcal{H}_{k,k'}^{abs} | \phi_j \rangle|^2 \mathcal{L}(E_i^k - E_j^{k'} - \hbar\omega) \quad (2.35)$$

$$\mathcal{L}(E_i^k - E_j^{k'} - \hbar\omega) = \frac{f(E_i^k - \mu_i, T_e) \left(1 - f(E_j^{k'} - \mu_j, T_e)\right)}{(E_i^k - E_j^{k'} - \hbar\omega)^2 + \Gamma_{opt}^2} \quad (2.36)$$

où $\hbar\omega$ est l'énergie du photon absorbé, et le hamiltonien de couplage est calculé en approximation dipolaire¹³. Le cadre strict du hopping Wannier-Stark développé

13. C'est la valeur du carré du champ électrique optique qui contient le nombre de photons.

jusqu'ici a été élargi : pour cette interaction, le δ de la conservation en énergie est ici devenu une lorentzienne, de largeur Γ_{opt} .

En effet, les spectres d'absorption observés expérimentalement ont des largeurs spectrales finies, ce qui ne peut se comprendre théoriquement dans le cadre de l'équation (2.30). En ignorant les phénomènes de non-parabolicité, les sousbandes sont parfaitement parallèles. Puisque le photon porte une impulsion négligeable devant celle des électrons, les transitions inter-sousbandes assistées optiquement sont verticales, donc à énergie constante sur tout l'espace des k . L'équation (2.30) prédirait des spectres discrets aux différences d'énergies propres de \mathcal{H}_0^z . L'introduction d'une lorentzienne permet de prendre en compte le temps de vie fini de la transition inter-sousbandes : sa cohérence est en effet détruite par la diffusion intra-sousbande des porteurs au sein des deux niveaux de la transition, et par la diffusion inter-sousbandes hors de ces niveaux.

Moyennant un calcul des taux de diffusion intra-sousbande, il est possible de retrouver Γ_{opt} *a priori*, en suivant la méthode de la Ref. [106]. Ce calcul étant en cours d'implémentation dans METIS, ce travail a été mené avec une largeur de raie *ad hoc* de 7 meV, extraite des courbes expérimentales d'absorption à environ 25K. Nous vérifierons que c'est bien cette largeur de raie qui détermine le gabarit spectral de la réponse, et qu'on n'est pas limité par l'acceptance spectrale du dispositif de couplage optique.

Il est théoriquement possible de généraliser le cadre du hopping Wannier-Stark et de prendre en compte le temps de vie fini des transitions électroniques pour tous les processus de diffusion. Cela aurait le mérite de faire disparaître tous les pics de résonance. Deux remarques cependant. La première est d'ordre numérique. Sachant que le code est déjà exigeant en termes de performances processeur, ajouter une largeur aux transitions électroniques revient à rajouter au moins une boucle dans les calculs de taux de transition : le temps de calcul prend alors deux ordres de grandeur, ce qui devient rédhibitoire en terme d'utilisation. La seconde est d'ordre physique. N'oublions pas que ces δ émanaient de l'hypothèse markovienne que les cohérences de la matrice densité évoluent beaucoup plus vite que les populations. Seuls les termes rotatoires $\exp(i(\epsilon_i - \epsilon_j)t/\hbar)$ parfaitement résonants donnent une intégrale non nulle à temps infini. Plutôt que d'essayer de généraliser notre formalisme de l'équation de Boltzmann, il serait sûrement plus fructueux de développer un modèle de transport entièrement en matrice densité.

Résultats

L'absorption multipassage du QCD 15, présentée sur la figure 2.13 montre un pic d'absorption centré à 14.2 μm . Cette longueur d'onde correspond bien au pic de la réponse expérimentale montrée sur la figure 2.14, ce qui laisse penser que l'acceptance spectrale du réseau de diffraction n'est pas limitante pour cet échantillon. Les gabarits spectraux calculés à 20K pour un élargissement de 7 meV, se comparent bien à l'expérience *modulo* trois erreurs principales.

Premièrement, le pic de réponse théorique (correspondant au pic théorique d'absorption, non représenté), est décalé à 14.7 μm par rapport aux 14.25 μm de l'expérience, pour les fortes tensions négatives. Cette erreur systématique de 3 meV sur l'énergie des photo-réponses a plusieurs explications possibles, en cours d'analyse. La plus probable est le traitement de l'énergie de Kane dans le calcul k.p [127],

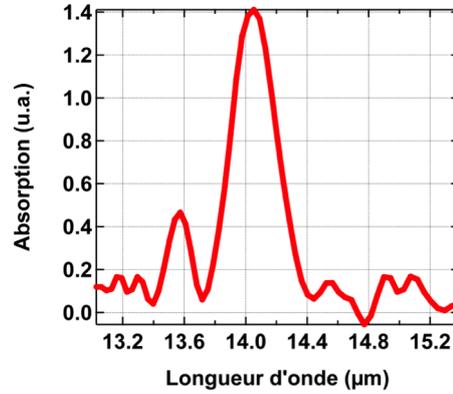


FIGURE 2.13 – Absorption multipassage du QCD 15 en incidence Brewster à température ambiante, après soustraction de la ligne de base. D’après la Ref. [126].

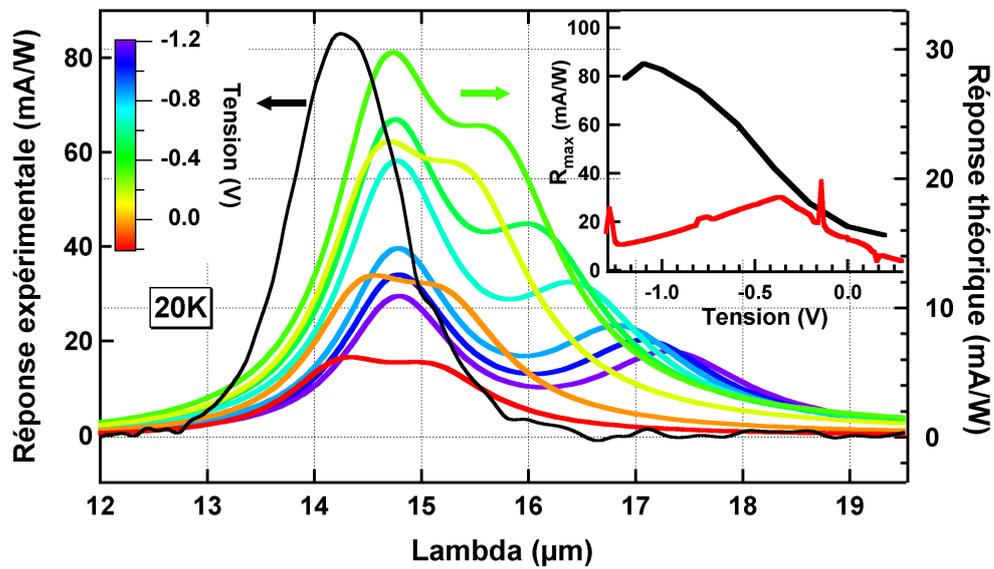


FIGURE 2.14 – Couleur (échelle de droite) : Gabarits spectraux calculés à 20K avec $\Gamma_{opt} = 7$ meV, pour différents points de tension. Noir (échelle de gauche) : Rappel du gabarit spectral expérimental à $V = -1.1V$. Insert : Maximum de la réponse en fonction de la tension, noir pour l’expérience, rouge pour la théorie.

mais on peut aussi noter la non prise en compte de l'effet de dépolarisation (faible cependant pour ces niveaux de dopage).

Deuxièmement, le gabarit spectral théorique est la somme de deux contributions : 1A-5B et 1A-4B. Ces deux contributions sont aussi observables sur l'absorption calculée. La contribution 1A-5B à la réponse se situe à $14.75 \mu m$, et reste stable en tension au delà de $-0.2V$, car les deux fonctions d'ondes de la transition appartiennent au même puits et ne subissent pas d'effet Stark du premier ordre. Elle est légèrement translatée vers le bleu autour de $0V$. Cela provient du fait que sur le flan de l'anticroisement 5B-4B, le niveau supérieur 5B est repoussé vers les hautes énergies. La contribution 1A-4B est déplacée en longueur d'onde de $15.1 \mu m$ à $0.2V$, à $17.3 \mu m$ à $-1.2V$, à cause de l'effet Stark entre le puits principal et le premier niveau de la cascade.

Ce second pic n'apparaît pas dans les courbes expérimentales, principalement car la force d'oscillateur entre l'état 1A et l'état 4B localisé sur son puits est très faible (la barrière entre ces deux puits est épaisse de 6 nm). Encore une fois la prise en compte d'états non localisés par la diffusion comme base de calcul génère des problèmes en cas de résonance : c'est ici le doublet de niveaux 5B-4B qui est mal représenté par la base symétrique/antisymétrique.

La dernière erreur est uniquement liée au défaut du modèle de transport. L'amplitude relative des courbes de réponses calculées ne suit pas du tout l'évolution expérimentale en fonction de la tension. Alors que dans la mesure, le maximum de réponse est atteint pour une tension de $-1.1V$, en théorie le maximum est prédit à $-0.36V$. L'amplitude d'un pic de réponse est la convolution de deux grandeurs : l'absorption de la transition et la probabilité d'extraction des photo-électrons. La première va donner l'efficacité de la transformation des photons de cavités en électrons. Elle est au premier ordre indépendante de la tension. La variation de l'amplitude des pics de réponse est donc entièrement contenue dans la probabilité d'extraction, *ie* la capacité des photo-électrons à rejoindre la période suivante.

Nous venons de réintroduire un argument lagrangien, après s'être astreint à une description eulerienne depuis le début de cette analyse¹⁴. Même si la bonne façon de calculer la réponse est de quantifier la perturbation de l'état stationnaire d'obscurité par l'allumage d'une source de diffusion complémentaire, il est instructif d'essayer de retracer le parcours des photo-électrons.

A l'ordre zéro, un photo-électron dans le niveau NB a une probabilité p_{NB} d'atteindre le niveau $(N-1)B$ sans retourner au niveau 1A.

$$p_{NB} = \frac{\Gamma_{NB-(N-1)B}}{\Gamma_{NB-(N-1)B} + \Gamma_{NB-1A}} \quad (2.37)$$

Ceci exclut toute remontée à l'intérieur de la cascade. La condition pour une bonne extraction, est donc $\Gamma_{NB-(N-1)B} \gg \Gamma_{NB-1A} \quad \forall N \in B$. Sur la figure 2.15, cela correspond à la courbe en traits plein au dessus de la courbe pointillée pour chaque niveau. Les taux de diffusion non représentés sont plus faibles (mais on a $p_{2B} \approx 1$). On distingue deux régimes autour du maximum prédit à $-0.36V$, tension pour laquelle on a tracé la structure de bande sur la figure 2.16(b).

14. Une illustration de la force de la vision eulerienne : si pour calculer le courant, on choisit comme interface de comptage la ligne qui sépare deux cascades, on ne s'intéresse absolument pas à savoir si le photo-électron de 5B a réussi à atteindre 1B ou pas. En effet, l'interface ne coupe pas la cascade, donc cette partie du trajet électronique.

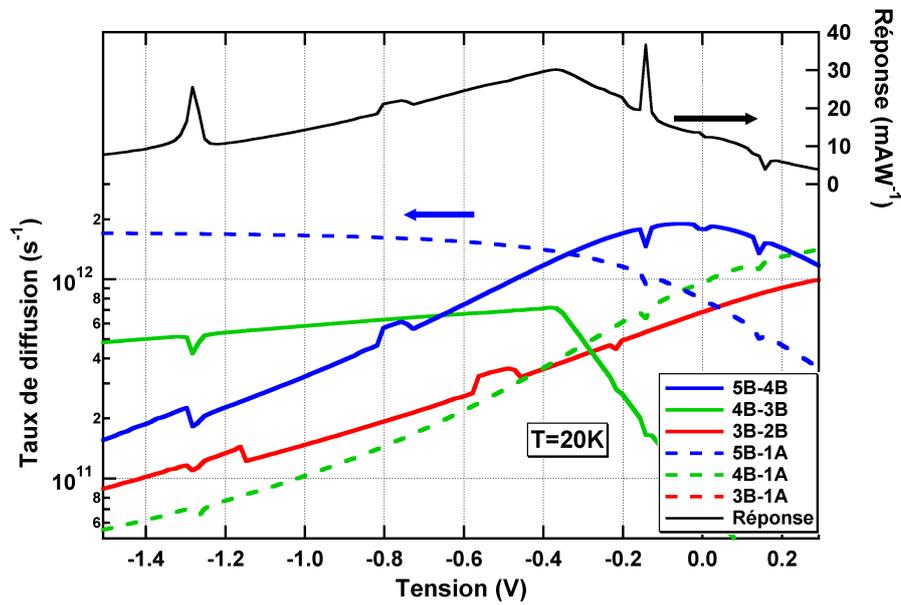


FIGURE 2.15 – En haut, à droite : Maximum de la réponse prédit en fonction de la tension. En bas, gauche : Taux de diffusions totaux pour les niveaux de la cascade B en fonction de la tension. En traits plein, diffusion vers l'état aval de la cascade. En pointillés, diffusion retour vers 1A. Le taux de diffusion 3B-1A se situe vers $10^9 s^{-1}$.

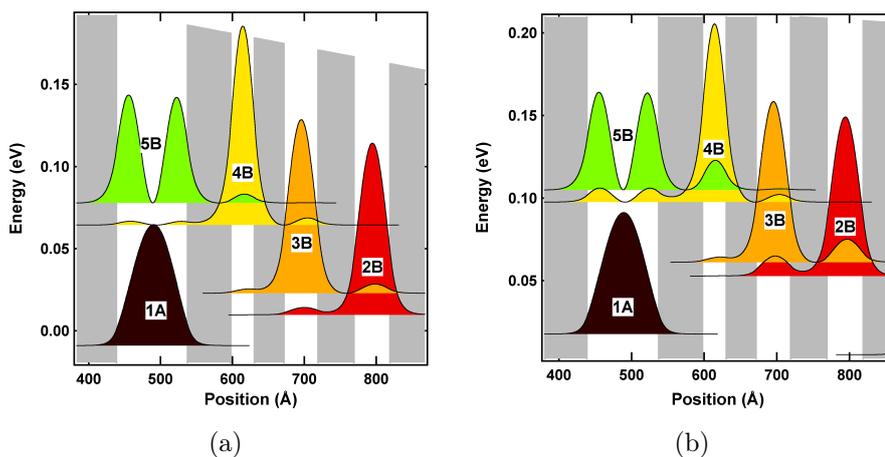


FIGURE 2.16 – Structures de bande calculées en base étendue pour des points de tension correspondant au maximum de la réponse. (a) : maximum de la réponse expérimentale, $V=-1.1V$. (b) : maximum de la réponse théorique $V=-0.36V$

Autour de 0V, le niveau 4B calculé est très couplé à 5B : il présente un fort recouvrement avec 1A, et faible avec 3B. La réponse est limitée par le retour des électrons depuis 4B vers 1A. Encore une fois cette résonance est artefactuelle. Pour des tensions négatives supérieures à -0.36V, 5B et 4B sont effectivement découplés, et l'extraction est alors limitée par le transfert de 5B vers 4B. Le modèle diffusif identifie donc la transition 5B-4B comme limitante de la réponse. Hors cette transition résonante est précisément mal décrite par ce modèle : le fort désaccord avec l'expérience n'est donc pas étonnant.

L'analyse détaillée du comportement en courant et en réponse du QCD 15 a mis en lumière que la principale source d'erreur du modèle est le mauvais traitement des transitions résonantes : les anticroisements 1A-2B et 1A-3B empêchent de prédire le courant d'obscurité à basse température, la transition 5B-4B gêne la modélisation de la réponse. Cette erreur est importante devant les autres approximations (statistique de Maxwell-Boltzmann, non prise en compte des corrections induite par l'équation de Poisson, pas de diffusion sur les impuretés ionisées), et émane directement de la façon dont le hamiltonien a été diagonalisé. C'est ce qui va être traité dans la partie suivante.

3.3 Du tunnel séquentiel au modèle hybride

Même si l'analyse détaillée du QCD 15 sous le prisme du modèle diffusif est un travail original mené au cours de cette thèse, ma contribution s'est limitée à exploiter un modèle et un code informatique pré-existants. Ma principale réalisation dans le cadre du transport "de premier moment" (courant et réponse), est l'implémentation des calculs de temps tunnel dans le code METIS. En effet, ma prédécesseure Amandine Buffaz avait montré que l'application du modèle de tunnel séquentiel *Kazarinov-Suris* expliquait bien les courbes de courant d'obscurité pour le QCD @ 8 μm [91], et le QCD @ 15 μm [85] à basse température. Mais l'implémentation de ces modèles, décorélée de l'algorithme diffusif METIS, nécessite d'identifier pour chaque échantillon les transitions concernées, et de rentrer à la main les paramètres *ad hoc*. Et l'articulation avec les processus diffusifs n'étant pas gérée, ces modèles échouent à mesure que la température augmente.

Formalisme

L'objectif est de dépasser le cadre de la "délocalisation instantanée" induite par le calcul de fonctions d'ondes en base étendue, et de gérer l'articulation entre couplage par effet tunnel Ω et l'élargissement des niveaux par diffusion Γ . Le tunneling étant un phénomène induit par la cohérence entre états, le bon formalisme pour le traiter est celui de la matrice densité f , adapté à la description de système à grand nombre de particules. Il est de fait beaucoup utilisé pour décrire le transport dans les hétérostructures [128–132]. Le calcul développé par *Kazarinov* et *Suris* [133], repris par *Wacker* dans le cas de super-réseaux faiblement couplés [113], puis enrichi par le terme du second ordre par *Willenberg et al* [134] permet d'écrire le courant cohérent qui passe entre deux sousbandes localisées sous une forme compatible avec les taux de diffusion du modèle METIS. Nous allons en rappeler les résultats principaux, les détails étant dans les références.

Soient deux sousbandes 1 et 2, localisées sur des puits adjacents d'une hétéro-structure. La base est choisie de telle sorte qu'il existe un couplage Ω entre les états quantiques qui décrivent chacune des sousbandes. Soit $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$, le hamiltonien du système à deux niveaux complet. \mathcal{H}_0 est la partie cohérente diagonale en moment cristallin \mathbf{k} , en vertu de la périodicité du super-réseau. Elle s'écrit

$$\mathcal{H}_0^k = \begin{pmatrix} \epsilon_1^k & \Omega \\ \Omega & \epsilon_2^k \end{pmatrix} \quad (2.38)$$

La dispersion dans les sousbandes est prise parabolique : $\epsilon_1^k = E_1 + \hbar^2 k^2 / 2m^*$. V le hamiltonien de diffusion couple des états de moments cristallins différents à l'intérieur d'une même sousbande. Il est non diagonal en k . On néglige ici la diffusion inter-sousbandes.

$$V^{kk'} = \begin{pmatrix} V_1^{kk'} & 0 \\ 0 & V_2^{kk'} \end{pmatrix} \quad (2.39)$$

La valeur moyenne du courant qui circule entre ces deux sousbandes est donnée par $J = eTr(\hat{v}f)$, où \hat{v} est l'opérateur vitesse, défini comme la dérivée de l'opérateur position $\hat{z} : \hat{v} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{z}, \mathcal{H}_0]$. Ce qui donne pour le courant :

$$J \approx \frac{e}{i\hbar} \sum_k \Omega (f_{21}^k - f_{12}^k) \quad (2.40)$$

Dans cette expression ce sont les valeurs moyennes des cohérences f_{21} et f_{12} entre les deux sousbandes qui gouvernent le courant. La résolution de l'équation de Liouville pour les cohérences de la matrice densité donne :

$$\begin{aligned} (\epsilon_1^k - \epsilon_2^k) f_{12}^k - \underbrace{\nu (\gamma_1^k + \gamma_2^k)}_{\text{Elargissement}} f_{12}^k &= \underbrace{\Omega (f_{11}^k - f_{22}^k)}_{\text{Ordre 1}} \\ &+ \underbrace{\nu \frac{\Omega}{\epsilon_1^k - \epsilon_2^k} (\gamma_1^k (f_{11}^{q-} - f_{11}^k) - \gamma_2^k (f_{22}^{q+} - f_{22}^k))}_{\text{Ordre 2}} \end{aligned} \quad (2.41)$$

où γ_1^k correspond au taux de diffusion total hors de l'état k dans la sousbande 1. Le membre de gauche de l'équation (2.41) montre que la transition entre les deux sousbandes est élargie par la diffusion intra-sousbande. Dans le membre de droite, le terme d'ordre 1 est directement le passage résonant par effet tunnel entre 1 et 2. L'ordre 2 correspond à la convolution du passage tunnel vers un état virtuel et d'une diffusion vers l'autre sousbande. $q+$ et $q-$ représentent les moments cristallins dans les sousbandes virtuelles qui vérifient la condition de transition tunnel à énergie constante [134]. Ce terme décrit un passage possible entre deux états non diagonaux en k , et est utile pour prendre en compte le couplage entre deux niveaux équivalents (type super-réseaux). Le courant s'écrit alors :

$$J \approx e\Omega^2 \sum_k \frac{(\gamma_1^k + \gamma_2^k) (f_{11}^k - f_{22}^k)}{(\epsilon_1^k - \epsilon_2^k)^2 + (\gamma_1^k + \gamma_2^k)^2} \quad (2.42)$$

L'introduction de l'ordre 2, dans l'hypothèse d'élargissement constants, change simplement les occupations des populations f_{11}^k et f_{22}^k , pour ne prendre en compte

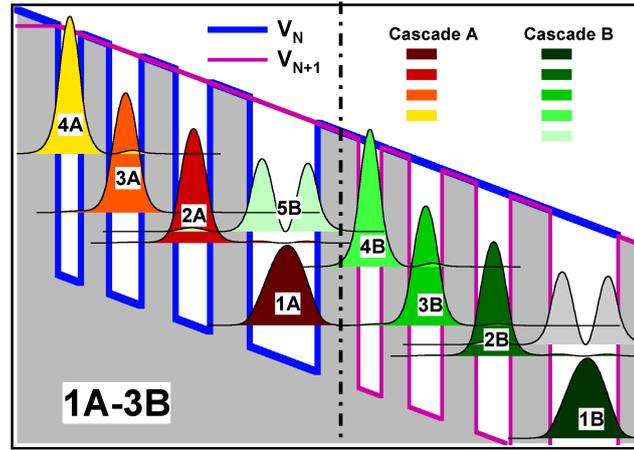


FIGURE 2.17 – Structure de bande calculée en base localisée pour l'anticroisement 1A-3B. La période de gauche est calculée dans le potentiel bleu V_N , la période de droite dans le potentiel magenta V_{N+1} . La limite entre les deux périodes est matérialisée en pointillés noirs. Les délocalisations inter-périodes des fonctions d'ondes ont disparu, mais pas celles intra-période (eg 2A-5B)

que les électrons suffisamment résonants. Cette équation est tout à fait similaire à celles écrites dans le programme METIS pour calculer les taux de diffusion. De fait, en prenant un élargissement γ constant pour tous les moments cristallins k et pour les deux sousbandes, on peut écrire :

$$J \approx e \frac{n_1 - n_2}{\tau} \quad (2.43)$$

$$\frac{1}{\tau} = \frac{\Omega^2 \gamma}{(\epsilon_1^k - \epsilon_2^k)^2 + \gamma^2} \quad (2.44)$$

avec n_1 et n_2 le nombre d'électrons dans chaque sousbande situés au dessus du bas de la sousbande complémentaire, et pouvant donc passer par effet tunnel. Pour inclure ce formalisme dans le modèle METIS, il suffit donc de rajouter un mécanisme élastique de "diffusion", correspondant à ce mécanisme tunnel. Pour ce faire, deux éléments sont nécessaires. Premièrement être capable de calculer le couplage Ω entre toutes les sousbandes de la structure. C'est ce que nous allons détailler dans la suite. Deuxièmement il faut calculer les taux de diffusions intra-sousbande. Ceci étant en cours de réalisation au moment de l'écriture de ce manuscrit, nous prendrons donc un élargissement constant *ad hoc*, qui sera le même que celui utilisé pour la largeur de raie optique.

Calcul des couplages

Le formalisme précédent a été développé sur une base d'états localisés. Quelle base utiliser ? Les états de Wannier sont à écarter car on veut rester dans le cadre d'une diagonalisation du hamiltonien avec le champ électrique (notamment si on veut gérer les corrections du potentiel de Poisson). Dans METIS, tous les états sont calculés en base étendue, sur un potentiel pseudo-infini. La question est de savoir comment et jusqu'à quel point localiser ces états de la base. On peut imaginer appliquer le champ électrique statique sur le potentiel de chaque puits unique. Puis

la base complète serait obtenue en reconcaténant tous ces états. Le grand problème est qu'alors cette base n'est plus orthogonale, ce qui complique considérablement les calculs, si on doit rigoureusement le prendre en compte. Il s'agit donc de modifier le potentiel du super-réseau infini le moins possible pour conserver le plus d'orthogonalité possible de la base, et en même temps, de localiser suffisamment les états pour éviter les anti-croisements.

La méthode, proposée pour les QCLs dans la Ref. [135], consiste à restreindre le calcul du potentiel sur une période ou plusieurs sous-périodes (le cas extrême étant celui d'une sous-période par puits), et à remplacer le potentiel d'hétérostructure hors de la sous-période par le potentiel de barrière. Cela permet pour les QCLs de séparer l'injecteur de la transition optique, et de bien traiter l'injection résonante sur le niveau haut. La figure 2.17 illustre cet algorithme, pour une sous-période égale à la période du QCD15. Les fonctions d'onde de la période de gauche N ont été calculées dans le potentiel bleu V_N . Modulo le champ électrique, V_N est donc égal au potentiel d'hétérostructure V_{het} à l'intérieur d'une période, et égal au potentiel de barrière V_{bar} en dehors.

$$V_N = (z) \begin{cases} V_{het}(z) + eFz & z \in N \\ V_{bar} + eFz & z \notin N \end{cases} \quad (2.45)$$

Pour le QCD 15, on a pu se restreindre à une seule localisation (un potentiel pour toute la période), sans avoir à subdiviser la période en sous périodes. En effet, on peut s'affranchir des trois anticroisements principaux 5B-4B, 1A-2B, et 1A-3B en prenant comme séparation la barrière immédiatement après le puits principal. Cette barrière est bien traversée par les trois résonances gênantes. La tension utilisée pour représenter la structure de bande sur la figure 2.16 correspond à l'anti-croisement 1A-3B. Comparé à la figure 2.11(a), la délocalisation de 1A sur 3B est ici éteinte. Noter que les délocalisations intra-période sont encore possibles : par exemple ici entre 2A et 5B.

Le couplage Ω entre deux états vaut par définition la moitié de la différence d'énergie à l'anticroisement en base étendue. Cependant, cette définition ne permet que très difficilement (ou très partiellement) de calculer tous les couplages dans une structure donnée. Il faut pour cela calculer la structure de bande sur une très large gamme de tension, être capable d'identifier et de suivre tous les états au travers de leurs résonances, de gérer les résonances multiples, et de remonter ainsi à tous les termes de couplage. Pour des raisons de simplicité numérique, en particulier parce qu'on veut que le calcul d'un point de tension puisse être indépendant des autres, ce n'est pas la méthode qui a été choisie dans METIS.

Le calcul du couplage est effectué en perturbation au premier ordre en se restreignant aux plus proches voisins : le potentiel perturbateur V_{pert} est donc le potentiel des puits de la sous-période adjacente. Soit un état 1 appartenant à la sous-période α , de fonction d'onde ϕ_1 , et un état 2 dans la sous-période β de fonction d'onde ϕ_2 , alors le couplage entre les deux est donné par :

$$\Omega_{21} = \int_{z \in \beta} V_{pert}(z) \phi_1(z) \phi_2(z) dz \quad (2.46)$$

avec $V_{pert} = 0$ au niveau des barrières et $V_{pert} = \Delta E_c$, la discontinuité de bande de conduction entre barrière et puits au niveau des puits.

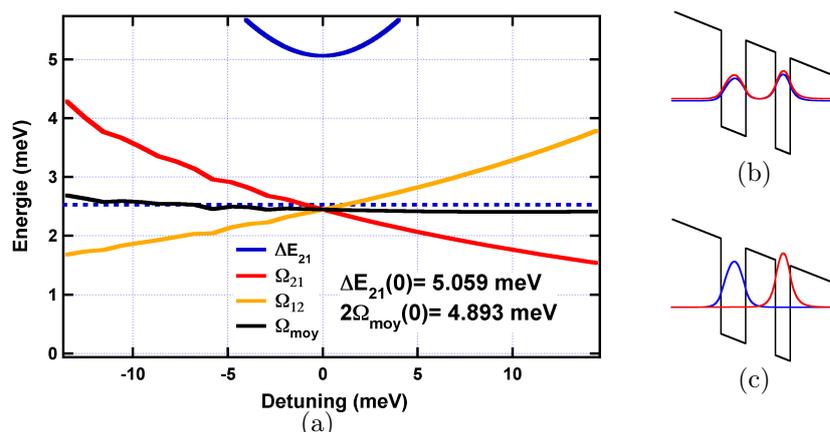


FIGURE 2.18 – Calcul implémenté du couplage de Rabi, sur une structure simplifiée pour l'anticroisement 1A-3B. (a) : Différents couplages en fonction de l'accord à la résonance. ΔE_{21} est l'écart entre les deux énergies propres en base étendue (b). Ω_{21} (resp. Ω_{12}) est le terme de couplage induit par l'état de droite (resp. gauche) sur l'état de gauche (resp. droite) en base localisée (c). Ω_{moy} en est la moyenne géométrique. Les pointillés correspondent à la valeur exacte calculée par l'anticroisement en base étendue.

Dans ce cas, on a $\Omega_{21} \neq \Omega_{12}$. La raison est double : d'une part à cause de la perte d'orthogonalité liée à la localisation, mais cet effet est faible car on a localisé *a minima*. D'autre part à cause du champ électrique F . En effet, le calcul Ω_{21} étant effectué sur la période β , il est particulièrement sensible à l'amplitude de ϕ_1 sur cette période, qui correspond à une décroissance exponentielle sous la barrière aval. Cette amplitude est donc une fonction croissante de $|F|$: plus l'abaissement de la barrière aval est grand, plus la queue exponentielle de ϕ_1 sera étalée. L'effet est exactement inverse avec ϕ_2 , qui regarde une perturbation du côté amont. Ces deux termes sont néanmoins égaux à la résonance.

La figure 2.18 illustre ce calcul sur une structure modèle. L'état 1 est localisé sur le puits de gauche, l'état 2 est localisé sur le puits de droite. Les deux termes de couplages présentent l'évolution escomptée intuitivement avec le champ électrique (ici pris sous la forme de detuning entre les énergies). A résonance, les deux couplages sont égaux : la valeur trouvée par cette méthode donne une erreur relative de moins de 3% avec la valeur exacte calculée en base délocalisée : $\Delta E_{21}/2$.

Le problème principal est de calculer cette valeur pour des points de tension qui ne correspondent pas à la résonance pour la transition considérée. La solution retenue consiste à prendre la moyenne géométrique des deux termes de couplage obtenus. Cette solution, tracée en noir, est à comparer avec la valeur exacte tracée en pointillés bleus. L'erreur ne dépasse pas 5% sur la gamme de detuning explorée qui correspond à la valeur de l'élargissement des niveaux $\Gamma = 10 \text{ meV}$. Il est possible de trouver une expression analytique de Ω_{21} et Ω_{12} en fonction du detuning [136], mais nous contenterons ici du constat de la robustesse de la solution effective utilisée.

Analyse des résultats

La figure 2.19 présente les taux de diffusion du niveau 1A vers 3B, calculés en base localisée. Une analyse similaire à celle de la figure 2.8 (rappelée en insert) peut être menée. On distingue les trois régimes : à fort désaccord négatif, le régime est

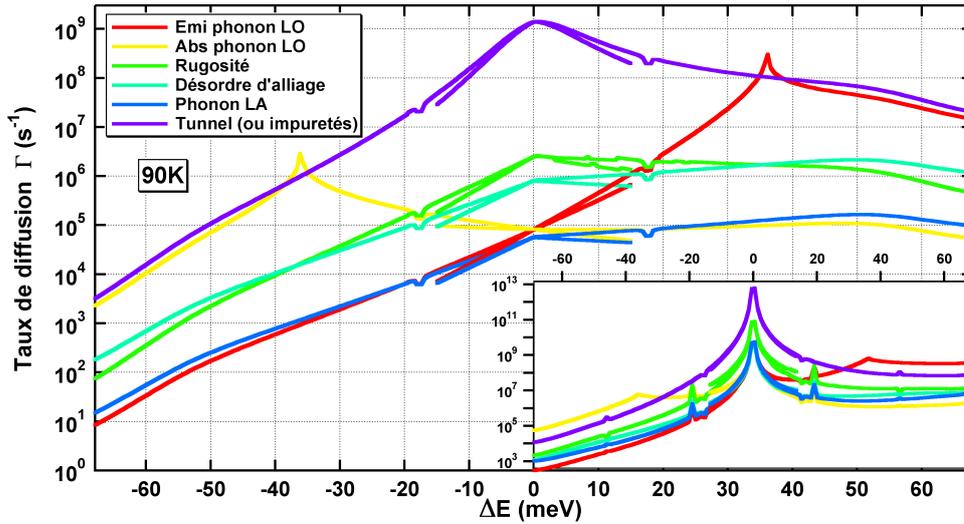


FIGURE 2.19 – Comparaison des taux de diffusions du niveau 1A vers 3B en fonction de la tension, selon la nature du mécanisme de diffusion. Dans la gamme de températures étudiées, 90K correspond à l'importance relative maximale de la diffusion par rapport aux effets tunnels. Pour le temps tunnel, l'élargissement est pris à 12 meV. En insert sont rappelés les taux équivalents calculés en base étendue.

limité par le nombre de porteurs susceptibles d'être diffusés. A fort désaccord positif les taux de diffusion sont relativement indépendants du désaccord. Pour le régime tunnel cela correspond à la queue de la lorentzienne. Le changement est qu'ici la résonance est beaucoup mieux traitée. Les pics de diffusion LO sont aussi mieux dessinés.

Par rapport à la base délocalisée, tous les taux de diffusion sont plus faibles d'environ un ordre de grandeur en moyenne. Cela est dû au recouvrement beaucoup plus faible entre les fonctions d'ondes. L'élément le plus frappant est le fait que le taux tunnel soit comparable aux temps de diffusion sur toute la gamme de tension explorée, là où le hopping Wannier-Stark supposait qu'il était des ordres de grandeurs plus efficace. S'il est équivalent aux termes LO loin de la résonance, il est quand même supérieur de presque trois ordres de grandeur au deuxième mécanisme élastique (la rugosité d'interface) à la résonance. C'est toute la vision du transport qui se trouve bouleversée. Noter que les effets tunnels dominent encore dans ce régime dit diffusif à haute température pour le QCD.

La figure 2.20 présente les améliorations apportées par la prise en compte des effets tunnel résonants dans le modèle hybride, ici pour le courant d'obscurité, en statistique de Maxwell-Boltzmann. Les courbes théoriques ont été calculées avec une dépendance linéaire de l'élargissement Γ avec la température, correspondant aux valeurs expérimentales de 7 meV à 20K et 12 meV à 80K, ce qui donne un peu moins de 1 meV pour 10K.

Par rapport à la figure 2.10, le calcul est beaucoup plus performant. La quasi-totalité des pics de résonances ont disparus. La première exception est l'absorption de phonon LO entre 1A et 3B à -0.75V (précédemment à -0.8V), dont on sait qu'elle est atténuée en prenant en compte l'exclusion de Pauli. Le second pic à -0.28V correspond à une résonance intra-période entre 4B et 5C.

Les deux anticroisements principaux 1A-2B et 1A-3B ne sont plus représentés par

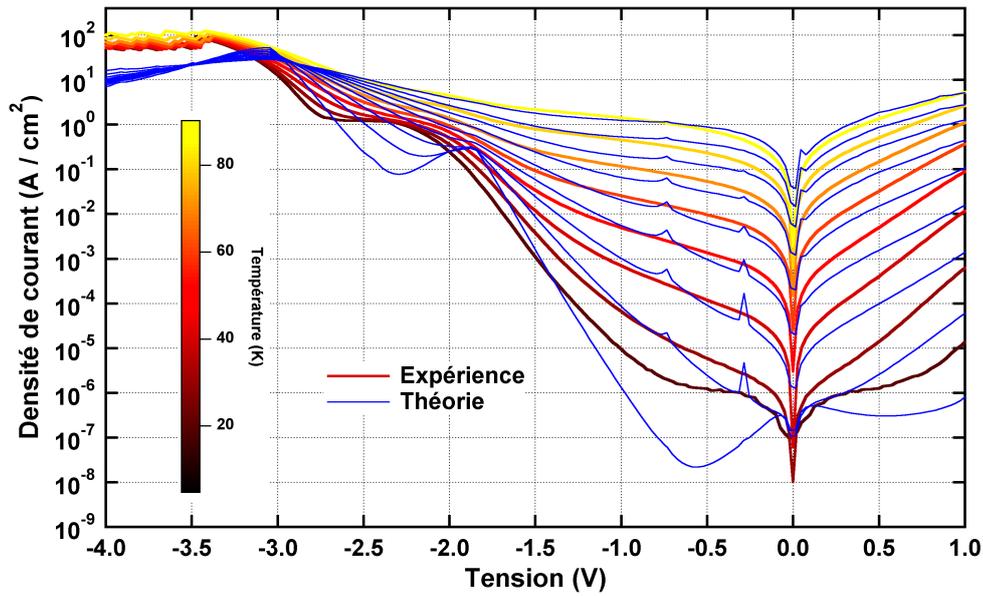


FIGURE 2.20 – Comparaison des courbes théoriques (bleu) et expérimentales (couleur) pour le courant d’obscurité dans le QCD 15, pour des températures de 20K à 90K.

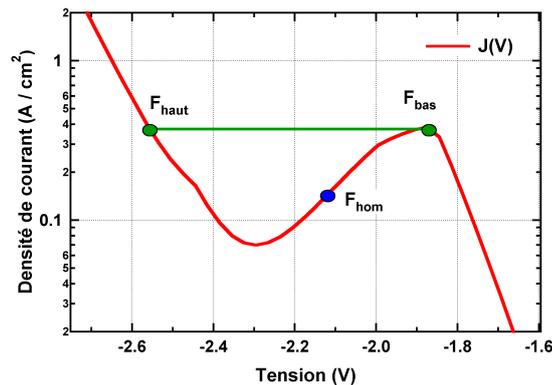


FIGURE 2.21 – $J(V)$ théorique en régime de RDN, et comportement qualitatif de la structure réelle.

des pics, mais par des épaulements plus larges associés à des régimes de résistance différentielle négative (RDN), entre -1.9V et -2.3V, et au delà de -3V respectivement, pour $T=20K$. Ces épaulements trouvent un écho dans les plateaux expérimentaux qui apparaissent à des tensions légèrement supérieures en valeur absolue, *ie* -2.1V et -3.2 V respectivement. Cette erreur systématique de -0.2V est la plus grande inconnue qui demeure, et est à rapprocher directement de la sur-évaluation de la longueur d’onde aux pics d’absorption et de réponse, et donc du traitement de l’énergie de Kane dans la structure. Une autre explication pourrait être la résistance des contacts.

Le fait qu’on voit des creux sur les RDN théoriques et des plateaux sur les courbes expérimentales a deux explications possibles. La première est la dépendance à l’élargissement intra-sousbande. Plus la diffusion est importante, plus la transition tunnel s’étale en tension, et plus l’épaulement du courant s’adoucit vers un plateau. Cependant, un élargissement de 20 meV, suffisant pour retrouver un plateau sur

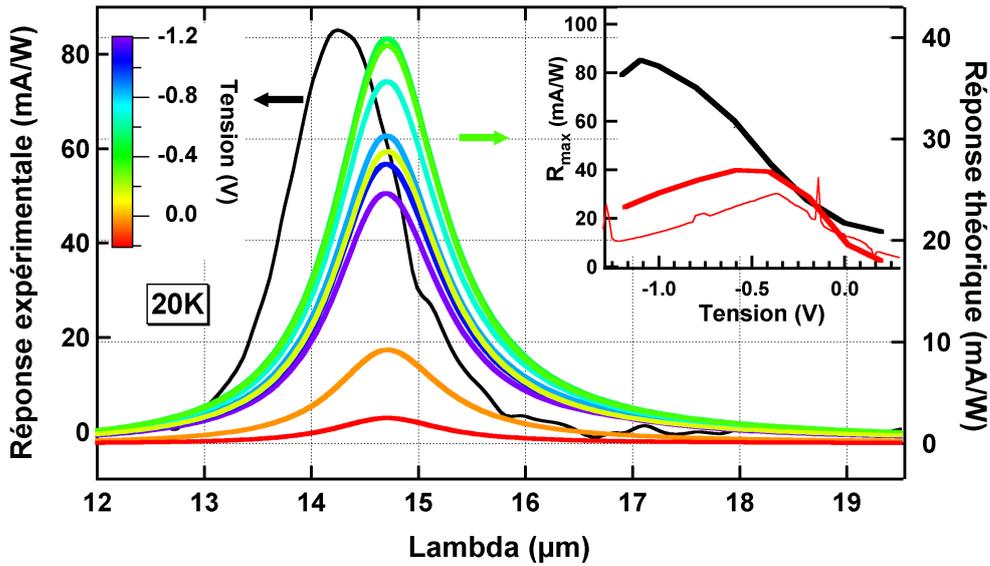


FIGURE 2.22 – Couleur (échelle de droite) : Gabarits spectraux calculés à 20K avec $\Gamma_{opt} = 7$ meV, pour différents points de tension. Noir (échelle de gauche) : Rappel du gabarit spectral expérimental à $V = -1.1V$. Insert : Maximum de la réponse en fonction de la tension, noir pour l'expérience, rouge pour la théorie. Le trait fin est la base délocalisée, le trait épais la base localisée.

le courant, est beaucoup trop fort par rapport à la valeur à 20K qui explique les spectres de réponse. La seconde explication est plus probable. Les courbes théoriques sur la figure 2.10, correspondent en fait à des $J(V)$ pour chaque période. Sur le flan des épaulements associé au régime de RDN dit en "N", (illustré sur la figure 2.21), la structure complète ne peut pas trouver un équilibre stable en champ homogène F_{hom} . Il va donc se former deux régions de champ électrique dans la structure, F_{bas} et F_{haut} . La région haut champ prenant le pas sur la seconde à mesure que la tension augmente (en valeur absolue), et que les périodes passent brusquement d'un champ F_{bas} à F_{haut} . Les régimes de RDN se transforment donc sur la courbe totale en plateaux associés à des dents de scie. Ceux ci sont par exemple bien visibles au delà de $-3.2V$. S'ils dépassent le cadre strict du modèle homogène déployé ici, ces phénomènes non-linéaires ont été extensivement étudiés dans la semi-conducteurs massifs [137] et les super-réseaux [113], ainsi que dans les QWIPs et les QCDs [138].

La différence entre théorie et expérience à 20K à faible tension négative comporte vraisemblablement une dimension similaire. L'autre composante de l'explication est un effet de seuil exponentiel vis à vis de l'absorption de phonon LO pour quitter le niveau 1A. Théoriquement à 30K cet effet est significatif par rapport aux différents temps tunnel depuis 1A, mais devient négligeable à 20K. Cela explique pourquoi le comportement calculé à 20K ne ressemble pas ni à l'expérience, ni à une extrapolation de celui calculé à 30K. L'inventaire de toutes ces erreurs ne doit pas occulter le fait qu'à plus haute température (au delà de 40K), l'accord entre théorie et expérience devient quantitatif sur toute la gamme de tension de 0 à $-3V$! En particulier l'effet plateau à haute température a complètement disparu. En polarisation positive par contre, l'accord semble s'être dégradé.

La figure 2.22 présente les améliorations apportées le modèle hybride sur la prédiction de la réponse. Parmi les erreurs du modèle diffusif, l'artefact du double pic

d'absorption a totalement disparu. Les formes des gabarits spectraux théoriques et expérimentaux se comparent de façon quantitative (garder à l'esprit que l'élargissement de la transition est un paramètre ajusté). L'erreur de prédiction sur la longueur d'onde du pic demeure, mais n'a pas été dégradée. Enfin la prédiction du comportement du maximum de réponse en fonction de la tension appliquée est un peu plus performante : le maximum est prédit à $-0.4V$, par rapport à $-0.36V$ précédemment. Cette valeur est néanmoins à comparer aux $-1.1V$ expérimentaux. Il est néanmoins intéressant de noter que le courant sous flux optique présente lui aussi un régime de RDN sur la gamme de tension considérée, pour lequel F_{bas} correspond à une tension totale de $-0.4V$, et F_{haut} à une tension totale de $-1V$. Ainsi, il est fort possible que la différence entre la théorie et l'expérience en terme de réponse émane du fait que seule une partie des périodes de la structure voient un champ optimal pour la réponse. Des mesures complémentaires à plus haute température seraient à mener pour statuer plus définitivement de la qualité de ce modèle pour la réponse, qui est certes encourageant mais pas concluant.

4 Bilan

Ce chapitre s'est principalement attaché à détailler la justification, les présupposés et les limites du choix du modèle de transport dans les QCDs. L'étude d'un détecteur QCD opérant à $15 \mu m$, système modèle qui allie simplicité de la structure et richesse des régimes de transport observables, a montré la pertinence et les limites des formalismes de hopping Wannier-Stark et de tunnel séquentiel. Une partie de ce travail de thèse a été de les rassembler au sein d'un modèle hybride. Une précision quantitative est atteinte sur une gamme de tensions et de températures inégalée en physique des détecteurs inter-sousbandes.

4.1 Approximations et présupposés de la modélisation du transport

Dans les deux premières parties de ce chapitre, un effort particulier a été mis en oeuvre pour identifier, rassembler et discuter les hypothèses qui mènent au calcul du courant d'obscurité et de la réponse dans les détecteurs à puits quantiques. Les principales approximations sont :

- **Electrons indépendants** : La factorisation de la fonction à N particules et le traitement en électrons indépendants est possible dans l'infrarouge car les densités électroniques sont suffisamment faibles pour que les corrections liées aux interactions électron-électron soient négligés. Tel n'est pas le cas dans le THz, comme nous le verrons au chapitre suivant. Dans le choix de jauge de Coulomb, le potentiel de Hartree permet de gérer les effets de charge électrique en champ moyen.
- **Thermalisation intra-sousbande** : La dynamique du transport dans le plan des couches est considérée comme beaucoup plus rapide que dans la direction d'épitaxie. Les sousbandes peuvent être considérées en quasi-équilibre thermodynamique. Cette approximation repose sur une différence de temps caractéristiques de l'ordre d'un facteur cinq seulement, mais est très efficace en pratique.

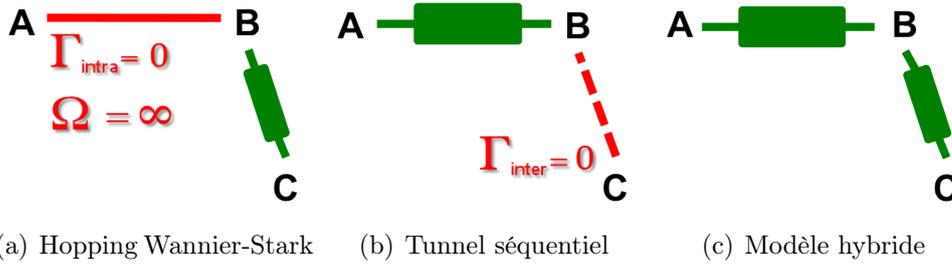


FIGURE 2.23 – Schéma des différences conceptuelles pour les trois modèles utilisés pour le transport dans les QCD. A, B et C sont trois sousbandes. A et B sont résonantes et localisées dans des puits différents. B et C sont deux états liés dans le même puits. En vert (resp. rouge) le traitement est adapté (resp. incorrect). Une résistance prend en compte un temps de transport fini là où un fil le considère comme instantané.

- **Base de diagonalisation** : Le hamiltonien de fonction enveloppe et sous-bande parabolique peut être diagonalisé dans des bases donnant lieu à des visions du transport très différentes : états de Bloch et transport minibande, états de Wannier (ou localisés) et tunnel séquentiel, états de Wannier-Stark et hopping inter-sousbandes.
- **Non idéalités du potentiel** : Elles sont traitées comme des processus de diffusion dans le formalisme de la règle d’or de Fermi, qui consiste en une diagonalisation markovienne de la matrice densité. Parmi ces processus, le rôle particulier des impuretés ionisées est mis en exergue : c’est le mécanisme résonant qui domine, mais il est coûteux de l’implémenter numériquement.
- **Choix de la statistique** : Même si rigoureusement la statistique électronique suit une distribution de Fermi-Dirac, la distribution de Maxwell-Boltzmann se révèle être un bon substitut par sa simplicité et le fait qu’elle introduit uniquement une erreur systématique facilement quantifiable.
- **Modèle homogène** : Le caractère série du transport dans les QCDs et le faible flux optique permet de se restreindre au calcul d’une seule période.

4.2 Résultats pour le modèle hybride

La figure 2.23 schématise les limitations liés aux modèles de hopping Wannier-Stark et de tunnel séquentiel, et en quoi le modèle hybride réconcilie ces visions. Le problème principal lié au modèle de hopping Wannier-Stark est qu’il traite mal le transport entre sousbandes résonantes. En effet, la base de Wannier-Stark néglige structurellement les phénomènes de localisation par diffusion, et délocalise instantanément les électrons sur tous les niveaux à la même énergie. Les pics de résonance induits constituent les principaux obstacles à une bonne modélisation du courant et du bruit d’obscurité. Par contre il traite correctement la diffusion entre sousbandes bien séparées en énergie, dès que $\Delta > 2\Gamma$. Le tunnel séquentiel possède des domaines de validité complémentaires : il décrit bien le transport entre sousbandes résonantes, mais échoue quand l’énergie échangée devient importante, comme par exemple la thermalisation d’une cascade à haute température par absorption et émission de phonons LO.

Le modèle hybride introduit arbitrairement une localisation partielle des états de

Wannier-Stark qui rompt partiellement l'orthogonalité de la base, moyennant quoi il décrit correctement le transport résonant et non résonant. Un accord quantitatif entre théorie et expérience est obtenu pour le courant d'obscurité sur une gamme de tension et de température inégalée à notre connaissance, étant donnée la variété des régimes de transport décrits. Deux limitations demeurent. D'une part il est difficile de prédire, dans ce modèle de champ homogène, le comportement macroscopique du composant correspondant à des régimes de résistance différentielle négatives au niveau microscopique. D'autre part, l'élargissement intra-sousbande est encore un paramètre d'entrée pris constant pour tous les niveaux de la structure. Son calcul ne change rien au modèle et est en cours d'implémentation.

Néanmoins, le modèle hybride est capable de calculer à partir des seuls principes microscopiques (et un paramètre *ad hoc*, l'élargissement intra-sousbande) l'ensemble des grandeurs caractéristiques du signal d'un détecteur QCD. La précision est quantitative en termes de courant d'obscurité, et donne un bon ordre de grandeur pour la réponse (*modulo* la détermination du nombre de photons dans le mode de cavité). Le calcul de structures optimisées, objectif principal de l'algorithme METIS, est grandement facilité par la robustesse de ce modèle.

4.3 Vers la matrice densité

Tous les problèmes soulevés dans cette partie peuvent être résumés en un seul : le choix de traiter le transport dans un formalisme semi-classique de l'équation de Boltzmann et donc d'utiliser l'approximation markovienne de temps longs, qui mène à l'établissement de la règle d'or de Fermi. Cette approximation rompt l'invariance des résultats selon la base choisie pour diagonaliser le hamiltonien. En effet, le changement de focale associé au traitement en diffusion des mécanismes de couplage (approximation des temps longs) confère une irréversibilité au choix de base. Ce dernier force un régime limite dans l'articulation des énergies caractéristiques Γ (décohérence), Δ (désaccord) et Ω (couplage). Tout nos problèmes émanent du fait que dans les QCDs, notamment dans les régimes de basse température, le couplage et la décohérence sont caractérisés par des temps comparables.

Nous vérifions donc expérimentalement ce que *Wacker* prédisait sur le plan théorique [112]. Seul un traitement entièrement quantique peut décrire l'ensemble des régimes observables dans les QCDs. Le formalisme de la matrice densité, plus explicite que celui des fonctions de Green semble être le candidat approprié pour raffiner la compréhension du transport. Il a récemment été largement développé pour les QCLs THz, dans lesquels les effets directs des cohérences doivent être pris en compte [139, 140]. Pour les détecteurs inter-sousbandes moyen infrarouge, la précision atteinte par le modèle semi-classique présenté dans ce chapitre pose la question du gain à développer un formalisme purement quantique et moins intuitif. Un élément de réponse est donné dans le chapitre suivant, où la vision semi-classique échoue à calculer une transition de phase hors équilibre dans les QWIPs THz. Le lecteur plus intéressé par les QCDs pourra passer directement au chapitre 4.

Chapitre 3

Transition de phase dans les QWIPs THz

*La jeunesse est une manière de se tromper qui se change assez vite
en une manière de ne plus même pouvoir se tromper.*

Paul Valéry

Ce chapitre présente une transition de régime de transport électronique macroscopique observée dans des QWIPs THz, et l'analyse en termes d'ionisation par impact inter-sousbandes (I3) au niveau microscopique. Il propose d'introduire l'intermédiaire mésoscopique¹ de la loi de discontinuité $\mathcal{D}(F)$ pour faire le lien entre ces deux échelles. La première section décrit le contexte expérimental et applicatif de cette étude, et introduit l'approche générale de l'interprétation. La seconde section détaille le passage du macroscopique au mésoscopique, *ie* comment la forme de loi de discontinuité peut être extraite des mesures expérimentales. La troisième section présente les enjeux du calcul de la loi de discontinuité à partir des principes microscopiques. La dernière section ouvre sur des interprétations alternatives.

1 Système de détection THz à très fort gain

1.1 Contexte

Le domaine THz du spectre électromagnétique (1-10 THz, 30-300 μm) constitue la frontière entre les domaines de l'optique très basse fréquence et de l'électronique très haute fréquence [141, 142]. Le développement de sources performantes notamment grâce notamment aux QCLs [143–145] a révélé le besoin de détecteurs rapides et sensibles. De nombreuses solutions émanant des deux communautés ont été proposées [146], parmi lesquelles des boîtes quantiques [147], des photo-transistors à effet de charge [148], des bolomètres supraconducteurs [149] ou des détecteurs à bande d'impuretés [150], ainsi que des structures QWIPs adaptées à ces longueurs d'onde [151]. Par rapport aux autres technologies, les QWIPs bénéficient d'une grande maturité en terme d'intégration en plans focaux, mais sont foncièrement

1. A prendre au sens strict d'échelle intermédiaire entre micro et macro, mais ne renvoie pas dans ce chapitre à la définition traditionnelle de physique mésoscopique.

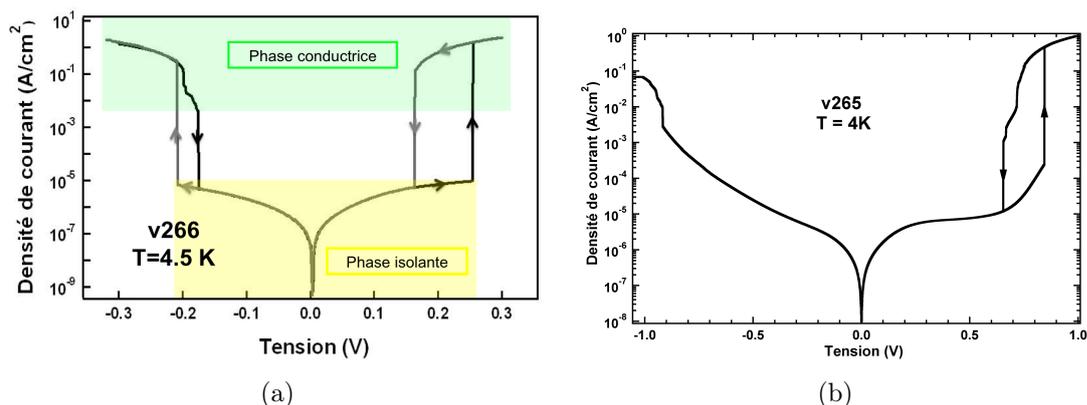


FIGURE 3.1 – Mesures $I(v)$ à l'obscurité pour (a) l'échantillon v266 @ 5.4 THz et (b) l'échantillon v265 @ 9.7 THz

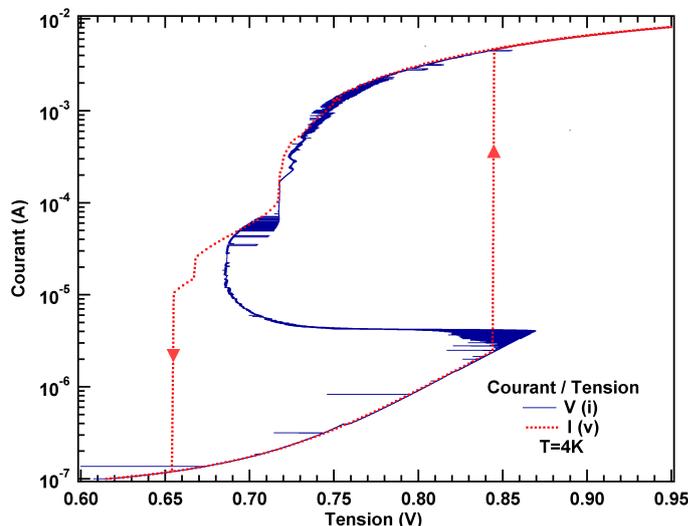


FIGURE 3.2 – Mesure $V(i)$ à l'obscurité pour l'échantillon v265 @ 9.7 THz, agrandie sur la figure d'hystérésis. Le balayage va des faibles aux forts courants imposés, la résolution en courant étant adaptative, de pas relatif d'environ $\delta i/i = 10^{-4}$. Les mesures $I(v)$ correspondantes sont rappelées.

limités par la thermodynamique qui impose des températures de fonctionnement particulièrement basses (de l'ordre de la dizaine de Kelvins).

1.2 Mise en évidence expérimentale d'une transition métal-insolant dans les QWIPs THz

Les trois structures QWIPs, v265 v266 et v267, étudiées dans la référence [151] présentent à haute tension une transition de phase hors équilibre². Comme illustré sur la figure 3.1 pour v266 et v265, la résistivité (le paramètre d'ordre) de ces structures subit une discontinuité qui peut atteindre cinq ordres de grandeurs lorsqu'une tension critique V_c est atteinte. Les structures passent d'une phase qualifiée d'iso-

2. Terminologie prise ici au sens large. En particulier, l'existence d'un éventuel point critique de l'énergie libre n'est pas interrogée.

Structure	v265	v266	v267
Fréquence de détection (THz)	9.7	5.4	3.2
E_{21} (meV)	30	22.3	13.4
F_c^{up} (kV.cm ⁻¹)	3.1	1.11	0.18
F_c^{down} (kV.cm ⁻¹)	2.4	0.73	0.11
$\Delta\rho$	10 ³	10 ⁵	10 ⁵

TABLE 3.1 – Paramètres caractéristiques des transitions de phase des échantillons v265, v266 et v267. E_{21} est l'énergie de transition entre le niveau fondamental des puits quantiques 1 et le niveau quasi-lié 2 résonant avec le haut des barrières. Pour v265, l'énergie de transition tombant dans la bande *restrahlen*, elle ne correspond pas au maximum de réponse expérimental. F_c^* sont les champs électriques moyens sur la structure auxquels apparaissent les changements de régime. Rigoureusement, ils sont différents pour les polarisations positives et négatives. Les valeurs données ici sont les valeurs en tension positive. $\Delta\rho$ est l'ordre de grandeur des discontinuités de résistivité maximales observées au passage de la transition de phase, prise à la montée.

lante à une phase qualifiée de conductrice. La valeur de V_c est plus élevée lorsque la transition se fait dans le sens isolant vers conducteur V_c^{up} que dans le sens conducteur vers isolant V_c^{down} , dessinant une figure d'hystérésis. Sur l'échantillon v266, l'hystérésis a une forme différente en tension négative. La figure complète d'une hystérésis, et notamment le régime de résistance différentielle négative (RDN) ont été caractérisés très précisément au Laboratoire Pierre Aigrain dans le cadre de la thèse de François-Régis Jasnot et Amandine Buffaz, par une mesure fine $V(i)$ pour la structure v265 (cf Fig. 3.2).

Le tableau 3.1 rassemble les valeurs des discontinuités de résistance et des champs électriques moyens auxquels apparaissent ces transitions. On observe en particulier que les champs critiques sont des fonctions croissantes de l'énergie de transition optique. Cela est bien expliqué, et c'est la piste développée ci-après, par le phénomène d'ionisation par impact inter-sousbandes (I3). Des envolées du courant similaires, mais cependant moins spectaculaires, ont été observées à haute tension dans des QWIPs infrarouge et expliquées par ce même phénomène [152].

Indépendamment de son origine physique, l'utilisation de cette transition pourrait aboutir à des détecteurs THz très fort gain, potentiellement capables de détecter des photons uniques. L'idée est de polariser le dispositif en régime isolant juste en dessous de la tension critique V_c^{up} , afin que l'absorption d'un faible nombre de photons déclenche la transition vers le régime conducteur. La vitesse du détecteur serait alors limitée par le temps parcouru de la figure d'hystérésis afin de retourner à la tension V_c^{up} .

Le problème majeur associé à ce type de fonctionnement est que près d'une transition de phase, les fluctuations du système sont fortement amplifiées, et des boucles de rétro-action doivent être mises en place afin de limiter les déclenchements parasites (phénomène bien connu par exemple dans les bolomètres supraconducteurs [153]). Sur la figure 3.2, des zones de fort bruit sont visibles sur la $V(i)$ près des transitions de régime de $I(v)$, à la montée comme à la descente. De fait, un composant polarisé en régime isolant près de la transition passe d'une stabilité de plusieurs centaines de secondes à environ une seconde à mesure qu'on se rapproche de la tension critique. Une compréhension fine du mécanisme responsable de la transition de phase est dès

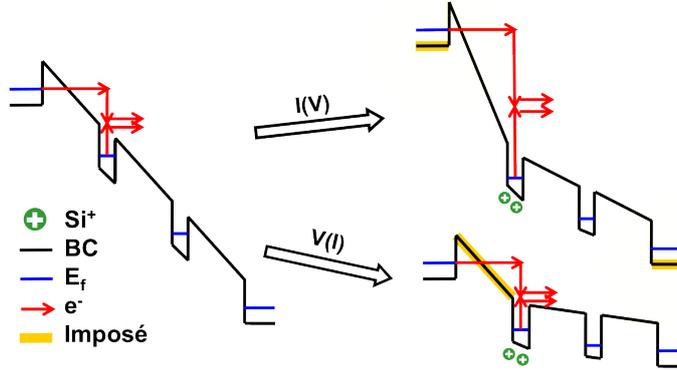


FIGURE 3.3 – Réorganisations de la structure de bande d'un QWIP THz sous l'effet de l'I3. BC est le bas de bande de conduction, E_f les quasi-niveaux de Fermi, e^- les trajets électroniques et les surlignages jaunes indiquent les quantités imposées par l'expérience. À gauche le régime isolant est dominé par le courant tunnel. L'ouverture de canaux du continuum par I3 induit un comportement macroscopique très différent selon que la tension ($I(v)$, en haut) ou le courant ($V(i)$, en bas) sont imposés.

lors nécessaire pour dessiner des structures maximisant le gain (*ie* la discontinuité de résistivité) et minimisant les fluctuations.

1.3 Interprétation par l'ionisation par impact inter-sousbandes

Une interprétation qualitative de cette transition de phase a été proposée par *Gomez et al* [154]. L'idée en est résumée sur la figure 3.3. Dans le régime isolant, la faible température de fonctionnement réduit l'activation thermo-ionique des porteurs vers le continuum d'état au dessus des barrières, et le faible champ électrique garantit que le transport électronique est dominé par les effets tunnels entre les puits. Les canaux du continuum sont activés lorsque le champ électrique atteint une valeur critique F_c . Dès lors, un nouveau mécanisme augmente soudainement l'efficacité de la promotion des électrons depuis le niveau fondamental des puits quantiques vers le continuum au dessus des barrières. Ce mécanisme est identifié comme l'ionisation par impact inter-sousbandes (I3) : les électrons incidents dans le continuum arrivent au dessus du puits avec une énergie comparable à E_{21} , et peuvent exciter des électrons liés dans le niveau 1 vers le continuum par collision coulombienne. Le processus de capture électronique (et donc de remplissage des puits) n'étant pas magnifié par ce processus, une charge positive correspondant au donneur *Si* non écranté apparaît dans le puits.

La résolution de l'équation de Poisson au niveau du puits ionisé implique qu'une discontinuité de champ électrique est alors induite : le champ amont devient supérieur au champ aval. Le comportement de la structure varie alors selon qu'on impose la tension ou le courant. Dans le premier cas, la différence entre les quasi-niveaux de Fermi des deux contacts de la structure étant fixée, cette discontinuité de champ implique un abaissement de la barrière amont, entraînant un appel supplémentaire d'électrons et une amplification du phénomène d'I3. D'où un affaissement catastrophique de la structure de bande, et une forte discontinuité du courant dans

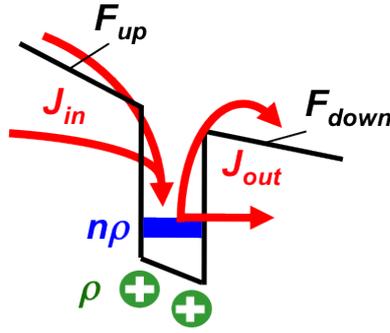


FIGURE 3.4 – Bilan des porteurs sur un puits quantique contenant ρ dopant Si^+ ionisés, et $n \times \rho$ électrons sur le niveau fondamental du puits (n est la fraction réduite et va de 0 à 1). Le champ sur la barrière amont (resp. aval) vaut F_{up} (resp. F_{down}). J_{in} et J_{out} sont les courants de remplissage et de vidange du puits.

la structure. Dans le second cas, la présence d'une charge positive supplémentaire au niveau d'un puits va simplement réduire la valeur du champ électrique aval, et l'ensemble du motif en 'S' de RDN sera exploré.

Lorsque l'ionisation par impact est abordée dans la littérature, elle donne souvent lieu à un effet d'avalanche, que ce soit en transitions interbandes [155], ou inter-minibandes dans les détecteurs BIB [150]. L'avalanche est la combinaison de l'ionisation par impact et de la mobilité des charges positives et négatives. Ce sont les effets de charges d'espaces qui éteignent le processus d'avalanche. A l'inverse dans notre cas, les charges positives sont fixes (les donneurs ionisés non écrantés dans les puits) et les effets de charges d'espace peuvent amplifier le phénomène. La partie suivante cherche à mettre tout cela en équations.

1.4 La loi de discontinuité $\mathcal{D}(F)$, une échelle intermédiaire micro-macro

L'interprétation qualitative présentée au dessus révèle que la transition de phase est foncièrement gérée par la réorganisation de la structure de bande sous l'effet des charges d'espace. Afin de modéliser plus quantitativement un tel effet et de jeter une lumière plus explicite sur les phénomènes contrôlés par l'équation de Poisson, nous introduisons la loi de discontinuité dont l'idée est inspirée des modèles photo-émissifs pour les QWIPs [67–69]. On considère pour chaque puits le système d'équations composé du bilan de porteurs (cf Fig. 3.4) et de l'équation de Poisson intégrée au passage d'un puits quantique :

$$\rho \frac{dn}{dt} = J_{in} - J_{out} \quad (3.1)$$

$$\mathcal{D} = F_{down} - F_{up} \quad (3.2)$$

$$= \frac{e\rho(1-n)}{\epsilon} \quad (3.3)$$

avec ϵ la permittivité du milieu. En toute rigueur, les courants de particules J_{in} et J_{out} possèdent une composante tunnel et une composante d'interaction avec le continuum. Ils dépendent du remplissage du puits amont et du puits aval, des valeurs de champ électrique au niveau des barrières ainsi que de la distribution des

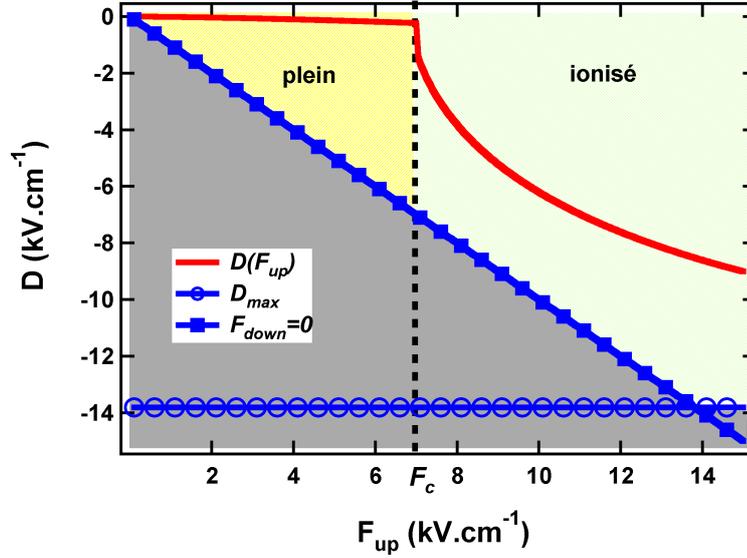


FIGURE 3.5 – Exemple de loi de discontinuité \mathcal{D} en fonction du champ amont F_{up} . La zone grisée correspond à une zone interdite par les deux limites \mathcal{D}_{max} (puits vide) et $F_{down} = 0$ (champ aval nul). Le régime "plein" est matérialisé en hachures jaunes, le régime "ionisés" en hachures vertes. Ils sont séparés par le champ critique F_c .

porteurs au dessus des barrières. La principale approximation de ce modèle consiste à dire que toutes ces dépendances peuvent se réduire à la seule dépendance aux champs électriques : $J_{in}, J_{out} = f(F_{up}, F_{down})$. On néglige la composante tunnel et la dépendance spatiale de la distribution 3D. Nous reviendrons sur ces hypothèses plus tard.

On peut réécrire le système (3.3) sous la forme d'une loi de comportement pour les puits quantiques $\mathcal{D}(F_{up})$. Elle donne la valeur de la discontinuité de champ électrique lorsqu'on passe au travers d'un puits de la structure. Elle est fonction uniquement de la valeur du champ amont. La forme de cette loi, illustrée sur la figure 3.5, peut être cernée à gros traits par les hypothèses suivantes :

- **Régime sous-peuplé.** Les valeurs relatives du dopage entre les puits et les contacts indiquent que les puits possèdent en général un déficit d'électrons par rapport aux charges positives. On se restreint donc aux valeurs négatives de \mathcal{D} . Cette hypothèse implique que la valeur du champ électrique décroît à mesure qu'on s'éloigne du contact d'injection.
- **Saturation.** La valeur maximale \mathcal{D}_{max} de la discontinuité sera atteinte pour un puits entièrement vidé de ses électrons. Elle correspond par exemple à une valeur de $15 \text{ kV}\cdot\text{cm}^{-1}$ pour un dopage de 10^{11} cm^{-2} .
- **Limite du champ aval.** On considère que si le champ électrique aval remonte, des mécanismes de repeuplement par retour des électrons vont intervenir. Donc \mathcal{D} est doit être inférieur à F_{up} en valeur absolue : c'est le sens de la limite $F_{down} = 0$.
- **Deux régimes.** Enfin, pour un puits, il existe deux régimes : "plein" et "ionisé", séparés par la valeur critique F_c . Cette valeur correspond à l'apparition de l'I3. Si $F_{up} < F_c$, les électrons incidents n'ont pas assez d'énergie pour ioniser le puits et celui-ci est quasiment plein. La valeur de la discontinuité est

faible. Si $F_{up} > F_c$, le processus d'I3 est possible et le puits devient partiellement ionisé. Noter que l'existence de ces deux régimes, expliquée ici par l'I3, ne lui est pas nécessairement réduite : un autre phénomène physique pourrait en être la cause microscopique.

La suite de ce chapitre consiste à utiliser cette loi de discontinuité comme un intermédiaire entre microscopique et macroscopique. La section 2 détaille comment on peut traduire l'information portée par la mesure $V(i)$ à l'échelle mésoscopique et produire une loi $\mathcal{D}(F_{up})$ optimisée à partir de l'expérience. En ce sens elle a pour vocation d'étudier la réorganisation de la structure de bande sous l'effet des charges d'espace, indépendamment de leur origine physique. La section 3 pose des jalons pour calculer cette loi à partir de principes microscopiques. La dernière partie discute des limitations de ce modèle et propose des perspectives alternatives.

2 Ajuster la loi $\mathcal{D}(F)$: effets de charges d'espace

Il s'agit ici de rendre intelligible, à un niveau plus proche de la réalité microscopique, les caractéristiques du motif en 'S' et de RDN de la mesure $V(i)$ pour la structure v265 (cf Fig.3.2). L'idée est d'ajuster la mesure expérimentale afin de trouver empiriquement une loi de discontinuité optimisée. A part la modélisation du contact précisée ci-après, le reste de cette section n'introduit plus de physique supplémentaire. Moralement, nous allons ajuster numériquement une courbe avec un nombre arbitraire de paramètres (ceux qui déterminent la forme de la loi $\mathcal{D}(F)$). Cette étude des effets de charges d'espace peut être menée sans avoir identifié leur origine physique. Nous allons donc volontairement nous concentrer sur les conséquences (charges d'espace) sans discuter des causes associées (I3).

Pour un courant donné i traversant les couches actives, il est possible de calculer le champ sur la barrière d'injection $F_0(i)$. En appliquant ensuite de façon itérative la loi $\mathcal{D}(F_{up})$ sur chaque puits, on calcule les champs électriques F_k sur toutes les barrières de la structure. Leur somme donne la valeur de tension. Soit f la fonction qui donne $F_{down} = f(F_{up})$: $f = 1 + \mathcal{D}$. Alors $F_k = f^{(k)}(F_0)$ et on veut donc résoudre numériquement l'équation fonctionnelle d'inconnue f :

$$V_{exp}(i) = L_p \times \sum_{k=0}^{40} f^{(k)}(F_0(I)) \quad (3.4)$$

où (k) représente la k -ième convolution, L_p est la largeur d'une période, et $V_{exp}(i)$ la mesure expérimentale.

2.1 Modèle du contact d'injection

Un modèle précis du contact d'injection est nécessaire dans la mesure où l'algorithme se déploie séquentiellement à partir de $F_0(i)$. Le calcul de cette loi s'effectue en deux temps³. Les détails sont disponibles dans l'annexe B.

Dans un premier temps, la structure de bande du contact et du premier puits est calculée pour chaque valeur de F_0 . Les corrections dues aux interactions à N

3. C'est en fait la loi $i(F_0)$ qu'on calcule.

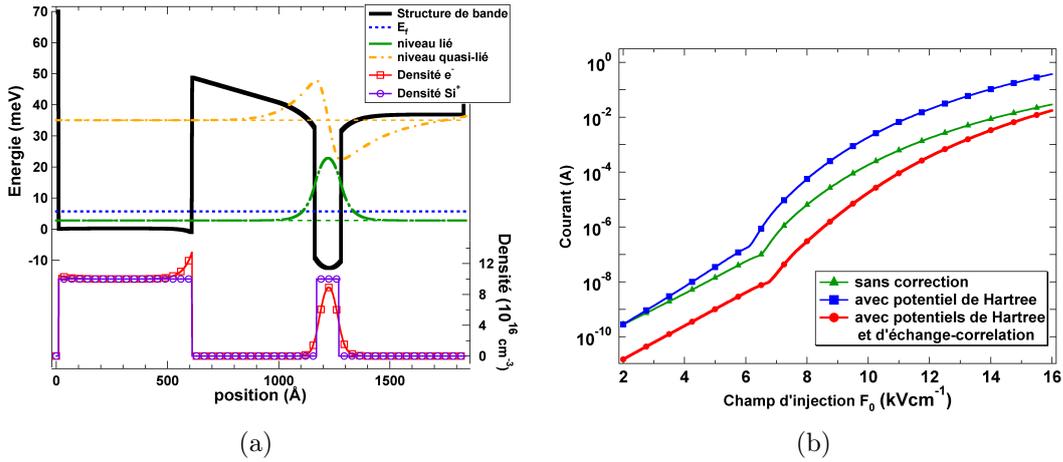


FIGURE 3.6 – (a) Structure de bande du contact et de la barrière d’injection de la structure v265 à tension nulle. (b) Lois $F_0(i)$ calculées pour trois degrés d’approximation : sans correction, en prenant en compte l’équation de Poisson (terme Hartree), et celui d’échange-corrélation. Les angles autour de $6 - 7 \text{ kV.cm}^{-1}$ correspondent au moment où la barrière devient triangulaire.

corps doivent être prises en compte dans le traitement en électrons indépendants des structures QWIPs THz [156]. En effet la valeur de la transition optique, de l’ordre de 10 meV , y est comparable aux corrections de Poisson et d’échange-corrélation. Le problème principal provient du calcul de la densité de porteurs, car le contact est bien décrit comme un gaz électronique tri-dimensionnel alors que dans les puits, le confinement quantique doit être considéré. La figure 3.6(a) montre le résultat d’un tel calcul de structure de bande. La correction portée par le terme d’échange-corrélation vaut 7.6 meV , pour une énergie de transition calculée $E_{21} = 32.3 \text{ meV}$.

Dans un second temps, on calcule pour chaque structure de bande le courant qui passe à travers la barrière d’injection, au moyen d’un formalisme WKB en matrice de transfert [157]. La figure 3.6(b) illustre comment la prise en compte du potentiel de Hartree (correction due à l’équation de Poisson) et celui d’échange-corrélation modifient la loi $F_0(i)$. Comparé au calcul à l’ordre zéro, la correction Hartree abaisse la barrière d’injection (pour vérifier la continuité du champ électrique), et le courant est augmenté. Cette majoration est compensée par l’élévation de 7.6 meV de la barrière lorsque le terme d’échange-corrélation est pris en compte. Le fait que le courant varie sur plus d’un ordre de grandeur montre à quel point ces corrections, souvent négligées dans l’infrarouge, sont importantes dans le THz.

2.2 Optimisation sur un QWIP THz @ $30 \mu\text{m}$

Une fois connue la loi $F_0(i)$, la résolution numérique de l’équation fonctionnelle (3.4) est un problème complexe d’optimisation multi-dimensionnelle. La méthode utilisée est une descente de gradient [158]. Elle nécessite de circonscrire l’espace des phases, de bien paramétrer la courbe $\mathcal{D}(F)$ et de vérifier la convergence vers un même optimum à partir de différents points de départ suffisamment proches. Pour explorer plus largement la topologie de l’espace des phases, des algorithmes génétiques peuvent être utilisés en première approche [159]. La figure 3.7, sur laquelle l’exploration du ‘S’ de la $V(i)$ correspond au changement de régime pour le pre-

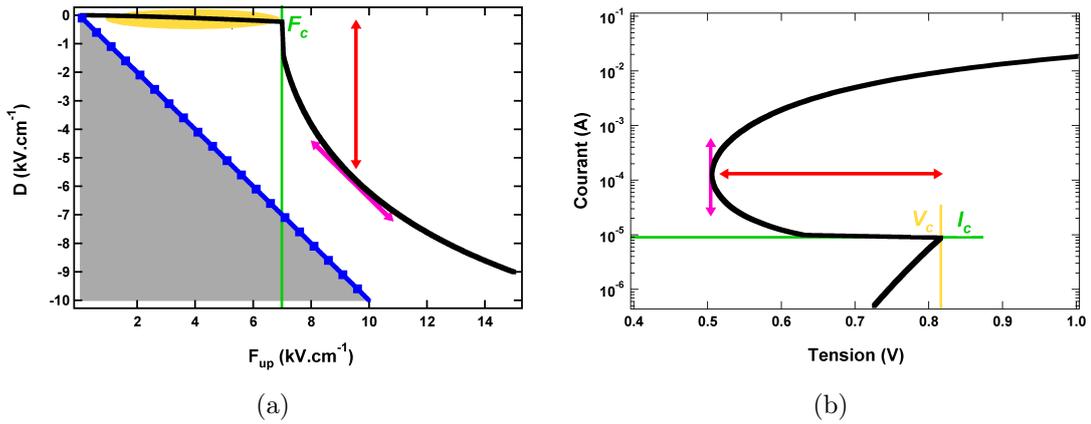


FIGURE 3.7 – Lien entre les éléments de (a) la loi $\mathcal{D}(F)$ et de (b) la courbe $V(i)$ calculée. F_c est le champ électrique seuil de la transition de régime pour un puits, I_c et V_c les valeurs du courant et de la tension de la transition de phase au niveau macroscopique.

mier puits de la structure, montre comment simplifier ce problème. Les différentes caractéristiques de la courbe $V(i)$ sont en fait contrôlées par des zones de la loi $\mathcal{D}(F)$ relativement distinctes et indépendantes. En plus de simplifier le problème, cela garantit une certaine unicité de la solution.

- Le degré d’ionisation des puits dans le régime "plein" (ellipse orange) contrôle la tension de seuil V_c où apparaît la transition de phase. Une structure avec des puits très peu ionisés sera proche de la condition de champ homogène et V_c sera grand. Un degré d’ionisation plus fort et la structure sera courbée : la tension de seuil V_c sera plus faible.
- Le champ électrique seuil F_c (en vert), contrôle la valeur du courant à la transition I_c .
- L’amplitude de l’ionisation dans le régime "ionisé" (flèche rouge) contrôle la largeur du 'S'.
- La pente de la loi $\mathcal{D}(F)$ (flèche magenta) se retrouve sur la courbe $V(i)$. Le régime de RDN est restreint aux points de la loi de discontinuité vérifiant $\partial\mathcal{D}/\partial F_{\text{up}} < -1$.

La figure 3.8 présente le résultat de l’optimisation fonctionnelle. Il a fallu singulariser la loi $\mathcal{D}(F)$ du premier puits pour prendre en compte le fait que dans son cas, tous les électrons sont injectés depuis le contact. De plus, il présente une discontinuité déjà significative en régime "plein" (cf figure 3.6(a)). La loi du premier puits est obtenue à partir de la loi des autres puits, par simple translation des valeurs F_0 et $\mathcal{D}|_{0V}$ extraites du calcul de la structure de bande à 0V.

L’objectif de rendre les informations portées par la $V(i)$ macroscopique intelligibles à l’échelle mésoscopique est bien rempli. La courbe expérimentale est en effet parfaitement ajustée. Elle peut s’interpréter de la façon suivante. En partant de la phase isolante, le premier puits pour lequel le champ seuil est atteint est en fait le second puits de la structure. A mesure que le courant imposé augmente, le premier puits va alors à son tour entrer en régime "ionisé". Dans son cas la transition est moins abrupte car il est déjà partiellement vidé par les effets de charge d’espace liés à la proximité du contact. On n’observe pas de second 'S'.

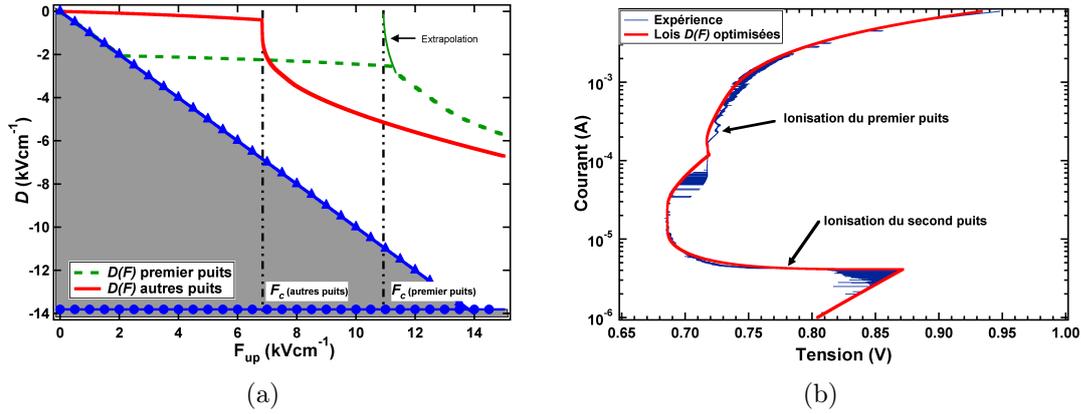


FIGURE 3.8 – Résultat de l’optimisation complète pour l’hystérésis en tension positive de la structure v265. (a) Lois $\mathcal{D}(F)$ optimisées. La loi du premier puits est singularisée par une translation de F_c et de $\mathcal{D}(F)$ en régime plein. (b) Comparaison de la mesure $V(i)$ expérimentale avec la $V(i)$ calculée à partir des lois $\mathcal{D}(F)$ optimisées.

Les lois $\mathcal{D}(F)$ optimisées numériquement portent donc l’information relative à la transition de phase macroscopique. Le but de la partie suivante est de les recalculer à partir de principes microscopiques.

3 Ionisation par impact pour calculer la loi $\mathcal{D}(F)$

La traduction macro vers méso de la partie précédente pouvait se faire sans identifier d’origine physique aux effets de charges d’espaces. Cependant plusieurs éléments abondent dans le sens d’une interprétation en termes d’I3, et seront discutés au cours de cette partie. En particulier, il est frappant de réaliser que les valeurs des champs critiques F_c renvoyés numériquement par l’algorithme ci-dessus correspondent au meV près à la condition d’ionisation par impact. En effet, lorsque le second puits entre en régime ionisé, les électrons injectés balistiquement depuis le contact arrivent à son niveau avec une énergie $E_c = 103$ meV par rapport au niveau fondamental. Si on considère une émission de phonon LO, on a $E_c = 67$ meV. La condition d’ionisation par impact pour ce puits s’écrit $E_c > 2 \times E_{21} = 64.6$ meV. De même pour le premier puits, le changement de régime survient lorsque l’énergie des électrons balistiquement incidents vaut $E_c = 68$ meV.

Recalculer les lois $\mathcal{D}(F)$ touche au coeur de la difficulté conceptuelle relative à la modélisation des QWIPs : il s’agit en effet de modéliser l’interaction entre des électrons 3D en transit au dessus des barrières, et des électrons 2D liés dans les puits quantiques. Dans le cas des modèles photo-émissifs dans l’infrarouge, l’enjeu est d’égaliser le courant de capture des électrons 3D et le courant de drain des électrons 2D par émission thermo-ionique et absorption de photons. C’est l’impossibilité de calculer des temps de diffusion pour des électrons en transit dans un continuum et des électrons dans des sousbandes liées au sein d’un même cadre formel qui a conduit la communauté à s’appuyer sur le paramètre empirique de probabilité de capture [68].

Dans le cas des QWIPs THz et du scénario d’I3, le problème est un peu simplifié par le fait que les mêmes électrons sont responsables du drain et du remplissage

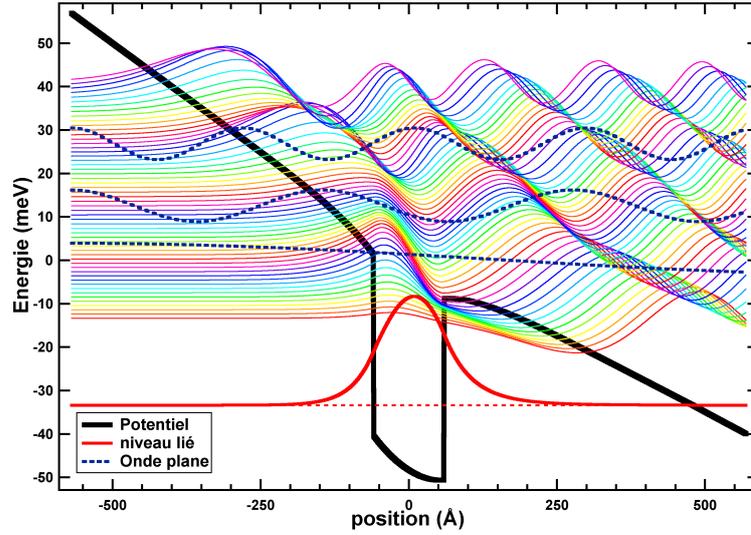


FIGURE 3.9 – Structure de bande pour un puits quantique. F_{up} vaut 10 kV.cm^{-1} , et le puits est rempli à 80% ($n=0.8$). Trois ondes planes sont représentées en pointillés bleus.

des puits. Il n'est donc pas nécessaire de connaître le nombre total d'électrons en interaction avec le puits : des distributions électroniques 3D normalisées η_{3D} suffisent. Le raisonnement esquissé dans cette partie n'a pas abouti. Etant donné le temps qui lui a été consacré dans cette thèse, nous avons choisi de le présenter tel qu'il a été pensé initialement, et de rassembler l'ensemble des réserves et contre-arguments pour la partie suivante. Le calcul se déroule en trois étapes, semblables à celles présentées pour l'algorithme METIS dans le chapitre 2⁴ :

Structures de bande. On calcule la structure de bande d'un puits quantique pour un grand nombre de couples (F_{up}, n) . Comme illustré sur la figure 3.9, les états du continuum sont calculés pour un modèle de type grande boîte. La perturbation des états du continuum par le niveau quasi-lié est bien visible autour de 0 meV. Pour comparaison, trois fonctions d'ondes planes sont représentées. Dans ce calcul où les effets de champ électrique sont prépondérants, on a choisi la base de Wannier-Stark qui les prend directement en compte dès la diagonalisation du hamiltonien. La taille de la boîte et donc la densité d'états dans le continuum est fixée par le critère suivant : l'écart en énergie entre deux fonctions doit être comparable à $k_B T$, qui vaut 0.3 meV à 4K. On justifie une telle discrétisation par le fait qu'on veut modéliser des effets fortement résonants.

Taux de diffusion Pour chaque configuration (F_{up}, n) , on dresse une cartographie des taux d'ionisation Γ_{I3} [121, 122] et de capture par émission de phonon LO Γ_{LO} [160], en fonction de l'énergie du niveau du continuum considéré E_z . Contrairement au chapitre 2, il est nécessaire de prendre en compte la dépendance en énergie dans le plan des couches $E_{//}$, car l'hypothèse de thermalisation intra-sousbande n'est pas valide pour un continuum aussi fourni en états.

Le principe de ces mécanismes est rappelé sur les figures 3.10(a) et 3.10(b). Ils vérifient simultanément la conservation de l'énergie et du moment cristallin, car dans

4. Pour des raisons conjoncturelles, ce travail a été effectué sans interaction avec Thales R&T. Le code développé ici est indépendant de METIS.

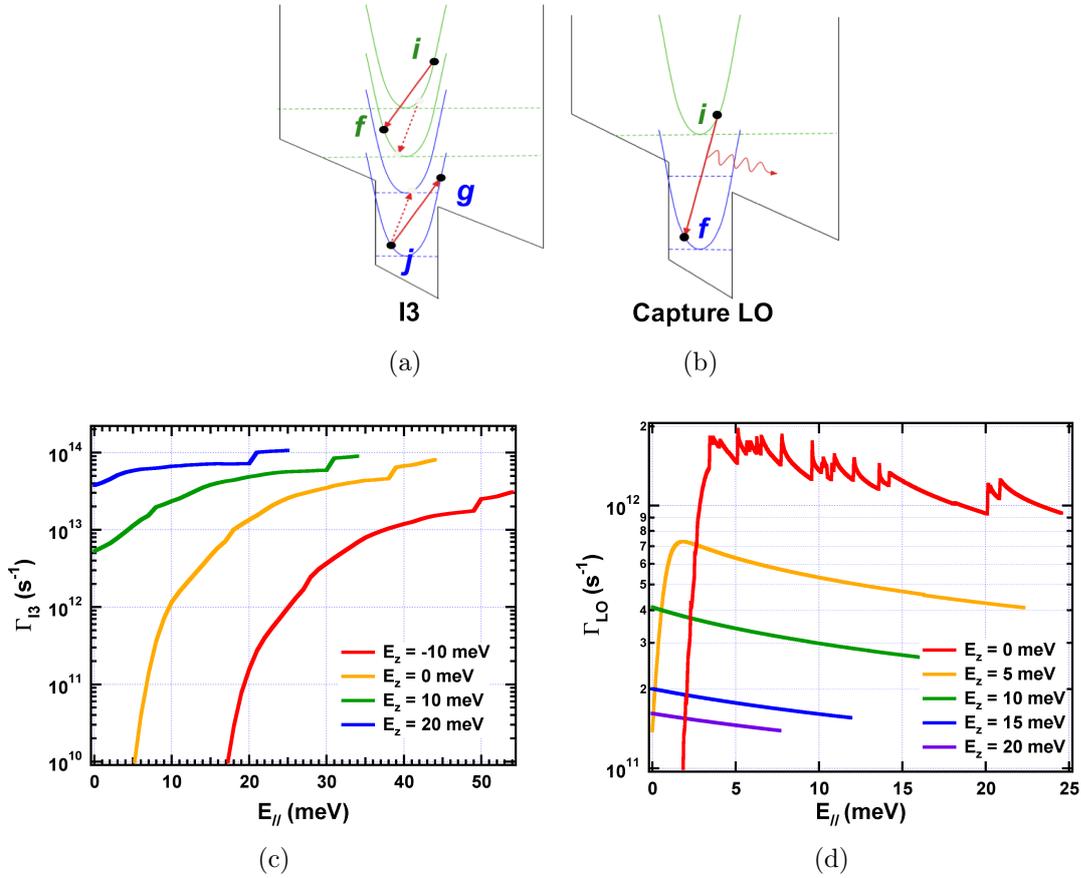


FIGURE 3.10 – (a) et (b) : Principe des diffusions par (a) ionisation par impact inter-sousbandes et (b) capture par émission de phonon LO. i et j sont les états de départ, f et g mes états d'arrivées. Pour l'I3 on a représenté deux diffusions possibles. (c) et (d) : Taux de diffusions calculés pour différents niveaux du continuum (E_z) en fonction de l'énergie dans le plan des couches ($E_{||}$), pour (c) l'I3 et (d) la capture LO.

le cas de ces diffusions, l'invariance par translation dans le plan des couches est bien vérifiée. Une ionisation est considérée réussie si les deux états finaux appartiennent au continuum d'états. La capture sera efficace si l'état d'arrivée est le niveau lié, et que l'énergie parallèle est inférieure à la hauteur de la barrière.

Les figures 3.10(c) et 3.10(d) montrent les résultats numériques pour différentes valeurs du couple $(E_z, E_{||})$. Pour l'I3, le taux de diffusion est une fonction croissante de l'énergie totale, plus sensible à la variation de E_z que $E_{||}$. Cette variation est l'image directe du nombre d'états accessibles par des transitions conservant l'énergie et le moment cristallin. Pour la même raison, l'efficacité de l'I3 calculée ici pour les électrons du continuum dépend exponentiellement du nombre de porteurs dans le puits. En revanche, le taux de capture est quasiment indépendant de l'énergie parallèle $E_{||}$ (la faible décroissance correspond à une diminution de l'efficacité quand le transfert de moment cristallin au réseau augmente) et de la population du puits (mis à part un effet marginal de blocage de Pauli). Comme vu au chapitre 2, il présente une résonance lorsque $\Delta E_z = \hbar\omega_{LO}$.

Le caractère bruité du taux de diffusion LO pour $E_z = 0$ meV est symptomatique des instabilités numériques de ce calcul, émanant ici d'une discrétisation insuffisante

pour calculer une intégrale numérique⁵. Des pics similaires sont observés sur les taux d'I3. Cependant la précision numérique vient au prix du temps de calcul. Une heure de temps processeur est nécessaire pour calculer un taux $\Gamma_{I3}(F_{up}, n, E_z, E_{//})$, car c'est une collision à deux particules. Il faut environ 10 secondes pour le taux LO correspondant. Pour obtenir un bon maillage $(F_{up}, n, E_z, E_{//})$, environ 10^7 taux de diffusion doivent être calculés.

Courants de diffusion et population du puits La dernière étape lie la distribution d'électrons dans le continuum η_{3D} à la loi $\mathcal{D}(F)$. Le problème peut être pris dans les deux sens. Dans un cas, on calcule *a priori* η_{3D} , puis on détermine la loi $\mathcal{D}(F)$ et on la compare à la loi optimisée. L'étape supplémentaire de détermination de η_{3D} peut se faire par exemple en utilisant une méthode Monte-Carlo et en ignorant l'interaction avec les puits quantiques. Dans l'autre cas, on utilise la loi optimisée pour extraire une photographie de la distribution 3D. De la même façon que dans la partie précédente, on procède à la résolution d'une équation fonctionnelle d'inconnue $\eta_{3D}(F_{up}, E_z, E_{//})$.

Dans les deux cas, l'idée est de trouver la population du puits n qui égalise les courants d'I3 et de capture, pour un couple (η_{3D}, F_{up}) donnés. Si le courant de capture est quasiment indépendant de la population du puits, le courant d'ionisation varie exponentiellement avec n , ce qui garantit l'existence d'une solution $n^*(F_{up}, \eta_{3D})$ à l'équation :

$$\begin{aligned} J_{in} &= \int dE_z dE_{//} \eta_{3D}(F_{up}, E_z, E_{//}) \Gamma_{LO}(F_{up}, n, E_z, E_{//}) \\ &= \int dE_z dE_{//} \eta_{3D}(F_{up}, E_z, E_{//}) \Gamma_{I3}(F_{up}, n, E_z, E_{//}) \\ &= J_{out} \end{aligned} \quad (3.5)$$

L'équation de Poisson lie directement n^* à $\mathcal{D}(F_{up})$. C'est la seconde démarche, permettant de "photographier" la distribution 3D qui a été adoptée, sans pouvoir aboutir. En effet, des distributions très relaxées surévaluent systématiquement le champ critique F_c , alors que des distributions balistiques ionisent trop fortement le puits. De plus, cette équation fonctionnelle est beaucoup moins bien posée que la précédente, l'espace des phases ne possédant pas de minimum global. Nous détaillerons d'autres raisons plus fondamentales dans la partie suivante.

4 Discussion

Après avoir présenté le principe d'une tentative d'explication quantitative à la transition de phase dans des QWIPs THz, cette section est dévolue à une analyse plus qualitative menée avec un peu plus de recul sur le problème. Si des mesures complémentaires en champ magnétique et en température viennent étayer notre hypothèse d'I3 et de réorganisation de structure de bande, le caractère idéal de l'explication avancée est largement remis en cause par la variabilité expérimentale du phénomène.

5. Fondcièrement, c'est la densité bidimensionnelle du moment cristallin d'arrivée $\mathbf{k}_{//}^f$ qui est approximée par un nombre insuffisant de densités uni-dimensionnelles. Ce comportement n'est pas visible sur les autres courbes car le nombre d'états possibles d'arrivée est alors beaucoup plus grand

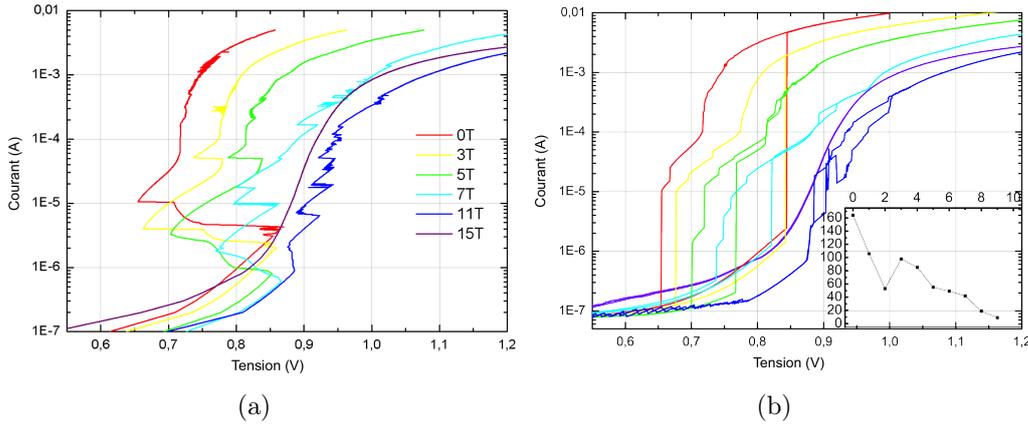


FIGURE 3.11 – Echantillon v265 à 4K. (a) $V(i)$ mesurées en fonction du champ magnétique. (b) : $I(v)$ mesurées en fonction du champ magnétique. Insert : largeur de la figure d’hystérésis en mV en fonction du champ magnétique. Les mesures ont été effectuées au Laboratoire Pierre Aigrain.

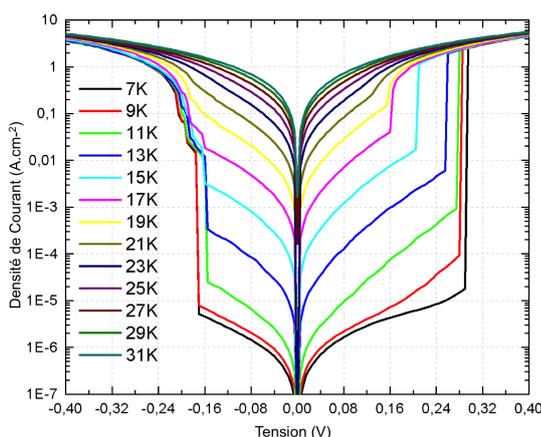
4.1 Argument qualitatif en faveur de l’ionisation par impact inter-sousbandes

Un argument complémentaire plaide fortement en faveur de l’ionisation par impact inter-sousbandes comme responsable de la transition de phase. Il explique notamment pourquoi ce phénomène n’est pas observé dans les QWIPs infrarouge de façon aussi marquée. C’est le caractère ramassé de la distribution d’électrons du continuum, spécifique à la gamme THz à basse température.

Commençons par justifier cette assertion. Dans le THz, l’énergie de transition E_{21} est comparable, ou inférieure à $\hbar\omega_{LO}$. Les électrons du continuum peuvent facilement atteindre des énergies suffisantes pour déclencher l’I3, même accélérés par des champs électriques faibles. L’émission de phonon LO, principale contribution à la perte d’énergie des électrons dans le continuum, n’est possible que lorsque ceux-ci possèdent une énergie supérieure de 36 meV par rapport au sommet des barrières. Pour les champs étudiés ici, l’énergie acquise en traversant une période correspond environ à une ou deux émissions possibles. La faible température et le peu d’électrons dans le continuum garantissent que les deux autres mécanismes de l’étalement de l’énergie des électrons 3D (phonons LA et interactions électron-électron) sont peu efficaces. L’énergie du gaz électronique n’est donc qualitativement que peu modifiée par sa propagation au dessus des barrières. En revanche, dès que le gaz peut interagir avec des puits quantiques, par I3 ou émission LO, sa distribution énergétique peut être significativement modifiée. Dans l’infrarouge, les champs électriques nécessaires à l’apparition d’I3 sont plus importants, l’émission de phonons LO activée dans le continuum, et la distribution d’électrons potentiellement ionisants largement plus étalée énergétiquement.

Si l’image intuitive de l’I3 a été présentée comme la conséquence de la collision d’un seul électron, c’est pourtant bien un effet fortement collectif : il faut que ce franchissement du seuil déclenche l’I3 pour un nombre massif d’électrons du continuum⁶. Une distribution 3D resserrée autour d’une énergie donnée garantit donc cet

6. Voir les phénomènes en valeur moyenne uniquement peut aboutir à une vision très biaisée.


 FIGURE 3.12 – Mesures $I(v)$ pour l'échantillon v266 pour différentes températures.

effet collectif : tous les électrons atteignent la condition d'I3 pour le même champ électrique. On observe alors un régime de RDN très plat dans la $V(i)$, et une forte discontinuité de courant en $I(v)$. A l'inverse, une distribution large induira des modifications du régime de transport moins abruptes. Il y a deux moyens expérimentaux de vérifier l'importance de la concentration de η_{3D} , en étalant les distributions électroniques en énergie : le champ magnétique et la température ⁷.

La figure 3.11 illustre la modification de la transition de phase de la structure v265, induite par l'application d'un champ magnétique dans la direction d'épitaxie. Dans le plan des couches, les électrons suivent alors des orbites cyclotron fermées. La dispersion continue des sousbandes est quantifiée en niveaux de Landau, de façon similaire à un potentiel harmonique. L'écart entre deux niveaux est contrôlé par la pulsation cyclotron $\Delta E_L = \hbar\omega_c = \hbar qB/m^*$. A mesure que le champ magnétique appliqué augmente, la largeur et la hauteur du 'S' et de l'hystérésis diminuent, jusqu'à disparaître complètement. On observe simplement une envolée du courant, qui ressemble à des figures observées dans l'infrarouge [152]. Les deux phases limites sont conservées. La fragmentation de la figure du 'S' en ce qui ressemble à des sous-structures de même genre peut être interprétée qualitativement comme une conséquence de la discrétisation des densités d'états par les niveaux de Landau.

La figure 3.12 montre comment la transition de phase de la structure v266 varie avec la température. Lorsque la température augmente, la valeur du courant en phase isolante augmente, la tension de seuil diminue, mais le régime conducteur n'est que peu modifié. Cela s'explique qualitativement par l'augmentation de l'extension énergétique de la distribution des électrons liés dans le puits. Pour le courant en phase isolante cela induit une thermo-ionisation accrue : les électrons sont plus chauds et le nombre de phonons LO pouvant être absorbés augmente. Pour la tension de seuil, c'est la condition énergétique pour l'I3 qui est assouplie : les électrons chauds sont plus proches du sommet de la barrière.

Le chapitre 4 est consacré à la mise en perspective des fluctuations associées.

7. Noter que ces deux quantités élargissent simultanément la distribution 3D et la distribution des électrons liés dans les puits. Cela ne change formellement pas l'argument.

4.2 Limitations de la démarche

En prenant du recul, la démarche détaillée depuis le début de ce chapitre se fonde sur une traduction en deux temps de l'information : d'abord en regardant les effets de charge d'espace pour obtenir une loi de comportement pour chacun des puits, ensuite en utilisant un calcul de hopping Wannier-Stark pour traduire cette loi de comportement en distribution électronique. Cinq (au moins) critiques peuvent être adressées à cette démarche. Nous allons les présenter par ordre d'importance croissante, qui correspond à la remontée du raisonnement déployé ci-dessus.

La première réserve concerne l'articulation des deux régimes "plein" et "ionisé" pour les puits. On a voulu effectuer un calcul de la partie "ionisée" de la loi $\mathcal{D}(F_{up})$. A ce titre les mécanismes tunnel ont été ignorés. Mais la sensibilité du modèle à ce qui se passe au seuil du changement de régime exigerait de prendre en compte tous les mécanismes de capture et de vidange du puits.

La seconde réserve concerne le choix de modéliser le continuum d'états au dessus des barrières comme un quasi-continuum composé d'états liés dans une grande boîte, afin d'y déployer un modèle de hopping Wannier-Stark. Ce dernier est en effet un cas particulier de l'équation de Boltzmann dans lequel le confinement quantique a éteint le terme de gradient $\frac{q}{\hbar}(\mathbf{F} + \nu_g \times \mathbf{B})\nabla_{\mathbf{k}}$ (cf chapitre 2), et où le champ électrique est directement pris en compte dès la diagonalisation du hamiltonien. Mais pour le continuum au dessus des barrières il n'y a plus de confinement. Comment traiter alors l'effet du champ électrique ?⁸ Autrement dit, il paraît assez douteux d'utiliser une base d'états stationnaires pour décrire le transport d'électrons en transit. La condition de validité $\Gamma < 2\Delta$ (élargissement du niveau faible devant l'écart entre deux niveaux, voir chapitre 2) pour le hopping Wannier Stark implique que l'électron doit rester pendant un temps "long" sur chacun des états utilisés.

De fait, les problèmes numériques qui ont limité ce calcul proviennent principalement du caractère parfaitement défini énergétiquement, sans élargissement, des états stationnaires. Les pics de résonances et le bruit numérique induits empêchent d'atteindre la précision nécessaire à l'optimisation. On pourrait imaginer ne plus calculer les taux d'ionisation et de capture pour des couples $(E_z, E_{//})$ donnés, mais doublement moyennés : une fois en remplaçant les diracs de la règle d'or de Fermi par des lorentziennes, une seconde fois en considérant chaque électron comme un paquet d'ondes réparti sur plusieurs fonctions du continuum. Là où l'exigence numérique était contraignante, elle deviendrait ici rédhitoire.

La troisième réserve concerne le choix même de la méthode utilisée : traitement en loi $\mathcal{D}(F_{up})$, dans l'hypothèse d'I3. En effet, l'étude des détails microscopiques du mécanisme montrent un caractère fortement résonant du processus d'I3. Ce qui est assez incompatible avec la grossièreté de l'hypothèse selon laquelle la distribution 3D n'est fonction que de la valeur de F_{up} . De fait la singularisation du premier puits est un premier pas dans la prise en compte du fait que η_{3D} varie significativement non seulement en fonction du champ électrique, mais aussi en fonction de la position dans la structure, de l'état des puits en amont, etc...⁹.

8. La performance du programme METIS pour calculer les caractéristiques d'obscurité des QWIPs est un signe que c'est l'interaction avec les puits quantiques qui domine. L'échec à prédire les amplitudes de réponse illustre que le détail du transport au sein même du continuum est mal modélisé.

9. Sur la figure 3.8(a), la loi du premier puits n'est pas exactement la translatée de la loi des

La quatrième réserve concerne la conservation du courant. Pour déployer cet algorithme, le courant a été calculé au niveau de la barrière d'injection, et la conservation de la charge a été invoquée pour justifier un certain désintéressement de ce qui se passe plus en aval de la structure. Renversons le point de vue et regardons près du contact aval. Comment se fait-il que dans le cas d'un effondrement de structure de bande en $I(v)$, le courant ait augmenté de plusieurs ordres de grandeur entre la phase isolante et la phase conductrice, alors que le champ électrique sur les derniers puits de la structure a diminué ? Deux pistes d'explication peuvent être avancées : augmentation du nombre de porteurs du continuum par la vidange des puits ionisés, et augmentation de la température électronique¹⁰.

La cinquième réserve est d'ordre méthodologique. Nous nous sommes concentrés sur une figure d'hystérésis sur un pixel d'un échantillon (v265). Même si la mesure expérimentale est parfaitement reproductible pour cet échantillon (superposition des courbes mesurées à 3 ans d'intervalle), les mesures effectuées sur d'autres pixels issus de la même plaque, et sur des pixels différents d'autres échantillons présentent une dispersion de tensions de seuil et de formes d'hystérésis assez incompatibles avec le caractère idéalisé de la structure qui sous-tend l'interprétation de la transition de phase en terme d'I3. Cette explication considère que le transport change de nature de façon homogène simultanément dans l'ensemble de la structure. Au contraire, la variabilité des figures d'hystérésis amène à considérer les défauts de la structure comme acteurs importants de la transition de phase.

4.3 Interprétations alternatives

Les transitions de phase hors équilibre ont été étudiées extensivement dans les semi-conducteurs massifs [161], ainsi que les phénomènes de dynamique non-linéaire associés [137]. Les régimes de résistance différentielle négative sont interprétés en termes d'une inhomogénéité de conductivité qui se propage dans la structure [162]. Le transport s'effectue dans la direction z entre les électrodes, perpendiculairement au plan //.

Les motifs en 'N' correspondent souvent à la coexistence de deux régimes de transport dans la direction de propagation du courant z . L'échantillon étant homogène dans la direction //. Nous en avons vu un exemple dans le chapitre 2, où les plateaux des courbes $I(v)$ à basse températures correspondent à une RDN pour chaque période. A mesure que les plateaux de courant sont parcourus, les puits basculent successivement dans un régime de haut champ électrique, et la zone de grande conductivité s'étend progressivement à l'ensemble de la structure.

Les motifs en 'S' peuvent être expliqués par l'apparition de filaments de courant, zones traversantes de forte conductivité suivant z et immergées dans une zone de faible conductivité. Le diamètre du filament augmente à mesure que le 'S' est parcouru. L'existence d'un filament requiert d'une part un processus de nucléation qui va créer localement une forte conductivité σ_z dans la direction z , et d'autre part une

autres puits. Le petit relief entre 11.5 et 13.5 $kV.cm^{-1}$ est un artefact permettant de bien ajuster la $V(i)$, et rend compte en fait de la modification de la loi du deuxième puits lorsque le premier entre en régime ionisé.

10. Ce second argument est à nuancer par le fait que pour ces champs faibles, l'émission de phonon LO est un bon drain de l'énergie vers le réseau.

faible conductivité $\sigma_{//}$ dans le plan $//$. L'énergie de surface du filament est alors suffisamment basse pour permettre sa stabilité. La dynamique non linéaire et chaotique de ces filaments est très riche (nucléation, croissance, coalescence, multi-stabilité, oscillations) et a été largement investiguée théoriquement [137, 163]. En revanche, leur mise en évidence expérimentale est plus difficile et les résultats probants sont moins abondants [164]. L'ionisation par impact interbandes ou depuis une minibande de dopants est souvent identifiée comme le mécanisme responsable de la nucléation des filaments.

Qualitativement, le processus de filamentation vient compléter de façon prometteuse l'interprétation de la transition de phase déclenchée par l'I3 dans les QWIPs THz. Il pourrait notamment répondre à la cinquième réserve ci-dessus, celle de la variabilité des motifs d'hystérésis selon les échantillons et les polarisations. En effet, la dynamique de formation des filaments donne à notre interprétation la sensibilité aux défauts qui lui manque. Elle pourrait en partie expliquer la forme des fluctuations observées près des points anguleux de la courbe $V(i)$ (cf Fig. 3.2). La question principale en suspens est la possibilité d'une stabilité des filaments, car les structures à puits quantiques *AlGaAs* épitaxiées sont connues pour avoir $\sigma_{//}$ particulièrement élevée, surtout pour ces très basses températures : l'énergie de surface des filaments doit donc être très importante. Dans cette perspective, les mesures $V(i)$ en champ magnétique sur la figure 3.11(a) sont très intéressantes puisque la fermeture des orbites cyclotrons dans le plan des couches joue fortement sur $\sigma_{//}$. La fragmentation du motif en 'S' à mesure que B augmente pourrait donc aussi être interprétée comme la nucléation de filaments variables en nombre et en taille.

5 Bilan

5.1 Résultats

Dans ce chapitre, une transition de phase hors équilibre observée dans des structures QWIPs THz à basse température a été investiguée. Elle est caractérisée par des figures d'hystérésis, des régimes de résistance différentielle négative en 'S', et des discontinuités de résistivité entre les phases isolante et conductrice pouvant atteindre cinq ordres de grandeur.

La transition est attribuée à une importante réorganisation de la structure de bande lorsque des charges positives non écrantées apparaissent sur les premiers puits de la structure. L'échelle mésoscopique de la loi de discontinuité $\mathcal{D}(F_{up})$ est proposée pour expliciter le lien entre comportements microscopique au niveau des puits quantiques et macroscopique dans la mesure expérimentale. Cette méthode consiste à rassembler l'équation du bilan des porteurs sur un puits et de l'équation de Poisson sous une même loi ajustée empiriquement. Elle s'appuie sur une description détaillée des effets de charge d'espace au niveau de l'injecteur, pour lequel on introduit un modèle hybride 2D-3D prenant en compte les potentiels correctifs de Hartree et d'échange-corrélation, afin d'établir précisément le lien entre courant et champ électrique sur la barrière d'injection $F_0(i)$. La résolution numérique d'une équation fonctionnelle permet de trouver deux lois $\mathcal{D}(F_{up})$ qui, ajustant parfaitement la mesure $V(i)$ expérimentale, mettent en lumière un comportement microscopique original. L'exploration du motif en 'S' de la courbe $V(i)$ correspond ainsi à une apparition de

charges positives sur le second puits de la structure, suivie d'un phénomène similaire sur le premier puits. Cet ordre contre-intuitif est expliqué par les effets de transfert de charge entre le premier puits et le contact.

L'apparition des charges positives dans les puits est attribué à un processus d'ionisation par impact inter-sousbandes (I3), au cours duquel les électrons du continuum arrachent des électrons du puits dans lequel ils sont liés, sous l'effet d'interactions coulombiennes. Ce choix d'interprétation est étayé par le fait que l'optimisation numérique des lois $\mathcal{D}(F_{up})$, effectuée sans présupposé de l'origine physique de la création des charges positives, renvoie un champ critique vérifiant précisément la condition d'I3 proposée. Les éléments qui ont empêché son calcul à partir de principes microscopiques sont discutés en détails, en particulier les problèmes liés à la modélisation du transport pour les électrons 3D par un formalisme de hopping Wannier-Stark. Des mesures complémentaires en température et en champ magnétique illustrent qualitativement en quoi le caractère resserré en énergie de la distribution 3D, spécifique aux structures THz à basse température, est responsable de l'ampleur du changement de régime de transport.

5.2 Perspectives

Les difficultés liées au changement d'échelle sont bien visibles sur cette étude, et expliquent bien pourquoi la démarche proposée ne pouvait pas aboutir. La première étape consistait à traduire l'information macroscopique à l'échelle microscopique. Deux réductions du problème ont été mises en oeuvre lors de ce processus : la concentration sur une seule mesure (et passage sous silence de la variabilité du phénomène dans certains cas), et l'hypothèse selon laquelle \mathcal{D} ne dépend que du champ amont F_{up} . Dès lors, toutes les étapes de raisonnement en aval discutaient d'effets dont la rugosité formelle est bien inférieure à celle introduite par ces deux projections.

S'il est impossible que la démarche fondée sur la loi $\mathcal{D}(F_{up})$ puisse aboutir quantitativement, elle étaye qualitativement l'interprétation de la transition de phase en termes d'I3. Un autre angle d'attaque plus prometteur consiste à articuler ce phénomène déclencheur de la transition, avec une dynamique non linéaire de filamentation [137]. En particulier, cela permettrait d'expliquer la variabilité de la transition avec la tension de polarisation, les conditions de mesure et les inhomogénéités des échantillons.

Les principales questions qui émergent concernent la stabilité des filaments. La seule augmentation du nombre de porteurs par ionisation permet-elle d'expliquer la forte conductivité σ_z ? Comment le courant peut-il être conservé dans la région aval? La conductivité $\sigma_{//}$ est-elle suffisamment réduite pour permettre la nucléation des filaments? Il s'agit de renverser le point de vue et de tenter de comprendre les non idéalités en même temps que le phénomène lui même, et pas dans un second temps comme cela a été le cas. Si l'hypothèse de filamentation s'avère exacte, le dispositif gagnerait alors en richesse de la physique (phénomènes hautement non-linéaires et chaotiques) ce qu'il perdrait en potentiel applicatif. De tels détecteurs seraient alors beaucoup trop sensibles au moindre défaut dans la structure.

Un dispositif est un système complexe qu'il faut simplifier pour pouvoir comprendre. Le risque est d'aller trop loin : dans le cas de ce chapitre, la transcription

du problème de l'échelle macroscopique à l'échelle microscopique l'a déjà trop idéalisé pour qu'il puisse être résolu. Sans être toujours aussi limitante, la tendance à l'idéalisation, à la vision en valeur moyenne, réduit la compréhension qu'on peut avoir d'un système, et empêche d'en percevoir tous les aspects. Hors la non-idéalité, la variabilité, les fluctuations des phénomènes étudiés sont très riches d'enseignements. R. Landauer disait : "The noise is the signal". C'est l'objet du chapitre suivant.

Chapitre 4

Bruit électronique dans les détecteurs inter-sousbandes

Tout est bruit pour qui a peur
Sophocle

Le mot "bruit" apparaît dans la langue française au XII^e siècle pour désigner l'éclat, la renommée. Il est ironique qu'il prenne aujourd'hui en physique une acception beaucoup plus péjorative : c'est l'ensemble des éléments parasites qui vont limiter la qualité des mesures et les performances des dispositifs. Soumis à une excitation donnée, un système physique va en effet donner une réponse qui fluctue autour d'une valeur moyenne. L'amplitude relative de la valeur moyenne par rapport à celle des fluctuations définit le rapport signal à bruit qui est le critère de mérite principal des performances des dispositifs.

Pour les détecteurs, la détectivité et la NETD en sont les exemples les plus courants. Cette thèse a été l'occasion de se pencher sur le bruit, sujet relativement délaissé du point de vue théorique dans la communauté des détecteurs inter-sousbandes, malgré son impact prépondérant sur les performances de ces dispositifs. Le QCD est un système modèle pour étudier le transport électronique, et permet ainsi d'aborder l'épineuse question du bruit plus sereinement que d'autres dispositifs moins "propres". Ce chapitre est particulièrement illustratif de notre problématique générale : comment bien articuler la multiplicité des échelles et des visions du transport. Les nombreuses confusions et questions irrésolues, en particulier celle l'indépendance des bruits thermique et de grenaille ("shot noise" en anglais), présentes dans la littérature de la communauté invitent à prendre du recul et à procéder avec prudence.

On définit la densité spectrale de bruit (DSB) pour un processus aléatoire stationnaire ergodique $x(t)$ d'espérance $\langle x \rangle$ de la manière suivante :

$$S_X(\omega) = \lim_{\tau \rightarrow +\infty} \frac{1}{\tau} \langle |X(\omega)|^2 \rangle_\tau - 2\pi \langle x \rangle \delta(\omega) \quad (4.1)$$

où $X(\omega)$ est la transformée de Fourier de $x(t)$, moyennée sur le temps τ long de la mesure expérimentale. La convention "majuscule" pour l'espace de Fourier, "minuscule" pour l'espace réel sera fréquemment utilisée dans la suite. L'hypothèse d'ergodicité indique que $\langle \cdot \rangle_\tau$ peut aussi être une moyenne statistique. Cette grandeur

caractérise l'amplitude des fluctuations des réalisations du processus autour de la valeur moyenne. On montre par le théorème de Wiener-Khintchine que la densité spectrale de bruit est égale à la transformée de Fourier de la fonction d'auto-corrélation du processus $g_{xx}(s) = \langle x(t)x(t+s) \rangle$.

Expérimentalement, le bruit est mesuré dans le circuit extérieur branché sur le dispositif à étudier. Une grandeur physique est imposée (en électronique, le courant ou la tension), et on mesure les fluctuations d'une autre grandeur : tension, courant, mais aussi nombre de photons, capacités... En pratique le temps de mesure τ est fini, et le bruit est mesuré sur une bande de fréquence¹ finie $\Delta\omega = \pi/\tau$. L'amplitude de bruit, qui correspond à l'écart type des fluctuations, est alors définie comme la racine carrée de l'intégrale de la DSB sur la bande de fréquence de mesure :

$$\sqrt{\langle x^2 \rangle_{\Delta\omega}} = \left(\int_{\Delta\omega} S_X(\omega) d\omega \right)^{1/2} \quad (4.2)$$

C'est cette grandeur qui est souvent représentée expérimentalement car elle a la même dimension que le signal. Par exemple, si dans un composant le spectre de bruit de courant est blanc, *ie* indépendant de la fréquence, on a le courant de bruit suivant $\sqrt{\langle i^2 \rangle_{\Delta\omega}} = (S_I(0)\Delta\omega)^{1/2}$, exprimé en Ampères.

Dans le chapitre précédent, nous avons occulté le fait que le transport dans les hétérostructures à puits quantiques est un processus fondamentalement stochastique. En effet, lors de la résolution de l'équation (2.33), le passage des temps de vies aux populations des sousbandes implicait une vision "en moyenne". En réalité, les diffusions entre les sous-bandes sont aléatoires, les grandeurs électroniques fluctuent autour de leurs valeurs moyennes.

La démarche habituelle pour l'analyse du bruit s'effectue en trois temps, dans un mouvement d'aller-retour entre le macroscopique et le microscopique : à partir de la mesure expérimentale macroscopique, une analyse microscopique des phénomènes est déployée, pour finalement retourner au macroscopique pour y comparer théorie et expérience. Ce chapitre va se déployer selon un mouvement similaire de particularisation-généralisation. Dans un premier temps, nous nous placerons dans un cadre général pour inventorier les sources de bruit usuelles dans les dispositifs semiconducteurs (partie 1), puis plus particulièrement dans les détecteurs inter-sousbandes (partie 2). Les problèmes liés à la formulation courante des bruits shot et Johnson comme phénomènes indépendants seront identifiés (partie 3). Deux nouvelles approches pour comprendre et modéliser le bruit dans ces structures seront présentées (parties 4 et 5). Forts de ces idées et résultats, nous repartirons finalement vers la généralité en essayant de dégager les grandes idées d'une analyse rigoureuse des fluctuations en physique du solide (partie 6).

1 Sources de bruit en physique du solide

En physique du solide, le bruit est usuellement représenté par une ou plusieurs des contributions suivantes [165] : thermique, grenaille, scintillement, télégraphe. La figure 4.1 en illustre certaines sur un exemple. Dans cette section, on s'attachera à décrire chacun de ces types de bruit suivant deux points de vue : empiriquement au

1. Rigoureusement, c'est ici de la pulsation dont il s'agit.

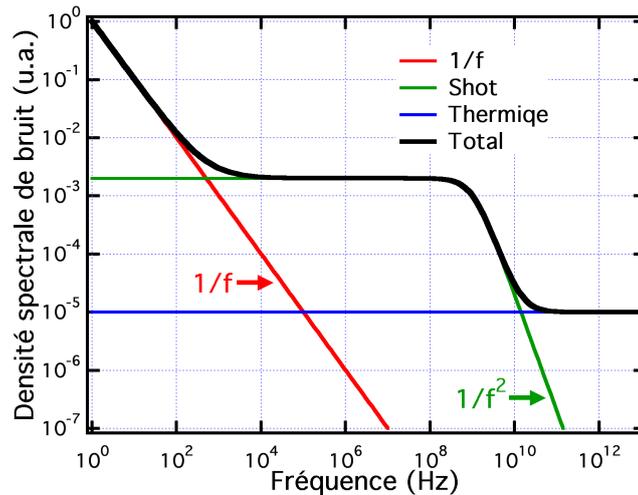


FIGURE 4.1 – Exemple de densité spectrale de bruit. On distingue trois contributions différentes qui sont usuellement interprétées comme suit : à basse fréquence, un bruit en $1/f$ domine. A fréquence intermédiaire, le bruit shot est blanc jusqu'à sa fréquence de coupure puis décroît en $1/f^2$. A très haute fréquence, le bruit blanc est attribué à des fluctuations thermiques. On peut donc interpréter une telle figure comme la somme de trois contributions indépendantes.

niveau de la mesure expérimentale et phénoménologiquement à l'échelle des porteurs de charge.

1.1 Bruit thermique

Dans un système physique à l'équilibre thermodynamique, les porteurs de charges se trouvent dans un état d'agitation thermique. Celle-ci peut s'interpréter différemment selon la focale utilisée pour étudier le transport. Dans une description de type dérive-diffusion, on considère que la vitesse des porteurs varie sous l'effet du mouvement brownien. Dans le modèle de diffusion inter-sousbandes du chapitre 2, c'est l'extension en énergie de la fonction de distribution de chaque sousbande qui caractérise ces fluctuations. Dans une vision mésoscopique du transport, on peuple les canaux de conduction avec une probabilité qui ne vaut plus 1 ou 0 à température finie.

Ainsi à température non nulle, le potentiel (ou le courant) mesuré aux bornes de n'importe quel objet fluctue autour de zéro. Les mesures de J.B. Johnson [166] ont mis en évidence dès 1928 que dans un circuit électrique linéaire ce bruit ne dépend ni de la forme ni du matériau considéré, mais est seulement proportionnel à la température T et à la résistance R de l'échantillon (voir Fig. 4.2). La justification théorique fut donnée la même année par H. Nyquist [167]. En hommage, ce bruit est souvent appelé bruit Johnson ou Johnson-Nyquist. Historiquement le papier de Nyquist est le premier énoncé du théorème de fluctuation-dissipation, et les travaux de Johnson ont permis une détermination expérimentale de la constante de Boltzmann. De nombreuses démonstrations de la célèbre formule $S_I = 4k_B T/R$ existent, nous en donnerons deux : la démonstration historique en suivant le raisonnement originel de Nyquist par la loi d'Ohm et une plus récréative en utilisant le rayonnement du corps noir à une dimension.

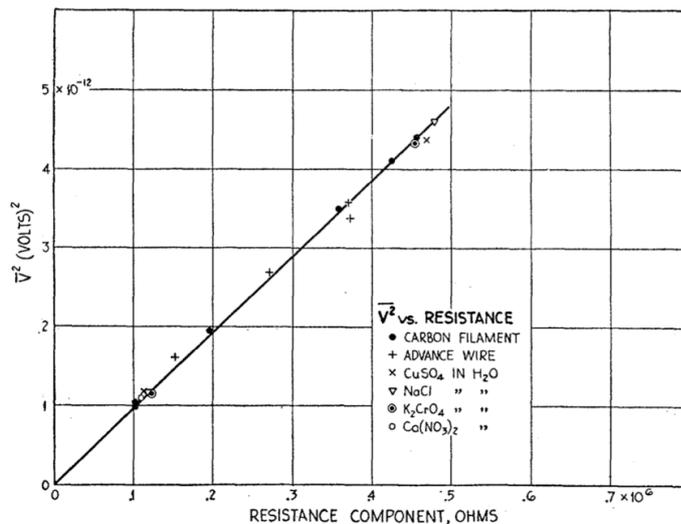


FIGURE 4.2 – Première mise en évidence expérimentale du théorème de Nyquist : linéarité des fluctuations thermiques avec la température et la résistance de l'échantillon. Source : ref. [166]

Loi d'Ohm

² Soit un circuit électrique linéaire composé d'une inductance L en série avec une résistance R . Les mouvements aléatoires des porteurs de charges créent dans le circuit un courant fluctuant $I_{th}(t)$. On choisit de le représenter par un potentiel aléatoire $V_{th}(t)$ dans la loi d'Ohm du circuit :

$$L \frac{dI}{dt} + RI = V_{th}(t) \quad (4.3)$$

Cette équation est formellement similaire à l'équation de Langevin ³, avec $V_{th}(t)$ analogue à la force de Langevin. C'est par hypothèse un processus aléatoire stationnaire de moyenne nulle, dont les fluctuations sont caractérisées par la fonction d'auto-corrélation $g_{VV}(s) = \langle V(t)V(t+s) \rangle$, d'extension temporelle caractéristique τ_c . On pose que $\int_{-\infty}^{+\infty} g_{VV}(s) ds = 2DL^2$. D peut être compris comme un coefficient de diffusion. On suppose de plus que $\tau_c \ll \tau_r = L/R$, le temps de relaxation du système, ce qui permet d'assimiler la fonction d'auto-corrélation à un dirac : $g_{VV}(s) = 2DL^2\delta(s)$.

A partir d'un instant initial déterminé (t_0, I_0), l'intégration de la loi d'Ohm donne :

$$I(t) = I_0 e^{-t/\tau_r} + \frac{1}{L} \int_0^t V(t') e^{-(t-t')/\tau_r} dt' \quad (4.4)$$

L'évolution de la valeur moyenne est donnée par $\langle I(t) \rangle = I_0 e^{-t/\tau_r}$, et celle de la variance par $\sigma_I^2(t) = D\tau_r(1 - e^{-2t/\tau_r})$. Dans la limite des temps longs ($t \gg \tau_r$), elle sature à l'expression classique $\langle I^2 \rangle = D\tau_r$. Le théorème d'équipartition de l'énergie stipule qu'à l'équilibre, la valeur moyenne $L \langle I^2 \rangle / 2$ de l'énergie emmagasinée

2. Cette partie est inspirée du complément 10.C du livre de Noëlle Pottier [168]

3. La méthode initialement développée par Langevin en 1908 pour analyser le mouvement brownien s'est généralisée pour s'imposer comme un des outils de référence en physique statistique [169,170]. Voir par exemple la Ref. [171] pour une utilisation dans les QWIPs.

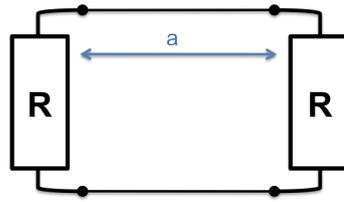


FIGURE 4.3 – Ligne de transmission de longueur a adaptée en impédance. Les résistances R agissent comme les miroirs d’une cavité optique et définissent les modes électroniques stationnaires.

dans l’inductance est égale à $k_B T/2$. Ainsi, $1/\tau_r = LD/k_b T$ ce qui, compte tenu de l’expression de τ_r et D , donne la formulation suivante du théorème de fluctuation-dissipation :

$$R = \frac{1}{k_B T} \int_0^{+\infty} \langle V(t)V(t+s) \rangle ds \quad (4.5)$$

R caractérise le comportement dissipatif du système : la puissance moyenne dissipée par effet Joule vaut $R \langle I^2 \rangle$. Le terme $\langle V(t)V(t+s) \rangle$ représente les fluctuations du système à l’équilibre.

Dans le cadre de l’analyse harmonique de ce problème, on introduit la densité spectrale $S_V(\omega) = 2 \int_0^{+\infty} \langle V(t)V(t+s) \rangle e^{-i\omega s} ds$. On peut généraliser (4.5) sous la forme du théorème de Nyquist :

$$S_V(\omega) = 4Rk_B T \quad \omega \ll \tau_c^{-1} \quad (4.6)$$

$$S_I(\omega) = \frac{4k_B T}{R} \quad \omega \ll \tau_c^{-1} \quad (4.7)$$

En effet dans l’hypothèse que la fonction d’auto-corrélation des fluctuations est un dirac, le bruit thermique ne dépend pas de la fréquence : c’est un bruit blanc. Cette hypothèse est en fait vérifiée pour les fréquences inférieures à τ_c^{-1} qui en pratique est de l’ordre du temps moyen entre deux collisions : $\sim 10^{-14}$ s dans un conducteur macroscopique. Le bruit est blanc jusqu’à 10^{14} Hz. Cette caractéristique n’est pas conservée dans un circuit linéaire plus général pour lequel il faut substituer R par la partie réelle (notée $R(\omega)$) de l’impédance complexe $Z(\omega)$.

Corps noir unidimensionnel

Sur la figure 4.3 on considère une ligne de transmission de longueur a et adaptée en impédance de telle sorte que toute la puissance soit couplée dans les résistances R . Ainsi à l’équilibre thermodynamique, les fonctions d’ondes électroniques admises sont des ondes stationnaires pour lesquelles le champ électrique est nul aux extrémités ; les autres modes sont supprimés par les pertes résistives. C’est l’analogie électronique d’une cavité optique avec des miroirs non parfaits. La longueur d’onde λ des modes de cavité vérifie $a = n\lambda/2$ avec n entier. Le nombre de modes admis par unité de fréquence ν vérifie :

$$\frac{\Delta n}{\Delta \nu} = \frac{2a}{v} \quad (4.8)$$

où v est la vitesse de propagation des signaux électriques, supposée inférieure à c . En physique classique, la loi de Boltzmann stipule qu’à l’équilibre thermodynamique,

chaque mode porte une énergie moyenne $\langle E \rangle = k_B T$. Cette énergie traverse la ligne de transmission en un temps $\Delta t = a/v$, donc la puissance moyenne par unité de fréquence qui passe dans la ligne vaut :

$$P_\nu = \frac{\Delta n}{\Delta \nu} \frac{\langle E \rangle}{\Delta t} = 2k_B T \quad (4.9)$$

Cette puissance est la densité spectrale de puissance générée par les deux résistances, donc pour chacune on a $S_P = k_B T$, qui est la formulation du théorème de Nyquist en puissance. Pour repasser à la tension ou au courant, il suffit d'appliquer le montage en pont diviseur de tension pour refaire apparaître le facteur 4 et la résistance.

La loi de Rayleigh-Jeans, équivalent classique de la loi de Planck pour le rayonnement du corps noir, est la contrepartie formelle du théorème de Nyquist pour les ondes optiques. Les deux formulations classiques souffrent de la même "catastrophe ultraviolette" : la puissance intégrée sur toutes les fréquences diverge. Cela vient de l'utilisation de la loi classique de Boltzmann $\langle E \rangle = k_B T$. Dans une théorie quantique, l'énergie par mode à une fréquence ν devient :

$$E_\nu = \frac{h\nu}{\exp \frac{h\nu}{k_B T} - 1} \quad (4.10)$$

qui mène à la loi de Planck du corps noir présentée au chapitre 1. En pratique tant que $h\nu \ll k_B T$, ce qui est toujours vérifié aux fréquences électroniques, la formulation classique du théorème de Nyquist est toujours valide.

Le théorème de Nyquist, une arme à double tranchant

Revenons sur les hypothèses utilisées dans nos démonstrations du théorème de Nyquist. La description par circuits électriques équivalents impose des restrictions aux systèmes physiques potentiellement décrits. Cette description s'applique aux systèmes macroscopiques où les mécanismes microscopiques sont traités en 'champ moyen' au travers de résistances et d'inductances. Des démonstrations de ce théorème existent cependant pour d'autres types de systèmes [172] dans d'autres modèles de transport. En fait le théorème de Nyquist s'applique universellement à l'équilibre thermodynamique comme nous l'avons laissé entendre au début de cette section. Une justification sans perte de généralité est obtenue dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire [170, 173].

Insistons un instant sur la puissance du théorème de Nyquist. L'universalité de sa validité et la simplicité de son énoncé ne peuvent laisser indifférent. Quelque soit la source des fluctuations, on accède à la manifestation macroscopique grâce à la seule donnée de la résistance, une grandeur aisément mesurable ! Au passage on ignore les particularismes microscopiques et des représentations utilisées pour décrire le transport. A mon avis, c'est précisément la désarmante facilité du passage de l'échelle des porteurs de charge à celle de la mesure qui est la source de nombreux quiproquos dans l'appréhension des phénomènes de bruit. Cette démarche est tellement séduisante qu'on a tendance, souvent à tort, à vouloir la généraliser hors de l'équilibre et pour d'autres types de bruits.

Il faut garder à l'esprit que l'extension hors équilibre est souvent introduite phénoménologiquement, sans justification *a priori*. De nombreux auteurs préconisent

par exemple de remplacer la résistance statique R par la résistance différentielle $dV/dI|_V$ tant qu'on reste dans le cadre du régime linéaire pour le transport. Une telle substitution peut s'avérer efficace dans certains cas, mais possède des fondements théoriques moins solides.

1.2 Bruit de grenaille

Une des représentations les plus frappantes de la dualité onde-corpuscule est le bruit de grenaille (en anglais "shot noise"). Un signal continu (électrique, lumineux, thermique...) est en fait porté par des quanta (électrons, photons, phonons). C'est le caractère discret des porteurs associé à la nature aléatoire du transport qui génère des fluctuations dans le signal. Il impose une limite théorique au rapport signal sur bruit, particulièrement bien connue des opticiens fondamentaux. Dans le cas du courant électrique, il a été décrit pour la première fois par W. Schottky dans des diodes thermo-ioniques en 1918 [174].

Dans un flux de particules (ou quasi-particules), le nombre n de particules émises (ou collectées) pendant un temps τ obéit à une distribution de Poisson. Mathématiquement cela est justifié par le paradigme de Poisson, qui stipule que la somme d'un grand nombre de variables de Bernoulli indépendantes de petit paramètre (une pour chaque porteur) suit la loi de Poisson :

$$p(n) = \frac{\langle n \rangle^n}{n!} e^{-\langle n \rangle} \quad (4.11)$$

où $\langle \rangle$ désigne la valeur moyenne sur le temps τ . La variance vaut $\sigma_n^2 = \langle n \rangle$. Dans le cas historique de Schottky, les événements aléatoires de Bernoulli correspondaient à l'émission d'un électron par la cathode. Dans le cas du bruit optique en intensité d'une LED, c'est la sortie d'un photon de la cavité. En notant $\langle I \rangle = e \langle n \rangle / \tau$, la densité spectrale de bruit en courant prend la forme poissonnienne :

$$S_I^P = 2e \langle I \rangle \quad (4.12)$$

De même que le bruit thermique, c'est un bruit blanc en fréquence en dessous de la fréquence de Nyquist associée au plus long temps de diffusion dans le système.

Le bruit de grenaille résulte donc du caractère discret des porteurs de charges, associé à une somme d'événements aléatoires. Il est usuellement considéré hors équilibre thermodynamique, et est qualifié d'"excédentaire", car il est associé à un flux net de particules. Nous allons démontrer dans la suite que prendre le bruit poissonnien associé au flux net est une erreur majeure dans la modélisation du bruit. La bonne façon de procéder est de prendre le bruit poissonnien associé à chaque flux contra-propageant. Un flux net nul pourra ainsi porter un bruit très important.

La complexité du problème vient du fait que de nombreux événements aléatoires de natures très diverses entrent en jeu dans le transport électronique. On peut distinguer deux grandes familles de bruit de grenaille, selon que les diffusions conservent ou font varier le nombre de porteurs de charge.

Diffusions conservant le nombre des porteurs

Toutes les diffusions qui restreignent le caractère balistique des porteurs (e.g. phonons, impuretés...) peuvent *a priori* entraîner une discrimination dans le trajet de

chaque électron, et générer du bruit. Les mésoscopistes appellent bruit de partition les fluctuations créées par des diffusions élastiques qui séparent les électrons des canaux incidents entre les canaux réfléchis et transmis. Le bruit de grenaille est un sujet majeur dans cette communauté qui étudie des systèmes où peu d'électrons interviennent dans le transport (cf la revue [175]).

La formule (4.12) est établie pour des porteurs de charges indépendants, *ie* des particules classiques. En pratique le bruit réel n'est pas égal à la valeur poissonnienne : leur rapport est appelé facteur de Fano et est un bon nombre caractéristique du régime de transport. Les investigations des fluctuations permettent d'étudier le transport électronique à des niveaux bien plus fins que les seules mesures des valeurs moyennes. En pratique le facteur de Fano est souvent inférieur à 1. La réduction du bruit s'explique par la nature fermionique des électrons et les corrélations qui découlent du principe d'exclusion de Pauli. Des prédictions théoriques [176,177] et des observations expérimentales [178–180] ont illustré ce résultat dans des systèmes divers. En outre, des considérations sur l'effet au niveau du bruit de la nature élastique ou inélastique des diffusions existent dans la littérature [181].

Génération-Recombinaison

Dans les systèmes à plus grand nombre d'électrons, l'ampleur des effets des corrélations augmente et atténue le bruit causé par les diffusions à nombre de porteurs fixés. Dans le cas limite d'un très grand nombre d'électrons, on s'attend à ce que l'intensité des interactions coulombiennes entre les porteurs réduise considérablement le bruit. Le bruit de grenaille est tout de même observé, causé par des diffusions qui concernent tous les électrons sans se préoccuper des interactions : franchissement d'une barrière de potentiel (cathodique par exemple), émission thermoionique depuis un puits quantique, recombinaison avec un trou... Ces mécanismes peuvent être rassemblés sous l'appellation générique de génération-recombinaison (GR), et font fluctuer le nombre de porteurs. Dans certains cas comme par exemple la capture (resp. relaxation) vers (resp. depuis) un très grand nombre de pièges ayant un même temps de vie, on peut obtenir une signature spectrale blanche qui varie comme le courant.

Une source complémentaire de génération apparaît dans les semi-conducteurs sous fort champ électrique, quand les porteurs de charge libres accumulent suffisamment d'énergie pour ioniser par impact d'autres porteurs en créant par exemple des paires électrons-trous en inter-bandes, ou un porteur et une charge statique ionisée en inter-sousbandes. Ce phénomène a notamment été étudié et caractérisé dans le cadre des photodiodes à avalanche [182].

1.3 Autres types de bruit

Bruit de scintillement ou bruit $1/f$

Le bruit de scintillement a été aussi observé pour la première fois par J.B. Johnson en 1925 dans des diodes à vide [183]. A basse fréquence le bruit dépassait largement la valeur poissonnienne et présentait une signature spectrale inversement proportionnelle à la fréquence, d'où son nom $1/f$ ou bruit rose, car il est à mi-chemin entre le bruit blanc en $1/f^0$ et le bruit brownien rouge en $1/f^2$.

Des fluctuations avec une telle signature spectrale ont été observées dans de très nombreux systèmes, tels que les semi-conducteurs homogènes, hétéro-jonctions, films métalliques, solutions électrolytiques, jonctions Josephson. Le débat est très houleux dans la littérature pour expliquer ce type de fluctuations. Deux camps principaux s'affrontent : les partisans de la théorie de McWorther de fluctuation du nombre de porteurs et ceux de la théorie de Hooge de fluctuations de la mobilité.

L'idée principale du modèle de McWorther développé initialement à partir d'expériences sur des filaments de Germanium [184] est que des défauts capturent et relâchent les porteurs libres avec des constantes de temps différentes. Historiquement les défauts considérés étaient de surface, et les temps caractéristiques des pièges τ suivaient une distribution en $1/\tau$ donnant bien une signature spectrale rose des fluctuations.

La théorie alternative fut proposée initialement par Hooge dans un article au titre cinglant "1/f noise is no surface effect" [185]. Dans ce modèle le bruit de scintillement est dû à des effets massifs qui font varier la mobilité des porteurs mais pas leur nombre [186, 187]. Cette explication fut complétée par des travaux théoriques de Jindal et van der Ziel [188] de fluctuation du bain de phonons.

Beaucoup d'opinions se sont ralliées à la voie médiane, qui stipule que de nombreuses sources microscopiques différentes peuvent générer du bruit 1/f [189], et utilisent un modèle empirique qui ne contient pas d'explication physique :

$$S_I(\omega) = \gamma \frac{I^2}{N\omega} \quad (4.13)$$

où γ est la constante de Hooge qui est utilisée pour caractériser le système, et N le nombre de porteurs. Par opposition aux bruits thermiques et shot qualifiés de limites fondamentales car liés à la nature intrinsèque du transport, le bruit 1/f est un bruit technologique. Il est engendré par des défauts (de surface ou massifs) du réseau cristallin. Un matériau plus pur, une meilleure technologie donneront *in fine* un bruit de scintillement réduit. Aujourd'hui aucun consensus n'a réellement émergé et les études sont encore nombreuses et trans-disciplinaires.

Bruit de télégraphe

Le bruit de télégraphe est observé dans des systèmes physiques multistables lorsqu'ils explorent aléatoirement les différentes configurations possibles du transport. Par exemple lorsque des régimes de blocage de Coulomb apparaissent ou disparaissent lors de la capture ou du relâchement d'un électron entre un niveau de piège et un contact ponctuel quantique. On observe alors au cours du temps des sauts dans la grandeur mesurée, comme le courant dans un MOSFET pour la figure 4.4.

Exception faite du bruit thermique, les appellations grenaille, scintillement et télégraphe sont issues d'une caractéristique empirique liée à la mesure expérimentale : variation avec l'amplitude du flux (poissonienne), signature spectrale ou temporelle. Mais des signatures macroscopiques équivalentes peuvent être générées par des sources microscopiques très différentes les unes des autres, d'où une certaine confusion. A l'inverse, prenons par exemple le piégeage et relâchement d'électrons par des pièges. Selon les systèmes, il peut générer un bruit poissonien de génération-recombinaison, un bruit en 1/f ou du bruit télégraphe.

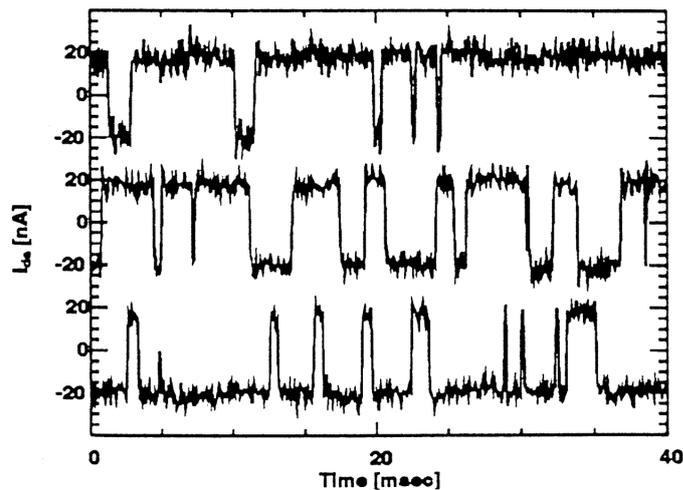


FIGURE 4.4 – Bruit de télégraphe présentant des niveaux discrets de courant source-drain dans un MOSFET pour trois tensions de polarisation. Source Ref. [190].

Les trois temps (macro-micro-macro) de l'analyse des fluctuations d'un système donné sont articulés par deux mouvements. Le premier est une démarche de type "top-down", dans lequel on essaie de retrouver microscopiquement les sources de chaque contribution macroscopique identifiée dans la mesure. Le second mouvement est une démarche de type "bottom-up", dans lequel on essaie de quantifier l'impact macroscopique des modèles établis pour chaque source microscopique. Le prémisses nécessaire à l'établissement du second mouvement est donc l'identification des spécificités du système étudié. Elle est vitale pour mettre efficacement en perspective les deux échelles du transport. C'est l'objet de la partie suivante.

2 Etat de l'art dans les détecteurs inter-sousbandes

Dans cette section, la description de l'état de l'art des détecteurs inter-sousbandes va permettre d'illustrer la démarche 'top-down', d'en dégager les forces ainsi que les limites⁴. Ainsi, le modèle de bruit complet QWIP apparaîtra comme la somme des contributions significatives parmi celles inventoriées au dessus. Le but étant de faire émerger la nécessité du deuxième mouvement de l'analyse, celui de la démarche 'bottom-up'.

2.1 Historique : élaboration du modèle QWIP

Les premiers travaux sur le bruit dans les détecteurs inter-sousbandes furent menés pour des QWIPs [44]. Cet héritage historique a conditionné la façon dont fut abordé ce problème, et explique en partie pourquoi il reste encore mal compris.

Une grande réussite technologique des QWIP provient du fait qu'on n'y mesure usuellement pas de bruit de scintillement (sauf dans certains régimes particuliers [191, 192]), contrairement aux détecteurs thermiques inter-bandes comme HgCdTe ou InSb. Ce bruit a une contribution faible à 100 Hz, fréquence qui correspond encore

4. A ce titre, nous utiliserons la terminologie usuelle, sans prendre garde par exemple aux confusions d'échelle.

à une limite statique pour les autres phénomènes de bruit gouvernés par des temps microscopiques bien plus courts. En effet les technologies de MBE utilisées pour fabriquer les détecteurs inter-sousbandes sont suffisamment matures pour garantir l'absence des défauts générant ces fluctuations. Lorsque elles apparaissent parfois dans les spectres expérimentaux, des signatures en $1/f$ sont en général dues au banc de mesure. N'étant pas limité par le bruit "technologique", le physicien a la chance d'avoir accès au bruit intrinsèque à la nature du transport.

S'il reste négligeable dans la plupart des régimes de fonctionnement, un bruit télégraphe est parfois observé dans les QWIPs. Ce bruit peut être associé à la formation et au déplacement de domaines de champs électriques différents le long de la structure à basse température. Ce processus est dû à la résistance différentielle négative dans les caractéristiques $J - F$ associées à chaque période. Selon les régimes de fonctionnement, plusieurs explications physiques sont avancées pour expliquer ce phénomène : tunnel résonant [138], diffusion inter-vallées [193]. D'autres origines de l'inhomogénéité du champ électrique dans les QWIPs ont été étudiés, notamment celle induite par le flux optique [194].

Le bruit thermique Johnson, qui domine à faible tension de polarisation, contribue d'ordinaire faiblement dans les conditions normales d'opération loin de l'équilibre thermodynamique [195, 196]. Microscopiquement, il est généralement associé aux fluctuations de la mobilité des porteurs dans le continuum d'état au dessus des barrières.

Les bruits de grenaille constituent la majeure partie de la densité spectrale de bruit dans les QWIPs. En effet, ce dispositif fonctionne loin de l'équilibre thermodynamique, et les fluctuations du nombre de porteurs par génération et recombinaison génèrent un bruit poissonnien. Suivant les idées présentées par Rose [20] pour les photoconducteurs, le bruit d'obscurité s'écrit :

$$S_I = \sum_n 2F_n^2 \alpha_n \quad (4.14)$$

Cette formulation considère comment chaque source microscopique de bruit α_n est vue de l'extérieur à travers le facteur de grandissement F . Pour les QWIPs, les sources de bruits sont la génération par émission thermo-ionique et la recombinaison par capture d'électrons au niveau d'un des N puits de la structure. Ces processus génèrent des courants moyens i_e (émission) et i_c (capture) égaux :

$$i_e = i_c = I_{dark} \times N p_c \quad (4.15)$$

où I_{dark} est le courant d'obscurité et p_c la probabilité de capture. Le facteur de grandissement associé est donc $F = 1/N p_c$. En prenant des statistiques poissonniennes, on obtient la formule classique

$$S_I = 4e g_n I_{dark} \quad (4.16)$$

avec le gain de bruit $g_n = 1/N p_c$. On peut interpréter cette formule comme suit. L'ajout en série de N sources idéales de bruit donne une densité spectrale de bruit totale divisée par N [197]. L'hypothèse sous-jacente est que les fluctuations de deux éléments adjacents sont décorrélées. C'est effectivement le cas lorsque les électrons passent par un réservoir contenant un très grand nombre de porteurs, qui écrante

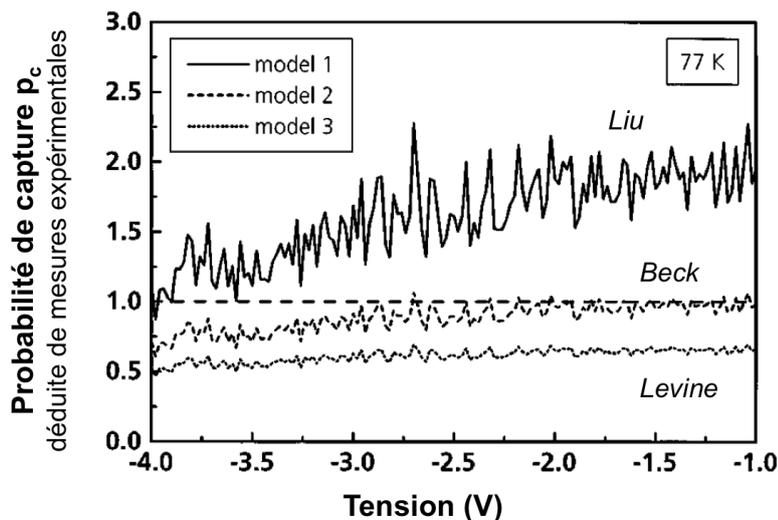


FIGURE 4.5 – Comparaison des modèles de bruit de Liu (modèle 1), Beck (modèle 2) et Levine (modèle 3) pour le gain de bruit, d’après des mesures expérimentales de courant et de bruit dans des QWIPs 4 zones. La probabilité de capture est alors extraite du gain de bruit. Par construction, on s’attend à ce que $p_c = 1$, ce qui est bien retrouvé par le modèle de Beck. Le désaccord au delà de $-3V$ s’explique car le libre parcours moyen des électrons avant capture augmente par effet tunnel au travers de la barrière d’AIAs. Source Ref [201].

les effets inter-éléments. Cette condition est bien vérifiée par le niveau fondamental des puits quantiques. Ainsi, lorsqu’un électron passe dans le continuum d’état, il parcourt en moyenne $1/p_c$ périodes avant d’être recapturé par un tel réservoir. Du point de vue des fluctuations, un QWIP correspond bien à la mise en série de Np_c sources de bruit indépendantes.

Contrairement au photoconducteur standard, le gain de photoconduction $g_{photo} = (1 - p_c)/Np_c$ évalué par des mesures d’absorption, est différent du gain de bruit. En pratique ce dernier est extrait des mesures de bruit et de celles de courant en utilisant (4.16), et vaut deux fois le facteur de Fano. Ce point crucial a été le sujet de nombreuses discussions. Le modèle que nous avons présenté est celui proposé par Liu [195, 198], et s’oppose au modèle avancé par Levine [64, 199] qui diffère par la définition du gain de bruit : $g_n = g_{photo} = p_e/Np_c$ (p_e est la probabilité d’émission). Cependant aucune des deux définitions ne redonne un bruit poissonnien de génération seul dans le cas où $p_c \rightarrow 1$ comme on pourrait l’attendre puisqu’alors le bruit de recombinaison s’éteint. Ceci amena Beck à développer un modèle [200] qui diffère du précédent en ce qu’il considère une statistique de capture binômiale, conforme à un temps de capture uniforme par émission de phonons LO [66]. Dans ce cas on obtient :

$$S_I = 4e \frac{1}{Np_c} \left(1 - \frac{p_c}{2}\right) I_{dark} \quad (4.17)$$

qui redonne bien une seule contribution de génération au bruit dans le cas d’une capture déterministe. Ce modèle a notamment été le plus efficace pour expliquer les mesures de bruits de QWIPs 4-zones [201] (cf fig. 4.5), et fait relativement consensus aujourd’hui. La question de la définition des gains de bruit et de photoconduction n’en reste pas moins encore épineuse [202].

Pour trouver la contribution des fluctuations du photo-courant, il suffit de rem-

placer le courant noir thermiquement activé I_{dark} par le photo-courant I_{photo} . Dans la suite nous ne nous intéresserons quasiment jamais au photo-courant. Du point de vue microscopique, il paraît en effet assez artificiel de séparer les porteurs photo-générés de ceux thermiquement activés. Comme montré au chapitre 2, cette description lagrangienne qui suit les porteurs dans leur mouvement est souvent plus intuitive, mais moins productive que la vision eulerienne de perturbations locales de l'état stationnaire. Pour étudier le photo-courant, il suffit d'allumer la diffusion assistée par les photons dans les potentiels perturbateurs pris en compte, sans changer le reste du modèle, tant que l'hypothèse de champ homogène reste valide.

Le formalisme de Beck a été généralisé par Schneider [152, 203] pour expliquer l'envolée du bruit associée à celle du courant quand le champ électrique est assez fort pour que les électrons du continuum au dessus des barrières ionisent par impact les porteurs dans les puits quantiques. Carbone [204] a utilisé la méthode de Langevin pour modéliser le bruit dans les QWIPs, mais toujours selon une approche lagrangienne. C'est une extension du modèle de Beck qui fait aussi référence aujourd'hui dans les QDIPs [205, 206].

Relisons un instant cette discussion à l'aune de notre problématique. Le point qui cristallise les débats est le gain associé au bruit, *ie* le facteur de grandissement dans la formule (4.14). C'est exactement ce que nous allons nous proposer de clarifier dans la suite. *Ershov et al* ont amélioré le raisonnement de Beck en introduisant un facteur de grandissement calculé grâce au théorème de Ramo-Shockley [207], démarche dont nous nous inspirerons dans la suite. Néanmoins, le fait d'associer telle ou telle statistique (binômiale ou poissonnienne) à une source de bruit peut paraître relever de la confusion d'échelles, en imposant au niveau des phénomènes quantiques une vision macroscopique déduite d'un très grand nombre d'événements. Ce point là est moins critique que le précédent, car dans les dispositifs inter-sousbandes de nombreux électrons prennent part au transport. Mais dès que le nombre de porteurs diminue (par exemple dans les boîtes quantiques), cet ansatz perd beaucoup de son efficacité.

Dans la partie suivante nous allons rassembler les contributions détaillées précédemment, et présenter le modèle de bruit complet dans les QWIP (et donc l'ensemble des détecteurs inter sousbandes), tel qu'il est habituellement introduit dans la littérature.

2.2 Le poids de l'Histoire : limitations du modèle QWIP

La formulation complète usuelle du bruit dans les QWIPs se comprend simplement à partir de l'expression suivante pour le courant : $I = eNv$. Les mécanismes GR font fluctuer le nombre de porteurs N , et les fluctuations thermiques modifient la distribution des vitesses v . Comme illustré sur la figure 4.6, un QWIP se comporte comme un gaz tri-dimensionnel d'électrons en contact avec des réservoirs bi-dimensionnels : les puits quantiques. Au niveau macroscopique, cette vision aditionne indépendamment les contributions Johnson et GR :

$$S_I = 4k_bT/R + 4e \frac{1}{Np_c} \left(1 - \frac{p_c}{2}\right) (|I_{dark}| + |I_{photo}|) \quad (4.18)$$

auxquelles on ajoute éventuellement une contribution pour les processus d'ionisation par impact. Dans l'expression (4.18), seule la probabilité de capture p_c exige

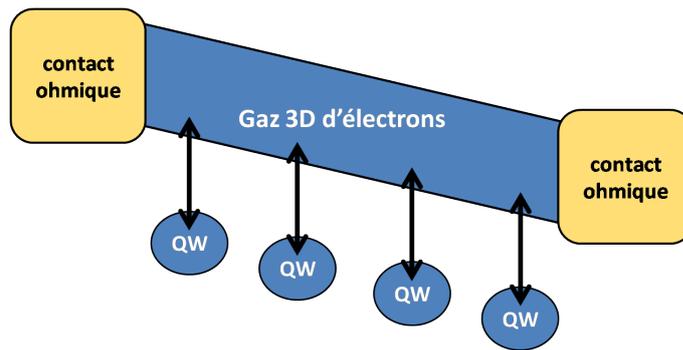


FIGURE 4.6 – Du point de vue du bruit, un QWIP est usuellement vu comme un gaz 3D d'électrons compris entre deux contacts et échangeant des électrons avec des réservoirs 2D : les puits quantiques

une description microscopique des mécanismes de transport. C'est aussi le paramètre ajustable des modèles photo-émissifs [68] qui permettent de calculer les courants d'obscurité et optique. Malgré de nombreux travaux sur le sujet [66, 208], ce paramètre reste insaisissable, d'autant qu'il dépend beaucoup des conditions expérimentales telles que la tension de polarisation ou la température de fonctionnement (voir Fig. 4.7). Ainsi, il est difficile en pratique de vérifier le modèle QWIP, car ce paramètre ajustable voile les effets et artefacts qui permettraient de comparer quantitativement la théorie à l'expérience. On peut seulement constater que p_c doit être compris entre 0 et 1 et être une fonction grossièrement décroissante de la tension. Sur la figure 4.7, il est par exemple étonnant que pour des champs électriques supérieurs à 20 kV/cm en valeur absolue, la probabilité de capture réaugmente.

L'incapacité (relative, voir Ref. [73]) à prédire p_c *a priori* est donc un obstacle majeur du point de vue de l'amélioration des dispositifs. Face à l'impossibilité de connaître en théorie les performances d'une structure particulière, il faut extrapoler des résultats existants ou effectivement fabriquer et mesurer l'échantillon pour les obtenir. En termes d'ingénierie quantique, cette étape chronophage et coûteuse ralentit considérablement l'optimisation des systèmes. D'où un réel besoin de modèles prédictifs.

Enfin, notons que la description du bruit dans les QWIPs participe à la même vision du transport que les modèles photo-émissifs, et même si Beck a posé les bases de la prise en compte des mécanismes tunnels, peu ou pas d'études ont été publiées dans ces régimes [138]. Et il manque toujours un modèle compatible avec la vision plus récemment développée de hopping Wannier-Stark [73, 74].

Dans les conditions d'opérations photoconductrices, les fluctuations thermiques ne contribuent que très peu au bruit général et peuvent être négligées dans la plupart des cas. En effet sur la figure 4.7, le bruit varie avec le courant sur pratiquement toute la plage de tension, ce qui signifie qu'on ne voit jamais la contribution Johnson dominer. Pour éprouver plus avant la vision des contributions indépendantes, il peut être intéressant d'appliquer ce modèle à un composant photovoltaïque pour lequel la plage de tension où la contribution Johnson est non négligeable est plus importante.

Dans ce cas, la question se pose de savoir quelle résistance est implémentée dans le modèle : R_{eq} la résistance à l'équilibre thermodynamique, pour laquelle à tension nulle le théorème de Nyquist est vérifié, ou bien la généralisation empirique à la résistance dynamique $R_{dyn} = \partial V / \partial I$. Pour ce faire, le QCD est un composant très

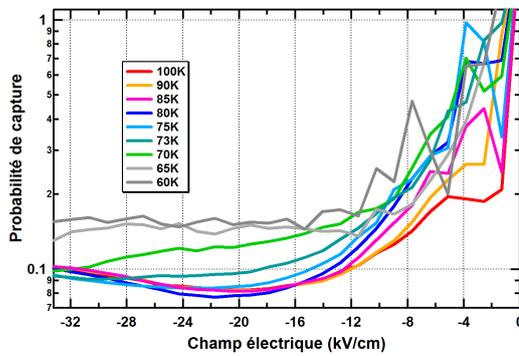
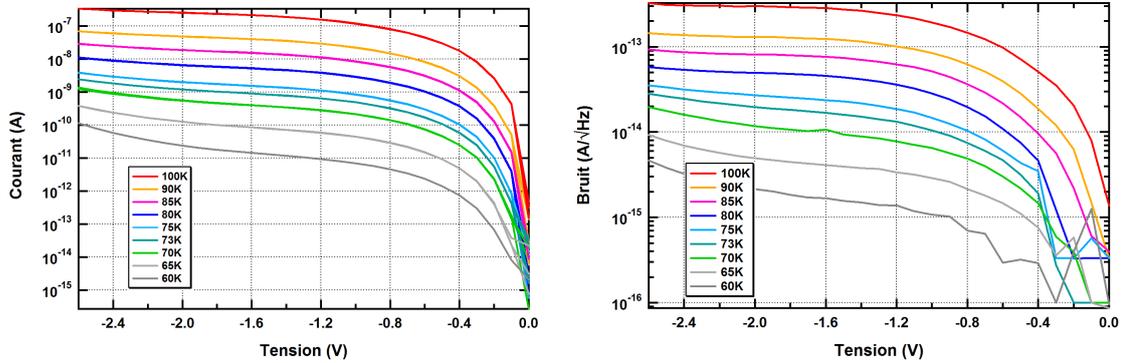


FIGURE 4.7 – QWIP @ $8.5\mu m$. En haut : mesures expérimentales du courant et bruit d’obscurité à différentes températures. A gauche : probabilité de capture extraite en considérant seulement la contribution GR (modèle de Beck). p_c varie beaucoup dans la gamme de température et champ électrique considérée. A faible tension, p_c dépasse 1 car on a pas pris en compte la contribution thermique. Les mesures ont été faites à Thales R&T.

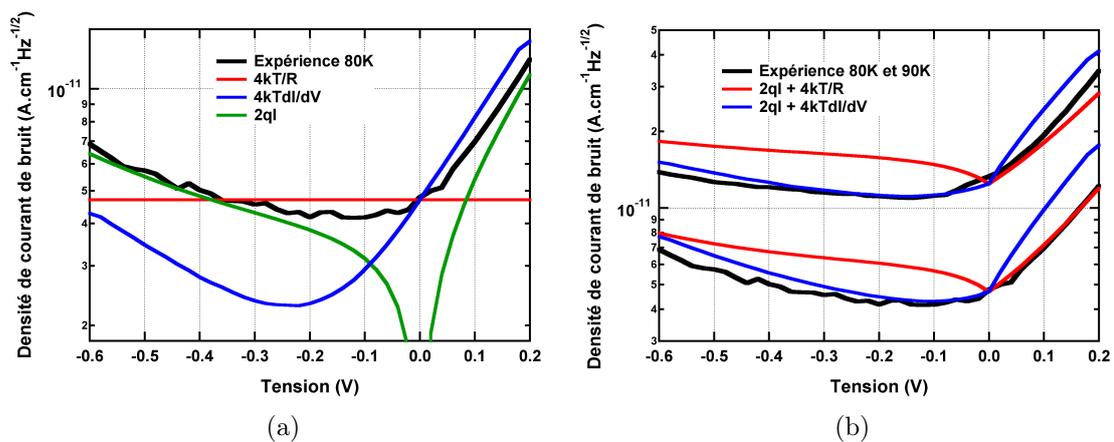


FIGURE 4.8 – Modèle effectif QWIP appliqué à un QCD @ $8.5\mu m$. (a) : détail des contributions au bruit calculées à partir du courant expérimental et en prenant $p_c = 1$. (b) : modèles complets.

intéressant dans la mesure où $p_c = 1$ dans tous les régimes de fonctionnement étudiés. Cela permet de réellement tester le modèle puisqu'à partir de la mesure du courant on devrait pouvoir extraire le bruit sans autre paramètre ajustable.

Sur la figure 4.8, ces deux modèles sont comparés à l'expérience sur un QCD @ $8.5\mu m$. Les deux modèles de résistance correspondent bien à la valeur expérimentale à l'équilibre pour le bruit thermique, qui domine alors largement le bruit de grenaille. On peut vérifier que le théorème de Nyquist n'est pas valide en dehors de l'équilibre : si la généralisation empirique à la résistance différentielle s'accorde qualitativement à l'expérience pour les tensions positives, ce n'est pas du tout le cas pour les tensions négatives. En revanche pour les hautes tensions, le bruit shot de génération seul tend bien vers la valeur expérimentale.

Le modèle complet avec une résistance statique marche bien pour les polarisations positives, alors que celui en résistance dynamique est lui performant pour les polarisations négatives. Néanmoins aucun des deux modèles n'est valide sur l'ensemble de la plage de transition entre bruit thermique dominant et bruit shot dominant. Il est difficile, en se cantonnant au point de vue strictement macroscopique associé à l'équation (4.18), de comprendre pourquoi dans un cas la résistance statique fonctionne, et dans l'autre cas la dynamique. C'est précisément parce que les phénomènes de bruit dans les détecteurs inter-sousbandes sont trop souvent regardés à travers la mauvaise focale et en confondant les échelles de description.

Le modèle QWIP complet tel que nous l'avons présenté possède en outre une faille conceptuelle dès la formulation initiale. Les fluctuations de la distribution des vitesses des électrons dans le continuum au dessus des barrières sont censées être à l'origine du bruit thermique. Elles sont causées par des diffusions des porteurs de charge. Parmi celles-ci, l'émission de phonon LO est un processus significatif, voir dominant. Or c'est par ce même processus que les électrons sont capturés dans les puits, capture aléatoire comptée dans le bruit GR. Un même phénomène microscopique serait alors compté dans deux contributions macroscopiques supposées indépendantes ! Le but de la partie suivante est de montrer les insuffisances de cette vision des bruits thermique et shot comme indépendants.

3 Doit-on additionner bruits thermique et grenaille ?

Nous avons montré dans la section précédente que la modélisation du bruit par la somme de contributions de type thermique et shot n'était pas opérationnelle dans des régimes où les termes ont des contributions équivalentes. Nous allons dans cette partie montrer qu'en outre cette vision phénoménologique n'est pas satisfaisante du point de vue conceptuel. Nous en avons eu un premier aperçu en remarquant que dans les QWIPs, la capture par émission de phonon LO d'un électron du continuum pouvait être comptabilisée à la fois comme bruit thermique et comme bruit GR.

La question est de fait beaucoup plus générale, et dans de nombreux cas le bruit thermique et le bruit de grenaille sont deux expressions limites au niveau macroscopique d'un phénomène général dont la source microscopique est unique : la diffusion de charges quantifiées. Landauer fut un des premiers à théoriser cette idée en montrant dans de nombreux exemples qu'une formulation shot redonne bien une expression Johnson-Nyquist à l'équilibre [172, 197]. Des intuitions précoces de ce résultat avaient auparavant été avancées, pointant le fait qu'une résistance linéaire

pouvait être construite à partir de deux diodes thermo-ioniques montées tête-bêche [209, 210].

3.1 Cas général

Une des premières démonstrations convaincantes de ce phénomène fut donnée en physique mésoscopique par R. Landauer et Th. Martin [211] pour un conducteur à un seul canal avec une probabilité de transmission Λ qui diffuse les porteurs de charge. Ils montrent qu'à la température T pour une polarisation V , la densité spectrale de bruit s'écrit :

$$S_I = \frac{4e^2}{\pi\hbar}k_B T\Lambda + \frac{2e^2}{\pi\hbar}\Lambda(1-\Lambda)eV + \frac{4e^2}{\pi\hbar}k_B T\Lambda(1-\Lambda)\times\left[\frac{eV/k_B T}{\exp(eV/k_B T) - 1} - 1\right] \quad (4.19)$$

La valeur du rapport $eV/k_B T$ discrimine quel régime de bruit est prépondérant. A haute température le premier terme du membre de droite domine, et on retrouve une expression thermique du bruit. A basse température le second terme domine, et on retrouve une formulation shot (modifiée par un facteur $(1-\Lambda)$ qui est un exemple de réduction du bruit à cause des interactions électrons-électrons, mais ne gêne pas la discussion ici). Le troisième terme est une correction au premier ordre qui gère la transition entre les deux régimes limites. Ainsi au sein d'une formulation unifiée, on passe continûment d'une description de type Johnson à une description shot, ce qui contredit le postulat de bruits indépendants.

On peut redémontrer le théorème de Nyquist à partir d'une formulation shot en utilisant de nombreuses focales et descriptions du transport différents. Un conducteur classique est bien décrit par un modèle hydrodynamique où les porteurs de charge suivent une distribution de Maxwell-Boltzmann. L'idée est de considérer le transfert de charge effectif entre les électrodes lorsque les électrons bougent d'un libre parcours moyen. Un porteur qui retourne vers son électrode émettrice ne contribue pas au bruit. La DSB shot est proportionnelle au nombre de transferts effectifs (d'une électrode à l'autre) effectués par unité de temps. Celui-ci est obtenu en intégrant la statistique de Maxwell-Boltzmann sur les libres parcours moyens, ce qui fait apparaître au passage la dépendance en température. Le théorème de Nyquist est réobtenu en sommant les DSB shot associées aux transferts gauche-droite et droite-gauche.

Un métal peut être décrit dans un formalisme de l'équation de Boltzmann pour un gaz d'électrons. La sphère de Fermi est déplacée lorsqu'un champ électrique est appliqué. Les états asymétriquement occupés sont diffusés vers la distribution d'équilibre avec une probabilité de $1/\tau$, produisant pendant ce temps un transfert de charge. Ce sont les fluctuations de ce temps d'occupation qui produisent le bruit. De la même façon que dans un conducteur classique, le bruit thermique se retrouve à partir du bruit de grenaille causé par les électrons le long de leur libre parcours moyen. Un développement au second ordre de la fonction de distribution permet en outre de retrouver la dépendance au paramètre discriminant $eV/k_B T$ dans le régime de transition.

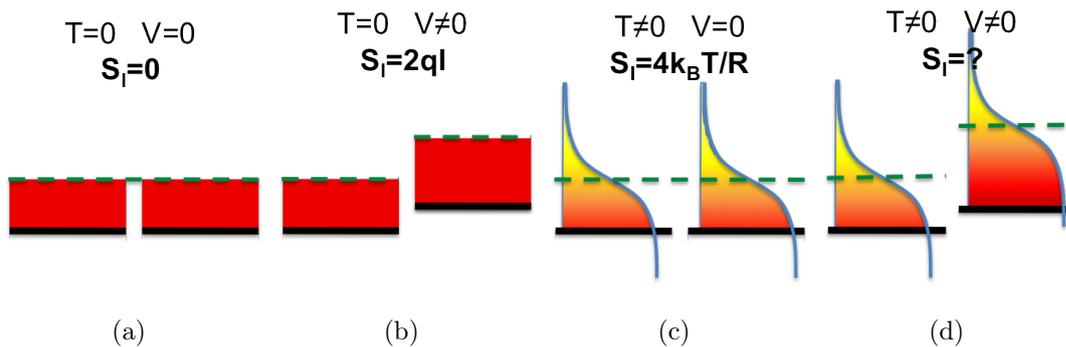


FIGURE 4.9 – Schéma représentatif de deux sousbandes. En traits plein noirs, le bas des sousbandes. En pointillés verts, les quasi niveaux de Fermi associés. En dégradé, la distribution de population suivant une statistique de Fermi-Dirac.

3.2 Dans les dispositifs inter-sousbandes

C'est finalement peut être dans le cadre du hopping inter-sousbandes que le problème soulevé par l'hypothèse d'indépendance des bruits thermique et shot est le mieux mis en lumière. Sur la figure 4.9, on considère deux sousbandes dans quatre configurations de température et de tension.

4.9(a) Tension et température nulles. Aucun électron ne peut passer d'une sousbande à l'autre puisque tous les états d'arrivée sont occupés, et que le réseau ne possède aucune réserve d'énergie sous forme de phonon. Puisque les charges ne bougent pas, le bruit associé dans le circuit extérieur est nul.

4.9(b) Tension non nulle, température nulle. On peut alors voir les deux sousbandes comme des électrodes avec, dans ce cas, celle de droite qui envoie aléatoirement vers celle de gauche les électrons dont l'énergie est comprise entre les deux quasi-niveaux de Fermi. Pour chaque énergie le temps caractéristique d'émission varie, et on retrouve le système modèle d'une statistique poissonnienne des porteurs générés. Le bruit est exactement donné par l'expression de Schottky $2qI$.

4.9(c) Tension nulle et température finie. A cause de la température finie, les électrons dans chaque sousbande se répartissent en énergie selon une distribution de Fermi-Dirac f . L'amplitude des fluctuations thermiques autour de cette moyenne vaut $f(1-f)$. Bien que cet élargissement soit causé par des diffusions inter-électrons ou avec le réseau, il ne génère *per se* aucune fluctuation dans le circuit extérieur car il ne correspond à aucun déplacement de charge dans la direction du transport. En revanche, des états électroniques sont désormais disponibles de part et d'autre, et les sousbandes peuvent s'échanger des charges de façon aléatoire. Cette dernière assertion rappelle plutôt une formulation traditionnellement shot ; démontrant par là, au niveau microscopique, l'intrication viscérale de ces deux contributions. On peut encore s'émerveiller ici de la force du théorème de Nyquist qui cache la complexité du niveau quantique sous une simple résistance macroscopique.

4.9(d) Tension non nulle et température finie. L'addition indépendante d'une contribution thermique et d'un bruit "excédentaire" de grenaille est sérieusement battue en brèche. Quel sens peut désormais avoir l'assertion selon laquelle les sources de fluctuations sont différentes ? Dans la mesure où on pourrait envisager ce cas comme une somme des deux précédents ? L'argument paraît faible. De plus, le

régime proche de l'équilibre thermodynamique n'est alors pas bien décrit.

3.3 Du cahier de doléances au cahier des charges

Outre la question de l'indépendance des bruits thermique et shot qui est le véritable aiguillon de ce travail, résumons ici l'ensemble des autres problèmes soulevés précédemment, afin de mieux dégager les enjeux auxquels notre étude doit faire face.

Insuffisance de la démarche "top-down" : Cette étape correspond au premier mouvement nécessaire de l'analyse : retrouver microscopiquement les sources des différentes contributions macroscopiques. Elle peut néanmoins être source d'erreurs dans la mesure où elle est souvent associée à une confusion des échelles de description des phénomènes. Elle ne peut suffire seule à une analyse complète.

Ambivalence du théorème de Nyquist : La puissance du théorème de fluctuations-dissipation, qui permet une description globale des phénomènes de bruit à l'équilibre, incite souvent à tort à considérer qu'il décrit les fluctuations thermiques comme une source indépendante, à laquelle on rajoute *a posteriori* d'autres sources hors de l'équilibre.

Gain de bruit : Si dans les QWIPs la description des mécanismes GR se fait dans la perspective "bottom-up" de la formule de Rose (4.14), le choix du facteur de magnification ainsi que de la statistique de la source des fluctuations est sujet à débat.

Probabilité de capture : Le modèle QWIP souffre grandement du fait que la probabilité de capture est une grandeur d'ajustement. Elle rend difficile la modélisation du bruit, et malaisée l'optimisation des performances de ces composants.

Articulation thermique-grenaille : L'addition d'un terme Nyquist et d'un terme poissonnien dans l'expression (4.18) ne permet pas de bien décrire la transition entre les régimes thermique et shot, ce qui jette un doute sur l'indépendance des deux phénomènes.

Démarche "bottom-up" pour le hopping inter-sousbandes : En utilisant le modèle de hopping inter-sousbandes, le courant et la réponse dans les détecteurs à puits quantiques sont calculés *a priori* avec une précision quantitative. Pour ces quantités, le passage du micro au macro est immédiat par conservation de la charge. Si la vision eulerienne du transport constitue un socle solide pour établir une démarche "bottom-up", il reste encore à introduire de façon rigoureuse ce second mouvement nécessaire de l'analyse des phénomènes de bruit.

Nous pouvons désormais formuler le problème fondamental que nous allons nous attacher à résoudre. Les approches "top-down" d'addition de contributions indépendantes dans le bruit sont insuffisantes en théorie et en pratique pour les détecteurs inter-sousbandes. Or les outils pour bien décrire le transport au niveau quantique existent. Dans la suite, nous allons développer deux démarches "bottom-up" qui se fondent sur la description du hopping inter-sousbandes pour décrire les fluctuations microscopiques. Dans la première approche, le formalisme du transport développé au chapitre 2 va être généralisé dans le cadre de l'équation maîtresse. Le passage de l'échelle des phénomènes quantiques à l'échelle de l'expérience se fera grâce au théorème de Ramo-Schokley. Dans la seconde approche, ce changement d'échelle se fera très simplement grâce à la théorie des circuits linéaires.

4 Equation Maîtresse et Théorème de Ramo-Schokley

Dans cette partie, nous allons développer le cadre de la physique statistique près d'un état stationnaire pour caractériser le bruit dans les détecteurs. Nous utiliserons de nombreux arguments développés par *Lax* dans ses revues sur le bruit classique [169, 212, 213].

4.1 Théorie

Le lecteur souhaitant ignorer les détails du calcul peut se reporter directement au résultat de la formule (4.55).

Le hopping inter-sousbandes comme processus de Markov

Au chapitre 2 le formalisme du hopping entre niveaux de Wannier-Stark a été développé. Du point de vue du transport inter-sousbandes, les temps caractéristiques régissant les phénomènes intra-sousbandes sont considérés comme instantanés, et les sousbandes sont bien décrites par un état de quasi-équilibre thermodynamique⁵. Si l'on suit un électron dans son mouvement, il subira de très nombreuses diffusions intra entre deux sauts inter-sousbandes, avec pour effet de brouiller la phase quantique. C'est cette hypothèse sous-jacente de décohérence qui nous a permis de déployer le formalisme de la règle d'or de Fermi. Plus généralement, elle ouvre la voie à une description très puissante du transport : celle des processus de Markov.

Un processus de Markov est un processus stochastique à mémoire courte ou sans mémoire : l'état du système à un instant t ne dépend que de son état à un instant immédiatement antérieur, et pas de son passé plus lointain ni de son histoire. Les processus en temps discrets sont appelés chaînes de Markov. Dans ces cas là, l'état du système au temps n ne dépend que d'un nombre fini de configurations précédentes, $n - 1, n - 2, \dots, n - q$ ⁶. Pour le transport inter-sousbandes, la décohérence induite par les diffusions intra-sousbandes correspond donc exactement à l'hypothèse de Markov.

Une hétérostructure avec des sousbandes thermalisées peut être considérée comme une assemblée de réservoirs qui échangent aléatoirement des électrons. La variable aléatoire est le vecteur \mathbf{n} des densités de populations : chaque composante n_i de \mathbf{n} représente la densité de population de la sousbande i . De la même façon que précédemment, on ne considère qu'une seule période contenant r réservoirs avec des conditions de bord périodiques : l'espace des phases est de dimension r . Pour éviter des problèmes de terminologie, dans la suite on distinguera les *niveaux* électroniques ou sousbandes des *états* statistiques donnant les configurations de \mathbf{n} .

L'équation bilan (2.33) d'évolution des densités de population a permis de calculer le courant et la réponse. En fait, elle est déduite d'une équation plus générale : l'équation maîtresse⁷, qui permet aussi de caractériser les fluctuations autour de

5. Rappelons que cette assertion perd beaucoup de son fondement dans le cas des QWIPs pour les états au dessus des barrières qui sont décrits comme un quasi-continuum. Mais elle trouve une justification *a posteriori* de par la qualité des prévisions données par le calcul.

6. Dans la plupart des cas on a $q = 1$.

7. Ce formalisme a déjà été utilisé pour le transport dans les superréseaux [214], mais pas pour calculer le bruit.

l'état stationnaire [212]. L'équation maîtresse est elle aussi une équation bilan. Elle donne l'évolution de la densité de probabilité $p(\mathbf{n}, t)$ que le système soit dans une configuration de populations \mathbf{n} à un temps t . C'est elle que nous allons maintenant dériver en utilisant les propriétés des processus de Markov.

Un processus de Markov stationnaire est entièrement déterminé par la probabilité conditionnelle $p(\mathbf{n}, t + \Delta t | \mathbf{n}_0)$ que les populations soient dans un état \mathbf{n} au temps $t + \Delta t$, alors qu'elles étaient dans l'état \mathbf{n}_0 à $t = 0$. L'évolution de cette probabilité est donnée par l'équation de Chapman-Kolmogorov-Smoluchovski (CKS), qui stipule que l'on passe de la configuration \mathbf{n}_0 à \mathbf{n} en moyennant sur tous les états possibles \mathbf{n}' à un temps intermédiaire :

$$p(\mathbf{n}, t + \Delta t | \mathbf{n}_0) = \int d\mathbf{n}' p(\mathbf{n}, \Delta t | \mathbf{n}') p(\mathbf{n}', t | \mathbf{n}_0) \quad (4.20)$$

quelque soit $t, \Delta t \geq 0$. Dans cette équation, l'effet de mémoire courte est visible dans le fait que l'information passe de proche en proche. La ressemblance est troublante avec la relation quantique fondamentale pour les amplitudes obtenue grâce à la relation de fermeture :

$$\langle \psi_2(t_2) | \psi_1(t_1) \rangle = \int d\psi' \langle \psi_2(t_2) | \psi' \rangle \langle \psi' | \psi_1(t_1) \rangle \quad (4.21)$$

Une grande différence de nature demeure. Dans (4.20) on *moyenne* sur des *probabilités* à temps intermédiaire, alors que dans (4.21) le caractère vertigineux de la physique quantique provient du fait qu'on fait *interférer* les *amplitudes de probabilité* correspondants aux différents chemins possibles.

Les transitions entre les sousbandes sont calculées grâce à la règle d'or de Fermi. Celle-ci est usuellement introduite comme une linéarisation aux temps courts, sous l'effet de décohérence, des oscillations induites par un couplage entre deux états propres d'un hamiltonien. Dans notre cas, elle correspond à la linéarisation markovienne aux temps longs des rotations des polarisations de la matrice densité. Encore une fois c'est la décohérence associée aux diffusions intra-sousbandes considérées comme instantanées qui justifie cette linéarisation :

$$p(\mathbf{n}, \Delta t | \mathbf{n}') = \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{n}'} (1 - \Gamma_{\mathbf{n}} \Delta t) + \Delta t w_{\mathbf{n}' \mathbf{n}} \quad (4.22)$$

où $w_{\mathbf{n}' \mathbf{n}}$ est la probabilité de transition de \mathbf{n}' à \mathbf{n} par unité de temps, et $\Gamma_{\mathbf{n}}$ le taux de transition global hors de l'état \mathbf{n} : $\Gamma_{\mathbf{n}} = \int d\mathbf{n}' w_{\mathbf{n} \mathbf{n}'}$. La quantité $p(\mathbf{n}, t)$ est obtenue à partir de la probabilité conditionnelle en intégrant sur les conditions initiales $p(\mathbf{n}, t) = \int d\mathbf{n}_0 p(\mathbf{n}, t | \mathbf{n}_0)$. Une intégration similaire de l'équation (4.20) donne l'équation maîtresse gouvernant son évolution :

$$\frac{dp(\mathbf{n}, t)}{dt} = -\Gamma_{\mathbf{n}} p(\mathbf{n}, t) + \int d\mathbf{n}' w_{\mathbf{n}' \mathbf{n}} p(\mathbf{n}', t) \quad (4.23)$$

C'est formellement une équation de continuité pour la distribution de probabilités $p(\mathbf{n}, t)$. A chaque moment de la distribution $p(\mathbf{n}, t)$ est associée une équation qui se déduit de l'équation (4.23). Le premier moment correspond à l'espérance, *ie* le vecteur des valeurs moyennes des populations $\langle \mathbf{n} \rangle = \int d\mathbf{n}' \mathbf{n}' p(\mathbf{n}', t)$. Il est calculé par l'équation-bilan (2.32) donnée au chapitre 2. Le second moment appelé variance

donne les corrélations entre les populations. Le troisième moment indique l'asymétrie, et le quatrième moment, le *kurtosis*, est lié à l'aplatissement de la variable. Il est mathématiquement équivalent de connaître tous les moments de la distribution en résolvant les équations correspondantes, et de connaître la distribution de probabilité en résolvant directement l'équation maîtresse.

Résolution de l'équation maîtresse pour les particules classiques

L'équation maîtresse (4.23) en régime stationnaire (identifié par l'indice $_0$ dans la suite), permet de trouver la distribution $p_0(\mathbf{n})$ stationnaire. En annulant la dérivée temporelle, on obtient :

$$\int d\mathbf{n}' w_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} p_0(\mathbf{n}) = \int d\mathbf{n}' w_{\mathbf{n}'\mathbf{n}} p_0(\mathbf{n}') \quad (4.24)$$

Cette condition globale est beaucoup plus faible que la version hors équilibre de la condition d'équilibre détaillé $w_{\mathbf{n}'\mathbf{n}} p_0(\mathbf{n}') = w_{\mathbf{n}\mathbf{n}'} p_0(\mathbf{n})$. La microréversibilité, vérifiée à l'équilibre thermodynamique pour un système fermé et isolé en l'absence de champ magnétique, n'est plus valable près d'un état stationnaire. Dans les systèmes mésoscopiques avec un espace des phases à une ou deux dimensions, il est toutefois possible de résoudre complètement (4.24) et de connaître la distribution de probabilité $p_0(\mathbf{n})$ [176, 215, 216]. Mais dès que le problème s'agrandit, il faut recourir à d'autres méthodes. Une première idée est de développer l'équation maîtresse en série de moments, d'invoquer la loi des grands nombres et de supposer $p(\mathbf{n}, t)$ gaussienne. Il suffit alors de résoudre les équations des deux premiers moments pour déterminer entièrement la statistique du transport. On peut également utiliser une des nombreuses méthodes associées à la résolution de l'équation de Fokker-Planck [217], qui est le développement de Taylor à l'ordre 2 en $(n) - \langle \mathbf{n} \rangle_0$ de l'équation maîtresse. Dans notre cas, il apparaîtra dans la suite qu'on peut prédire le bruit sans connaître entièrement la distribution stationnaire $p_0(\mathbf{n})$, mais en calculant seulement les deux premiers moments grâce aux équations associées.

La règle d'or de Fermi garantit que toutes les équations des moments de (4.20) sont linéaires en Δt . En particulier pour ceux qui nous intéressent :

$$\int d\mathbf{n} p(\mathbf{n}, \Delta t | \mathbf{n}') (\mathbf{n} - \mathbf{n}') = \mathbf{A}(\mathbf{n}') \Delta t \quad (4.25)$$

$$\int d\mathbf{n} p(\mathbf{n}, \Delta t | \mathbf{n}') (\mathbf{n} - \mathbf{n}')^\dagger (\mathbf{n} - \mathbf{n}') = 2\mathcal{D}(\mathbf{n}') \Delta t \quad (4.26)$$

où \mathbf{A} est l'opérateur de dérive (on utilisera aussi l'anglicisme de scattering), \mathcal{D} l'opérateur de diffusion et † indique la transposée d'un vecteur. Grâce à la linéarité aux temps courts, on obtient

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{n}') &= \int d\mathbf{n} (\mathbf{n} - \mathbf{n}') w_{\mathbf{n}'\mathbf{n}} \\ \mathcal{D} &= \frac{1}{2} \int d\mathbf{n} (\mathbf{n} - \mathbf{n}')^\dagger (\mathbf{n} - \mathbf{n}') w_{\mathbf{n}'\mathbf{n}} \end{aligned} \quad (4.27)$$

Même si jusqu'à ce point la théorie est valide pour des charges non quantifiées, il est plus aisé de passer en représentation entière pour \mathbf{n} , ce qui évitera des problèmes

de convergence dans les intégrales. L'étape suivante est d'écrire les probabilités de transition $w_{\mathbf{n}'\mathbf{n}}$ calculées par la règle d'or de Fermi. Dans cette dernière, il est nécessaire d'indiquer une statistique pour les porteurs de charge dans les sousbandes, et le choix naturel pour les fermions se porte sur la distribution de Fermi-Dirac. Cependant la statistique de Maxwell-Boltzmann décrivant des particules classiques convient bien aux détecteurs inter-sousbandes. En effet, quasiment tous les porteurs sont situés dans le niveau bas de la transition optique, et seule la queue maxwellienne à haute énergie de la distribution de Fermi-Dirac contient les porteurs de charges qui contribuent significativement au transport. Dans les autres niveaux, le quasi-niveau de Fermi se situe loin sous le bas de la sousbande, d'où le succès de la distribution de Maxwell-Boltzmann. Dans notre problème, elle a de plus la vertu cardinale de garantir la linéarité par rapport à l'état stationnaire : les probabilités de transition $w_{\mathbf{n}'\mathbf{n}}$ sont linéaires en \mathbf{n}' , et la solution devient analytique :

$$w_{\mathbf{n}'\mathbf{n}} = \sum_{i,j} n'_i \Gamma_{ij} \delta_i^j(\mathbf{n}', \mathbf{n}) \quad (4.28)$$

$$\delta_i^j(\mathbf{n}', \mathbf{n}) = \delta(\mathbf{n}', \mathbf{n} + \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)$$

où \mathbf{u}_i sont les vecteurs unitaires de la base de l'espace des phases, et Γ_{ij} le taux de transition total du niveau i au niveau j . La forme de $\delta_i^j(\mathbf{n}', \mathbf{n})$ provient de l'hypothèse qu'un état \mathbf{n}' ne communique qu'avec des états \mathbf{n} qui ne varient que par le transfert d'un seul électron. C'est une approximation de Born : les collisions à deux (ou plus) électrons sont négligées. La linéarité autour de l'état stationnaire permet de développer exactement \mathbf{A} et \mathcal{D} au premier ordre non nul :

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{n}) &= \langle \mathbf{A}(\mathbf{n}) \rangle_0 - \mathcal{L} \Delta \mathbf{n} \\ \mathcal{D}(\mathbf{n}) &= \langle \mathcal{D}(\mathbf{n}) \rangle_0 \end{aligned} \quad (4.29)$$

Par définition, on a $\langle \mathbf{A}(\mathbf{n}) \rangle_0 = 0$. On a introduit la variable centrée $\Delta \mathbf{n} = \mathbf{n} - \langle \mathbf{n} \rangle_0$ qui donne l'écart à la valeur moyenne stationnaire. \mathcal{L} est la matrice de scattering (appelée aussi matrice des coefficients cinétiques en thermodynamique) calculée au chapitre 2. Notons $\langle \mathcal{D}(\mathbf{n}) \rangle_0 = \mathcal{D}$ la matrice de diffusion stationnaire. \mathcal{L} et \mathcal{D} sont obtenus par :

$$\begin{aligned} \mathcal{L} \Delta \mathbf{n} &= \sum_{i,j} \Delta n_i \Gamma_{ij} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \\ \mathcal{D} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle n_i \rangle_0 \Gamma_{ij} (\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)^\dagger (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i) \end{aligned} \quad (4.30)$$

Les équations des deux premiers moments de (4.23) deviennent finalement :

$$\frac{d\langle \Delta \mathbf{n}(t) \rangle}{dt} = -\mathcal{L} \langle \Delta \mathbf{n}(t) \rangle \quad (4.31)$$

$$\frac{d\langle \Delta \mathbf{n}(t) \Delta \mathbf{n}(t) \rangle}{dt} = 2\mathcal{D} - \mathcal{L} \langle \Delta \mathbf{n} \Delta \mathbf{n} \rangle - \langle \Delta \mathbf{n} \Delta \mathbf{n} \rangle \mathcal{L}^\dagger \quad (4.32)$$

L'équation (4.31) n'est rien d'autre que l'équation (2.33), dans laquelle on a pris garde de remettre en perspective la valeur moyenne. En effet, la description précédente pouvait laisser entendre que la population de la sousbande i en régime stationnaire valait toujours $\langle n_i \rangle_0$. Il était alors impossible de comprendre l'origine du bruit.

La seule quantité qui ne varie pas est en fait $p_0(\mathbf{n})$. Les corrélations stationnaires vérifient la relation d'Einstein généralisée⁸

$$2\mathcal{D} = \mathcal{L} \langle \Delta \mathbf{n} \Delta \mathbf{n} \rangle_0 + \langle \Delta \mathbf{n} \Delta \mathbf{n} \rangle_0 \mathcal{L}^\dagger \quad (4.33)$$

À l'échelle microscopique, la condition de réversibilité temporelle est vérifiée. Formellement, cela se traduit par $\langle \Delta \mathbf{n}(t) \Delta \mathbf{n} \rangle = \langle \Delta \mathbf{n}(-t) \Delta \mathbf{n} \rangle$. En régime stationnaire, on a donc $\langle \Delta \mathbf{n}(t) \Delta \mathbf{n} \rangle_0 = \langle \Delta \mathbf{n} \Delta \mathbf{n}(t) \rangle_0$, ce qui traduit par $\exp(-\mathcal{L}t) \langle \Delta \mathbf{n} \Delta \mathbf{n} \rangle_0 = \langle \Delta \mathbf{n} \Delta \mathbf{n} \rangle_0 \exp(-\mathcal{L}^\dagger t)$. Et aux temps courts on obtient :

$$\mathcal{L} \langle \Delta \mathbf{n} \Delta \mathbf{n} \rangle_0 = \langle \Delta \mathbf{n} \Delta \mathbf{n} \rangle_0 \mathcal{L}^\dagger \quad (4.34)$$

Il peut être montré (cf [212]) que cette équation n'est autre que la relation de réciprocité d'Onsager qui relie les flux et les forces généralisées en thermodynamique [168, 218]

La forme des transitions de probabilité introduites dans l'équation (4.28) implique qu'il n'y a aucun terme de source ou de puits dans l'équation maîtresse : on raisonne en système fermé avec un nombre total de porteurs constant N . Sans cette hypothèse, il était impossible de résoudre l'équation de premier moment (4.31) de façon univoque car \mathcal{L} possède une valeur propre nulle. Cela dit l'hypothèse préalable de conditions de bord périodiques impose déjà la conservation du nombre total de porteurs sur chaque période. En ce qui concerne le calcul des fluctuations, cela implique que le système modélisé est une chaîne infinie de périodes parfaitement corrélées. Nous reviendrons sur ce point plus tard, quand la question se posera d'identifier les électrodes entre lesquelles la mesure de bruit est effectuée. Les transitions de probabilité telles qu'elles ont été écrites dans l'équation (4.28), associées à la représentation discrète des populations, satisfont automatiquement aux conditions aux limites suivantes : $\forall i, 0 \leq n_i \leq N$. On évite ainsi les zones sombres de l'espace des phases où le nombre de porteurs dans une sousbande est négatif, ou excède le nombre total de dopant introduits.

Au chapitre 2 le calcul de la matrice de scattering \mathcal{L} a été présenté. Insistons sur le fait que c'est cette étape du calcul qui est gourmande en ressources numériques. La résolution du système linéaire $\mathcal{L} \langle \mathbf{n} \rangle_0 = 0$ donne les valeurs moyennes des populations stationnaires, dès que N est fixé. Le courant total est obtenu en comptant tous les courants inter-sousbandes $J_{ij} = e \langle n_i \rangle_0 \Gamma_{ij}$ passant à travers n'importe quelle interface de la structure. Dans ce cas, le passage de l'échelle microscopique à celle du dispositif est instantané.

En injectant les expressions de (4.30) dans (4.33), on obtient les corrélations entre les populations :

$$\langle \Delta n_i \Delta n_j \rangle_0 = \langle n_i \rangle_0 \delta_{ij} - \frac{\langle n_i \rangle_0 \langle n_j \rangle_0}{N} \quad (4.35)$$

Dans le cas de particules classiques, on s'attend à retrouver la valeur poissonnienne : $\langle n_i \rangle_0 \delta_{ij}$. La correction sous-poissonnienne $-\langle n_i \rangle_0 \langle n_j \rangle_0 / N$ provient du fait que le système est fermé et le nombre total N de porteurs conservé. La contrainte

8. La formulation usuelle à une dimension de cette loi est donnée dans le formalisme de dérive-diffusion $D = k_B T / \mu$. La mobilité μ est liée à la matrice de scattering \mathcal{L} , et le terme $k_B T$ donne les fluctuations à l'équilibre $\langle \Delta \mathbf{n} \Delta \mathbf{n} \rangle_0$

supplémentaire diminue les fluctuations. Le résultat principal ici est que les seconds moments s'écrivent analytiquement à partir des premiers. Une fois le courant déterminé, le bruit est instantanément calculé! Nous allons en effet voir qu'il suffit de connaître les valeurs moyennes et les corrélations stationnaires des populations des sousbandes pour calculer entièrement le bruit électronique.

Cas des fermions et des bosons

Si on ne suppose plus les particules classiques, il faut introduire une nouvelle hypothèse de quasi-linéarité autour de l'état stationnaire. En effet, la linéarité en \mathbf{n} donnée par l'expression (4.28) n'est plus garantie. Les fermions dans des sousbandes thermalisées sont distribués selon une statistique de Fermi-Dirac :

$$f(E, \mu) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-\mu}{k_B T}}} \quad (4.36)$$

où μ est le potentiel chimique de la sousbande. Dans ce cas la probabilité de transition $w_{\mathbf{n}'\mathbf{n}}$ n'est plus linéaire en \mathbf{n}' , et s'écrit :

$$w_{\mathbf{n}'\mathbf{n}} = \sum_{i,j} \tilde{\Gamma}_{ij}(n'_i, n'_j) \delta_i^j(\mathbf{n}', \mathbf{n}) \quad (4.37)$$

où $\tilde{\Gamma}_{ij}(n'_i, n'_j) = n'_i \Gamma_{ij}(n'_i, n'_j)$. A cause du principe d'exclusion de Pauli (le terme $1 - f(E, \mu)$ lié à la disponibilité du niveau d'arrivée de l'électron dans la règle d'or de Fermi), $\tilde{\Gamma}_{ij}(n'_i, n'_j)$ est désormais une fonction décroissante de n'_j , et croissante (mais pas nécessairement linéaire) de n'_i . Dans ce cas, les valeurs moyennes stationnaires des populations sont obtenues par résolution auto-cohérentes de $\mathbf{A}(\langle \mathbf{n} \rangle_0) = \mathbf{0}$ qui s'écrit :

$$0 = \sum_j \tilde{\Gamma}_{ji}(\langle n_j \rangle_0, \langle n_i \rangle_0) - \tilde{\Gamma}_{ij}(\langle n_i \rangle_0, \langle n_j \rangle_0) \quad \forall i \quad (4.38)$$

Puisque la linéarité autour de l'état stationnaire n'est plus exacte, les développements (4.29) deviennent des approximations au premier ordre non nul. On peut cependant se reporter au cas précédent en supposant la quasi-linéarité du problème autour de l'état stationnaire, et calculer les matrices de scattering et de diffusion en linéarisant la probabilité de transition :

$$w_{\mathbf{n}'\mathbf{n}} = w_{\langle \mathbf{n} \rangle_0 \langle \mathbf{n} \rangle_0} + (\mathbf{n}' - \langle \mathbf{n} \rangle_0) \cdot \nabla_{\mathbf{n}'} w_{\mathbf{n}'\mathbf{n} | \mathbf{n}' = \langle \mathbf{n} \rangle_0} + (\mathbf{n} - \langle \mathbf{n} \rangle_0) \cdot \nabla_{\mathbf{n}} w_{\mathbf{n}'\mathbf{n} | \mathbf{n} = \langle \mathbf{n} \rangle_0} \quad (4.39)$$

Dans cette expression les gradients sont maintenant indépendants de \mathbf{n}' et \mathbf{n} , et peuvent être calculés numériquement connaissant le premier moment de l'état stationnaire. Puisqu'on a désormais à disposition une expression linéaire (mais plus complexe) de $w_{\mathbf{n}'\mathbf{n}}$, le reste du calcul du bruit est identique. On a donc formellement remplacé l'hypothèse de statistique classique par une hypothèse de quasi-linéarité. Cette dernière pourrait être étayée plus avant en vérifiant que les ordres supérieurs sont effectivement négligeables. Le cas des bosons est strictement équivalent.

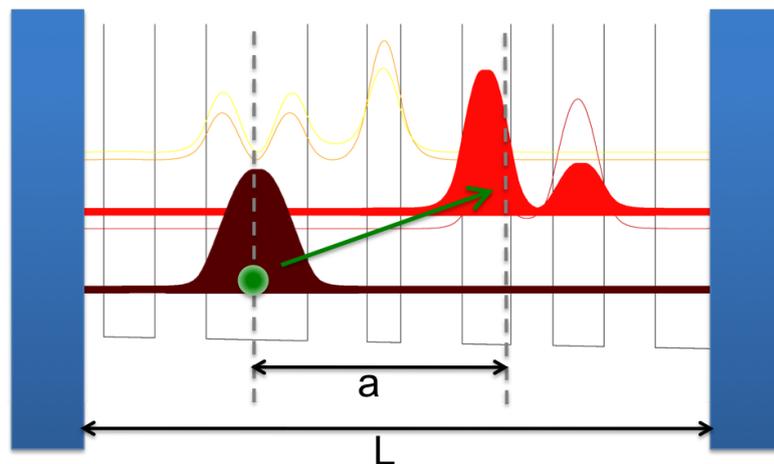


FIGURE 4.10 – Théorème de Ramo-Shockley : une charge diffusée d’une distance a entre deux électrodes espacées de L induit une variation de potentiel dans le circuit extérieur équivalente au transfert balistique d’une charge a/L entre les deux électrodes.

Du théorème de Ramo-Schokley au bruit

Ayant posé le cadre formel de l’équation maîtresse, tous les outils sont rassemblés pour dériver une formulation analytique du bruit dans les détecteurs intersousbandes, sans avoir besoin d’hypothèse supplémentaire. Le raisonnement détaillé ici généralise à r dimensions et pour des sousbandes thermalisées une démarche initialement proposée pour des diodes tunnel à double barrière [176, 215]. Dans notre cas la multi-dimensionnalité du problème empêche de résoudre directement l’équation maîtresse (4.23) mais la connaissance des moyennes et corrélations stationnaires des populations est suffisante. Le raisonnement comporte deux étapes. La première consiste à décrire le bruit de courant en fonction des corrélations entre les différents sauts inter-sousbandes, grâce au théorème de Ramo-Shockley. Dans la seconde étape, il s’agit d’écrire les corrélations entre sauts inter-sousbandes en fonction des corrélations entre populations.

Par définition, le bruit de courant mesuré pendant un temps τ dans un système physique s’écrit en suivant (4.1)

$$S_I(\omega) = \frac{2}{\tau} |I(\omega)|^2 - 4\pi \langle i \rangle_0^2 \delta(\omega) \quad (4.40)$$

Il s’agit donc de calculer le carré de la transformée de Fourier du courant mesuré dans le circuit externe. Nous avons laissé en suspens la question de la localisation des électrodes de mesure. Elle renvoie directement à la problématique du changement d’échelles qui est au centre de cette thèse. Le théorème de Ramo-Shockley [219, 220] en donne une solution très élégante : du point de vue du circuit extérieur, les deux événements illustrés sur la figure 4.10 sont équivalents. D’un côté un électron est diffusé entre deux niveaux dont les barycentres sont espacées de a ⁹. De l’autre, une charge effective de ea/L est transférée balistiquement entre les deux électrodes

9. Même si à proprement parler la diffusion est locale, dans cette représentation la délocalisation de l’électron sur l’ensemble de l’étendue spatiale de la fonction d’onde est considérée comme ins-

externes, séparées d'une distance L . En conséquence, le lien micro-macro est immédiatement donné, et nul n'est besoin d'introduire artificiellement un facteur de grandissement ou gain de bruit. Ce théorème est beaucoup plus général que le cadre du hopping inter-sousbandes dans lequel nous l'employons [221], et est une conséquence de la conservation de l'énergie. Il est parfois formulé en termes de capacités plutôt que de barycentres.

Soit \bar{z}_i le barycentre de la fonction d'onde de la i^{e} sousbande, et L_{per} la longueur de la période. Pour la diffusion d'un électron du niveau i vers le niveau j le ratio entre charge effective et charge électronique prend la valeur algébrique $\alpha_{ij} = (\bar{z}_j - \bar{z}_i)/L_{per}$. Tout se passe alors comme si les électrodes associées à une période étaient délocalisées, puisque les électrons ne les traversent jamais. Ce modèle représente bien une chaîne infinie de périodes parfaitement corrélées. De plus, la délocalisation des électrodes permet de prendre en compte naturellement les corrélations entre les périodes. Ainsi, pour comptabiliser le bruit créé par N_p périodes, il suffira de diviser la valeur obtenue pour une période par N_p , comme si elles étaient parfaitement décorréliées. En comparant à la formule du modèle de Beck (4.17), on peut voir que les occurrences de p_c dans le facteur de grandissement ont disparu. Elles sont en effet prises en compte dès notre calcul sur une période¹⁰. Enfin, notons que puisque les détecteurs inter-sousbandes contiennent de nombreuses périodes, le bruit dû aux électrodes de contact est une correction faible par rapport à ce que nous calculons ici, et sera négligé.

La valeur instantanée du courant par unité de surface s'écrit

$$i(t) = e \sum_{i,j} \alpha_{ij} \sum_p f(t - t_p^{ij}) \quad (4.41)$$

où p indice tous les temps t_p^{ij} des sauts électroniques depuis le niveau i vers j durant le temps de mesure τ . $f(t)$ donne la forme du pulse de courant dans le circuit extérieur. Si sa structure exacte est inconnue, il est raisonnable de supposer que la durée τ_p du pulse est considérablement plus courte que les temps caractéristiques du transport inter-sousbandes, et que dans les fréquences étudiées la transformée de Fourier de f est donnée par sa valeur statique $F(\omega) = 1$.

La transformée de Fourier du courant ainsi que son module carré deviennent :

$$I(\omega) = eF(\omega) \left\{ \sum_{i,j} \alpha_{ij} \sum_p \exp(i\omega t_p^{ij}) \right\} \quad (4.42)$$

$$|I(\omega)|^2 = e^2 \left\{ \sum_{i,j,k,l} \alpha_{ij} \alpha_{kl} \sum_{p,q} \exp[i\omega(t_p^{ij} - t_q^{kl})] \right\} \quad (4.43)$$

Puisque les effets de type Auger sont ignorés, il n'y a pas de saut simultané. Par là nous voulons dire que sur une échelle de temps suffisamment fine, les pulses associés à chaque saut seront distincts même s'ils sont espacés de moins que τ et ont un

tantaneé ; on parle directement de diffusion entre les deux barycentres. La signature spectrale des effets intra-sousbandes est reléguée à des fréquences bien supérieures à celles qui nous intéressent.

10. Une discussion plus fournie sur la relation entre les conditions de bord et la probabilité de capture dans les QWIPs est présentée en section 5

recouvrement non nul. La double somme p, q peut être ré-écrite :

$$\sum_{p,q} \exp [i\omega (t_p^{ij} - t_q^{kl})] = N_\tau^{kl} \delta_{ij,kl} + \sum_q \sum_{p \neq q} \exp [i\omega (t_p^{ij} - t_q^{kl})] \quad (4.44)$$

où N_τ^{kl} est le nombre moyen de sauts $k \rightarrow l$ (noté kl) pendant la mesure. Encore une fois, le delta de Dirac incarne l'hypothèse de seules diffusions à un électron. Pour un très grand nombre de sauts (le nombre de porteurs mis en jeu est très grand et τ est long devant les temps de vie des sousbandes) la somme sur p pour un q donné converge vers $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp [i\omega (t - t_q^{kl})] h_{ij,kl}(t - t_q^{kl}) dt$, où la fonction de corrélation entre sauts $h_{ij,kl}(t)$ n'est autre que le taux de transition ij moyen au temps t , sachant qu'à l'instant initial il y a eu un saut kl . Cette fonction se comprend très bien du point de vue eulérien de déplacement des équilibres locaux. Une perturbation initiale à un endroit (le saut kl) va modifier la distribution électronique dans la structure et engendrer des variations de courant autre part (ici en ij). L'expression intégrale ne dépendant pas de la valeur particulière de q , et la somme sur q peut être remplacée par N_τ^{kl} fois la valeur de l'intégrale pour $t_q^{kl} = 0$. Ainsi,

$$\begin{aligned} \left\langle \sum_{p,q} \exp [i\omega (t_p^{ij} - t_q^{kl})] \right\rangle_\tau &= N_\tau^{kl} \left[\delta_{ij,kl} + \int_{-\infty}^{+\infty} h_{ij,kl}(t) \exp (i\omega t) \right] \\ &= N_\tau^{kl} [\delta_{ij,kl} + H_{ij,kl}(\omega)] \end{aligned} \quad (4.45)$$

avec $H_{ij,kl}(\omega)$ la transformée de Fourier de $h_{ij,kl}(t)$. Les fonctions de corrélations vérifient la condition de symétrie temporelle $h_{ij,kl}(t) = h_{kl,ij}(-t)$. Le système relaxant vers l'état stationnaire, les corrélations disparaissent à temps long, donc la valeur limite de $h_{ij,kl}(t)$ n'est rien d'autre que le taux moyen de transition ij dans l'état stationnaire : $\lim_{t \rightarrow +\infty} h_{ij,kl}(t) = \langle w_{ij} \rangle_0 = \langle n_i \rangle_0 \Gamma_{ij}$.

Il est utile de soustraire la composante statique aux corrélateurs, et d'introduire les fonctions de corrélations réduites $g_{ij,kl}(t) = h_{ij,kl}(t) - \langle w_{ij} \rangle_0$. Dans l'espace de Fourier, on a $G_{ij,kl}(\omega) = h_{ij,kl}(\omega) - 2\pi \langle w_{ij} \rangle_0 \delta(\omega)$. En utilisant le fait que $N_\tau^{kl} = \langle w_{kl} \rangle_0 \tau$, l'équation (4.43) devient :

$$\begin{aligned} |I(\omega)|^2 &= e^2 \tau \left\{ \sum_{i,j,k,l} \alpha_{ij} \alpha_{kl} \langle w_{kl} \rangle_0 [\delta_{ij,kl} + G_{ij,kl}(\omega)] \right\} \\ &\quad + e^2 2\pi \delta(\omega) \tau \left\{ \sum_{i,j,k,l} \alpha_{ij} \alpha_{kl} \langle w_{kl} \rangle_0 \langle w_{ij} \rangle_0 \right\} \end{aligned} \quad (4.46)$$

qui à son tour, en injectant dans (4.40) donne la forme finale de la densité spectrale de bruit :

$$S_I(\omega) = 2e^2 \left\{ \sum_{i,j,k,l} \alpha_{ij} \alpha_{kl} \langle w_{kl} \rangle_0 [\delta_{ij,kl} + G_{ij,kl}(\omega)] \right\} \quad (4.47)$$

Dans l'équation (4.47) les coefficients α_{ij} sont connus après résolution du système auto-cohérent Schrödinger-Poisson, et les $\langle w_{kl} \rangle_0$ sont donnés par l'équation des premiers moments (4.31). Il nous reste donc à exprimer les corrélateurs $G_{ij,kl}(\omega)$ en fonction des seconds moments.

Pour cela, la méthodologie consiste à exprimer les fonctions de corrélations $h_{ij,kl}(t)$ (qui représentent le taux moyen de sauts ij au temps t , étant donné une transition kl à l'instant initial) grâce aux propriétés des processus de Markov données par l'équation CKS (4.20). L'état initial est supposé être décrit par la solution stationnaire $p_0(\mathbf{n}, t)$ de l'équation maîtresse (4.23). Soient $p_{kl}(\mathbf{n}, t)$ la probabilité d'être dans l'état \mathbf{n} au temps t sachant qu'une transition kl a eu lieu à l'instant initial, et $w_{ij}(\mathbf{n}) = w_{\mathbf{n}, \mathbf{n} + \mathbf{u}_j - \mathbf{u}_i} = n_i \Gamma_{ij}$ le taux de transition ij dans la configuration \mathbf{n} . Le corrélateur est alors donné par :

$$h_{ij,kl}(t) = \sum_{\mathbf{n}} w_{ij}(\mathbf{n}) p_{kl}(\mathbf{n}, t) \quad (4.48)$$

$$= \sum_{\mathbf{n}} w_{ij}(\mathbf{n}) \sum_{\mathbf{m}} p(\mathbf{n}, t | \mathbf{m}, 0) p_{kl}(\mathbf{m}, 0) \quad (4.49)$$

La probabilité $p_{kl}(\mathbf{m}, 0)$ d'être dans l'état \mathbf{m} juste après un saut kl est proportionnelle à la distribution $p_0(\mathbf{m} - \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_k)$ pondérée par le taux de transition kl stationnaire :

$$\begin{aligned} p_{kl}(\mathbf{m}, 0) &= \frac{p_0(\mathbf{m} - \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_k) w_{kl}(\mathbf{m} - \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_k)}{\sum_{\mathbf{m}'} p_0(\mathbf{m}') w_{kl}(\mathbf{m}')} \\ &= \langle w_{kl} \rangle_0^{-1} p_0(\mathbf{m} - \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_k) w_{kl}(\mathbf{m} - \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_k) \end{aligned} \quad (4.50)$$

La fonction de corrélation des sauts inter-sousbandes devient :

$$h_{ij,kl}(t) = \frac{\Gamma_{ij} \Gamma_{kl}}{\langle w_{kl} \rangle_0} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} n_i (m_k + 1) p(\mathbf{n}, t | \mathbf{m}, 0) p_0(\mathbf{m} - \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_k) \quad (4.51)$$

$$= \frac{\Gamma_{ij}}{\langle n_k \rangle_0} \sum_{\mathbf{m}} (m_k + 1) p_0(\mathbf{m} - \mathbf{u}_l + \mathbf{u}_k) \sum_{\mathbf{n}} n_i p(\mathbf{n}, t | \mathbf{m}, 0) \quad (4.52)$$

La linéarité autour de l'état stationnaire garantie par le fait que les particules sont supposées classiques est cruciale à ce moment du raisonnement. Elle permet en effet de factoriser les taux de diffusion Γ_{ij} et Γ_{kl} . Dans ce cas, les termes sous la somme vont pouvoir être réduits aux corrélations entre les populations. Pour des fermions (ou des bosons), il faut utiliser la linéarisation autour de l'état stationnaire.

Le terme $\sum_{\mathbf{n}} n_i p(\mathbf{n}, t | \mathbf{m}, 0)$ est la i^e composante du vecteur $\langle \mathbf{n}(t) \rangle_{|\mathbf{m}}$, qui donne les valeurs moyennes des populations au temps t connaissant la configuration initiale \mathbf{m} . Son évolution est entièrement régie par l'équation des premiers moments (4.31), gouvernée par la matrice de scattering \mathcal{L} . Soit $\mathcal{M}(t)$ le propagateur temporel associé : $\mathcal{M}(t) = e^{-\mathcal{L}t}$. Les valeurs moyennes sont données par

$$\langle n_i(t) \rangle_{|\mathbf{m}} = \langle n_i \rangle_0 + \sum_{s=1}^r \mathcal{M}_{is}(t) (m_s - \langle n_s \rangle_0) \quad (4.53)$$

Les calculs restant n'introduisent plus d'argument physique et sont disponibles dans l'annexe C. Le résultat final est :

$$G_{ij,kl}(\omega) = -\Gamma_{ij} \sum_{s=1}^r \mathcal{M}_{is}(\omega) \left(\frac{\langle n_s \rangle_0}{N} - \delta_{l,s} \right) \quad (4.54)$$

Il est assez surprenant que cette expression ne dépende pas de k , et nous ne l'expliquons pas. Un mot sur l'implémentation numérique. Le calcul du bruit vient se greffer à la fin de l'algorithme METIS lorsque toutes les boucles éventuelles (optique, température électronique, Poisson) ont convergé. La matrice de scattering \mathcal{L} est d'abord ramenée à une représentation mono-périodique, puis diagonalisée dans \mathbb{C} en $\tilde{\mathcal{L}}$. $\tilde{\mathcal{M}}(\omega)$ la transformée de Fourier de $\exp(-\tilde{\mathcal{L}}t)$ est diagonale, et ses termes ont pour parties réelles des Lorentziennes $2\tau_i/(1+(\omega\tau_i)^2)$. τ_i sont les inverses des valeurs propres de \mathcal{L} et sont comparables aux temps de vies inter-sousbandes des niveaux quantiques. Le terme associé à la valeur propre nulle est l'exception. Il donne un Dirac et vaut zéro en dehors de la fréquence rigoureusement nulle¹¹. \mathcal{M} est obtenue par le changement de base inverse, au cours duquel toutes les parties imaginaires s'annulent. Ainsi, le bruit est indépendant de la fréquence jusqu'à $\omega_c = 1/\max(\tau_i)$, qui est usuellement supérieure à plusieurs centaines de mégaHertz¹². On se limitera donc à représenter le bruit à fréquence nulle (au sens non rigoureux cette fois). Il est obtenu en injectant (4.54) dans (4.1) :

$$S_I(\omega) = 2e^2 \left\{ \sum_{i,j,k,l} \alpha_{ij}\alpha_{kl} \langle w_{kl} \rangle_0 \left[\delta_{ij,kl} - \Gamma_{ij} \sum_{s=1^r} \mathcal{M}_{is}(\omega) \left(\frac{\langle n_s \rangle_0}{N} - \delta_{l,s} \right) \right] \right\} \quad (4.55)$$

Le facteur de Fano n'a pas de forme simple dans ce calcul multi-dimensionnel.

4.2 Comparaison avec l'expérience

Dans cette partie nous allons comparer les résultats théoriques à des mesures faites sur cinq échantillons : deux QCDs détectant à 8 et 15 μm , deux QWIPs photovoltaïques (pv-QWIPs) détectant à 10 μm et un QWIP photoconducteur (pc-QWIP) détectant à 17 μm , dont les structures de bandes sont représentées sur la figure 4.11. Le tableau 4.1 détaille les caractéristiques et références de ces échantillons.

Les densités de courant de bruit d'obscurité (racine de la DSB) sont mesurées sur le banc de caractérisation du III-V Lab par un montage standard de transimpédance et analyseur de spectre, représenté sur la figure 4.12. Détaillons un instant les enjeux expérimentaux. On mesure des courants très faibles (de l'ordre de 10^{-13} A/ \sqrt{Hz}) : toute vibration des câbles, tout mouvement dans la salle d'expérimentation ou téléphone portable qui passe dans le couloir est capté et peut ruiner l'acquisition. La mesure a cependant été possible sans pour autant remédier à des montages plus complexes du type pont, mesure à plusieurs pointes et mesure de corrélations. Des précautions plus simples ont suffi, comme le raccourcissement/raidissement de tous les câbles de telle sorte que les fréquences de vibrations mécaniques soient au delà de celles qui nous intéressent. Une autre façon (non déployée) de fiabiliser la mesure serait d'enfermer l'intégralité du montage expérimental à l'intérieur d'un blindage magnétique monté sur pieds hydrauliques, au détriment de l'accessibilité et de la souplesse d'utilisation. Le protocole expérimental est le suivant :

11. En général le programme ne redonne pas 0 mais une erreur numérique qui doit être corrigée sous peine d'un bruit numérique comparable au signal

12. A part certains processus de rechargement qui peuvent être très longs dans le cas de QWIPs fonctionnant à basse température et très faible flux.

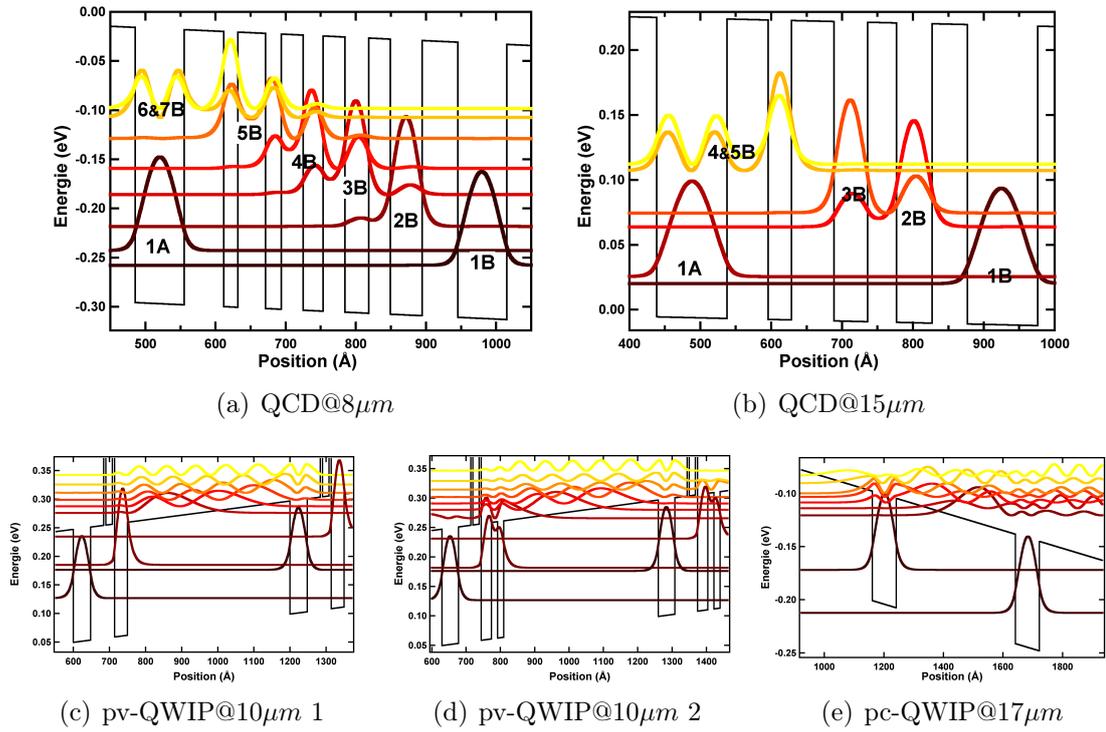


FIGURE 4.11 – Structures de bande des différents échantillons étudiés.

	QCD@8	QCD@15	pv-QWIP	pc-QWIP
Structure (Å)	68,56,20,40,23	99,50,33,41,	450,48,36,6,18,6	80.5,400
GaAs,AlGaAs	31,28,31,34,31	48,60,50,58	36 ou 30,18,18	
AlAs	40,31,43,51			
S_{mesa}	100 \times 100 μm^2		0.23 mm^2	30 \times 30 μm^2
T (K)	80, 90	50, 60	77	45, 65
N_p	10	30	20	40
Dopage (cm^{-2})	5×10^{11}	2×10^{11}	4×10^{11}	2×10^{11}
Source	Ref. [79]	Ref. [85]	Ref. [201, 222]	[74]

TABLE 4.1 – Paramètres expérimentaux. Structure : largeur des couches épitaxiées pour une période. S_{mesa} : surface des mésas mesurés. T : température de mesure. N_p nombre de périodes. Dopage : en Si pour les puits principaux.

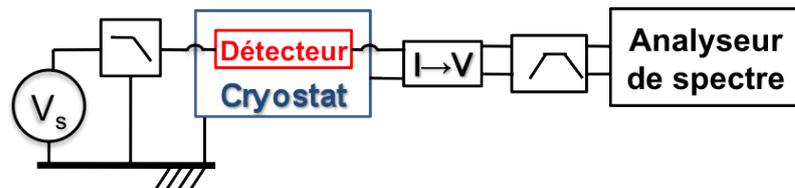


FIGURE 4.12 – Montage expérimental de mesure du bruit. V_s est la source de tension, la transimpédance est notée $I \rightarrow V$, et les filtres sont représentés par leur bande passante spectrale.

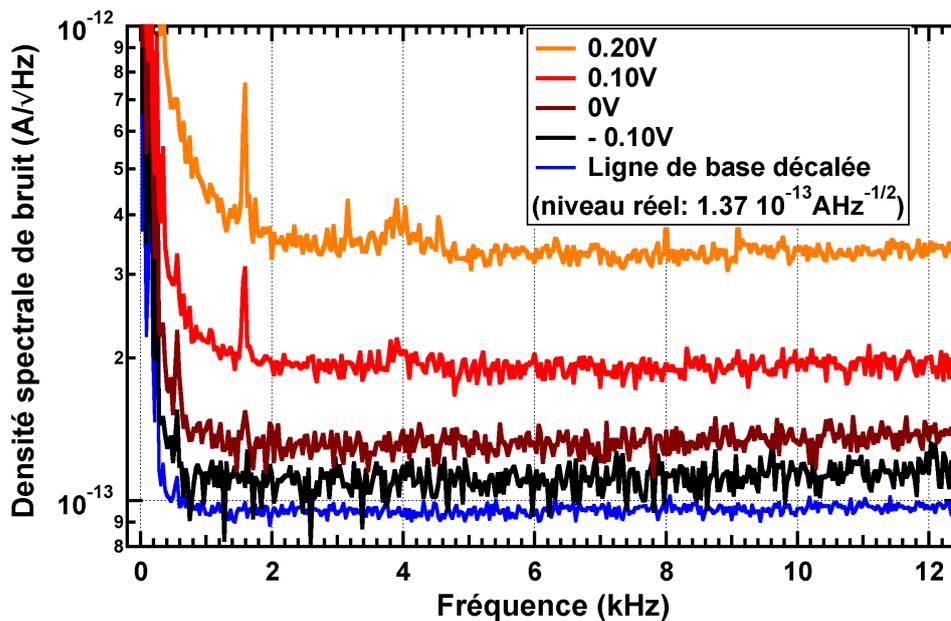


FIGURE 4.13 – Racine carrée de la densité spectrale de bruit de courant d’obscurité pour le QCD @ $8\mu\text{m}$ mesurée à 90K, pour différents points de tension. La ligne de base a été décalée pour des raisons de clarté, mais vaut en fait $1.37 \times 10^{-13} \text{ A.Hz}^{-1/2}$.

- **Mesure de la ligne de base** : on fait une mesure de bruit en remplaçant l’échantillon par une résistance de $9G\Omega$ pour acquérir la ligne de base L_{base} , densité spectrale de bruit créée due au banc de mesure. Cette ligne de base est acquise pour une température donnée, et sera utilisée pour toute la gamme de tension.
- **Mesure de la densité spectrale de bruit $S_I(\omega)$** pour chaque point de tension.
- **Calcul de la densité de courant de bruit** définie comme la racine carrée de la moyenne entre 2 et 12kHz de la DSB à laquelle a été soustraite la ligne de base : $\sqrt{\langle S_I \rangle_{2-12\text{kHz}}} = \left(\frac{1}{\Delta\omega} \int_{\Delta\omega} (S_I(\omega) - L_{base}(\omega)) d\omega \right)^{1/2}$, et l’intégrale se fait en dehors des zones d’artefacts décrites ci-dessous. Ceci est vrai pour les deux QCDs et le pc-QWIP. Pour les pv-QWIPs, la densité de courant de bruit est donnée comme la racine de la DSB à 1430Hz [201].

Les courants de bruit sont représentés sur la figure (4.13) pour le QCD @ $8\mu\text{m}$ à 90K. Le comportement blanc (bruit indépendant de la fréquence) est bien retrouvé de 2 à 12.5 kHz, limite de la mesure. En théorie, ce comportement devrait pouvoir être mesuré jusque dans la gamme de la centaine de MHz. Le choix a été de montrer des mesures sur lesquelles les principaux artefacts sont visibles. Le comportement en $1/f$ observé en deçà de 2kHz, est un double artefact. D’une part, la plage de fréquence choisie ne permet pas de mesurer correctement les basses fréquences : les points en deçà de 1kHz sont non pertinents. Pour les mesurer clairement, il faudrait concaténer une mesure dédiée étalée de 1Hz à 2kHz par exemple. L’autre part est attribuée à la source de tension. L’intensité de ce bruit $1/f$ varie avec le courant délivré, et cette contribution a été fortement réduite en plaçant un filtre passe bas dont la fréquence de coupure est de l’ordre de 100 Hz juste en aval de la source de tension, comme indiquée sur la figure 4.12. Cette contribution a de plus été observée

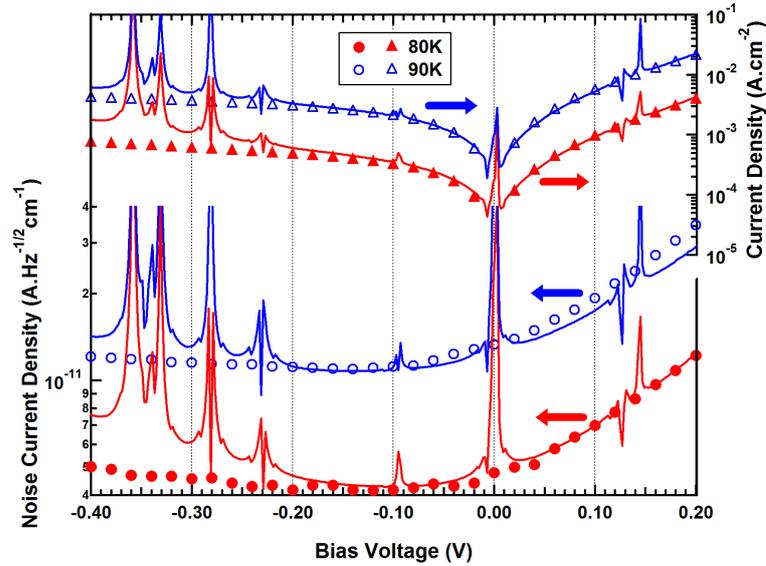


FIGURE 4.14 – Haut-droite : Modèle (traits pleins) et mesure expérimentale (points) du courant d’obscurité dans le QCD @ $8\mu m$. Bas-gauche : densités de courant de bruit d’obscurité correspondantes.

sur des résistances, ce qui confirme que c’est bien un artefact du banc de mesure. Les mêmes arguments sont valables pour le pic large à 4kHz. Enfin les autres pics, dont celui à 1.6 kHz sont des accidents de mesures car ils n’apparaissent pas de façon reproductible dans les mesures.

Dans cette partie, nous avons fait le choix délibéré de ne pas utiliser notre modèle de transport plus performant fondé sur la localisation partielle de la base, qui prend en compte le tunnel résonnant et supprime les pics dûs aux anticroisements. En effet, le but est ici de valider le modèle de bruit. Celui-ci peut indifféremment se greffer sur les calculs en base étendue ou localisée décrits au chapitre 2. Hors, le calcul en base étendue a pour défaut de rajouter des pics très localisés en plage de tension sur un fond continu. Ce défaut va être pour nous un étalon, afin de voir si le modèle de bruit est plus faible ou aussi robuste que le modèle de courant. Dans la mesure où aucune hypothèse supplémentaire n’a été introduite dans cette partie, on peut supposer que c’est la dernière assertion qui sera juste. Nous allons le vérifier dès à présent.

Les figures 4.14 à 4.17 montrent la comparaison entre la théorie et les mesures pour les QCD@ $8\mu m$, QCD@ $15\mu m$, pv-QWIPs et pc-QWIPs respectivement. Sur le haut de chaque figure sont comparés les courants théoriques et expérimentaux, tandis que les bruits sont comparés sur le bas. Pour tous les échantillons, les calculs sont effectués avec les paramètres de croissance nominaux, et seule la température est ajustée à 2K autour de la valeur indiquée par la sonde pour retrouver la valeur du courant d’obscurité.

Sur la figure 4.14 (QCD@ $8\mu m$), le modèle de courant est en accord quantitatif avec l’expérience entre $-0.2V$ et $0.2V$ pour les deux températures. Les pics à $-0.09V$, $0V$ and $0.15V$ sur les courbes théoriques sont la signature d’anticroisements entre niveaux de périodes adjacentes. Au delà de $-0.2V$, ce sont des phénomènes intrapériodes qui expliquent la surestimation systématique du courant et les pics qui correspondent à la résonance entre le niveau 1A les niveaux de la cascade B. Le

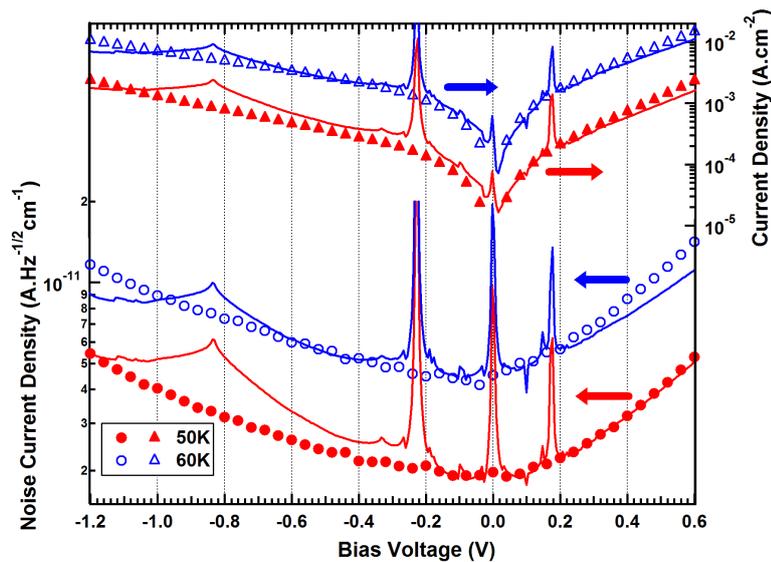


FIGURE 4.15 – Haut-droite : Modèle (traits pleins) et mesure expérimentale (points) du courant d’obscurité dans le QCD @ $15\mu m$. Bas-gauche : densités de courant de bruit d’obscurité correspondantes.

désaccord entre modèle et expérience diminue lorsque la température augmente, à mesure que les diffusions prennent le pas sur le transport résonnant.

Il est frappant de noter que si les erreurs dans la prédiction du courant trouvent systématiquement un écho dans les calculs de bruit (pics d’anticroisements et surestimation du courant en tension négative), aucune erreur additionnelle n’est introduite. Le bruit prédit est en accord quantitatif avec l’expérience pour les mêmes domaines de validité que le courant. En particulier, la valeur Johnson à tension nulle, ainsi que la variation avec le courant caractéristique d’un bruit de grenaille pour les tensions positives sont parfaitement retrouvées. De plus, on prédit très bien l’extinction du bruit de recombinaison à faible tension négative caractéristique du comportement Schottky des QCDs [75].

Pour le QCD@ $15\mu m$, des conclusions équivalentes sont tirées de la figure 4.15 pour le courant et le bruit. L’accord général est toujours bon. La légère baisse de précision quantitative est due à une insuffisance du modèle de transport complet, pas à la composante bruit : à plus grande longueur d’onde et plus faible température le modèle entièrement diffusif utilisé ici perd de sa pertinence à mesure que les phénomènes résonants prennent de l’importance. Les pics fins à $-0.23V$, $0V$, et $0.18V$ sont toujours dus à des anticroisements, alors le pic plus large à $-0.83V$ est une résonance LO entre les niveaux 1A et 3B. Notons quand même que les conclusions principales sont identiques : unification des bruits thermique et shot, et bonne description de la zone de transition.

Les deux pv-QWIPs souffrent beaucoup plus des phénomènes de résonance (cf figure 4.16). C’est compréhensible au vu des structures de bande des figures 4.11(c) et 4.11(d). Les niveaux calculés dans le continuum sont localisés sur chaque période par les barrières AlAs, et anticroisent beaucoup entre eux. Une fois ces artefacts oubliés, les conclusions restent similaires : description unifiée des bruits thermique et shot, et accord quantitatif dès que le courant est bien calculé.

Le pc-QWIP ne souffre pas de tels artefacts créés par le continuum (cf fig. 4.17),

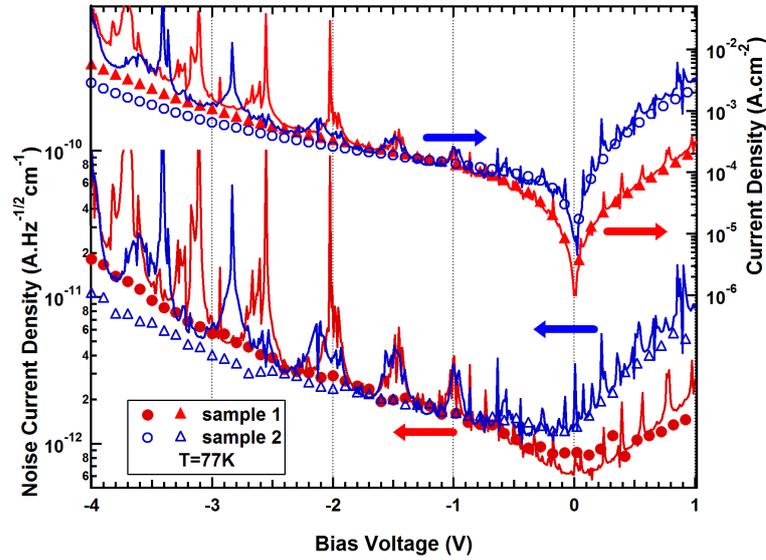


FIGURE 4.16 – Haut-droite : Modèle (traits pleins) et mesure expérimentale (points) du courant d’obscurité dans les pv-QWIPs @ $10\mu\text{m}$. Bas-gauche : densités de courant de bruit d’obscurité correspondantes.

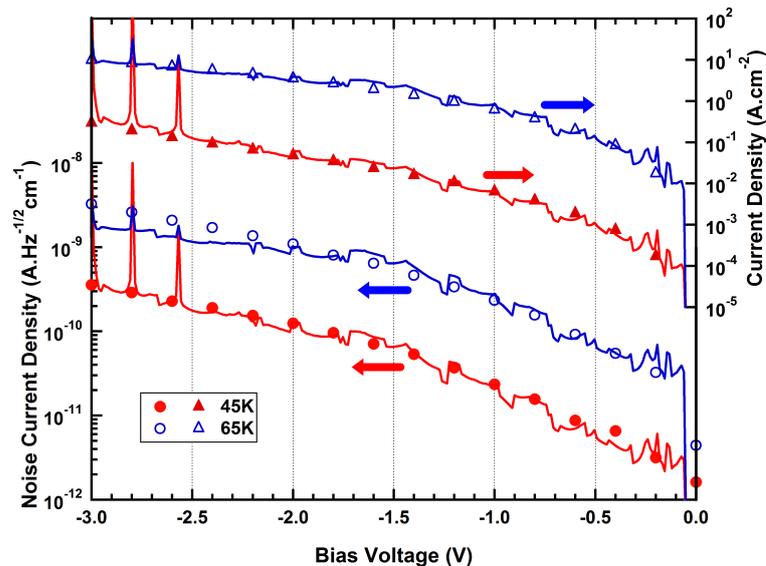


FIGURE 4.17 – Haut-droite : Modèle (traits pleins) et mesure expérimentale (points) du courant d’obscurité dans le pc-QWIP @ $17\mu\text{m}$. Bas-gauche : densités de courant de bruit d’obscurité correspondantes.

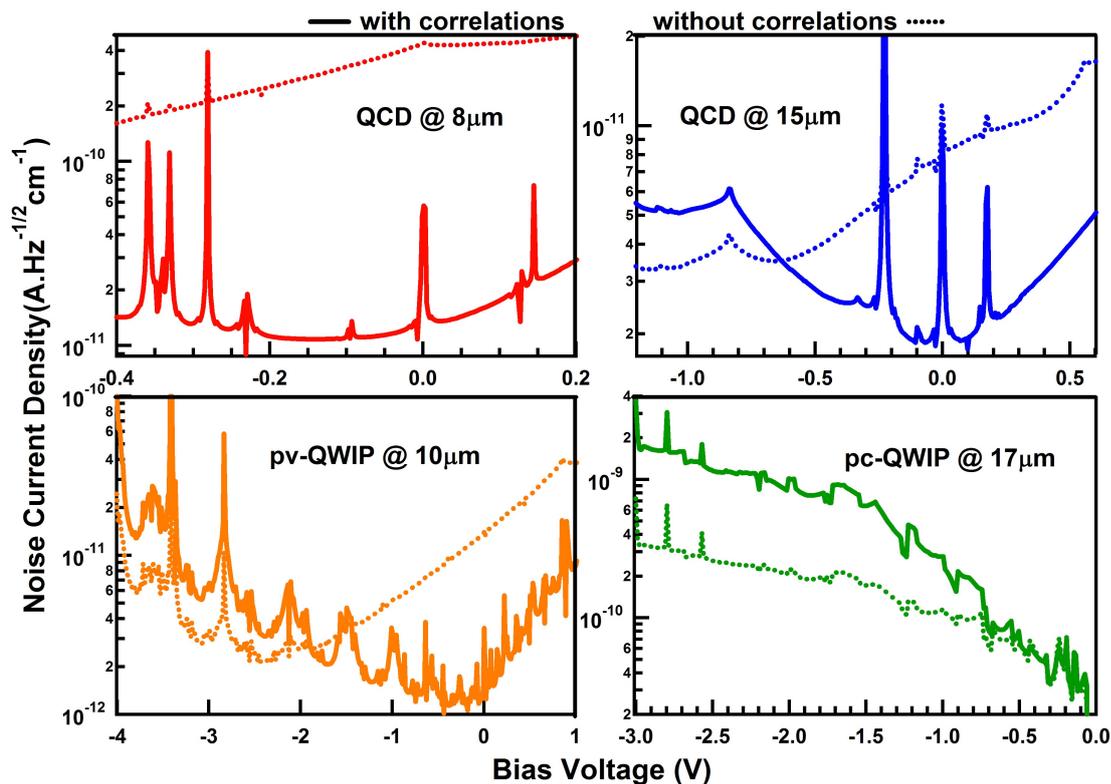


FIGURE 4.18 – Densités de courant de bruit avec corrélations réduites (traits pleins) ou sans corrélations réduites (pointillés). A faible tension les corrélations ont tendance à réduire le bruit, alors qu'à forte tension elles amplifient les fluctuations.

car les niveaux 3D ne sont pas localisés sur une période et ne peuvent pas anticroiser. Dans ce cas, le bruit numérique correspond à la fluctuation du nombre d'états dans le continuum entre deux points de tension. Les trois pics en dessous de $-2.5V$ correspondent au début du peigne de résonances entre le niveau fondamental du puits et ceux du continuum. L'échantillon étant très résistif, il est impossible de savoir si la valeur Johnson est bien retrouvée à tension nulle. En dehors de l'équilibre, le bruit est toujours aussi bien calculé que le courant ¹³.

Cette théorie a une vertu supplémentaire. L'analyse des effets des corrélations va jeter une lumière nouvelle sur la distinction entre comportements photovoltaïque et photoconducteur.

4.3 Effet des corrélations

Dans l'expression (4.47) de la densité spectrale de bruit, on pourrait s'attendre à ce que les corrélateurs réduits $G_{ij,kl}(\omega)$ soient négligeables, dans la mesure où

13. La plage $-2V - 3V$ sur la mesure à 65K semble contredire cette assertion. Le courant y est calculé avec une meilleure précision que le bruit, pour lequel la valeur expérimentale excède la prédiction théorique. Cependant cette plage correspond à une zone de doute sur la validité de la mesure. On retrouve un même comportement pour les tensions positives à 90K sur le QCD @ $8 \mu m$ et à 60K sur le QCD @ $15 \mu m$. Dans ces cas, le bruit est surpoissonien, ce qui est très étrange dans notre compréhension du transport. Dans la mesure où cet écart apparaît pour les fortes valeurs de courant, nous supposons sans pouvoir réellement le démontrer que la contribution supplémentaire est générée par la source de tension, comme évoqué précédemment.

on travaille avec des particules classiques, *ie* sans interaction. Il ne faut pas se tromper d'interprétation; ces termes ne décrivent pas directement les corrélations entre électrons, mais entre les transferts électroniques. Ils caractérisent comment une perturbation de l'état stationnaire impacte le transport électronique aux temps ultérieurs. En guise d'illustration, étudions les corrélateurs $h_{ij,kl}(t) = \langle n_i \rangle_0 \Gamma_{ij} + g_{ij,kl}(t)$ pour un système modèle à deux niveaux, où la dynamique du niveau 2 le moins peuplé contrôle le transport électronique, et le niveau 1 agit comme un réservoir ($1 \ll n_2 \ll n_1 \approx N$). Pour mémoire, $h_{ij,kl}(t)$ représente le taux moyen de sauts ij étant donné un saut kl à l'instant initial. En utilisant l'équation (4.54), il vient :

$$\begin{aligned}
 h_{12,12}(t) &= \langle n_1 \rangle_0 \Gamma_{12} \left(1 - \frac{n_2}{N^2} e^{-t/\tau_2} \right) \\
 h_{12,21}(t) &= \langle n_1 \rangle_0 \Gamma_{12} \left(1 + \frac{n_2}{N^2} e^{-t/\tau_2} \right) \\
 h_{21,12}(t) &= \langle n_2 \rangle_0 \Gamma_{21} \left(1 + \frac{1}{n_2} e^{-t/\tau_2} \right) \\
 h_{21,21}(t) &= \langle n_2 \rangle_0 \Gamma_{21} \left(1 - \frac{1}{n_2} e^{-t/\tau_2} \right)
 \end{aligned} \tag{4.56}$$

Si à l'instant initial un niveau donné bénéficie du saut d'un électron, le courant hors de ce niveau va augmenter par rapport à sa valeur moyenne. A l'inverse un courant sortant réduit va résulter d'une déplétion initiale. Les corrélateurs réduits décrivent donc d'une part l'amplitude de la perturbation, qui tient compte des rapports des populations, et d'autre part de la rapidité de retour à l'état stationnaire, donnée par les temps de vie intersousbandes. Pour plus de détail dans le cas unidimensionnel, voir la référence [176].

La figure 4.18 montre la différence entre les bruits calculés avec et sans les corrélateurs réduits $G_{ij,kl}(\omega)$. Contrairement à ce que l'on pourrait imaginer, les corrélations telles que nous les avons définies ne réduisent pas toujours le bruit, mais peuvent au contraire l'amplifier. Ceci est dû au fait qu'elles portent sur les sauts des particules classiques, et peut se comprendre par la considération suivante. Près de l'équilibre thermodynamique, les courants inter-sousbandes sont symétriques : les contributions ij sont comparables aux courants ji . Ainsi, un saut ij va immédiatement augmenter le flux réciproque, et le système ne va pas pouvoir explorer des configurations de populations trop éloignées de la moyenne stationnaire, d'où un bruit plus faible. L'effet est inversé loin de l'équilibre quand les flux sont plus asymétriques. Les corrélations tendent alors à propager les fluctuations. Prenons l'exemple où les électrons d'un niveau i diffusent majoritairement vers un niveau j , puis de j vers k . Un saut excédentaire de i vers j par rapport au courant moyen ij sera directement répercuté dans une augmentation du courant jk . Tout se passe comme si la variation de potentiel induite dans les contacts par l'électron supplémentaire correspondait au transfert ballistique d'une charge de $\alpha_{ik}e$ et non plus $\alpha_{ij}e$.

Le point de tension où les courbes avec et sans corrélateurs se croisent peut être considéré comme le pivot entre les comportements photovoltaïque et photoconducteur. Près de l'équilibre, les courants sont symétriques et la vision comme bruit thermique domine. Plus loin de l'équilibre, les flux de particules sont plus directionnels, et la description shot devient prépondérante. Notons que sur les QWIPs photovoltaïques, la tension de $-2V$ correspond à la fois au moment où le régime

change pour devenir de type photoconducteur, et au décrochage de 1 de la probabilité de capture dans le cadre du modèle de Beck. C'est le moment où les électrons commencent à se propager d'une période à l'autre sans être recapturés, mais en passant par effet tunnel à travers les barrières AAs.

Conclusion

L'analyse de cinq détecteurs inter-sousbandes opérant dans des gammes de longueur d'onde, de température et de tension différentes a démontré la qualité de l'approche du bruit par la résolution de l'équation maîtresse. Cette démarche, cohérente avec la vision de hopping inter-sousbandes, développe une description unifiée du bruit dit Johnson et du bruit dit shot, et va au delà de leur simple addition incohérente. Ces sources de fluctuations ne sont pas indépendantes, mais bien deux facettes, deux expressions limites d'un phénomène plus général. En se fondant sur des paramètres nominaux, dès que le courant (*ie* la matrice de diffusion \mathcal{L}) est calculé avec une précision quantitative, le bruit théorique décrit avec la même acuité la mesure près et loin de l'équilibre thermodynamique.

Relisons un instant ces résultats à l'aune de notre cahier des charges. Nous nous sommes affranchis du théorème de Nyquist pour développer une vision unifiée des bruits thermique et de grenaille. Nous avons développé une démarche "bottom-up" cohérente avec la description microscopique du transport dans les hétéro-structures. L'emploi du théorème de Ramo-Shockley permet un changement d'échelle rigoureux en s'affranchissant de l'introduction d'un gain de bruit. Pour les QWIPs, la délocalisation des électrodes fait disparaître l'impact de la probabilité de capture. Le bruit dans les détecteurs inter-sousbandes qui demeurerait principalement une quantité mesurée, devient une grandeur calculable *a priori*.

Il convient avant de clore cette partie d'analyser les restrictions et améliorations potentielles de la théorie. Tout d'abord seules les conditions d'obscurité ont été étudiées. Néanmoins il est peu coûteux d'inclure dans le modèle les diffusions assistées par photons, dans la mesure où un seul terme sera ajouté dans le calcul de la matrice \mathcal{L} . L'emploi des conditions de bord périodiques est plus problématique : il est bien connu que dans les QWIPs les inhomogénéités du champ électrique sont accentuées par les flux optiques [67, 71, 194]. Il est cependant envisageable, une fois calculée la totalité des caractéristiques courant-bruit vs tension pour chaque période en représentation périodique, d'inclure ces objets dans des solveurs inhomogènes plus généraux. Cet arsenal numérique très lourd n'est toutefois pas nécessaire pour les composants photovoltaïques tels que le QCD, car dans ce cas l'approximation homogène est robuste jusqu'à des flux de photons très élevés.

L'approximation des sousbandes thermalisées est plus restrictive. En effet la dichotomie entre les temps caractéristiques du transport intra-sousbande et ceux du transport inter-sousbandes, bien vérifiée dans l'infrarouge moyen (le rapport est au moins de 1 pour 10), se réduit à mesure que la température diminue et que les phénomènes cohérents prennent relativement de l'ampleur. Une approche complète en matrice densité serait plus appropriée dans les dispositifs THz. Notons que le bruit dans les systèmes cohérents est un domaine beaucoup plus défriché que celui que nous avons exploré jusqu'ici [175].

De même lorsque le nombre d'électrons mis en jeu diminue, par exemple dans les détecteurs à boîtes quantiques, l'hypothèse des sousbandes thermalisées n'est

plus forcément valide. Ces systèmes sont néanmoins composés de deux éléments conceptuels : la zone de détection formée par les boîtes quantiques, et un extracteur qui lui est soit une cascade, soit le continuum au dessus des barrières. Ainsi notre approche constitue une des deux briques formelles pour une théorie complète du bruit dans les QDIPs. En prenant deux sousbandes comme contacts de la zone de détection, il suffirait d'intégrer une des nombreuses approches développées par les mésoscopistes pour décrire le bruit dans des boîtes quantiques [216,223] pour obtenir un modèle complet.

Le comportement fréquentiel n'a pas été détaillé dans cette étude, car il est restreint à un bruit blanc à basse fréquence, puis en $1/f^2$ au delà de toutes les fréquences de coupure inter-sousbandes. On pourrait aller au delà et tâcher de prendre en compte les effets électrons-électrons. Ces interactions à N corps à longue distance sortent du cadre de ce modèle d'électrons indépendants. Elles sont connues pour modifier la densité spectrale de bruit à haute fréquence [175, 224].

Enfin, reconnaissons que le modèle développé dans cette partie est complexe et ne donne pas forcément d'intuition physique simple : il est efficace, mais c'est une boîte noire. Le très grand nombre de corrélateurs intervenant dans la formule (4.55) rend l'analyse fine des sources de bruit prohibitive, et il est difficile d'en tirer des enseignements relatifs à l'amélioration des performances des dispositifs. Cependant, le succès de l'emploi des particules classiques¹⁴ va poser les jalons théoriques vers une seconde description du bruit, plus effective et plus efficace.

5 Circuit électrique équivalent

5.1 Théorie

Il est intéressant de mettre en perspective la formule du bruit classique obtenue à l'équation (4.47), sans les termes de corrélations, avec la formule de Rose (4.14)

$$\begin{aligned}
 S_I &= 2e^2 \sum_{i,j} \alpha_{ij}^2 \langle w_{ij} \rangle_0 \\
 S_I &= \sum_n 2F_n^2 \alpha_n
 \end{aligned}
 \tag{4.57}$$

Ainsi le facteur de grandissement F_n est équivalent à la charge effective $e\alpha_{ij}$ donnée par le théorème de Ramo-Shockley. Plus important, la source microscopique de bruit α_n est le courant inter-sousbandes $\langle w_{ij} \rangle_0$. Comme montré précédemment, il est fructueux de voir un détecteur inter-sousbandes comme une assemblée périodique de réservoirs échangeant des particules classiques. Le processus microscopique générant le bruit est la diffusion aléatoire des électrons entre ces réservoirs. Chaque transition inter-sousbandes peut être vue comme deux diodes à vide montées tête-bêche et émettant des électrons suivant des distributions poissonniennes dont les valeurs moyennes sont les courants stationnaires. Elle génère donc localement une densité spectrale de bruit shot $2e(|J_{ij}^0| + |J_{ji}^0|)$. Les sousbandes jouent le rôle des électrodes [75]. Nous avons changé de notation et J_{ij}^0 correspond à la densité de

¹⁴. Fondé en grande partie sur l'efficacité de l'emploi de la statistique Maxwell-Boltzmann détaillée au chapitre 2.

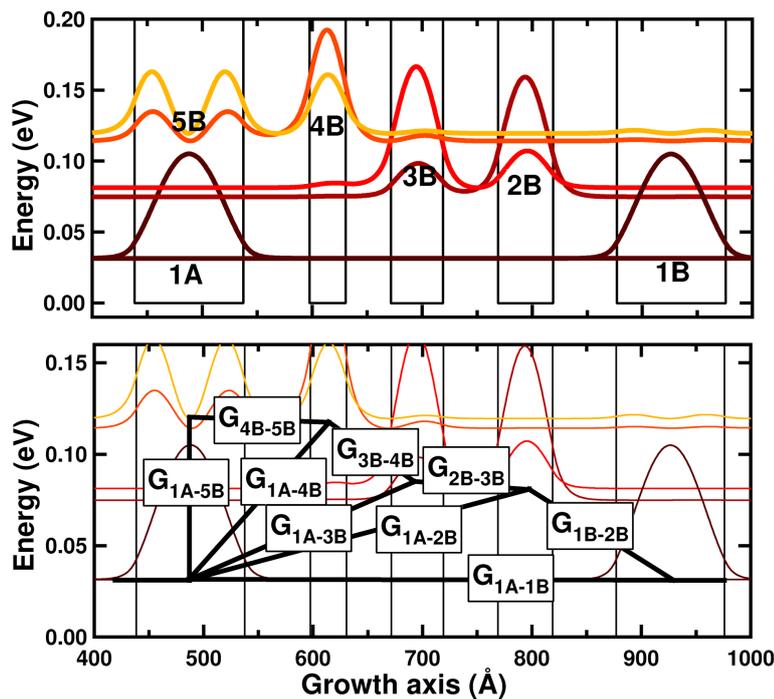


FIGURE 4.19 – Circuit électrique équivalent en terme de bruit à une période du QCD@ 15 μm . Les niveaux fondamentaux des cascades **1A** et **1B** agissent comme les contacts de la période entre lesquels la conductance équivalente est calculée.

courant moyenne de la sousbande i à la sousbande j dans l'état stationnaire, précédemment notée $e \langle w_{ij} \rangle_0$.

Une fois la source microscopique identifiée, il reste à introduire de façon rigoureuse un facteur de grandissement qui permettra le changement d'échelle. Des intuitions précoces de la démarche simple que nous allons déployer ont été proposées dès 1937, pointant le fait qu'une résistance linéaire pouvait être construite à partir de deux diodes thermo-ioniques montées tête-bêche [209, 210]. Cette démarche est inspirée par l'utilisation du théorème de Ramo-Shockley en termes de capacités. Pour quantifier l'impact dans le circuit extérieur de chaque source locale de bruit, nous allons transformer l'assemblée des sousbandes en un circuit équivalent en terme de bruit grâce à un double emploi formel du théorème de Nyquist.

La démarche est illustrée pour une période d'un QCD@ 15 μm sur la figure 4.19. La première étape est de substituer chaque transition $i \leftrightarrow j$ par une conductance G_{ij} (ou une résistance), qui générerait un bruit Johnson équivalent à la somme des deux bruits poissonniens.

$$G_{ij} = \frac{2e (|J_{ij}^0| + |J_{ji}^0|)}{4k_b T} \quad (4.58)$$

Si des conductances seules ne donnent accès qu'au bruit statique, les comportements fréquentiels peuvent être modélisés en utilisant des capacités et des inductances. En prenant en compte toutes les transitions possibles, on obtient un circuit équivalent en terme de bruit de toute la structure. Chaque noeud du circuit correspond à une sousbande. Dans ce circuit complexe la plupart des résistances sont nulles, dans la mesure où les transitions inter-sousbandes sont en général significatives seulement entre périodes adjacentes, et l'approximation de plus proches voisins

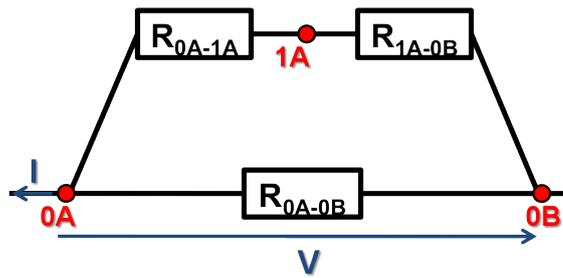


FIGURE 4.20 – Circuit électrique équivalent d'une structure à deux niveaux par période. Noter que le courant I est celui qui passe par les contacts $0A$ et $0B$.

les sur-diagonaux et sous-diagonaux respectivement. Ces matrices correspondent au système d'équation-bilan sur les populations des sousbandes : chaque ligne correspondant au bilan local sur un niveau particulier.

En multipliant par les populations moyennes stationnaires, on obtient la matrice des courants, puis grâce au théorème de Nyquist (4.58) la matrice symétrique des conductances équivalentes de bruit. Cette matrice correspond à l'application de la loi de Kirchhoff sur chacun des noeuds (*ie* sur chacune des sousbandes du circuit de bruit), avec comme inconnues les potentiels associés. De la même manière que précédemment le système n'est pas univalué (il y a une valeur propre nulle), et il faut donc imposer une équation supplémentaire : la tension entre α et Ω doit être celle imposée expérimentalement. Ce système résolu donne la conductance équivalente G_{tot} et donc le bruit. Par exemple pour le circuit à deux niveaux par périodes représenté sur la figure 4.20, avec une tension nulle sur le contact $0A$:

$$\begin{pmatrix} -G_{0A-1A} & -G_{0A-0B} \\ G_{0A-1A} + G_{1A-0B} & -G_{1A-0B} \\ -G_{1A-0B} & G_{0A-0B} + G_{1A-0B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V_{1A} \\ V \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I \\ 0 \\ -I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{tot}V \\ 0 \\ -G_{tot}V \end{pmatrix} \quad (4.63)$$

Nous allons dans la suite appliquer ce modèle aux différents détecteurs inter-sousbandes, constater qu'il est beaucoup plus éclairant en terme de comportement, et plus utile à l'optimisation des performances.

5.2 Application aux QCDs

Validation

Traisons d'abord le cas simple où les sous-circuits correspondants à chacune des périodes peuvent être mis en série. Pour ce faire, il doit exister sur chaque période une sousbande par laquelle passe tout le courant, et qui peut être définie comme le point de potentiel de jonction entre deux éléments successifs de la série. Pour les dispositifs inter-sousbandes photovoltaïques (QCD et pv-QWIP) où la probabilité de capture vaut 1, ce rôle est très bien joué par le niveau fondamental de la transition optique. Ces sousbandes ont en outre la vertu de contenir la quasi-totalité des électrons, et de bien décorrélérer les fluctuations des périodes adjacentes. Il suffit alors de calculer la conductance équivalente en terme de bruit de chaque période G_{per} comme montré en exemple sur la figure 4.19. Si on néglige les effets de bord (ce qui est valide car $N_p \gg 1$), cette dernière vaut alors N_p fois la conductance équivalente en terme de bruit de l'échantillon complet.

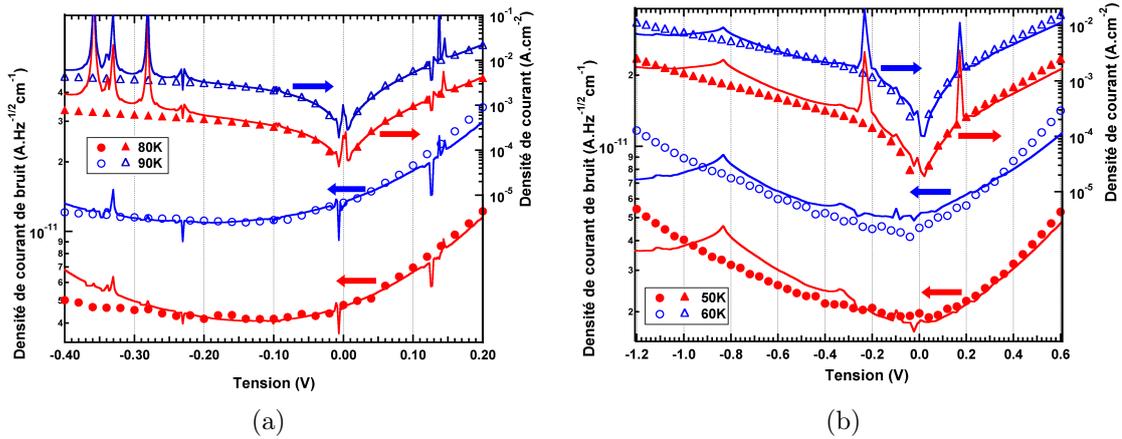


FIGURE 4.21 – Comparaison entre le modèle de circuit équivalent (traits pleins) et l'expérience (points) pour le QCD @ 8 μm (a) et le QCD @ 15 μm (b). Sur chaque figure, en haut-à droite : courant d'obscurité. En bas-à gauche : densités de courant de bruit d'obscurité correspondantes.

Les comparaisons entre théorie et expérience sont montrées sur la figure 4.21 pour le QCD @ 8 μm , et le QCD @ 15 μm . De même qu'à la section précédente, seule la température est ajustée à moins de 2K autour de la valeur de la sonde, tous les autres paramètres du modèle sont nominaux. Le modèle en base étendue a aussi été utilisé, afin que les pics d'anti-croisements soient des étalons des erreurs introduites.

La différence majoritaire avec le modèle Ramo-Shockley provient de la représentation des fonctions d'ondes : nous sommes passés de conditions de bord périodiques à une représentation à deux contacts qui encadrent la structure. Tous les anti-croisements inter-périodiques sont supprimés *de facto*, puisqu'on suppose alors que tout le courant passe par les niveaux fondamentaux des transitions optiques.

L'accord entre calculs et mesures semble plus précis sur une gamme de tension plus élevée. Il convient néanmoins d'être prudent, on ne peut a priori pas être plus précis que le calcul de courant. Prenons par exemple la courbe de bruit à 90K pour le QCD @ 8 μm sur la figure 4.21. Dans la gamme de -0.4V à -0.2V , l'accord semble être meilleur que pour le courant. Cela provient du fait qu'en réalité deux erreurs se compensent : le courant est sur-évalué, notamment à cause des phénomènes d'anticroisements inter-périodes, qui sont négligés lors du calcul du bruit. Ne nous y trompons pas, nous n'avons rien gagné car en toute généralité ces deux erreurs pourraient s'additionner.

Sans redonner tous les détails, rappelons les conclusions de la section précédente qui sont encore valables ici. Une vision simple et unifiée des bruits thermique et de grenaille dans les détecteurs inter-sousbandes a été proposée. Les transitions aléatoires inter-niveaux quantiques sont des sources microscopiques de bruit poissonien, équivalentes à des diodes à vide montées tête-bêche. Nous avons utilisé le théorème de Nyquist dans le cadre d'une démarche "bottom-up" formelle aboutissant à l'introduction rigoureuse du facteur de grandissement grâce au circuit équivalent de bruit. Encore une fois la capacité de prédiction du bruit devient quantitative.

La seule approximation supplémentaire introduite par rapport au modèle de courant est le passage à la représentation en série de N_p périodes, séparées par des

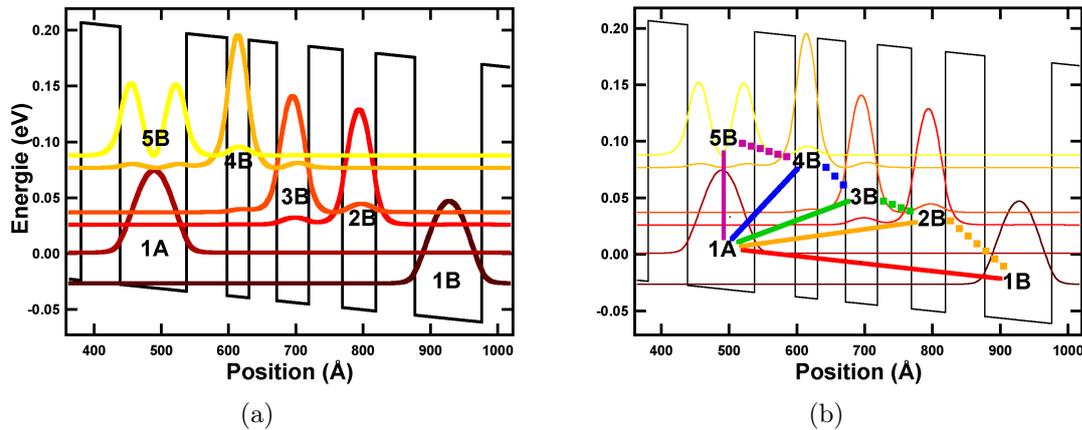


FIGURE 4.22 – (a) : Structure de bande du QCD @ $15 \mu m$ pour une tension de $-1.1V$, correspondant au maximum de la réponse spectrale. La forme des fonctions d’ondes 4 et 5 B sera prise comme critère qualitatif d’une bonne réponse pour ce détecteur : 90% de localisation, 10% de recouvrement entre les deux niveaux. (b) : schéma des correspondances couleurs/transitions utilisées dans la suite.

contacts. Le passage de la succession à la série de sous-circuits est permis dès qu’ils sont séparés par un point unique de potentiel. On peut alors restreindre l’étude à un seul sous circuit. Cette représentation, introduite par souci de simplification du modèle, est bien vérifiée pour les détecteurs inter-sousbandes photovoltaïques. Elle n’est néanmoins pas nécessaire puisque la modélisation de la structure totale (électrodes y compris) ne présente aucune difficulté. Cependant le traitement d’une période seule a le mérite de jeter une lumière simple sur la façon d’améliorer les performances des dispositifs¹⁵.

En effet la vision en circuit équivalent de bruit permet de quantifier la part portée par chaque transition inter-sousbandes dans le bruit total. Il suffit de mettre artificiellement la conductance équivalente G_{ij} à zéro, et de soustraire le bruit de la structure ainsi modifiée au bruit de la structure totale pour obtenir une image de l’impact dans le circuit extérieur du bruit créé spécifiquement par la transition ij . Cette grandeur, image de la somme des courants qui passe par chaque transition $|J_{ij}^0| + |J_{ji}^0|$, est à mettre en regard du courant net porté par la même transition $J_{ij}^0 - J_{ji}^0$. La première quantité est liée au bruit, et la seconde est liée au courant, donc à la réponse. Pour optimiser les performances d’un détecteur, il convient donc de réduire le bruit porté par les transitions parasites (par exemple les transitions diagonales inter-cascades dans les QCDs), et d’augmenter l’asymétrie du flux du courant le long du chemin des photo-électrons.

Optimisation

A titre d’exemple nous allons développer cette démarche pour le QCD @ $15 \mu m$, et montrer qu’il est *a priori* possible de multiplier par trois les performances du dispositif dès qu’on est capable de prédire le bruit et d’en comprendre les origines microscopiques. Pour fixer les idées, cet échantillon a été dessiné en 2009 pour une

15. Même si les éléments que nous allons discuter dans la suite sont tout à fait valables pour une modélisation de l’échantillon complet

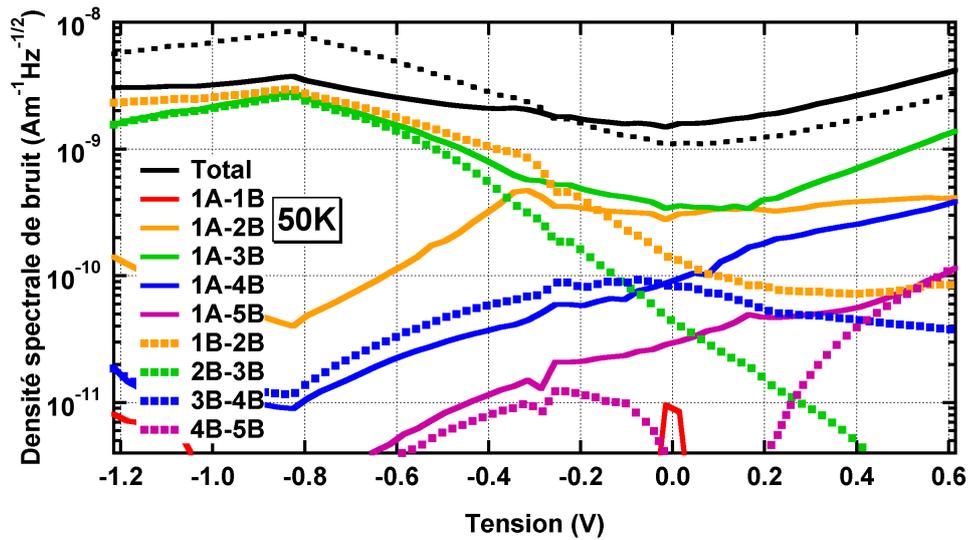


FIGURE 4.23 – QCD @ $15 \mu\text{m}$: Bruit total (noir, trait plein), images des bruits inter-cascade (traits pleins) et des bruits intra-cascade (pointillés) calculées par la méthode du circuit électrique équivalent. Il convient de garder à l'esprit qu'on travaille dans une représentation effective du bruit microscopique : la somme des contributions microscopiques (noir, tirets) ne redonne pas le bruit total, mais en est proche.

tension nominale de -0.6V , correspondant au minimum supposé du bruit dû à l'extinction du bruit de recombinaison. Dans la pratique, le maximum de la réponse est atteint pour une tension de -1.1V ([85] et chapitre 2), et le minimum de bruit se situe vers -0.1V ! Bien qu'il ne soit pas le plus adapté, nous allons continuer à nous placer dans le formalisme en base délocalisée sans prendre en compte les effets de tunnel résonnant, dans la mesure où l'objet d'intérêt de ce chapitre est la modélisation du bruit que nous avons détaillée sans prise en compte des phénomènes cohérents. Une optimisation fondée sur le modèle complet sera proposée dans le chapitre 5.

Dans un premier temps nous allons introduire un critère qualitatif qui va permettre de s'affranchir des questions liées à la réponse spectrale. On va supposer que la réponse est optimale si la forme des fonctions d'onde du niveau haut de la transition optique et du premier niveau de la cascade est similaire à celle calculée pour le maximum expérimental à -1.1V , comme montré sur la figure 4.22.

Il va s'agir ensuite d'analyser l'évolution des bruits créés par chaque transition inter-sousbandes en fonction de la tension montrée sur la figure 4.23. Le but est de se rapprocher au maximum de la situation où l'on n'est limité que par le bruit des transitions utiles : celles qui jalonnent le parcours des photo-électrons. Sur toute la gamme de tension, c'est la transition inter-cascades 1A-3B qui domine. La seconde contribution inter-cascades est la transition 1A-2B. La transition plus verticale 1A-4B et surtout la transition optique 1A-5B (en violet) sont reléguées à plus d'un facteur 3 (resp. 10) à tension nulle. Il est intéressant de voir que ces courbes de bruit nous donnent une représentation assez aisée du chemin parcouru par le courant dans la structure. En deçà de -0.4V , pour traverser la période le courant suit le chemin 1A-3B-2B-1B, qui correspond à l'association en série d'une résistance équivalente de bruit inter-cascades, et deux intra-cascades. Dans ce cas le bruit total est plus faible que la somme des images des bruits de chaque transition. A partir de

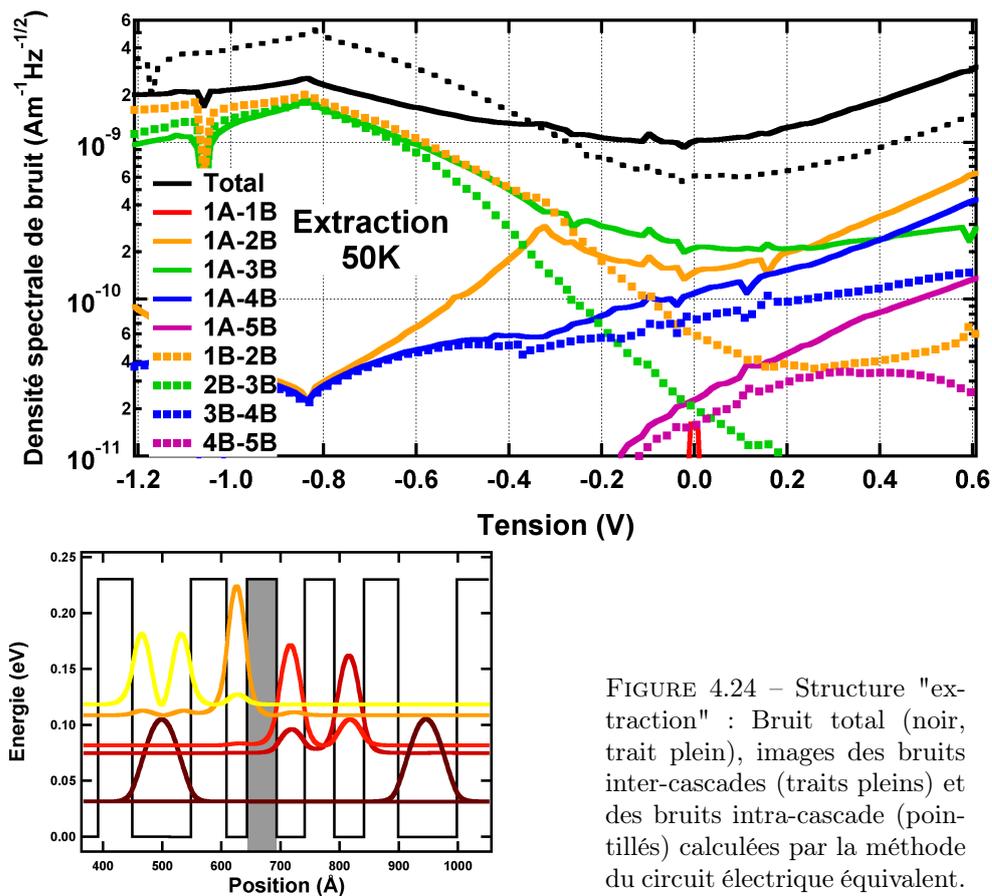


FIGURE 4.24 – Structure "extraction" : Bruit total (noir, trait plein), images des bruits inter-cascades (traits pleins) et des bruits intra-cascade (pointillés) calculées par la méthode du circuit électrique équivalent.

–0.4V et en allant vers les tensions positives, des canaux inter-cascade apparaissent successivement : 1A-2B, 1A-4B et finalement 1A-5B. Le flux du courant correspond plus à une association en parallèle, et le bruit total est supérieur à la somme des contributions individuelles.

Cette structure a été dessinée avec un courant diagonal beaucoup trop important. Il va s'agir de le réduire pour améliorer les performances, notamment en terme de bruit d'obscurité. Deux façons de procéder sont envisagées : éloigner le niveau 3B de 1A en position, ou en énergie. Nous allons dans la suite examiner deux structures émanant de ces deux idées respectivement, qu'on nommera structure "extraction" et structure "mini-bande".

La structure extraction dont les résultats sont présentés sur la figure 4.24, contient deux modifications par rapport à la structure standard. La première consiste en l'élargissement du puits contenant la fonction d'onde 4B de 33 à 35Å, pour découpler 5B et 4B. Cette modification permet de retrouver à 0V l'allure de la structure de bande du puits principal et du premier extracteur à la tension –1.1V de réponse maximale. Pour la seconde, la barrière suivante (grisée) a aussi été élargie de 47.5 à 50Å, pour diminuer le recouvrement de 3B et 1A. L'effet recherché est donc de diminuer le terme $\exp(-\kappa\Delta z)$ de la règle de la patate du chapitre 1.

Si le comportement général est similaire à la structure QCD @ 15 μm , notons qu'à tension nulle on a ramené les contributions 1A-4B et 1A-5B à un facteur 1.5 et 5 respectivement. Le croisement des courbes de bruit total et de somme des contributions qui sépare les régimes de flux série et parallèle du courant, a été repoussé

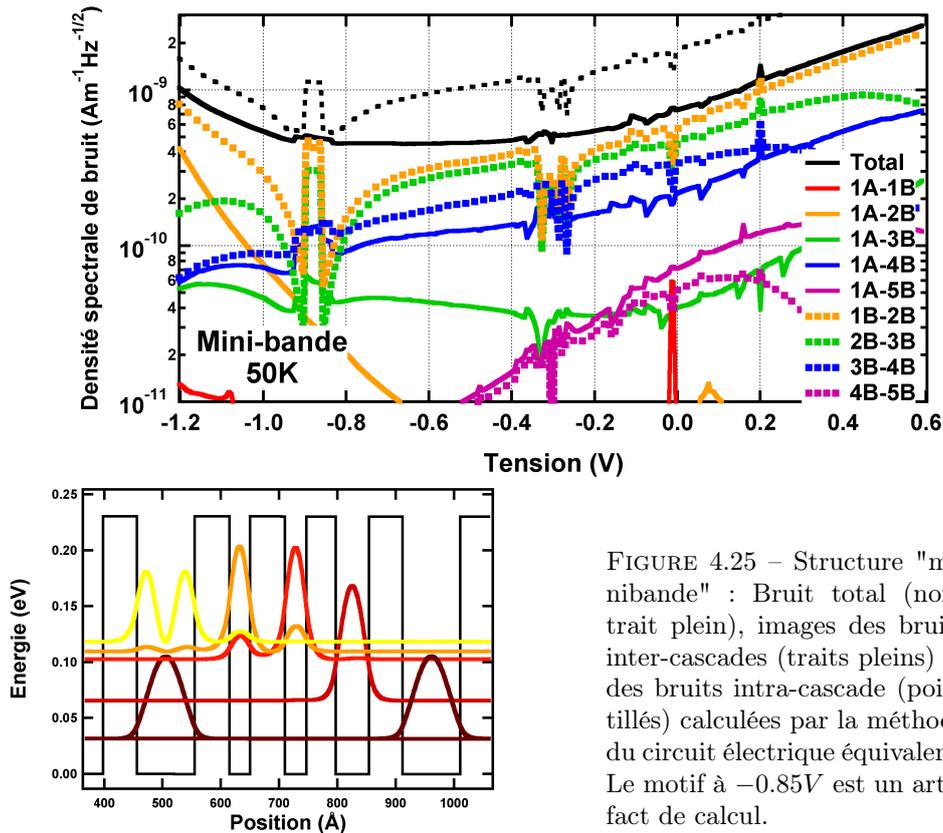


FIGURE 4.25 – Structure "mini-bande" : Bruit total (noir, trait plein), images des bruits inter-cascades (traits pleins) et des bruits intra-cascade (pointillés) calculées par la méthode du circuit électrique équivalent. Le motif à $-0.85V$ est un artefact de calcul.

de $-0.25V$ à $-0.35V$. Ainsi le courant d'obscurité a moins tendance à emprunter le chemin série parasite 1A-3B-2B-1B.

Pour la structure mini-bande¹⁶ montrée sur la figure 4.25, les modifications sont plus importantes. De même que pour la structure extraction, l'élargissement du second puits quantique garantit en principe une bonne extraction, donc un bon photo-courant. Le niveau 3B a été remonté vers les énergies des niveaux 4B et 5B, afin de former une structure d'extraction plus haute en énergie, et profiter des transitions par phonon LO une fois que l'électron est suffisamment éloigné de 1A. La gamme spectrale de $15\mu m$ impose de travailler à basses températures (40-50K), pour lesquelles la patate de la règle éponyme (cf chapitre 1) est aplatie horizontalement. Remonter ce niveau joue donc sur le terme $\exp(-\Delta E/k_B T)$. On peut qualitativement espérer une structure plus performante car le profil de la cascade devient assez similaire aux iso-courants émanant de 1A.

En effet, le calcul montre qu'ici le gain est plus manifeste : c'est désormais la transition 1A-4B qui domine sur l'ensemble de la gamme de tension, et la transition optique 1A-5B arrive en seconde position au dessus de $-0.2V$! Un nouveau chemin série domine, très proche de celui des photo-électrons : 1A-4B-3B-2B-1B. Une dernière remarque, d'ordre numérique : la simulation de cette structure présente beaucoup plus de difficultés numériques que les précédentes. En effet le programme METIS perd beaucoup de sa robustesse lorsque des niveaux proches en énergie peuvent anticroiser, comme nous l'avons vu pour les pv-QWIPs (auxquels cette structure commence à beaucoup ressembler...).

16. L'appellation n'est pas à comprendre ici au sens littéral, mais sert à donner à voir la structure

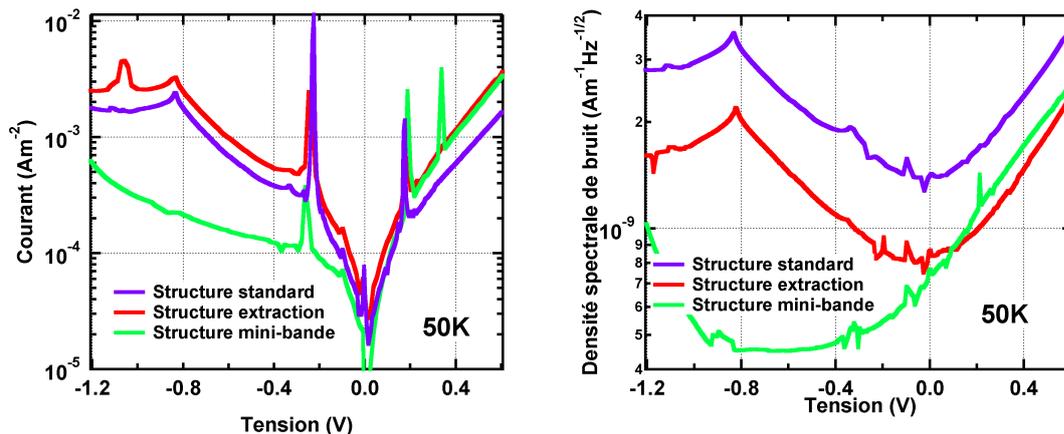


FIGURE 4.26 – Comparaison des calculs de courant et de bruit en modèle Nyquist pour les structures QCD @ 15 μm : l'échantillon de référence (violet), et les deux structures optimisées (rouge et vert).

La figure 4.26 compare les calculs du courant et du bruit d'obscurité pour les trois structures étudiées. Par rapport à la référence, la structure extraction permet de réduire le bruit d'un facteur 1.7 à 0V, la structure minibande d'un facteur 2, avec un minimum absolu correspondant à une réduction d'un facteur 3.2. Ce gain sur le bruit s'accompagne d'une faible réduction du courant en polarisation positive, qui ne doit pas amoindrir les performances, dans la mesure où le courant descend toujours très bien les cascades quantiques (c'est le courant inter-cascades qui a été réduit par l'extinction de la transition diagonale 1A-3B).

En conclusion, par l'étude détaillée des sources de bruit d'un détecteur QCD, nous avons été capables de proposer des échantillons qui devraient faire plus que doubler les performances des dispositifs existants, en jouant uniquement sur le dessin des couches. Autrement dit, outre la mise à disposition d'une méthode rigoureuse de calcul du bruit, l'approche du bruit par circuit électrique équivalent permet de nettement améliorer la compréhension du transport inter-sousbandes. Il est plus facile pour l'ingénieur quantique d'optimiser les performances des dispositifs en mettant directement en perspective réponse spectrale et bruit d'obscurité, plutôt que réponse et courant comme c'était le cas avant ce travail.

Nous ne nous sommes bornés ici qu'à une étude partielle, dans le but d'illustrer en quoi la boîte à outils de l'ingénieur est complétée par notre vision du bruit, plutôt que d'obtenir expérimentalement le meilleur échantillon possible. Pour ce faire, il faudrait déverrouiller d'autres paramètres des structures (dopage, nombre de périodes), faire des études en température... Laissons cela pour le chapitre 5. Il nous reste auparavant à explorer une autre voie ouverte par l'introduction de contacts entre lesquels calculer le bruit dans l'approche de circuit équivalent. Un mouvement cyclique nous ramène au premier problème soulevé dans ce chapitre : le gain de bruit et la probabilité de capture dans les QWIPs.

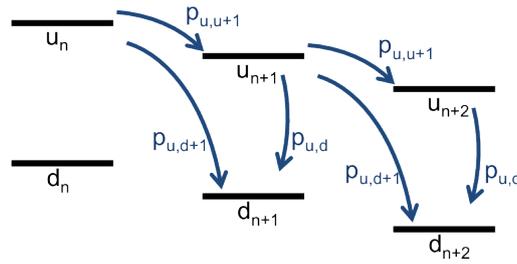


FIGURE 4.27 – Structure QWIP idéalisée avec un niveau lié d_n et un niveau pour le continuum u_n par période. Les probabilités de transfert sont invariantes par translation.

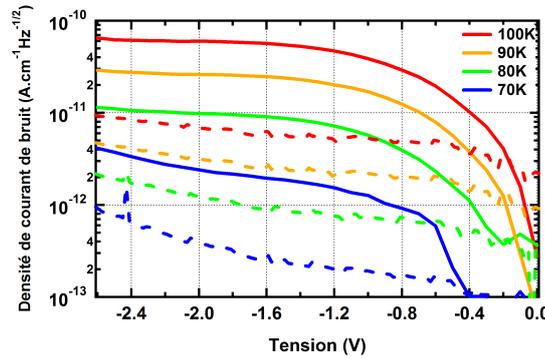


FIGURE 4.28 – Comparaison entre le calcul en circuit équivalent (pointillés) et la densité de courant de bruit d'obscurité expérimentale (traits pleins) pour le QWIP @ $8.35 \mu m$. On illustre l'échec de l'application directe de la démarche en circuit équivalent, dû à l'impossibilité de choisir de bons contacts.

5.3 QWIPs : retour sur le gain de bruit

Une des étapes fondamentales du raisonnement en circuit équivalent de bruit est d'identifier des contacts entre lesquels calculer le bruit. Ces contacts doivent vérifier deux conditions pour que le calcul soit correct.

Ils doivent correspondre à des réservoirs d'électrons, afin d'atténuer efficacement les fluctuations des périodes adjacentes dans le cas d'une mise en série. Cette condition n'est pas nécessairement obligatoire dans la mesure où l'on peut effectuer des calculs multi-périodiques.

La seconde condition est plus critique : l'intégralité du courant doit passer entre ces niveaux. En effet, le système (4.63) tel qu'il est résolu suppose qu'il n'y a pas d'autre terminal au circuit. Ainsi, lorsqu'on force un niveau à devenir un contact, on néglige artificiellement le courant qui pourrait passer par cette période sans interagir avec ce niveau. Dans une modélisation multi-périodique, l'erreur se limite aux bords, car toutes les périodes centrales sont traitées correctement. On peut donc s'attendre à ce qu'un calcul avec un grand nombre de périodes tende vers le résultat expérimental. Tel n'est pas le cas, comme le montre la figure 4.28. En effet, le terme I doit être le courant total qui passe à travers la structure. Sinon, il faut renormaliser la conductance équivalente G_{tot} par la fraction effective du courant qui passe par ce niveau.

Cette seconde condition ramène la probabilité de capture au coeur du problème. En effet, le candidat naturel pour les contacts étant toujours le niveau fondamental

N_p	L_b (Å)	L_w (Å)	ρ (10^{11} cm^{-2})
20	340	49	1.5

TABLE 4.2 – Paramètres de structure du QWIP @ $8.35 \mu\text{m}$ étudié. N_p : nombre de périodes. L_b : largeur des barrières. L_w : largeur des puits. ρ : Dopage en Si pour les puits principaux.

des puits (il vaut mieux éviter de singulariser un niveau du continuum), la fraction sus-mentionnée est précisément p_c . Si l'approche par circuit électrique équivalent de bruit dans les QWIPs n'arrive pas à s'affranchir totalement de cette quantité, nous allons montrer dans cette section qu'elle apporte un éclairage original et récréatif sur ce problème.

En premier lieu, il est possible de calculer p_c directement dans METIS, comme stipulé par *Jovanovic et al* [73]. Cependant ce moyen de calculer la probabilité de capture est relativement fragile, notamment car l'interface entre deux périodes doit être au milieu des barrières pour que la dérivation fonctionne. Il existe une autre façon, plus robuste de calculer cette grandeur lagrangienne dans notre modèle eulerien.

Considérons la figure 4.27, pour un flux d'électrons de gauche à droite. La probabilité de capture est définie comme la probabilité pour un électron dans le continuum u_n et passant dans la période $n + 1$, d'atteindre le niveau lié d_{n+1} sans être passé par le continuum u_{n+2} . On néglige la composante tunnel. Deux chemins sont possibles : soit directement depuis le continuum de la période n , soit en passant par le continuum de la période $n + 1$. Mis en équation, avec les notations de la figure 4.27 :

$$\begin{aligned}
 p_c &= p_{u,u+1}p_{u,d} + p_{u,d+1} \\
 p_{u,u+1} &= \frac{\Gamma_{u,u+1}}{\Gamma_{u,u+1} + \Gamma_{u,d+1}} = 1 - p_{u,d+1} \\
 p_{u,d} &= \frac{\Gamma_{u,d}}{\Gamma_{u,u+1} + \Gamma_{u,d+1} + \Gamma_{u,d}}
 \end{aligned} \tag{4.64}$$

avec Γ_{ij} les courants de particules entre les niveaux (ou assemblée de niveaux) i et j . Pour achever de concilier les approches lagrangienne et eulerienne, la probabilité finale doit être la somme pondérée par les flux totaux respectifs des probabilités de capture associées à la propagation des électrons vers la gauche et vers la droite. Cette définition est plus robuste que celle proposée par *Jovanovic et al*, puisqu'on peut alors mettre l'interface n'importe où entre les deux périodes.

En second lieu, le modèle simple de circuit équivalent multi-périodique permet lui aussi de calculer la probabilité de capture, à la condition que le modèle de Beck soit valide. Nous allons le montrer sur une structure QWIP @ $8.35 \mu\text{m}$, dont les références sont indiquées dans la table 4.2, et pour laquelle le modèle de circuit équivalent ne fonctionne pas, même dans un calcul multi-périodique (cf Fig. 4.28). Cependant on a l'impression qu'en divisant le bruit théorique par p_c on devrait retomber sur la mesure... A noter que le modèle analytique marche parfaitement pour cette structure et retrouve quantitativement la mesure expérimentale sur toute la plage de tension.

Sur la figure 4.29, la dépendance du modèle au nombre de périodes N_p est explicitée. La figure 4.29(b), qui correspond à des tranches verticales dans la figure

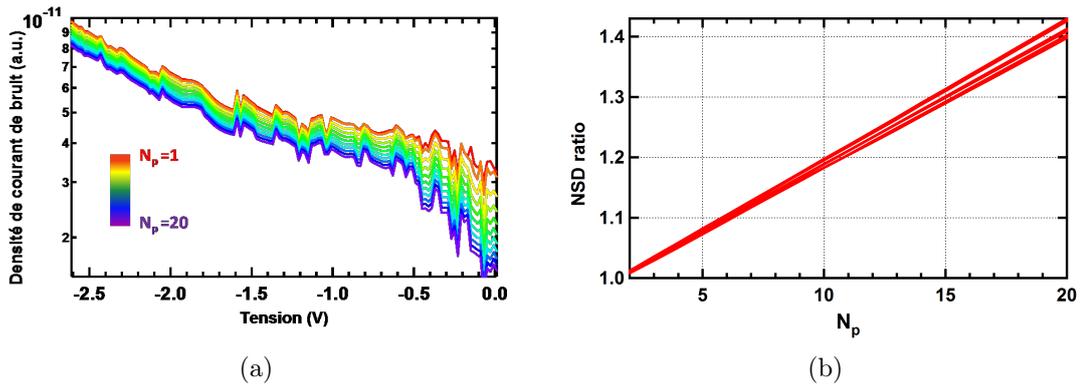


FIGURE 4.29 – Evolution du bruit théorique Nyquist en fonction de la tension et du nombre de périodes. Les ratios de bruits sont calculés en prenant le rapport de la DSB pour N_p périodes par la DSB pour une période. 4.29(a) : Densités de courant de bruit en fonction de la tension calculée pour plusieurs périodes. 4.29(b) : Ratio des densités spectrales de bruit en fonction du nombre de périodes calculés pour plusieurs points de tension.

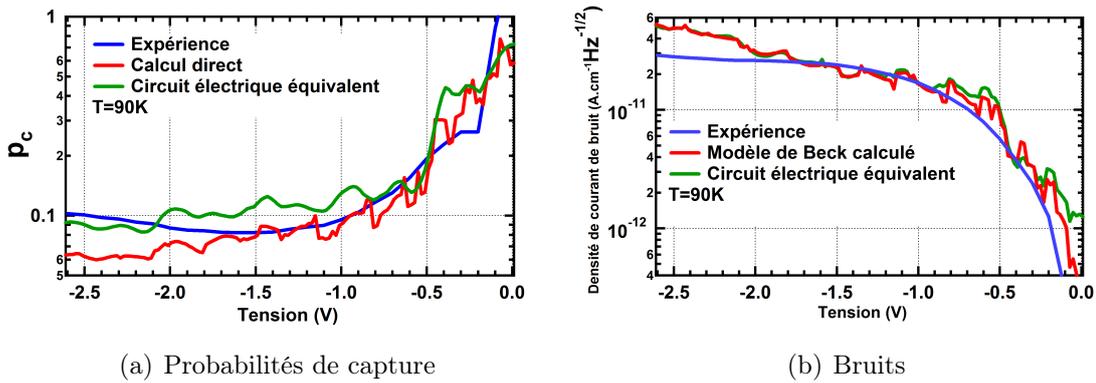


FIGURE 4.30 – QWIP @ $8.35 \mu m$: Comparaison entre l'expérience (bleu), et les modèles de bruit fondés sur la probabilité de capture : le modèle de Nyquist (vert) et le modèle de Beck.

4.29(a), montre que les densités spectrales de bruit sont parfaitement linéaires avec N_p , quelque soit la tension. Le coefficient directeur n'est autre que p_c , comme cela est mis en évidence sur la figure 4.30(a), où on a comparé la probabilité de capture extraite des courbes expérimentales de courant et de bruit, aux prédictions théoriques par le calcul direct ou en utilisant le bruit double Nyquist. L'accord est qualitatif. Enfin, la figure 4.30(b) montre qu'on peut effectivement calculer *a priori* le bruit dans les QWIPs, en utilisant directement le modèle de Beck avec p_c calculée d'après l'équation (4.64), ou en utilisant notre modèle de circuit équivalent.

L'intérêt de l'approche Nyquist pour les QWIPs est limité par le nécessaire choix des contacts, qui impose de réintroduire la probabilité de capture. S'il donne ici les mêmes résultats que le modèle de Beck, il est plus général et peut fonctionner sur d'autres systèmes. Fondcièrement, l'élément manquant est un modèle d'injecteur. Mais il faut alors relaxer l'hypothèse de périodicité du modèle METIS. De plus, dans la mesure où il est difficile de singulariser des états du continuum, le fait que ce modèle puisse mettre en lumière la contribution d'une transition inter-sousbandes défi-

nie dans le bruit total est relativement sans conséquence. S'il est plaisant d'éprouver la relation entre le modèle lagrangien de Beck et notre vision eulerienne, on utilisera préférentiellement le modèle Ramo-Shockley pour ce genre de structures. L'approche Nyquist redeviendra très pertinente lorsque le modèle METIS prendra en compte des contacts sur les bords de la structure.

6 Bilan

Dans ce chapitre le caractère crucial du choix cohérent de la bonne focale pour décrire le transport électronique apparaît très clairement. En effet, l'analyse du bruit dans un dispositif électronique est un parcours semé d'embûches, où les sources de confusion et d'erreur sont diverses et abondantes. Avant de résumer les résultats obtenus dans ce chapitre et d'ouvrir sur les questions en suspens, nous allons dégager une méthodologie générale pour étudier le bruit dans les dispositifs semi-conducteurs¹⁷.

6.1 Méthodologie

La démarche a trois temps, trois critères nécessaires de validité de la vision déployée : identifier les spécificités du montage expérimental, dégager le modèle de transport le plus pertinent et se tenir à ce cadre formel, puis gérer rigoureusement le changement d'échelle.

Spécificité de la mesure expérimentale

Le bruit n'a pour moi de sens que s'il est mesuré expérimentalement. Dans ce cas, il faut identifier la (les) grandeur(s) imposée(s), et celles qui sont libres de fluctuer et que l'on va mesurer, ainsi que les restrictions et artefacts imposés par le banc de caractérisation. Toutes les questions liées à la mesure constituent le coeur du travail de l'expérimentateur. La difficulté est telle que souvent le travail s'arrête à ce point. Le bruit est une grandeur qui ne se laisse pas facilement mesurer. En cas de succès de la mesure, on obtient des DSBs qu'on aimerait séparer en contributions *macroscopiquement* indépendantes.

Dans le cadre de cette thèse, j'ai eu la chance d'avoir des échantillons assez purs pour pouvoir mesurer le bruit blanc dit intrinsèque au régime de transport sans être limité par les bruits "technologiques" en $1/f$. De plus, le banc de caractérisation était suffisamment performant pour mesurer précisément de telles fluctuations.

Identification d'un modèle de transport

Passée l'étape limitante de la mesure, il convient de mettre en regard l'échelle macroscopique du circuit extérieur avec une vision microscopique du transport électronique. Pour ce faire, en reprenant l'analyse du chapitre 2, il faut identifier les échelles caractéristiques mises en jeu, et dégager le modèle de transport le plus pertinent : dérive-diffusion, hydrodynamique, équation de Boltzmann ou matrice densité. Viens la question fondamentale : suis-je capable de décrire *entièrement* les

17. Ce raisonnement s'applique de façon plus générale à toute étude de transport électronique

phénomènes de transport à l'intérieur de ce modèle ? Puis-je expliquer de façon cohérente toutes les contributions macroscopiques dans cette description du mouvement des porteurs de charge ?

La réponse est en général non (cf la discussion associée à la figure 4.9) : dans notre cas l'indépendance microscopique des contributions shot et Johnson est compréhensible, mais ne résiste pas au passage vers l'échelle de la mesure. L'hypothèse de relaxation intra-sousbandes permet de décrire les fluctuations de la distribution des porteurs dans chaque sous-bande comme un bruit thermique, mais celui-ci ne devrait pas être perçu dans le circuit extérieur (puisque'il ne génère directement aucun mouvement des porteurs de charge dans la direction d'épitaxie).

La source des fluctuations est le bruit shot associé aux sauts inter-sousbandes : au niveau microscopique, il faut comptabiliser un bruit poissonien pour chaque transition. Seulement, près de l'équilibre thermodynamique, ces sauts sont précisément rendus possibles par les fluctuations thermiques des sousbandes.

En résumé, l'échelle pertinente de description du transport a deux composantes. Au niveau temporel c'est celle des temps caractéristiques de saut inter-sousbandes, en regard desquels les sousbandes sont considérées comme en quasi-équilibre thermodynamique, d'où une description de type fluctuations thermiques. Au niveau spatial, l'échelle microscopique est celle du confinement quantique, au niveau duquel la description de bruit poissonien a un sens. Cela nous amène naturellement à la troisième question.

Changement d'échelle

Cette étape du raisonnement peut sembler secondaire, mais l'histoire des QWIPs nous apprend à quel point elle est cruciale. Tout l'enjeu est de bien modéliser comment est vue, de l'extérieur, chaque contribution locale au bruit de toute la structure. Nous avons présenté deux méthodes rigoureuses permettant un tel passage : l'utilisation du théorème de Ramo-Schokley, et la représentation par un circuit équivalent de bruit. Ces deux démarches "bottom-up" ont la vertu d'éviter l'introduction d'artificiels gains de bruit et autres confusions d'échelles.

6.2 Résultats pour les détecteurs inter-sousbandes

C'est à notre connaissance la première fois dans des détecteurs inter-sousbandes qu'on présente un calcul du bruit entièrement fondé sur les principes de mécanique quantique, et que la comparaison entre théorie et expérience est d'une précision quantitative sur une telle plage de tension et de température et pour un tel panel de dispositifs. Le bruit devient une grandeur calculable *a priori*, ce qui redistribue les cartes en terme d'ingénierie quantique. Deux nouveaux modèles ont été développés, validés, et mis en regard du modèle standard de Beck [200].

Equation Maître et Théorème de Ramo-Shockley

Deux éléments nouveaux ont permis de calculer le bruit de façon analytique dans le cadre d'un modèle eulerien de hopping inter-sousbandes : la généralisation au formalisme de l'équation maîtresse, et l'emploi du théorème de Ramo-Shockley. En réalisant que les hypothèses de règle d'or de Fermi et de relaxation inter-sousbandes

permettaient de décrire le transport comme un processus de Markov, on a généralisé l'équation-bilan (2.33) en montrant qu'elle n'est que le premier moment de l'équation maîtresse (4.23). Sa résolution partielle a permis d'écrire les corrélations des populations en fonction des valeurs moyennes. Ces corrélations entrent directement dans la formule analytique du bruit dérivée grâce au théorème de Ramo-Shockley :

$$S_I(\omega) = 2e^2 \left\{ \sum_{i,j,k,l} \alpha_{ij} \alpha_{kl} \langle w_{kl} \rangle_0 \left[\delta_{ij,kl} - \Gamma_{ij} \sum_{s=1^r} \mathcal{M}_{is}(\omega) \left(\frac{\langle n_s \rangle_0}{N} - \delta_{l,s} \right) \right] \right\} \quad (4.65)$$

Cette vision est très puissante dans la mesure où elle s'applique à tous les types de détecteurs, prend directement en compte les effets multi-périodiques et l'analyse des corrélations éclaire sur le comportement photovoltaïque ou photoconducteur des dispositifs.

Circuit équivalent de bruit

Le succès du modèle précédent fondé sur une description des électrons comme des particules classiques justifie l'approche par circuit équivalent de bruit, dans laquelle le lien micro-macro se fait simplement par la théorie des circuits linéaires. Cette démarche est performante dès que des contacts peuvent être identifiés à l'intérieur de la structure. De plus, elle facilite l'optimisation des performances dans la mesure où la contribution relative de chaque source microscopique peut être quantifiée macroscopiquement. Moins adaptée pour les QWIPs, elle permet néanmoins d'éprouver le modèle de Beck en revenant de façon détournée sur le gain de bruit.

Indépendance des bruits shot et Johnson

Les deux modèles précédents sont fondés sur une description intrinsèquement shot du bruit, et pourtant redonnent bien la valeur prédite par le théorème de Nyquist à l'équilibre. Que faut-il en conclure de l'indépendance de ces deux bruits ? Ce qui suit dans ce paragraphe est une interprétation personnelle, à considérer comme telle.

Fondamentalement, à l'origine du bruit, il y a la diffusion de charges quantifiées. D'où la nécessité de la deuxième étape dans la méthodologie présentée au dessus : l'identification du cadre formel pertinent pour décrire les diffusions des porteurs de charge. C'est précisément, voir uniquement, dans ce même cadre formel que le bruit sera bien compris. A cette échelle spatiale et temporelle, tout ce qui peut être décrit par un quasi-équilibre est alors bien modélisé par des fluctuations thermiques. Autrement dit, une fluctuation dite "thermique" est la vision thermodynamique, en champ moyen, aux temps longs, "de loin", d'une fluctuation qui, examinée de plus près, aurait tous les atours d'un bruit de grenaille. Le théorème de Nyquist est alors un outil fabuleux pour traiter le bruit dans ce type de régime. Les sources de bruit n'ont pas des natures différentes, mais les fluctuations sont traitées différemment. Et s'il en résulte une apparente indépendance des sources de bruit au niveau microscopique, c'est en fait la conséquence directe d'une partition nette des temps caractéristiques du transport. Sans oublier que lorsque l'on veut passer au niveau macroscopique, le transport est un merveilleux outil de recorrélation de ces contributions.

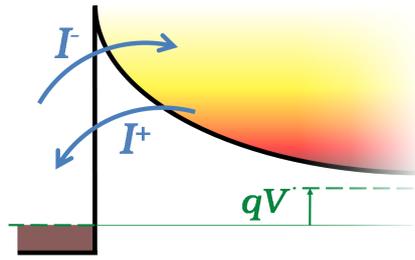


FIGURE 4.31 – Représentation d’une diode Schottky idéale, avec les courants de génération I^- et de recombinaison I^+ . Le dégradé de brun-rouge-jaune est un guide pour évaluer la densité de porteurs

Pour le voir autrement, la formulation shot et la formulation Johnson sont deux expressions limites d’une formulation plus générale, selon la valeur du rapport eV/k_bT . L’illustration la plus claire est donnée par la comparaison des figures 4.9(b) et 4.9(c). Dans le premier cas, $eV/k_bT \gg 1$ et c’est la formulation limite hors équilibre qui est valide. Dans le second, $eV/k_bT \ll 1$ et c’est le théorème de Nyquist, formulation limite d’équilibre, qui est valide. De l’un à l’autre, la nature des fluctuations n’a fondamentalement pas changé, seulement le régime de transport.

En conclusion, bruits Johnson et shot ne sont donc pas indépendants, mais simplement deux visions (temps courts/temps longs, proche/loin de l’équilibre...) d’un seul et même phénomène : la diffusion de porteurs quantifiés. Pour bien modéliser le bruit, il faut trouver la bonne échelle de description du transport, prendre un bruit de grenaille associé à tous les courants microscopiques, et bien gérer le passage à l’échelle macroscopique.

6.3 Perspectives

Avant de clore ce chapitre, mettons en avant certaines des nombreuses questions laissées en suspens, directions de travail qui restent à défricher ou approfondir à l’issue de cette thèse. D’abord en revenant au pur macroscopique : il est encore possible de modéliser crûment le bruit à partir de grandeurs mesurables empiriquement. Puis en essayant de faire plus justice à l’approche par circuit équivalent. Enfin, en abordant les questions de lumière et de cohérence.

Diode idéale

Pour étayer la dernière assertion selon laquelle la bonne façon de modéliser le bruit est de comptabiliser l’impact dans le circuit extérieur du bruit poissonien créé par chaque transition microscopique possible, considérons le cas simple de la diode Schottky idéale sur la figure 4.31. Ce modèle très simple décrit bien les QCDs à haute température [75, 89]. Dans ce cas, le bruit total est directement la contribution poissonienne des courants de génération I^- et de recombinaison I^+ (comptés positivement) : $S_I = 2q(I^+ + I^-)$.

Il est intéressant de voir que les modèles effectifs QWIP d’addition macroscopique de sources de bruits indépendantes, montrés sur la figure 4.8, ajustent quantitativement l’expérience précisément lorsque leur formulation redonne cette contribution !

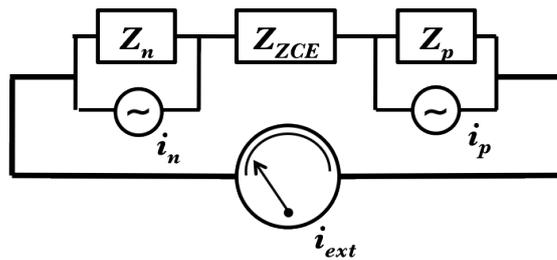


FIGURE 4.32 – Schéma électrique équivalent d'une diode pn. Ici les impédances sont les impédances réelles, et non pas équivalentes de bruit.

Avec R_{eq} la résistance à l'équilibre thermodynamique, et $R_{st} = dI/dV$ sa généralisation dynamique près de l'état stationnaire, les équations sont

$$I = I_0 \left(\exp \frac{qV}{k_B T} - 1 \right) = I^+ - I^- \quad (4.66)$$

$$\begin{aligned} S_I^{eq} &= \frac{4k_b T}{R_{eq}} + 2q|I| \\ &= \begin{cases} 2q(I^+ + I^-) & V > 0 \\ 6qI^- - 2qI^+ & V < 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.67)$$

$$\begin{aligned} S_I^{st} &= \frac{4k_b T}{R_{st}} + 2q|I| \\ &= \begin{cases} 6qI^+ - 2qI^- & V > 0 \\ 2q(I^+ + I^-) & V < 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (4.68)$$

Ainsi, l'addition macroscopiquement d'un bruit Johnson et d'une contribution shot excédentaire demeure valide dès que l'une des contributions (ou plutôt visions) domine largement l'autre, mais aussi lorsque leur addition rend correctement compte des mécanismes microscopiques.

Approche circuit équivalent

L'approche par circuit équivalent dépasse largement le cadre dans lequel nous l'avons employée. Cette démarche générale et puissante, étonamment assez peu répandue dans la littérature [197, 224] est pourtant porteuse de beaucoup d'intuition physique. A titre d'exemple, nous allons utiliser une variante de celle présentée plus haut pour expliquer un résultat qui peut sembler surprenant : dans une diode p-n à l'équilibre, la résistance apparaissant dans le bruit Johnson $4k_b T/R$ est celle (différentielle) de la zone de charge d'espace, qui ne contient de fait aucune charge mobile !

Considérons le schéma électrique 4.32 équivalent d'une diode p-n. Les zones p et n sont le théâtre de mouvement brownien des porteurs de charge, mécanisme qui va générer les fluctuations représentées par les sources de courant de bruit i_n et i_p . Ces fluctuations peuvent être localement décrites par le théorème de Nyquist : $i_n \propto k_B T/Z_n$ avec Z_n l'impédance de la zone n (de même pour i_p). La théorie des circuits linéaires donne

$$i_{ext} = \frac{Z_n}{Z_n + Z_{ZCE} + Z_p} i_n + \frac{Z_p}{Z_n + Z_{ZCE} + Z_p} i_p \quad (4.69)$$

Dans la mesure où $Z_{ZCE} \gg Z_n, Z_p$, on retrouve le résultat $S_I \propto k_B T / Z_{ZCE}$. L'impédance qu'on voit apparaître dans le théorème de Nyquist n'est pas forcément celle correspondant des zones où les charges fluctuent. Pour une discussion plus détaillée sur la diode p-n, voir la référence [225] (non publiée). Nous avons montré sur cet exemple la puissance et la simplicité de cette approche, qui mériterait d'être beaucoup plus massivement utilisée.

Miscellanées

De nombreuses pistes de travail restent encore à explorer. En particulier :

- **Champ inhomogène** : Il est osé de terminer une étude sur le bruit dans les photodétecteurs sans avoir jamais quitté les conditions d'obscurité. Dans le cadre de notre modèle en champ électrique homogène et pour un faible flux, aucune différence formelle n'est introduite par l'allumage de la diffusion assistée par photon. Et l'ensemble des arguments développés au dessus restent valables. Si par contre le champ électrique varie le long de la structure, comme c'est notoire dans les QWIPs sous illumination, c'est l'ensemble du modèle METIS qu'il faudrait implémenter dans un solveur inhomogène. L'intérêt est faible pour les QCDs dans le cadre d'applications d'imagerie dans lesquelles le flux est faible. En revanche, dans des applications de spectroscopie et/ou en optique intégrée, lorsque les flux deviennent suffisamment élevés pour approcher la saturation des détecteurs cette démarche prend tout son sens.
- **Cohérence** : On peut également se poser la question, lorsque le flux est élevé et cohérent, de savoir si le transport et notamment le bruit conservent une information sur la phase. De façon plus générale, nous avons développé nos approches dans le cas d'un modèle purement diffusif donc incohérent. Si l'extension au modèle cohérent détaillé dans le chapitre 2 ne change rien conceptuellement (on renormalise simplement les taux de transitions et on en introduit un nouveau), il en est autrement pour le transport quantique complet en matrice densité. Or des formulations de l'équation maîtresse pour la matrice densité sont disponibles dans la littérature [226–228] et laissent présager une extension possible de notre modèle. La question cruciale pour la cohérence et la propagation de l'information de phase est alors celle de la robustesse de l'hypothèse de Markov : comment se comparent le temps de perte de mémoire due à la diffusion par rapport aux temps caractéristiques du transport cohérent ?
- **Bruit d'intensité dans les QCL** : Est ce que le bruit d'intensité émis dans un QCL pourrait être, dans le même esprit que ce que nous avons fait, exprimé comme

$$NSD_{h\nu} = \frac{2h\nu (I_{stim} + I_{abs})}{N_p} \quad (4.70)$$

avec I_{stim} et I_{abs} les courants particuliers d'émission stimulée et d'absorption et N_p le nombre de périodes. En substance, cette formulation suppose un bruit poissonnien de génération et de recombinaison de photons, et néglige tout effet de corrélation induit par le bain de photons. De plus s'astreindre à ne plus raisonner uniquement en valeur moyenne, et considérer que les populations des états peuvent fluctuer avec une statistique poissonnienne pourrait être fructueux pour l'explication des phénomènes de compétitivité modale.

Chapitre 5

Perspectives pour la filière QCD

L'avenir est à ceux qui se lèvent tôt, surtout le matin.

Anonyme

I hate mornings!

Calvin

Les chapitres précédents ont été consacrés à la compréhension des phénomènes régissant le transport électronique dans les détecteurs à puits quantiques. L'enjeu était de comprendre comment modéliser ces dispositifs, et de quantifier l'impact des différentes visions du transport et approximations relatives. Les questions qu'aborde ce chapitre sont complémentaires, même si elles se fondent sur l'utilisation des savoirs élaborés précédemment : pour quelles applications les QCDs sont-ils des dispositifs pertinents, quelles fonctionnalités permettent-ils d'adresser, et quelles performances peuvent atteindre les structures optimales ? C'est ici le second volet de la définition "comprendre les phénomènes pour les utiliser" du métier de physicien des dispositifs qui est central.

Rappelons les forces et faiblesses de la technologie QCD, pour la grande majorité identiques à la filière QWIP. La maturité des technologies épitaxiales en GaAs et InGaAs assurent une stabilité et reproductibilité des processus de fabrication indispensables à une production industrielle. Pour les imageurs, l'uniformité, l'opérabilité et la stabilité des plans focaux est parmi la meilleure du marché. Le courant d'obscurité peut être nul. Du point de vue du détecteur, le QCD présente trois avantages majeurs : faible bruit, versatilité et vitesse. A noter aussi la possibilité de modéliser ce composant dans un système cohérent et prédictif, permettant une ingénierie quantique efficace. Son inconvénient principal est une faible, voire très faible réponse. La question est donc de trouver les scénarii qui valorisent au maximum les forces, sans être trop sensibles à la faiblesse majeure de la filière QCD.

La première section fait office de synthèse des chapitres précédents. L'exploitation de l'ensemble des résultats obtenus pour la réponse et le bruit permet de dessiner une structure optimale "dans l'absolu" (*ie* sans examiner d'application particulière) opérant à 15 μm . La seconde section présente et utilise un outil décisionnel pour interroger la potentialité de la filière QCD dans des applications d'imagerie. La troisième section ouvre des pistes de réflexion sur de nouvelles fonctionnalités pour lesquelles les QCDs sont des candidats très prometteurs.

1 Nouveau paradigme pour le dessin des QCDs

L'algorithme METIS permet de calculer le signal (réponse) et le bruit d'un détecteur QCD, à partir des principes quantiques, avec une précision qui peut être quantitative. *A minima*, il permet de décrire l'ensemble des caractéristiques électroniques d'un QCD, et donc de dessiner des structures optimisées. Les principales limitations du modèle sont la nécessité d'un champ homogène (et donc la mauvaise description des régimes de RDN), le problème d'articulation entre localisation par diffusion et délocalisation par tunnel des états quantiques, et la nécessaire interaction avec un programme d'électromagnétisme pour connaître le nombre de photons de cavité. Dans cette section, nous allons proposer un nouveau paradigme pour le dessin des QCDs se fondant sur les résultats des chapitres 2 et 4. La gamme spectrale choisie est celle du $15 \mu m$, car c'est celle où la richesse de la physique mise en jeu s'allie avec une certaine simplicité de la structure.

1.1 Idée du dessin

La structure de départ qui va être améliorée est la structure "minibande" introduite en fin de chapitre 4 (cf Fig. 4.25). L'idée principale émane du chapitre 2, et consiste à déplacer les impuretés Si du puits optiquement actif vers le premier puits de la cascade. La raison est quintuple :

Conservation de $5B \rightarrow 4B$. Le processus de diffusion par les impuretés ionisées était utilisé pour faciliter la transition quasi-résonante $5B \rightarrow 4B$ qui sert à extraire vers la cascade les électrons photoexcités. L'élément de matrice correspondant dans la règle d'or de Fermi est proportionnel à l'intégrale de recouvrement des fonctions d'onde $5B$ et $4B$ avec les impuretés ionisées. Ce terme ne change donc que très peu si on déplace les impuretés dans le premier puits de la cascade. On passe de $5B$ significatif et $4B$ faible à $5B$ faible et $4B$ négligeable.

Augmentation de $4B \rightarrow 3B$, pour des raisons similaires. Cela réduit la résistance de la cascade et donc améliore la réponse.

Diminution de $4B \rightarrow 1A$, car l'extension spatiale de $1A$, niveau beaucoup plus profond, est réduite par rapport aux niveaux du haut. Cette transition diagonale étant parasite, cela permet de réduire le bruit et le courant d'obscurité de façon concomitante à l'amélioration de l'extraction des photo-porteurs¹.

Diminution de $5B \rightarrow 1A$. Cette raison est la plus importante. On réduit significativement l'efficacité des transferts $5B \rightarrow 1A$ qui appartiennent au même puits. Pour les probabilités de présence au niveau des impuretés ionisées, on passe en effet de significative/significative à faible/faible. Cela augmente la probabilité pour les électrons photo-excités d'être extraits vers la cascade et donc de participer à la réponse.

Augmentation du temps de vie intra-sousbande dans $5B$. Dans le chapitre 2, dans la mesure où les diffusions intra-sousbande n'étaient jamais calculées, nous nous sommes tenus aux éléments de la littérature, établissant pour les lasers que la largeur de raie optique était déterminée par la rugosité d'interface [106].

1. Noter cependant que ces trois premières raisons, particulièrement pertinentes en vision purement diffusive du transport, sont modérées par la prise en compte des processus tunnel. Ce sont en effet plutôt ces derniers qui contrôlent le transport entre niveaux résonants.

En effet dans les QCLs, la transition optique s’effectue entre des fonctions d’ondes réparties sur plusieurs puits. Dans les QCDs en revanche, notamment à grande longueur d’onde quand le puits principal est large, cette efficacité diminue fortement. De plus, les impuretés donneuses qui sont dans la zone de minibande d’extraction et d’injection dans les QCLs sont ramenées dans le puits principal pour les QCDs. La conjonction de ces deux raisons laisse penser que ce sont plutôt les impuretés ionisées qui limitent la largeur de raie d’absorption dans les QCDs. Ce raisonnement qualitatif est étayé par les résultats de la figure 2.8 du chapitre 2. D’où l’intérêt de réduire cette contribution si on recherche une réponse fine et élevée.

Tous ces gains ont un prix. En effet, sur chaque période les barycentres des charges positives et négatives ne sont plus au même point, et les effets de charge d’espace ne sont plus négligeables. Ils sont décrits par l’équation de Poisson, qui doit donc être prise en compte théoriquement lors du dessin des structures. C’est à mon sens cette raison qui explique pourquoi ce type de structure n’a jamais été tenté, ou réussi et publié à ma connaissance. Le dessin de cette structure va en particulier être l’occasion d’utiliser une partie de l’arsenal METIS que nous avons laissé de côté lors de l’étude du QCD 15 dans le chapitre 2 : impuretés ionisées et résolution de l’équation de Poisson².

1.2 Résultats

La figure 5.1 rassemble les résultats pour les échantillons QCD15 et optimisé. L’analyse des structures de bande montre l’ampleur des modifications induites par le déplacement du dopage. Elle illustre la nécessité d’algorithmes robustes et complets pour optimiser les performances des dispositifs. La structure optimisée respecte beaucoup plus la règle de la patate du chapitre 1. Les gabarits spectraux des réponses (Fig. 5.1(c)) ont été calculés avec le même élargissement Γ_{intra} , et l’augmentation du temps de vie intra-sousbande dans le niveau $5B$ ne peut être vérifiée par ce calcul.

La détectivité de la structure optimisée est deux fois plus grande que celle de la structure standard (cf Fig. 5.1(d)). Cela s’explique à 90% par la diminution du bruit, et à 10% par l’augmentation de la réponse en vertu des arguments ci-dessus. Noter que l’augmentation de $4B \rightarrow 3B$ est plus dictée par le fait que $3B$ a été réhaussé que par le déplacement des impuretés. Il convient de reconnaître qu’il est encore assez difficile de modéliser finement les effets de transport dans la cascade (présence d’anticroisements parasites, par exemple entre $4B$ et $5C$), ce qui plaide pour l’adoption d’un modèle de transport complet en matrice densité. Nous touchons du doigt la différence d’exigences entre un modèle qui permet de calculer une structure donnée, et un modèle performant dans l’absolu.

Le doublement théorique de la détectivité ouvre plusieurs pistes de réflexion. Premièrement, le QCD15 ayant déjà des performances à l’état de l’art autour de $15 \mu m$, l’ouverture de cette marge de progression incite à penser que ce type de structures est très prometteur dans la gamme VLWIR. Deuxièmement, même si la structure de bande optimisée se rapproche de celle d’un QWIP photovoltaïque [222], il ne faut pas en conclure que ce dernier sera nécessairement plus performant. Bien qu’il soit intrinsèquement meilleur en termes d’énergie d’activation, il est moins bon sur l’asymétrie de l’extracteur. La versatilité du dessin QCD permet d’atteindre le point

2. Il manque la statistique de Fermi-Dirac, qui rend l’algorithme trop instable numériquement.

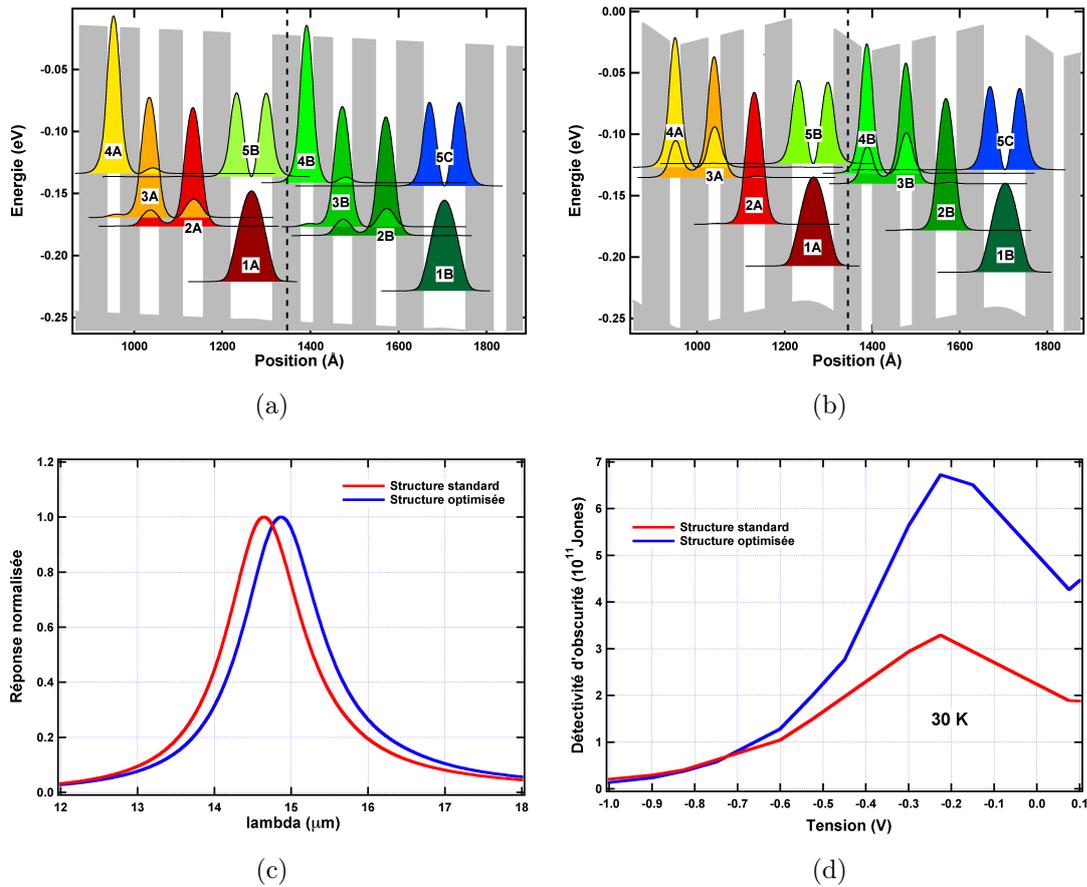


FIGURE 5.1 – (a) Structure de bande du QCD @15 μm étudié aux chapitre 2 et 4. (b) Structure de bande du QCD optimisé. Le trait pointillé identifie la barrière de localisation des fonctions d’ondes. (c) Comparaison des gabarits spectraux. Le QCD15 répond à 14.64 μm , le QCD optimisé à 14.87 μm . (d) Comparaison des détectivités d’obscurité (seul le bruit d’obscurité est pris en compte). Les valeurs absolues atteintes donnent un ordre de grandeur. Les valeurs relatives sont plus pertinentes : on double les performances par rapport à l’existant.

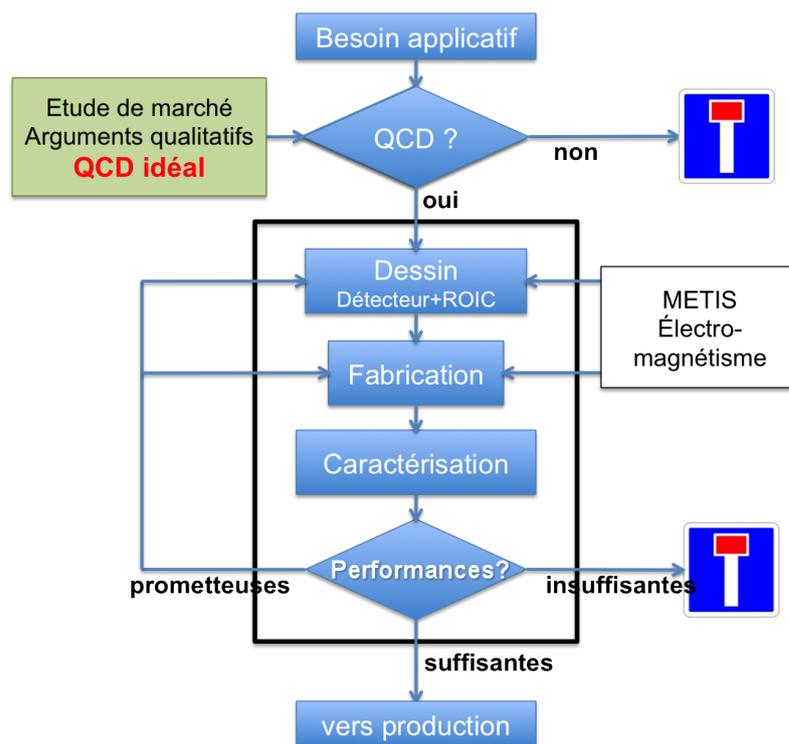


FIGURE 5.2 – Schéma décisionnel de la chaîne d'innovation pour la technologie QCD. En bleu, les étapes de l'élaboration du composant. En vert, les éléments qui orientent la décision. Les modèles METIS et d'électromagnétisme facilitent la recherche d'une structure optimale.

d'optimum, notamment en fonction de l'application choisie. La recontextualisation du détecteur au sein du système imageur est l'objet de la partie suivante.

2 QCD idéal pour l'imagerie, un outil décisionnel

Dans la chaîne de l'innovation, tous les modèles présentés jusqu'ici correspondent à une étape bien précise : le dessin de structures optimales dans le cadre de l'élaboration d'un composant dédié à une application. Le degré de précision et de sophistication de l'algorithme METIS imposent de se focaliser sur un aspect partiel du système complet. Il ne donne pas une réponse d'ensemble à la question des potentialités de la filière QCD pour un besoin applicatif donné.

La figure 5.2 remet en perspective ces éléments dans l'ensemble du processus décisionnel d'élaboration technologique. A partir d'un besoin applicatif, la première question qu'un industriel se pose est de savoir s'il investit pour développer une solution technologique donnée. Ce choix stratégique implique un effort financier et humain important, qui doit se fonder sur le maximum d'éléments possible : études de marchés, arguments qualitatifs issus de son expérience... Le modèle de QCD idéal a pour vocation de fournir des éléments quantitatifs à cette étape amont du processus de développement. L'utilisation de modèles de transport intervient seulement en aval, à partir du moment où la décision de développer un prototype a été prise.

Le but de cette section est de proposer une telle aide à la décision dans le cadre de l'imagerie monospectrale. Elle est fondée sur le modèle du QCD idéal, qui permet

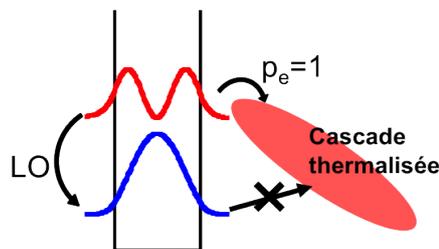


FIGURE 5.3 – Vision idéalisée d’une période QCD. Le puits optique est infini, la cascade parfaitement thermalisée, et les fuites diagonales négligées. Le courant est donc limité par l’émission de phonon LO depuis *up* vers *down*. Dans ces conditions la caractéristique $I(V)$ est celle d’une diode idéale.

d’interroger *a priori* la pertinence de la filière QCD pour une application donnée, et d’orienter la recherche de la structure optimale. La philosophie consiste à simplifier chaque élément du système, dégager les grandes tendances du comportement du composant, et identifier les points critiques de limitation des performances. En particulier, on cherchera à réduire au maximum les paramètres non nominaux (relatifs au dessin de la structure) du modèle.

2.1 Approche théorique

Le modèle du QCD idéal décrit dans un algorithme unique l’ensemble du système imageur : détecteur (aspects électronique et optique), circuit de lecture (ROIC) et scène observée. Il se fonde sur une vision idéalisée du comportement électronique du QCD, et une vision simplifiée du comportement optique, ainsi que du ROIC et de la scène. On décrit la limite supérieure des performances électroniques accessibles pour le détecteur. Cette limite est infranchissable et inatteignable quelque soit la qualité du composant. Si sa valeur est encore trop faible pour l’application visée, il n’est pas utile de considérer la filière QCD pour cette application. Dans le cas contraire, c’est ensuite à METIS de nous permettre de nous approcher le plus possible de cette limite théorique. Le comportement optique du QCD est dicté par l’emploi, classique dans les QWIPS, d’un réseau de diffraction comme mécanisme de couplage. Il est décrit comme une cavité avec pertes couplée au champ incident par le réseau de diffraction, au moyen d’une approche originale fondée sur une analogie Fabry-Pérot. De ce point de vue, la vision n’est pas idéalisée, et une forte amélioration des performances prédites par le modèle est possible en travaillant sur le mécanisme de couplage.

Idéalisation du comportement électronique du détecteur

Une période de QCD peut être vue comme une diode Schottky [75, 89], avec le niveau fondamental *down* de la transition optique jouant le rôle du métal, et la cascade thermalisée jouant le rôle du semiconducteur (cf Fig. 5.3) . Le caractère idéal de cette diode Schottky est garanti dès que les transitions diagonales entre *down* et la cascade adjacente sont négligées, au profit de la seule transition verticale optiquement active, entre *down* et *up*. On suppose de plus que le puits est infini, et seule sa largeur détermine l’énergie de transition donc la longueur d’onde de

détection λ_0 . Les photo-électrons sont extraits vers la période suivante avec une probabilité p_e , qui vaut 1 dans le cas idéal.

Dans le cas d'une cascade thermalisée, le courant d'obscurité suit le même chemin que le courant optique, et est limité par les deux contributions qui traversent la transition *up-down*. Le courant de *up* vers *down*, $J_{up-down}$ est le courant de recombinaison des porteurs minoritaires. Il est dû à l'émission de phonon LO. Il varie exponentiellement avec la tension, puisque le niveau *up* est décrit par une statistique de Maxwell-Boltzmann. Le courant de *down* vers *up*, $J_{down-up}$ est le courant de génération des porteurs minoritaires. Il est constant avec la tension et vaut $J_{up-down}$ à tension nulle. Une fois la réponse spectrale $R(\lambda)$ connue, le courant optique est calculé en fonction de l'émittance spectrale de la scène $E(\lambda)$ comme :

$$J_{photo} = \int d\lambda \frac{R(\lambda)E(\lambda)}{1 + 4ON^2} \quad (5.1)$$

où ON est l'ouverture numérique du système. En vertu des résultats du chapitre 4, la densité spectrale de bruit est donnée par la somme des contributions poissoniennes de ces trois courants :

$$DSB = \frac{2e}{N_p} (|J_{photo}| + |J_{up-down}| + |J_{down-up}|) \quad (5.2)$$

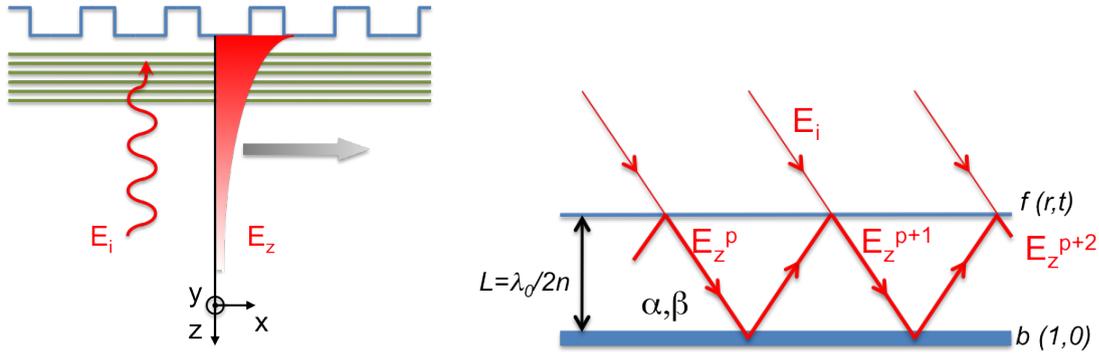
où N_p est le nombre de périodes de la structure. La détectivité du QCD est donnée comme le rapport signal à bruit. A noter qu'elle ne dépend pas exclusivement du détecteur puisque la scène et l'ouverture numérique rentrent en compte dans sa définition, *via* le courant optique.

$$D^*(\lambda) = \frac{R(\lambda)}{\sqrt{DSB}} \quad (5.3)$$

Vision Fabry-Pérot du couplage optique

Le but est ici de calculer analytiquement la réponse spectrale $R(\lambda)$ pour le détecteur en configuration de plan focal. Dans ce cas, les puits quantiques sont transparents au champ en incidence normale E_i (à cause de la règle de sélection inter-sousbandes), et un mécanisme de couplage doit injecter ce champ sur un mode pouvant être absorbé. Le mécanisme de couplage considéré est un réseau de diffraction métallisé [58]. Il possède la périodicité de la longueur d'onde de détection dans le matériau λ_0/n_{opt} , et couple le mode incident sur un mode plasmon-polariton de surface (SPP) évanescents à l'interface métal-diélectrique (cf Fig. 5.4(a))³. Le mode SPP se propage dans la direction x , et est injecté par les courants de surface au niveau des angles du réseau de diffraction, *ie* tous les λ_0/n_{opt} . La distribution du champ plasmon dans la direction z est donnée par $E_z(z) = E_0 \exp(-z/z_0)$, où z_0 est l'extension caractéristique du mode plasmon. On la considère homothétique à la longueur d'onde $z_0 = n_{eff}(\rho)\lambda_0$, où $n_{eff}(\rho)$ est lié à la partie imaginaire de l'indice optique qui dépend du dopage ρ . On a donc modélisé les couches actives comme un

3. Ce mode correspond en fait à une hybridation entre un véritable plasmon contrôlé par la fréquence plasma dans le métal, et un "spoof" plasmon ou mode de Bragg, contrôlé par la géométrie du réseau de diffraction [59].



- (a) Principe du couplage optique : le champ incident E_i est injecté par le réseau de diffraction sur un mode plasmon E_z qui possède une polarisation selon z et se propage le long des couches actives
- (b) Vision équivalente Fabry-Pérot du couplage. Le miroir f joue le rôle des angles du réseau de diffraction, qui couplent les modes *via* les courants de surface. La largeur de la cavité L correspond à la moitié de la période du réseau, et α (resp. β) sont les pertes de la cavité par absorption dans les puits quantiques (dissipation dans le métal). Noter qu'expérimentalement on travaille en incidence normale, l'angle ayant été introduit dans ce modèle pour des raisons de clarté.

FIGURE 5.4

milieu homogène anisotrope, dans lequel la proportion barrière-puits ne dépend ni de la longueur d'onde de détection, ni de la proportion d'Al dans les barrières⁴.

Cette situation est formellement équivalente à une cavité Fabry-Pérot (FP) comprise entre un miroir arrière parfait $b(1,0)$ et un miroir avant $f(r,t)$ jouant le rôle du réseau de diffraction, comme montré sur la figure 5.4(b). Les coefficients de Fresnel satisfont la conservation de l'énergie $r^2 + t^2 = R + T = 1$. Le miroir avant f couple le mode incident E_i au mode FP de cavité E_0 qui représente l'amplitude du mode plasmon au niveau du réseau. La distance $2L$ d'un aller-retour dans la cavité FP doit correspondre à la période du réseau : $L = \lambda_0/2n_{opt}$. Juste après la p -ième réflexion sur le miroir f , la condition de stationnarité du champ de cavité s'écrit :

$$E_0^{p+1} = tE_i + r \underbrace{e^{-\frac{1}{2}(\alpha_L + \beta_L) \frac{\lambda_0}{n_{opt}}}}_a e^{i \frac{2\pi\lambda_0}{\lambda}} E_0^p = E_0^p \quad (5.4)$$

a représente l'atténuation du champ par aller-retour, à cause des pertes utiles par absorption dans les puits quantiques (coefficient linéique α_L), et les pertes ohmiques dans le métal (coefficient linéique β_L). Le terme de déphasage $\phi = 2\pi\lambda_0/\lambda$ représente l'acceptance spectrale de la cavité. En effet, en passant en représentation en pulsation, le développement au premier ordre de ϕ autour du pic de détection permet d'écrire l'amplification du champ dans la cavité comme une lorentzienne :

$$\frac{|E_0|^2}{|E_i|^2} = \frac{T}{\frac{4\pi^2 r a}{\omega_0^2} \left(\Delta\omega^2 + \frac{\omega_0^2}{4\pi^2} \left(\frac{1}{r a} + r a - 2 \right) \right)} \quad (5.5)$$

L'amplification du champ de cavité apparaît dans l'expression de l'efficacité quantique η , définie comme le ratio entre le nombre de photons absorbés dans les

4. Des barrières plus hautes seront plus fines, et ces effets se compensent à l'ordre 0 dans la modification de l'indice moyen.

puits quantiques et le nombre de photons incidents. Elle est égale au taux d'absorption de l'énergie dans les puits divisée par le flux incident par unité de surface S_{xy}

$$\eta = \frac{\int_{z=0}^{\infty} \frac{1}{2} \epsilon |E_z|^2 dz \alpha S_{x,y}}{\frac{1}{2} \epsilon |E_i|^2 \frac{c}{n_{opt}} S_{x,y}} \quad (5.6)$$

$$= \frac{z_0 n \alpha |E_z|^2}{2c |E_i|^2} \quad (5.7)$$

où c est la vitesse de la lumière, et ϵ la permittivité du milieu. Le taux d'absorption de l'énergie dans les puits quantiques est calculé par la règle d'or de Fermi de façon similaire à l'algorithme METIS (voir par exemple Ref. [52]).

$$\alpha = \underbrace{\frac{256 \hbar e^2}{27 \pi^2 \epsilon z_0 m^*} \frac{\omega}{\omega_0} \rho}_{\text{Absorption puits } \infty} \underbrace{\frac{\Gamma_{intra}}{\Gamma_{intra}^2 + \hbar^2 (\omega_0 - \omega)^2}}_{\text{Largeur de raie}} \underbrace{\exp\left(\frac{-2L_c}{z_0}\right) \frac{1 - \exp(-2N_p L_p / z_0)}{1 - \exp(-2L_p / z_0)}}_{\text{Recouvrement du mode plasmon et des puits}} \quad (5.8)$$

$$\alpha_L = \alpha \frac{n_{opt}}{c} \quad (5.9)$$

où l'élargissement Γ_{intra} correspond au temps de vie de la transition optique, limité par la diffusion intra-sousbande. L_p (resp. L_c) est l'épaisseur d'une période (resp. du contact haut). Finalement, la réponse spectrale vaut :

$$R(\omega) = \frac{e \eta p_e}{\hbar \omega N_p} \quad (5.10)$$

Pour le système imageur complet (comprenant notamment les paramètres du ROIC), le reste des calculs jusqu'à la NETD suivent la définition standard [44] une fois tous les courants J_{photo} , $J_{up-down}$, $J_{down-up}$ connus.

2.2 Implémentation numérique

L'ensemble des paramètres introduits ci dessus sont classés par famille et rassemblés dans le tableau 5.1. Ces paramètres correspondent aux entrées d'une interface graphique MATLAB présentée sur la figure 5.5. Ils se classent en trois catégories :

- **Paramètres nominaux.** Ils correspondent au choix de l'utilisateur pour le matériau utilisé, la structure dessinée, le ROIC employé et la scénario d'application envisagé. Parmi ces paramètres, l'effet du dopage ρ et du nombre de périodes N_p est particulièrement bien décrit par ce modèle, et des règles de dessin concernant ces deux quantités seront détaillées plus tard.
- **Paramètres physiques.** Ces quantités représentent les grandeurs physiques que ce modèle simplifié du dispositif n'est pas capable de calculer. Ils doivent être extraits de modèles plus sophistiqués. En particulier on y trouve les coefficients de Fresnel du miroir avant (r, t) , les pertes ohmiques dans le métal β_L , la partie imaginaire de l'indice optique n_{eff} (la méthode de calcul en est présentée dans l'appendice D), et l'élargissement intra-sousbande qui comme dans le chapitre 2 sera déterminé phénoménologiquement, en accord avec la littérature. On s'autorisera à les ajuster finement (de l'ordre de 10%), pour retrouver les valeurs expérimentales.

Paramètre	Grandeur	Nature	Unité
Structure			
λ_0 (ω_0)	Longueur d'onde au pic de détection	nominal	μm (s^{-1})
L_c	Épaisseur du contact	nominal	μm
L_p	Épaisseur d'une période	nominal	μm
N_p	Nombre de périodes	nominal	
ρ	Dopage par puits	nominal	cm^{-2}
n_{opt}	Indice optique (partie réelle)	nominal	
n_{eff}	Indice optique (partie imaginaire)	physique	
Electronique			
T_{sys}	Température du système	nominal	K
p_e	Probabilité d'extraction	nominal	
Γ_{intra}	Elargissement intra-sousbande	physique	meV
α (α_L)	Taux d'absorption (linéique) dans les puits	calculé	s^{-1} (m^{-1})
η	Efficacité quantique	calculé	
Optique			
r, t, R, T	Coefficients de Fresnel du miroir avant	physique	
β (β_L)	Taux (linéique) de pertes ohmiques	physique	s^{-1} (m^{-1})
z_0	Longueur de décroissance plasmon	calculé	μm
ROIC			
C_{ROIC}	Capacité	nominal	Me^{-}
B_{ROIC}	Bruit du ROIC	nominal	V
G_{ROIC}	Gain du ROIC	nominal	V/e^{-}
S_{pixel}	Surface d'un pixel	nominal	$\mu m \times \mu m$
U	Tension de fonctionnement	nominal	V
Scénario			
λ (ω)	Longueur d'onde de détection	nominal	μm (s^{-1})
ON	Ouverture numérique	nominal	
T_{BKG}	Température de scène	nominal	K
T_{MAX}	Température maximale	nominal	K
τ_{int}^{max}	Temps d'intégration maximal	nominal	ms

TABLE 5.1 – Résumé des paramètres introduits dans le modèle de QCD idéal pour l'imagerie

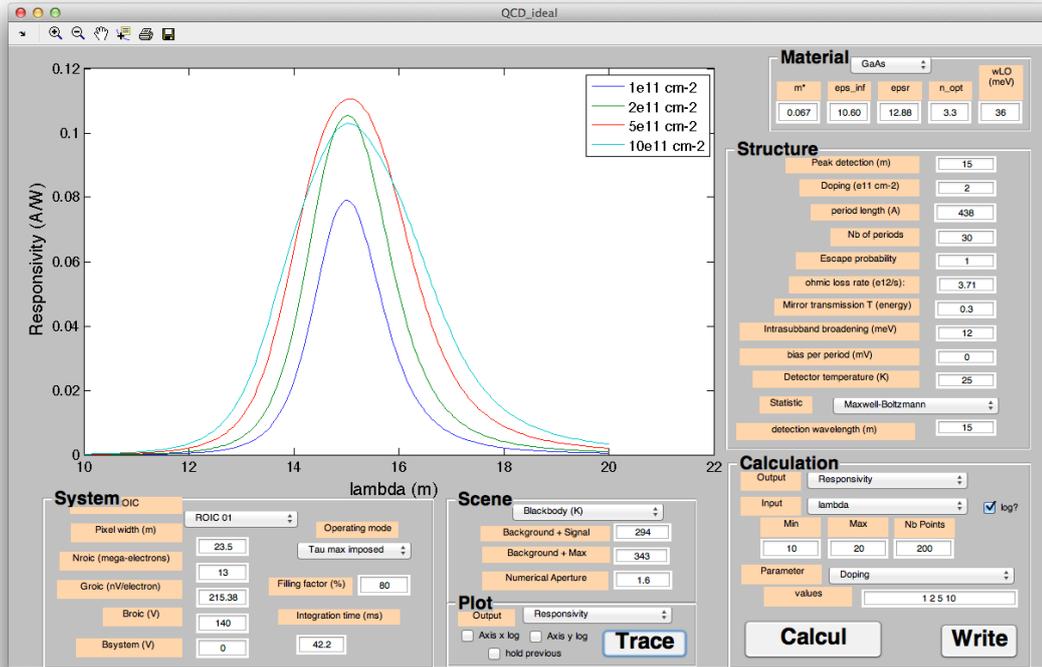


FIGURE 5.5 – Interface graphique pour le programme de QCD idéal. Toutes les sorties utiles à l'étude des performances d'un imageur sont affichables au sein d'une seule fenêtre. A chaque entrée correspond un paramètre du modèle.

- **Paramètres calculés**, non indépendants du reste des paramètres, rappelés ici pour le confort de la lecture.

Le modèle est validé par une confrontation avec l'expérience pour des QCDs GaAs/AlGaAs @ 8.5 et 14.3 μm [79, 85]. Les résultats pour la structure @ 14.3 μm sont présentés sur la figure 5.6 pour la réponse (5.6(a)), et pour la détectivité (5.6(b)). Aucun paramètre nominal n'est ajusté, et seul le paramètre physique $T = 0.3$ diffère de la valeur extraite du calcul par la méthode modale ($T = 0.35$). De plus, on a pris un élargissement intra-sousbande $\Gamma_{intra} = 8 meV$ (raisonnable pour 25K), et une probabilité d'extraction $p_e = 0.7$, qui correspond qualitativement aux calculs METIS de la figure 2.15 du chapitre 2. La qualité de l'accord entre théorie et expérience pour la réponse sur la figure 5.6(a) illustre la fiabilité de ce modèle idéal. En revanche pour la détectivité sur la figure 5.6(b), si la théorie et expérience sont en bon accord en régime BLIP (où le bruit du courant optique domine), le désaccord à plus haute température illustre bien le processus d'idéalisation de ce modèle. Le fait d'avoir négligé les transitions diagonales se traduit directement dans la différence des énergies d'activation observée. Noter ici qu'on a quantifié la non idéalité du détecteur en posant $p_e = 0.7$, en se fondant sur le régime BLIP.

En résumé, le modèle de QCD idéal permet de cerner, *a priori*, la limite haute des performances qu'on peut atteindre avec une structure QCD pour une scène donnée. Grossièrement, cette limite haute est accompagnée d'un intervalle de confiance de l'ordre d'un facteur deux⁵. La structure réelle pouvant se situer jusqu'à un facteur

5. La plus grosse incertitude émanant des paramètres de couplage optique. C'est à leur variation que le modèle est le plus sensible.

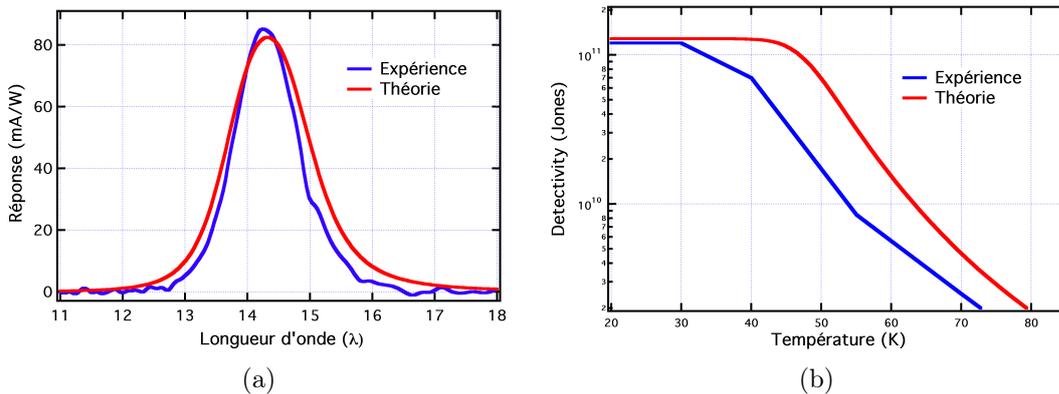


FIGURE 5.6 – Comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux pour un QCD @ 14.3 μm . (a) : Réponse spectrale à 25K. (b) : Détectivité

cinq en deçà selon les régimes : en régime BLIP c'est principalement l'hypothèse $p_e = 1$ qui est limitante. Au dessus du régime BLIP c'est plutôt la différence d'énergie d'activation par les transitions diagonales. Finalement, cela donne un intervalle de confiance d'environ un ordre de grandeur (2×5) par rapport aux prédictions théoriques⁶.

2.3 Règles de dessin QCD

Le modèle de QCD idéal a pour vertu de décrire la majorité des effets physiques notoires qui impactent le comportement du détecteur. En ce sens, il donne une image fidèle de la variation du comportement avec les paramètres nominaux, et permet de comprendre l'origine des points d'optimum pour le dessin. La majorité des paramètres nominaux du tableau 5.1 sont imposés par la technologie (matériau et dessin des cascades), ou par le scénario. En revanche, l'étalonnage du nombre de périodes et du dopage, dont le choix relève souvent de l'intuition de l'ingénieur, va ici être illustré avec des moyens quantitatifs, d'abord sur la détectivité, puis sur la NETD.

Optimiser la Détectivité

Ce travail est à mettre en perspective d'une étude de *Hofstetter* [229], dans laquelle l'auteur trace les lignes forces pour le dessin des QCDs, en se fondant sur une approche d'absorption à 45° simple passage pour le champ incident. Comme nous allons le voir, notre approche du couplage optique donne des points de fonctionnement sensiblement différents.

La figure 5.7(a) présente la variation de l'efficacité quantique avec le dopage et le nombre de périodes. Le comportement du détecteur en tant que cavité optique avec pertes est ici particulièrement visible. Les pertes réelles dans le métal étant constantes, la variation des pertes dans la cavité est déterminée par le nombre de puits dopés que voit le champ plasmon (N_p), et la quantité de dopant par puits (ρ).

6. A cause des effets de compensation, pour certaines grandeurs comme la NETD, cet intervalle se réduit plutôt à un facteur 3.

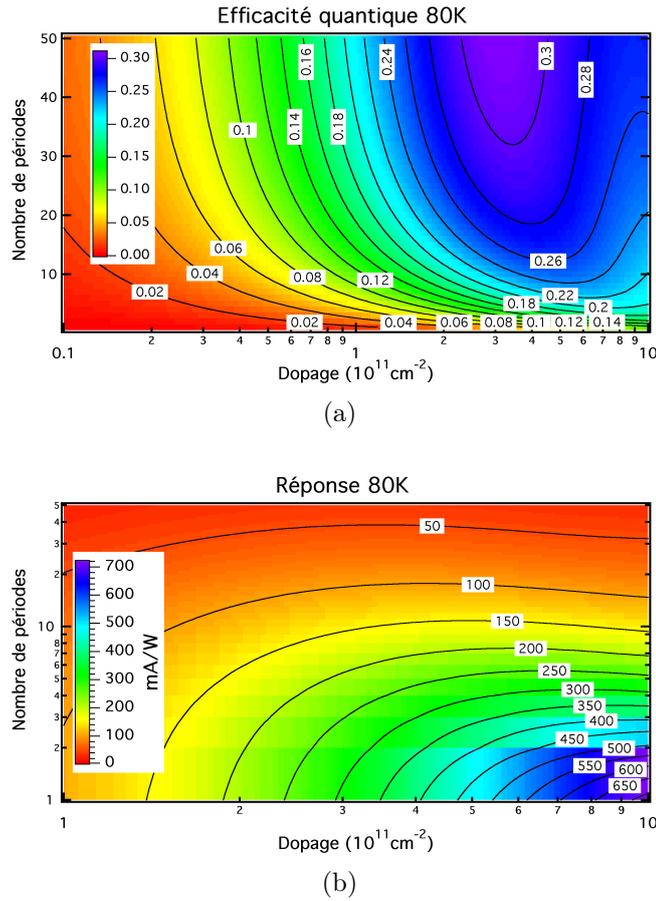


FIGURE 5.7 – Variation de l'efficacité quantique (a) et de la réponse (b) d'un QCD idéal à $8 \mu\text{m}$ à 80K, en fonction du nombre de périodes et du dopage.

A nombre de période constant (en suivant une horizontale sur la figure 5.7(a)), on passe d'une cavité surcouplée pour les faibles dopages à une cavité sous couplée pour les forts dopages⁷. A faible dopage, les puits ne sont pas capables d'évacuer l'énergie injectée dans la cavité par le réseau de diffraction, et une partie de celle-ci ressort sans avoir interagi avec les puits. A fort dopage, la lumière injectée sur un angle du réseau est entièrement absorbée avant de pouvoir ressortir de la cavité à l'angle suivant. A partir de la valeur critique correspondante pour le dopage, on devrait donc voir une saturation de l'efficacité quantique. Tel n'est pas le cas, on observe plutôt une diminution de η , qui provient du fait que l'extension du champ plasmon diminue avec le dopage, et donc que de moins en moins de puits voient les photons.

A dopage constant (en suivant une verticale sur la figure 5.7(a)), on voit le régime surcouplé à faible nombre de périodes, mais seulement une saturation à fort nombre de périodes. En effet, les périodes rajoutées sont de plus en plus éloignées du réseau de diffraction et voient de moins en moins le champ. Leur impact devient marginal. Noter que dans le cas des efficacités quantiques maximales atteintes ici, un photon incident sur trois est absorbé *in fine* dans les puits.

7. On s'est limité à un dopage maximum de 10^{12} cm^{-2} , de façon à rester dans des conditions où le formalisme de couplage faible est valide.

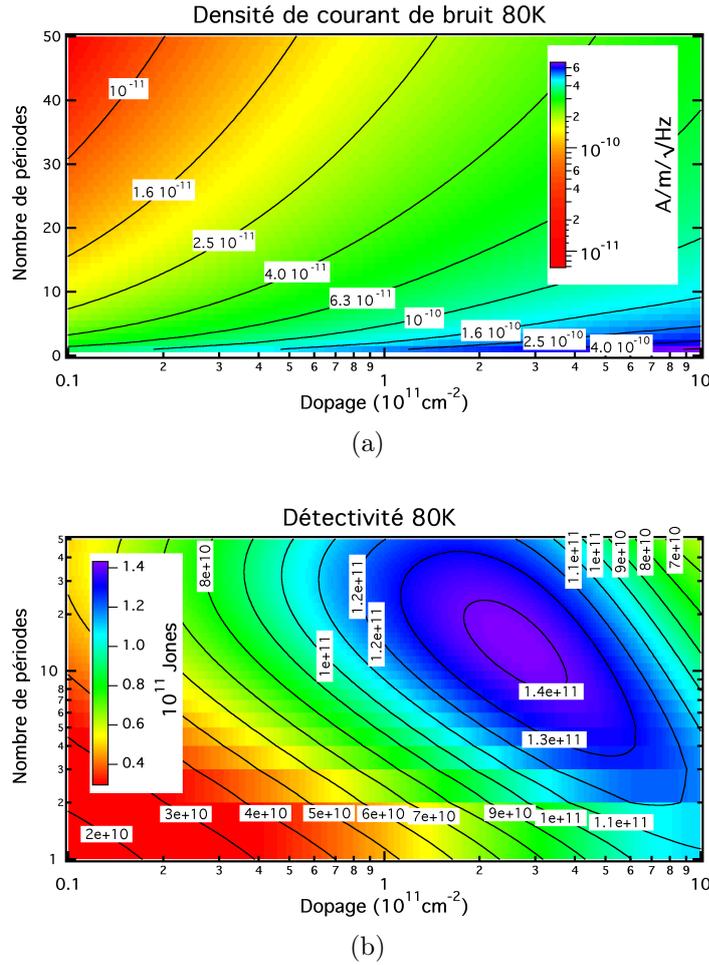


FIGURE 5.8 – Variation de la densité de courant de bruit (a) et de la détectivité (b) d'un QCD idéal à $8 \mu\text{m}$ à 80K, en fonction du nombre de périodes et du dopage.

La réponse présentée sur la figure 5.7(b) se déduit de l'efficacité quantique, en divisant par le nombre de périodes. Une idée qui circule dans la communauté QCD est qu'à faible nombre de périodes, on ne diminue pas la réponse en rajoutant des périodes. Cette idée est fondée sur une image d'absorption simple passage, pour laquelle chaque puits ayant une efficacité de l'ordre du %, on gagne en photons absorbés ce qu'on perd en nombre de périodes à franchir pour les photo-électrons. Cette situation correspondrait sur la figure 5.7(b) à des lignes de niveau verticales. Ce n'est jamais observé dans la zone de dopage de 10^{11} cm^{-2} . Le nombre de périodes a une influence positive sur l'efficacité quantique, sur-compensée par le facteur $1/N_p$ dans la réponse, et atténuée par le comportement en $1/\sqrt{N_p}$ du bruit.

Le choix de 80K comme température de fonctionnement implique pour ce QCD que dans l'espace des paramètres considérés, les courants d'obscurité et le courant optique sont comparables. Sur la figure 5.8(a), la densité de courant de bruit est proportionnelle à $\sqrt{\rho}$ et à $1/\sqrt{N_p}$. La tendance générale est similaire à l'évolution de la réponse : augmentation avec le dopage et diminution avec le nombre de périodes. Dans le cas du bruit limité par le seul courant optique, cette figure présenterait la même allure que la figure 5.7(b), modulée par le facteur $1/\sqrt{N_p}$.

La figure 5.8(b) illustre le fait que l'optimisation de la détectivité relève d'un

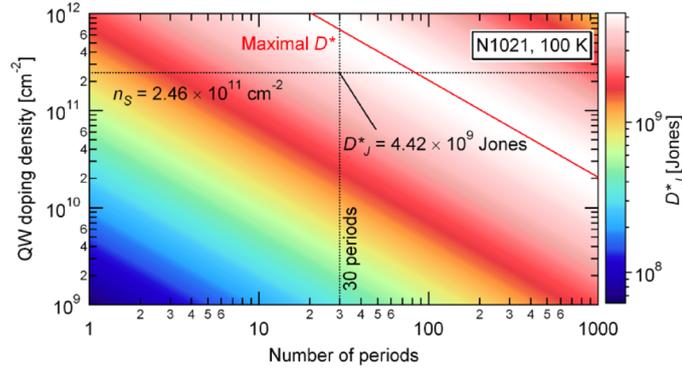


FIGURE 5.9 – Variation de la détectivité extrapolée d'un QCD à $7.5\mu\text{m}$ à 100K, en fonction du nombre de périodes et du dopage. Source Ref. [229].

compromis entre la réponse et le bruit. L'optimum pour cette température est obtenu de manière assez robuste autour de la configuration ($\rho = 2.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $N_p = 14$), pour lequel la détectivité vaut $1.43 \times 10^{11} \text{ Jones}$. Ce compromis est assez éloigné de l'habitude héritée de l'expérience QWIP de dessiner des structures avec plusieurs dizaines de périodes. Typiquement l'échantillon historique à $8\mu\text{m}$ comportait 40 périodes dopées à $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Cela illustre la pertinence de développer des modèles simples et globaux d'un composant. Le comportement est assez différent de celui extrapolé par *Hofstetter*, à partir d'un échantillon réel en absorption simple passage 45° [229]. En particulier, le modèle de QCD idéal avec une vision Fabry-Pérot du couplage donne des optima pour des valeurs de (ρ , N_p) plus faibles et plus réalistes.

Jusqu'ici l'accent a été porté sur le détecteur "nu". Mais l'ensemble du système imageur peut être modélisé de façon unifiée, et c'est dans ce cadre que le QCD présente un intérêt marqué par rapport aux QWIPs. Comme la réponse et le bruit sont plus faibles, les performances sont similaires en termes de détectivité. Par contre, dès que le temps d'intégration est pris en compte, le gain à utiliser un photovoltaïque devient tangible.

Optimiser la NETD

Les figures 5.10(a) à 5.11(b) illustrent un calcul de performances d'un système imageur complet (sachant que l'uniformité et l'opérabilité sont prises idéales et n'entrent pas en ligne de compte dans le calcul de la NETD). Le détail des calculs, formellement lourds mais conceptuellement simples, est standard (cf Ref. [14] par exemple). Le développement d'un ROIC dédié à un détecteur et une application demande un investissement humain, financier et temporel massif. Nous nous contenterons de choisir des ROIC existant dans le catalogue de FLIR Systems. Le choix du ROIC est principalement orienté par l'optimisation du temps d'intégration au regard du bruit du ROIC. Le ROIC choisi ici est le composant ISC0403 [230], conçu initialement pour des diodes InSb. On a utilisé la température 80K des spécifications, et pour des raisons de simplicité⁸ nous sommes placés à tension nulle.

Les deux régimes du temps d'intégration sont visibles sur la figure 5.10(a). En violet le temps d'intégration est limité par l'application. Il a été supposé ici que le système doit faire une image toutes les 10ms. Dans ce cas, le signal ne remplit pas

8. A cause de la variation du nombre de périodes.

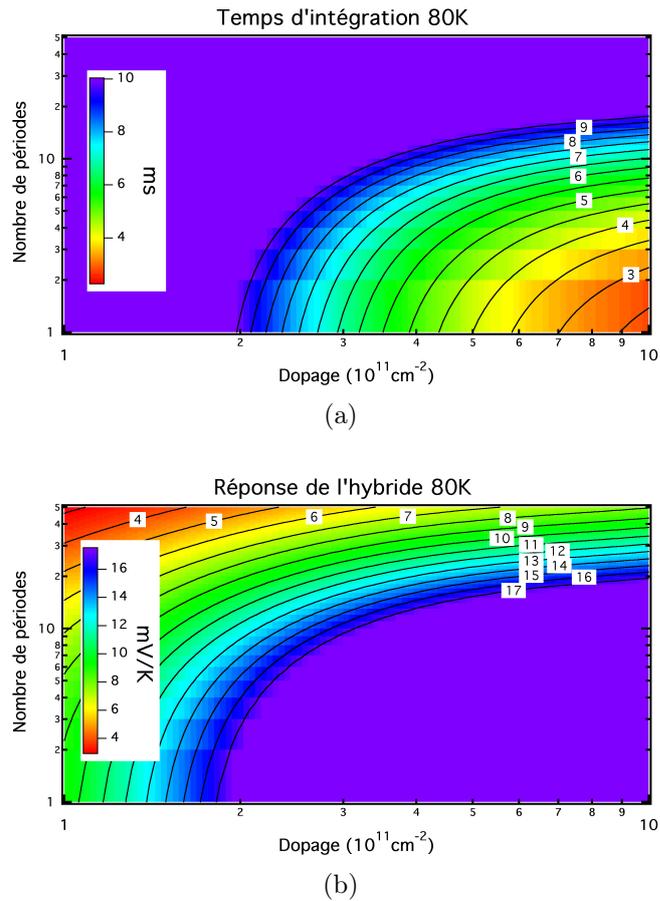


FIGURE 5.10 – Variation du temps d'intégration (a) et de la réponse de l'hybride (b) pour un système imageur QCD idéal à $8\mu\text{m}$ à 80K + ROIC ISC0403, en fonction du nombre de périodes et du dopage. La scène observée est un corps noir à 300K (dynamique de scène 50°C), avec une ouverture numérique de 1.6, et un temps d'intégration limité par l'application de 10ms.

l'intégralité de la capacité de lecture. Cette configuration n'est pas optimale dans la mesure où le bruit en sortie est limité par le ROIC lui même, et pas par le signal. Dans l'autre limite, le temps d'intégration vaut moins de 10 ms. Il est limité par le fait qu'on veut éviter une saturation des pixels : dès lors qu'un pixel illuminé par le corps le plus chaud de la scène (ici 350K) est entièrement rempli, les capacités sont déchargées. Dans ce cas la performance est dégradée par le fait que le signal est moyenné sur une période plus courte, d'où un rapport signal à bruit réduit (il est proportionnel à $\sqrt{\tau_{int}}$). Le cas optimal correspond à la jonction entre ces deux régimes, *ie* la ligne de niveau bleu sur la figure 5.10(a). Le point de fonctionnement a été pris à tension nulle, donc le seul signal intégré est le courant optique, d'où l'analogie de forme avec la réponse sur la figure 5.7(b).

La réponse de l'hybride présentée sur la figure 5.10(b) est calculée comme la dérivée de tension de sortie par rapport à la température de scène. C'est une image directe des phénomènes de temps d'intégration du signal. Elle est constante quand le temps d'intégration est limité par le remplissage de la capacité de lecture (même quantité de signal). Elle se dégrade à mesure qu'on acquiert de moins en moins de signal, en régime limité par le temps imposé par l'application.

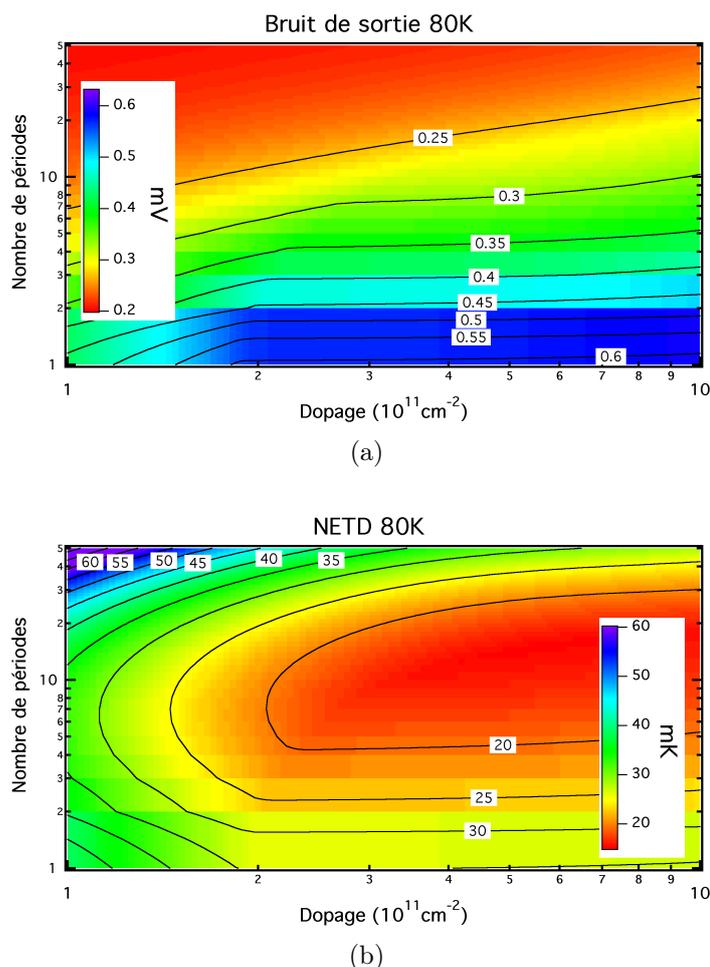


FIGURE 5.11 – Variation du bruit de sortie (a) et de la NETD (b) pour un système imageur QCD idéal à $8\mu\text{m}$ à 80K + ROIC ISC0403, en fonction du nombre de périodes et du dopage. La scène observée est un corps noir à 300K (dynamique de scène 50°C), avec une ouverture numérique de 1.6, et un temps d'intégration limité par l'application de 10ms. Le bruit nominal du ROIC est de $200\mu\text{V}$.

Le bruit en sortie, présenté sur la figure 5.11(a) est calculé comme la somme quadratique du bruit nominal du ROIC (constant, ici à 0.2 mV), et du bruit lié au signal intégré dans les capacités de lecture. Son évolution correspond qualitativement à celle du bruit du détecteur de la figure 5.8(a), translatée de 0.2 mV , et convoluée à l'effet de coupure induit par la limitation du temps d'intégration (géométriquement les points anguleux visibles sur les lignes de niveaux correspondent au motif principal des figures 5.10(a) et 5.10(b)). Noter l'effet de plateau induit par la saturation du temps d'intégration (indépendance du bruit par rapport au dopage), car le bruit de sortie est proportionnel à sa racine carrée.

La NETD, définie ici comme le rapport du bruit en sortie divisé par la réponse de l'hybride est montrée sur la figure 5.11(b). Puisque le bruit en sortie dépend principalement du nombre de périodes, une illustration graphique de l'optimum de la NETD correspond au point le plus haut de la zone de maximum de réponse du système sur la figure 5.10(b). La configuration optimale pour ce scénario et ce circuit de lecture est $(\rho, N_p) = (3.7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}, 11)$, pour une NETD de 15.6mK . Cette

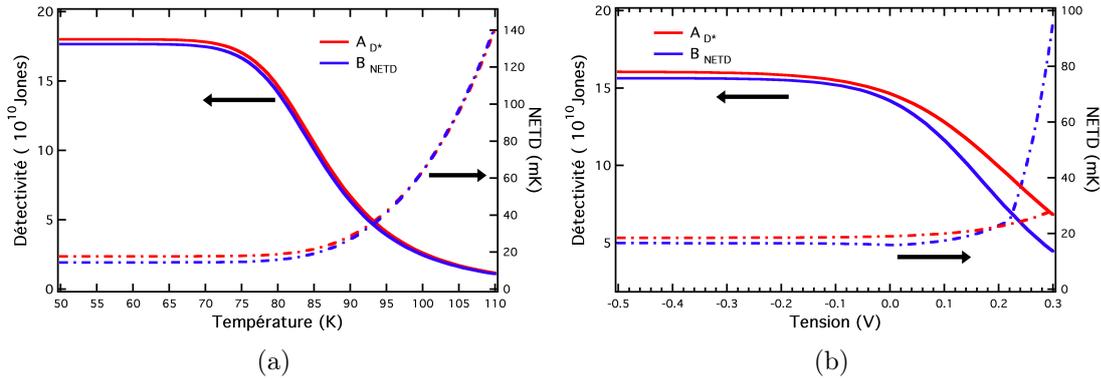


FIGURE 5.12 – Stabilité en température ((a)), et en tension de polarisation ((b)) des structures QCD optimisées A_{D^*} et B_{NETD} . La détectivité se lit en traits pleins sur l'échelle de gauche, la NETD en pointillés sur l'échelle de droite.

situation n'est pas identique, mais reste proche, de l'optimum de détectivité. Enfin, ce modèle semble indiquer que les configurations de fort dopage ($> 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) sont favorables pour la NETD. Pour des raisons physiques liées au calcul de l'absorption en couplage faible, il est probable que cette zone ne corresponde pas à la réalité.

Sur la gamme relativement étendue des paramètres (ρ, N_p) étudiés, la détectivité varie de moins d'un ordre de grandeur, et la NETD d'un facteur 40. Cela montre la robustesse du dessin QCD en général. Pour l'illustrer plus avant, la figure 5.12 regarde les comportements en température et en tension des configurations A_{D^*} et B_{NETD} , optimales respectivement pour la détectivité et pour la NETD. La NETD ne commence à augmenter significativement que pour une température $T_{NETD} = 85K$ supérieure à la température BLIP $T_{BLIP} = 75K$. Cette différence provient directement du fait que c'est le flux net du courant d'obscurité $J_{up-down} - J_{down-up}$ qui contrôle le temps d'intégration, mais bien la somme des flux contra-propageants $J_{up-down} + J_{down-up}$ qui contrôle le bruit.

Enfin, les performances du système ne varient pas sensiblement avec la tension (négative) dans ce modèle idéal. Ce comportement est à relativiser, du fait des hypothèses simplificatrices liée à la vision parfaite du transport. En particulier, on voit ici l'artefact introduit par l'hypothèse de courant de génération des porteurs minoritaires $J_{down-up}$ indépendant de la tension. Gardons à l'esprit que ce modèle a été construit pour décrire le transport près de la tension nulle. Qualitativement, on peut s'attendre à ce qu'en faible polarisation négative, ce qui est gagné par l'extinction du bruit de recombinaison (amélioration de la détectivité) soit compensé par le plus faible temps d'intégration (NETD plate).

Après avoir utilisé le modèle de QCD idéal pour broser les grandes idées qui sous-tendent le dessin de ces structures, nous allons illustrer la capacité prospective du modèle sur deux applications : l'imagerie embarquée à $8.5\mu m$, et la géosurveillance hyperspectrale entre 8 et $15\mu m$.

Scénario		ROIC ISC9803		Structure	
τ_{int}	7ms	C_{ROIC}	$11.2 Me^{-}$	ρ	$4 \times 10^{11} cm^{-2}$
T_{BKG}	293K	B_{ROIC}	$400 \mu V$	N_p	10
T_{MAX}	343K	G_{ROIC}	$1.17 \mu V/e^{-}$		
ON	2.7				

TABLE 5.2 – Paramètres pour le scénario Catherine XP

2.4 Prospectives d'applications

Imagerie embarquée à $8.5\mu m$

Dans cette application militaire, l'enjeu est d'imager des théâtres d'opérations à $8.5\mu m$, dans le but d'identifier les menaces humaines et motorisées de jour comme de nuit. Thales a établi l'état de l'art des QWIPs pour ce scénario, et commercialise aujourd'hui un système imageur sous le nom de Catherine XP. Nous posons ici la question de la compétitivité de la technologie QCD pour cette application, pour laquelle l'ensemble des paramètres significatifs est rappelé sur le tableau 5.2.

Pour la technologie QCD, la meilleure NETD a été trouvée pour une structure contenant 10 périodes dopées à $4 \times 10^{11} cm^{-2}$. Le ROIC a été choisi parmi le catalogue de FLIR Systems, et c'est le composant ISC9803 qui a été retenu, en configuration de gain 11 [231]. Les paramètres non précisés correspondent aux valeurs nominales de la partie précédente. La figure 5.13 présente les performances du système imageur QCD idéal, et les compare avec la NETD spécifiée pour le système Catherine XP. A 75K, le modèle renvoie une valeur de NETD optimisée à 15mK, comparée aux 30mK du système QWIP, valeur qui est atteinte pour une température QCD de 83K. Même si on compare les performances réelles du système en production avec celles théoriques d'un modèle idéalisé, le gain de 8K sur la température de fonctionnement (qui correspondrait à un gain réel qu'on peut estimer aux alentours de 4K, permettant de passer au dessus de 77K) montre que la faculté du QCD à travailler en régime photovoltaïque présente un réel intérêt par rapport aux QWIPs. D'autant plus que l'examen du temps d'intégration révèle que le système QCD fonctionne souvent en régime limité par l'application, donc n'exploite pas entièrement ses potentialités. Celles ci sont beaucoup nettes dans des applications où le temps d'intégration est plus long, comme la géosurveillance hyperspectrale.

Géosurveillance entre 8 et $15\mu m$

Ces dernières années, deux projets d'imagerie hyperspectrale pour la géosurveillance par satellite ont été menés parallèlement par l'ESA [14] et par la NASA [232]. La matrice de plan focal est montée dans un dispositif de spectroscopie dispersive. Chaque colonne effectue une image en continu de la Terre à une longueur d'onde donnée, la sélection spectrale étant effectuée par le réseau de diffraction.

De 2008 à 2011, Thales a mené pour le projet ESA un processus de 30 mois de développement d'un système imageur QWIP entre 11 et $15 \mu m$ [14]. La solution retenue consiste à utiliser deux couches actives accolées spatialement, une centrée à $12 \mu m$ couvrant la gamme 11-13 μm et gravée par les plus petits motifs du réseau

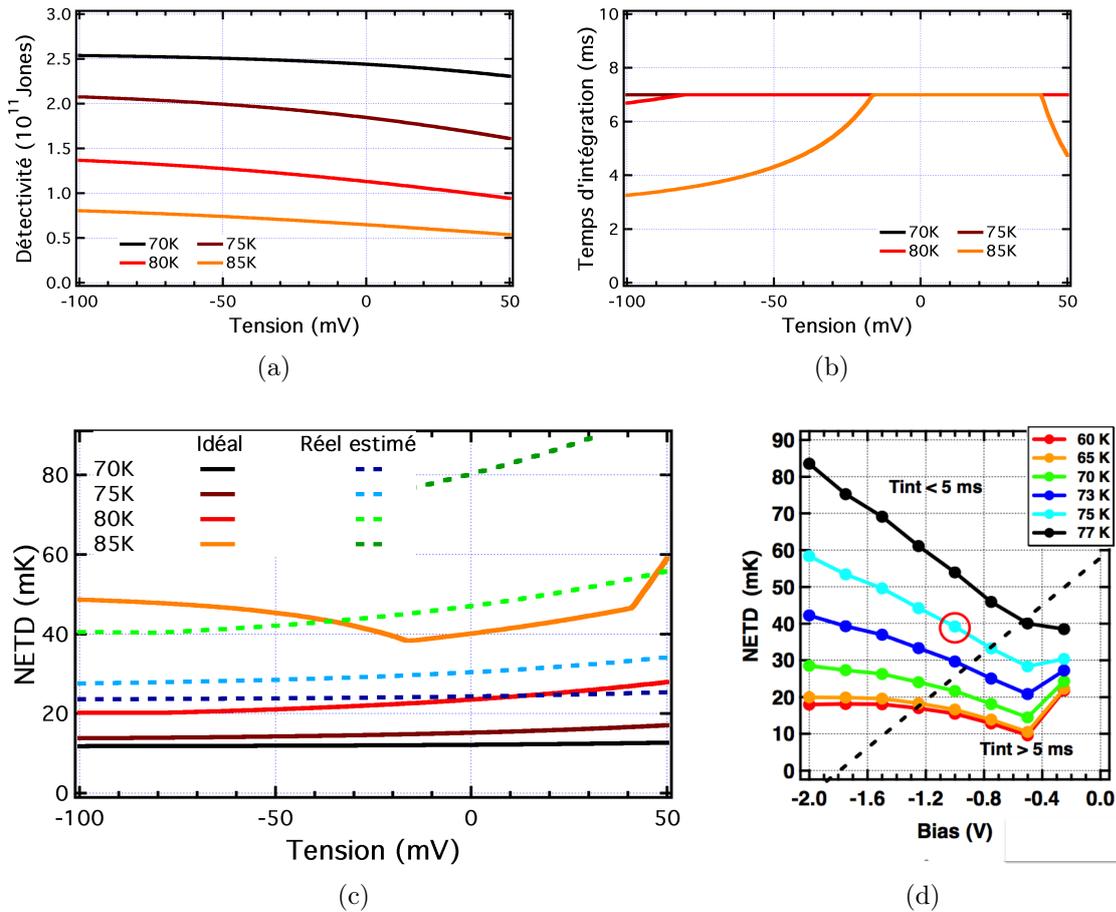


FIGURE 5.13 – Défectivité (a), temps d’intégration (b), NETD (c) du système imageur QCD idéal + ROIC ISC9803, en fonction de la tension de polarisation pour plusieurs températures de fonctionnement. En pointillés, on a estimé la limite basse des performances du système réel. (d) : Comparaison avec la NETD nominale pour la technologie QWIP. Le cercle rouge correspond au point réel de fonctionnement.

adaptatif, et la seconde centrée à $14 \mu\text{m}$ afin de couvrir la gamme $13\text{-}15 \mu\text{m}$ grâce aux grands motifs du réseau. C’est ce scénario que nous allons interroger, en remplaçant la couche active par deux QCDs : un à $12 \mu\text{m}$ et l’autre à $14 \mu\text{m}$.

Le tableau 5.3 résume les paramètres principaux pour le projet ESA. Dans cette application très faible flux, le choix du ROIC tel que nous l’avons modélisé a peu d’importance. En effet, le temps d’intégration maximal est souvent atteint, et le bruit est limité par celui du détecteur⁹. L’objectif du cahier des charges est un rapport signal sur bruit (RSB) d’au moins 700 à une température de 50K dans toute la gamme spectrale étudiée. La figure 5.14 présente les performances en températures des deux sous-systèmes imageurs. La performance du modèle de QCD idéal à $12\mu\text{m}$ excède l’objectif de plus d’un facteur deux, ce qui laisse une très bonne marge de confiance sur la faisabilité réelle dans cette gamme spectrale. En revanche, le RSB prédit à $14 \mu\text{m}$ est un facteur deux en deçà du cahier des charges à 50K. Ainsi quelque soit l’effort d’optimisation les performances attendues ne pourront jamais

9. Nous avons notamment fait des simulations sur des ROICs de plus faible capacité, sans gain notable sur les performances.

Scénario		ROIC		Structure	
τ_{int}	42ms	C_{ROIC}	$50 Me^{-}$	$\rho^{12\mu m}$	$2.5 \times 10^{11} cm^{-2}$
$Flux_{SIG+BKG}$	$14.5 mW/m^2$	B_{ROIC}	$30 \mu V$	$N_p^{12\mu m}$	8
$Flux_{MAX+BKG}$	$16 mW/m^2$	G_{ROIC}	$60 nV/e^{-}$		
ON	1.6	$U^{12\mu m}$	$-30 mV$	$\rho^{14\mu m}$	$2 \times 10^{11} cm^{-2}$
RSB à 50K	700	$U^{14\mu m}$	$-20 mV$	$N_p^{14\mu m}$	10

TABLE 5.3 – Paramètres pour le scénario ESA spectroscopie dispersive.

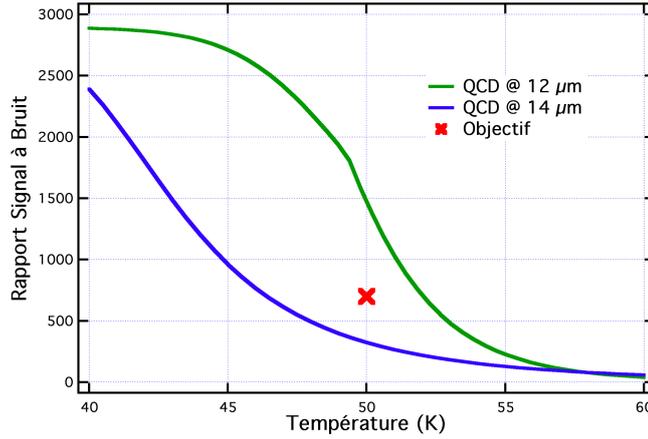


FIGURE 5.14 – Variation des rapports signal à bruit pour les couches QCD idéal à 12 et 14 μm en fonction de la température. La marge de la couche à 12 μm par rapport à l'objectif est supérieur à l'intervalle de confiance du modèle. En revanche, le modèle idéal est déjà en deçà de l'objectif à 14 μm . La technologie QCD ne pourra pas répondre à ce besoin applicatif.

être atteinte avec une technologie QCD.

Ce résultat peut sembler négatif : nous avons prouvé que la technologie QCD n'était pas la solution universelle. Mais il est possible de regarder ce problème à l'envers. Là où les QWIPs ont déployé un effort humain et financier de près de trois ans sans réussir à remplir un cahier des charges très exigeant (voire peu réaliste), pour les QCDs une étude du cahier des charges et l'emploi de ce modèle seraient arrivés à la même conclusion en une semaine de travail d'une personne. Le projet a en définitive été abandonné. Le gain à pouvoir quantifier *a priori* les potentialités d'une filière technologique est ici manifeste, et ce indépendamment de sa qualité intrinsèque.

Scénario		ROIC ISC9809		Structure	
τ_{int}	16ms	C_{ROIC}	$3.5 Me^{-}$	ρ	$4 \times 10^{11} cm^{-2}$
T_{BKG}	293K	B_{ROIC}	$497 \mu V$	N_p	20
T_{MAX}	343K	G_{ROIC}	$710 nV/e^{-}$	Γ_{intra}	$50 meV$
ON	1.6			p_e	0.2
NETD à 50K	200mK			U	-80 mV

TABLE 5.4 – Paramètres pour le scénario NASA : Landsat

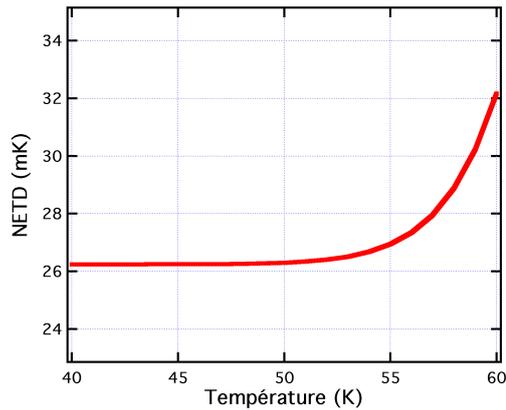


FIGURE 5.15 – Variation de la NETD pour les couches QCD idéal et le ROIC ISC9809 en fonction de la température du détecteur. Le cahier des charges demande une NETD de 200mK.

Le cahier des charges du projet NASA dans le cadre de la mission LDCM (Landsat Data Continuity Mission [232]) est plus tolérant. Le principe est le même que la mission ESA, cette fois entre 8 et 12 μm . Nous nous positionnons ici par rapport à un imageur QWIP large bande en cours de développement chez QmagiQ [15]. La solution qu'ils ont retenue est une seule couche active large bande, répondant sur l'ensemble de la gamme spectrale. Les paramètres choisis pour notre alternative QCD idéal sont montrées du tableau 5.4 avec le ROIC ISC9809 de chez FLIR Systems [233].

Deux modifications ont été apportées au modèle de QCD idéal pour établir une comparaison honnête. L'élargissement intrasousbande Γ_{intra} a été pris à 50 meV (au lieu d'environ 10 meV dans la gamme de température considérée), afin de reproduire un gabarit spectral large. De plus, la probabilité d'extraction a été dégradée à $p_e = 0.2$ afin de prendre en compte la sélectivité du réseau : c'est l'acceptance spectrale de ce dernier qui limite les bornes d'intégration du signal optique.

La figure 5.15 présente l'évolution en température de la NETD obtenue dans ce système. Par rapport à un objectif de $NETD = 200mK$, à une température de détecteur de 50K, la marge est ici d'un facteur 8. Cela laisse espérer des performances réelles quatre fois supérieures au seuil de besoin, seuil juste atteint par la solution QWIP de QmagiQ. Dans cette application à long temps d'intégration (16 ms), les QCDs sont structurellement meilleurs que les QWIPs de par leur capacité à travailler en régime photovoltaïque, et très prometteurs comparés à l'ensemble de l'état de l'art.

Enfin, remarquons que les deux projets de géosurveillance étudiés au dessus nécessitent une réponse spectrale large bande des couches actives. Cette condition, difficile à réaliser dans les structures QWIPs, est accessible de façon simple et robuste dans les QCDs. C'est ce que nous allons présenter dans la suite.

3 Nouvelles fonctionnalités pour le QCDs

Après avoir avancé des arguments quantitatifs sur les potentialités de la filière QCD, cette section est dédiée à une discussion plus qualitative. En ce sens, les

perspectives présentées ici sont la synthèse d'idées de la littérature, de discussions scientifiques et de réflexions personnelles. En l'état actuel des technologies (notamment au niveau de l'ingénierie de couplage optique), le QCD présente globalement des performances comparables au QWIP, mais un intérêt particulier en régime de long temps d'intégration. Dans le domaine de l'imagerie, la pertinence de ce détecteur pourrait être significative dans des applications de niche. Dans des applications plus grande échelle, une plus grande prudence est de rigueur. La sensibilité du détecteur est trop faible pour pouvoir soutenir une fréquence vidéo, et les concurrents MCT ou super-réseaux trop performants ou prometteurs.

A mon sens, deux axes majeurs président à la destinée de cette technologie. Le premier est l'application à la spectroscopie, dans le cadre de cellules photoniques intégrées avec des QCLs. Dans ce cas, le problème de faible sensibilité du détecteur disparaît en grande partie à cause du changement du schéma de couplage et de la définition même du signal. Le second est le champ émergent de la plasmonique infrarouge [234], qui pourrait grandement redistribuer les cartes en matière de sensibilité.

3.1 QCDs pour la spectroscopie

De très nombreuses molécules présentent des raies vibrationnelles dans la gamme spectrale entre 2 et 20 μm (cf Fig. 1.4). La détection spectroscopique de ces molécules présente un potentiel d'applications extrêmement prometteur : détection de gaz, contrôle de chaînes industrielles, surveillance environnementale, diagnostics non invasifs... Que ce soit en imagerie hyperspectrale (comme au dessus), ou au sein de véritables "laboratoires sur puce" composés d'une source, d'une cellule de fixation du gaz et d'un détecteur, il existe un réel besoin pour des dispositifs accordables et pouvant être commercialisés à grande échelle. Il faut pour cela être capable d'émettre et de détecter un signal spectralement fin dont on peut faire varier la longueur d'onde de façon contrôlée sur la plus grande gamme spectrale possible. On ne propose rien de moins que de développer une alternative portable aux interféromètres à transformée de Fourier [235].

Ce rêve technologique a commencé à prendre corps avec le développement de sources QCL dans le moyen infrarouge fonctionnant en régime continu CW (pour "continuous wave") à température ambiante [236]¹⁰. La deuxième étape a consisté à élargir le gain spectral, en introduisant toute une zoologie des dessins des couches actives [238–242] : "bound-to-continuum", "continuum-to-bound", "continuum-to-continuum", "dual-upper-state". L'idée est de remplacer le niveau haut et/ou le niveau bas de la transition laser par des minibandes¹¹. Une autre possibilité est la réalisation de structures empilées, dans lesquelles le gabarit spectral change d'un groupe de périodes à l'autre [243]. Le challenge du dessin réside alors dans le fait qu'il faut adapter le courant pour que tous les groupes de périodes atteignent l'alignement pour la même valeur de tension. La troisième étape, la sélection d'un mode spectralement fin déterminé se fait par une ingénierie de la cavité optique. Les dispositifs se répartissent en trois grandes familles :

10. L'analyse de cette section sur les sources QCL pour la spectroscopie est principalement tirée de la Ref. [237].

11. Remarquer la terminologie héritée des QWIPs, puisqu'ici tous les niveaux sont liés.

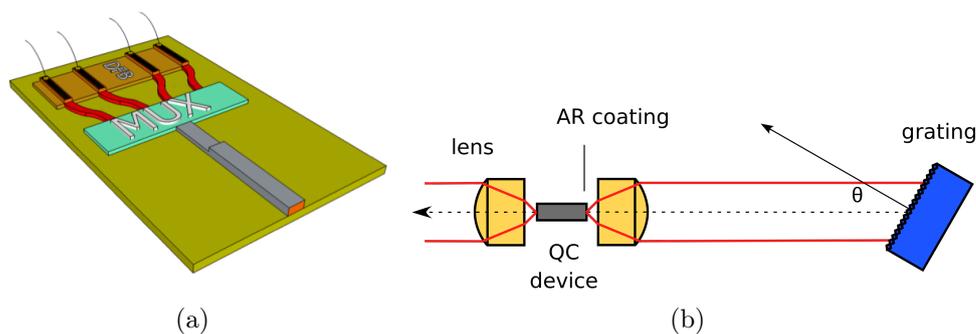


FIGURE 5.16 – Montages lasers pour la spectroscopie infrarouge. (a) : Principe de fonctionnement d'une cellule DFB. Chaque barrette est centrée sur une longueur d'onde donnée par un réseau gravée sur la surface, et adressée électriquement de façon sélective. La source large bande est recomposée en multiplexant (MUX) les signaux émis par les barrettes. (b) : Principe d'un montage en cavité externe, en configuration "Littrow". La sélection spectrale est assurée par le choix du mode diffracté d'ordre 1 qui est réinjecté dans la cavité laser.

- **DFB** (pour "distributed feedback" lasers). Un réseau de Bragg est gravé à, ou sous la surface de la barrette QCL, et sélectionne un mode de cavité donné [59, 244–246]. Pour obtenir l'accordabilité, une multitude de barrettes avec des réseaux de périodes différentes sont multiplexées (cf Fig. 5.16(a)). Pour l'accord fin autour de ces modes, la température du laser est modifiée, ce qui donne une latitude d'environ $0.1 - 0.2 \text{ cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$, et permet de reconstruire des sources continûment accordables. Une plage de 220 cm^{-1} a été démontrée [247]. Les modes DFB sont polarisés TM et guidés par le substrat.
- **Cavité circulaire** Le milieu actif est positionné sous des plots circulaires de métal, qui sélectionnent des modes de galerie par un processus Bragg du second ordre. L'émission se fait par la surface, et une accordabilité de 180 cm^{-1} a été démontrée [248] ainsi qu'une très bonne qualité de faisceau.
- **Cavité externe**. Un réseau de diffraction externe est utilisé pour réinjecter le premier ordre du mode Fabry-Pérot choisi dans la cavité correspondant à la barrette QCL, pendant que l'ordre zéro est envoyé en sortie (cf Fig. 5.16(b)). Le choix du mode se fait donc par diminution du taux de pertes. L'avantage par rapport aux précédents est qu'une seule barrette sert à l'ensemble de la plage, et une accordabilité de 430 cm^{-1} a été démontrée [249]. L'inconvénient est qu'un alignement précis et robuste doit être mis en oeuvre, et que le système contient des pièces mobiles, au détriment de la compacité, du coût, de la simplicité et de la solidité.

La quatrième et dernière étape a consisté à augmenter la puissance de sortie des QCLs, et le cap du Watt a été largement dépassé [250, 251]. C'est au niveau de cette étape que la question de la technologie du détecteur a changé de paradigme. En effet, que mesure-t-on dans une application de spectroscopie ? Le signal est la modification du flux optique capté par le détecteur $\Delta\phi$, lorsque N molécules de section efficace σ se trouvent sur le passage de la lumière : $\Delta\phi = \phi \exp(-\sigma N)$. Ainsi, en régime non saturé, le rapport signal à bruit est proportionnel à la racine du flux : $RSB \propto \Delta\phi / \sqrt{\phi}$. On a donc intérêt travailler au flux optique maximum.

Le candidat ultra-dominant pour le composant de détection en spectroscopie infrarouge haute performance est aujourd'hui le MCT [252, 253]. C'est un composant

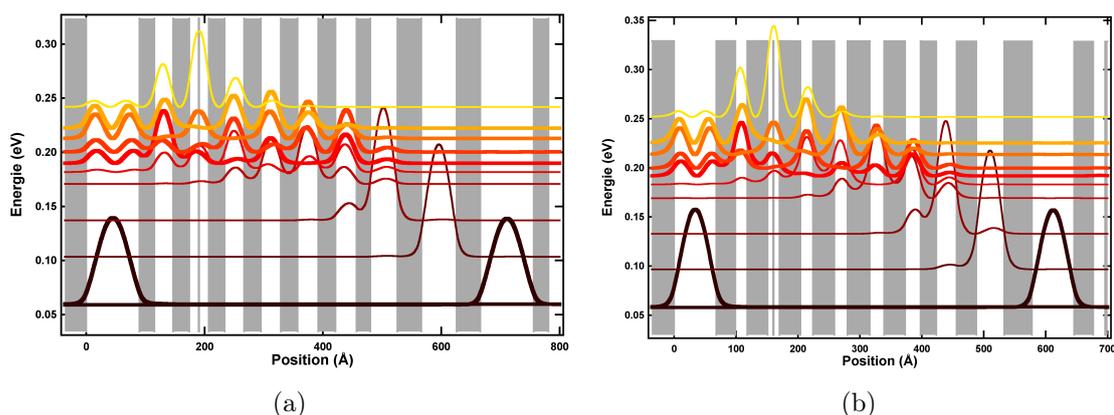


FIGURE 5.17 – Structures de bande d’une période de QCD large bande, répondant entre 7 et 10 μm , en AlInGaAs sur InP ((a)), et en GaAs ((b)). Le puits optiquement actif contient les impuretés ionisées Si. Pour les deux structures, la force d’oscillateur entre le niveau fondamental et chacun des quatre niveaux actifs de la minibande est de l’ordre de 0.2 (entre 0.18 et 0.23).

large bande, très sensible et pour lequel les problèmes d’uniformité ou d’opérabilité ne se posent pas dans cette application. Cependant il est saturé par les niveaux de flux optique atteints aujourd’hui par les QCLs. D’où la pertinence des détecteurs inter-sousbande (QWIPs et QCDs), qui compensent leur faible sensibilité par un temps de réponse de l’ordre de 0.2 ps. Et ce tout en apportant leurs qualités en termes de bruit (pas de 1/f) et de fiabilité technologique, ainsi qu’une compatibilité technologique avec les couches QCLs.

La réalisation de QWIPs large bande, notamment menée pour l’imagerie hyperspectrale a exploré un grand nombre de stratégies, réparties en trois familles : les structures à gradient de barrières [254], à puits couplés [255–257], et à puits différents [258, 259]. Cette dernière famille contient les structures empilées, et les structures inter-digitées. L’idée est d’insérer plusieurs types de puits pour élargir le gain spectral de l’ensemble de la structure. Dans la mesure où la réponse d’un puits dépend fortement de la tension qui lui est appliquée, l’élaboration d’une réponse spectrale globale plate relève de l’exercice d’équilibriste : il faut en effet prendre en compte très précisément la redistribution des porteurs de charge et les réarrangements de champ électrique le long de la structure. D’autant plus que le caractère partiellement parallèle du transport exige d’inclure les effets d’inhomogénéité du champ électrique statique et optique dans la cavité. Cette complexité du dessin induit une faible robustesse vis à vis de la modification du point de fonctionnement (tension, température).

Le principe d’un QCD permet naturellement de s’affranchir de ces difficultés. Le gain large est obtenu avec une seule période, en remplaçant le niveau haut de la transition optique par une minibande, comme illustré sur la figure 5.17 pour une structure AlInGaAs sur InP, et une structure AlGaAs. Le point critique du dessin est de répartir équitablement la force d’oscillateur sur chacun des niveaux de la minibande. La méthodologie de dessin de ces structures est la suivante :

- Le nombre de niveaux de la minibande est donné par la température de fonctionnement et la largeur spectrale désirée. Ici on a choisi de fonctionner à 300K, et de répondre entre 7 et 10 μm . Les niveaux de la minibande sont es-

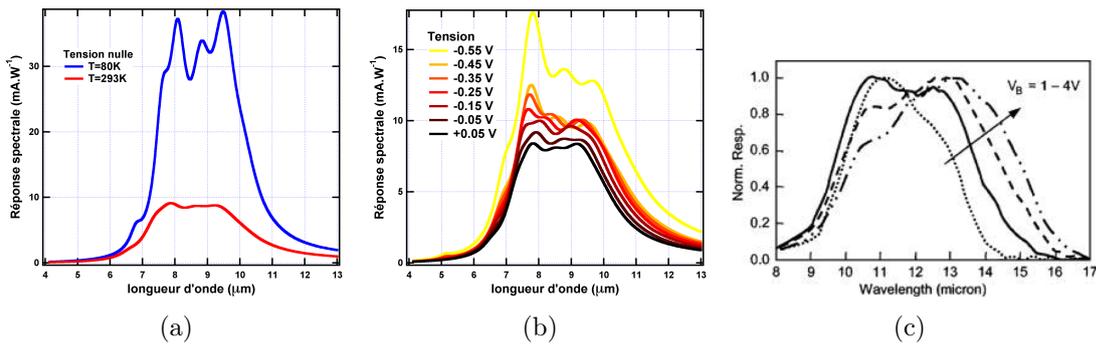


FIGURE 5.18 – Stabilité en température (a), et en tension (b) de la réponse spectrale de la structure large bande AlInGaAs/InP. Dans la mesure où le calcul est mené dans l’algorithme METIS, la valeur absolue de la réponse est sous-estimée. Ce qui importe est la variation de gabarit spectral. (c) : Variation de la réponse spectrale d’un QWIP multi-empilé avec la tension de polarisation. Source Ref. [258].

pacés de 10 meV, *ie* la moitié de l’élargissement intra-sousbande à température ambiante. Dans la minibande, 4 niveaux sur les 7 sont optiquement actifs.

- Equilibrer les forces d’oscillateur en inclinant la minibande : les puits s’élargissent légèrement à mesure qu’on s’éloigne du puits actif. Deux effets sont à compenser : la force d’oscillateur qui diminue avec l’énergie de transition, et le fait que seules les fonctions d’ondes des niveaux centraux (énergétiquement) d’une minibande ont une amplitude significative aux bords (spatialement). On a de plus utilisé une delta-barrière au niveau du deuxième puits de la cascade. Au delà de l’ajustement des forces d’oscillateurs, on s’attend à ce que la rugosité d’interface supplémentaire introduite contribue à fluidifier le transport dans la minibande.
- Drainer le plus efficacement la minibande grâce à une double émission de phonon LO en sortie.

La figure 5.18 illustre la stabilité en tension et en température du gabarit spectrale de réponse de la structure AlInGaAs, et la compare avec une référence de la littérature pour les QWIPs. Le dessin garantit intrinsèquement une très grande robustesse de la réponse QCD. En température, la seule variation notable est due à l’élargissement des niveaux, qui fait apparaître à 80K des pics là où la réponse à température ambiante est quasiment plate. Noter que si ces calculs doivent être confrontés à l’expérience, la faculté de METIS à prédire ce genre de gabarits est fiable. La robustesse en tension est exceptionnelle : le gabarit est similaire sur toute la gamme de tension explorée, qui correspond à un régime standard d’utilisation. En effet, le couplage entre les niveaux de la minibande donne aux niveaux quantiques une solidité d’ensemble, qui permet d’atténuer les modifications induites par l’effet Stark par exemple¹². Cette robustesse est à mettre en regard de la forte variation du gabarit spectral QWIP lorsque la tension de fonctionnement varie, sur la figure 5.18(c).

Le QCD est donc un candidat très sérieux pour la partie détection d’une cellule

12. Ce n’est rien d’autre que la généralisation à plusieurs niveaux de la robustesse des fonctions d’onde symétrique et antisymétrique, et de la dispersion plate quand on passe au travers d’un anti-croisement.

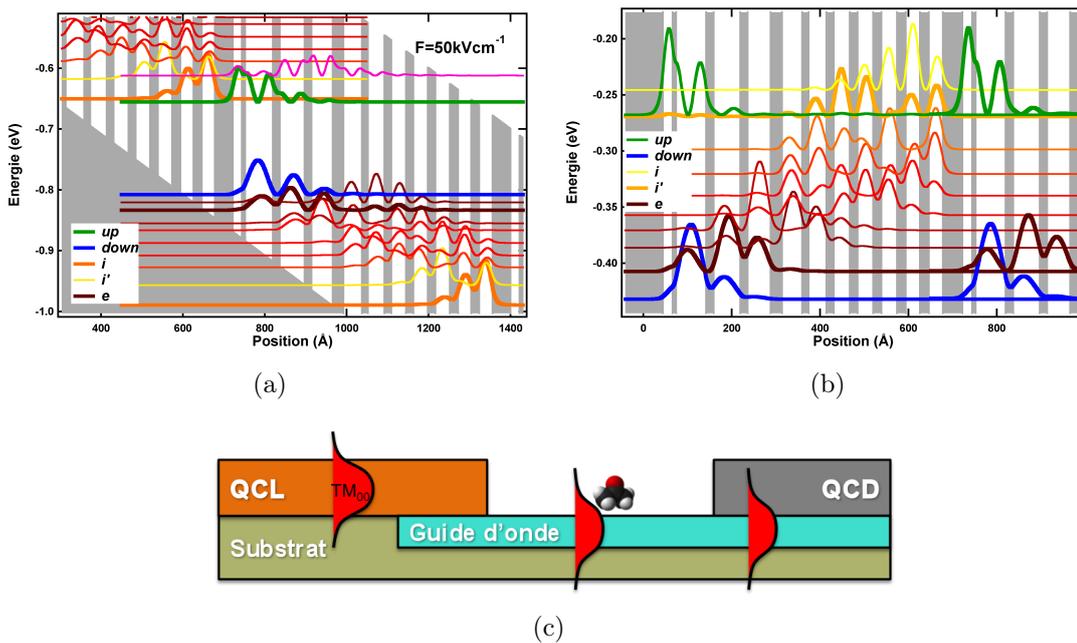


FIGURE 5.19 – Structures de bande d’une période hybride QCL (a) et QCD (b), en AlInGaAs/InP. Le champ nominal d’alignement du QCL est de 50 kV.cm^{-1} , et le QCD est conçu pour fonctionner à 0V. (c) : Schéma de côté d’une cellule spectroscopique intégrée avec un QCL DFB, dont le mode TM_{00} est couplé à un mode faiblement confiné dans le guide d’onde et qui peut interagir avec les molécules de gaz et être absorbé dans le QCD.

de spectroscopie intégrée, dont la source serait un QCL. Il se trouve de plus que dans la configuration propre aux cellules de spectroscopie, la sensibilité des QCDs peut être très élevée. En effet, la faible réponse de ces composants est liée à la règle de sélection dans les puits quantiques, qui rend la structure transparente aux signaux en incidence normale. Mais dans un montage spectroscopique, l’alignement peut être fait de telle sorte qu’on injecte la lumière par la tranche. L’absorption du signal est alors décrite par un taux linéique qui n’est rien d’autre que le gain des QCLs. Le détecteur est sensible et rapide.

Comme montré sur la figure 5.19(c), le montage DFB émet sur un mode TM qui se propage par le guide d’onde. Ce mode est particulièrement bien absorbé par des couches QCDs. Dans la mesure où un QCD n’est que peu différent d’un QCL à tension nulle, on peut imaginer une cellule spectroscopique dans laquelle la source et le détecteur partagent les mêmes couches épitaxiées, mais sont électriquement isolées. Même s’il faut encore fabriquer, déposer et aligner le multiplexeur et la cellule de captation du gaz, la compatibilité technologique entre la source et le détecteur, ainsi que leur alignement *de facto* constituent une très sérieuse étape dans la direction d’une cellule de spectroscopie moyen infrarouge tout intégrée et peu coûteuse. C’est la couche active répondant à un tel cahier des charges que nous nous proposons de calculer pour clore cette partie.

Le point critique d’une structure hybride QCL/QCD est d’atteindre le seuil laser pour la source. Il vaut donc mieux commencer à dessiner la source laser, puis dans un second temps l’adapter aux exigences de la détection. La structure de bande présentée sur la figure 5.19 illustre le résultat d’une telle démarche. Le principe

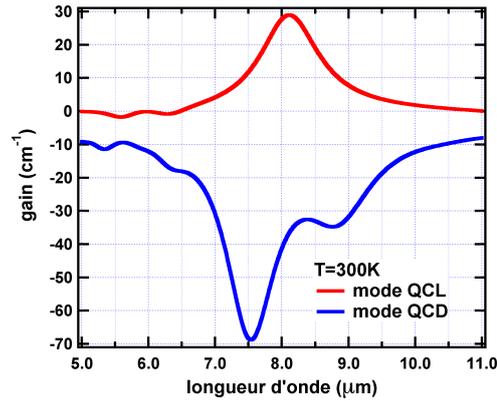


FIGURE 5.20 – Gains spectraux d’une même couche active, selon qu’elle fonctionne en mode QCL sous un champ électrique de 50 kV.cm^{-1} , ou en mode QCD à tension nulle.

du QCL est une transition "bound-to-bound" entre *up* et *down*, avec une injection résonante depuis *i* et une extraction résonante LO de *down* vers *e*. Il y a deux difficultés majeures. La première est de substituer *i* par un autre niveau résonant *i'* qui jouera le rôle d’extracteur à tension nulle, sachant que *i* est repoussé vers les hautes énergies par effet Stark. Accessoirement il est utile de placer *i'* à un phonon LO au dessus de son suivant dans la cascade pour favoriser l’extraction. La seconde difficulté est de garder une énergie *up* – *down* la plus constante possible, entre la tension correspondant à l’alignement laser et la tension nulle. Cette fonction est principalement réalisée par le puits fin très fortement couplé sur la gauche de la zone optique.

Noter que pour cette preuve de principe, nous avons négligé la résolution de l’équation de Poisson et l’effet de la position des charges positives. Cet effet doit pourtant impérativement être pris en compte dans le dessin d’une structure réaliste : en mode QCL, les électrons se situent principalement dans la minibande d’extraction/injection, alors qu’en mode QCD ils peuplent les niveaux *down* et *e*. L’effet de champ induit sera très significatif dans l’un ou l’autre des modes. Il est probable qu’il faudra doper Si dans la zone de minibande, car la configuration QCL est plus exigeante, et que nous avons vu que cela a un effet bénéfique en mode QCD.

Le résultat en terme de gain est présenté sur la figure 5.20. Le gain laser atteint 29 cm^{-1} à $8.1 \mu\text{m}$, là où l’absorption QCD vaut 36.5 cm^{-1} . Cette absorption est en fait la convolution de porteurs promus vers *up* depuis *down* et depuis *e*, ces deux derniers étant quasiment également peuplés à température ambiante. La conception et réalisation d’une telle cellule photonique intégrée est à mon avis un projet scientifiquement passionnant, et technologiquement extrêmement prometteur en terme de retombées applicatives.

Il faut cependant noter que la solution de cellule intégrée QCL/QCD proposée présente ici une bande étroite. Une cellule intégrée bande large comporterait beaucoup trop de contraintes de conception pour pouvoir être menée en première itération. Elle ne pourrait être envisagée qu’à l’aune de l’expérience accumulée en détection QCD large bande d’une part, et en cellule intégrée bande étroite d’autre part. Mais le marché potentiel est immense.

3.2 Plasmonique et QCDs pour l'infrarouge

La capacité à confiner et guider la lumière sur des échelles bien inférieures à la longueur d'onde est bien connue des électroniciens depuis plus d'un siècle. L'utilisation d'ondes de densité de charge (les plasmons) à la surface de métaux pour dépasser la limite de diffraction dans les longueurs d'onde optiques a suscité un intérêt phénoménal depuis l'observation en 1998 de la transmission optique extraordinaire d'un réseau de trous [260]. Le champ de la plasmonique [261, 262] s'est d'abord développé dans le spectre visible et proche infrarouge, puis dans le THz. Les champs applicatifs principaux qui ont émergé sont le photovoltaïque [263], le domaine des senseurs biomoléculaires [264], la microscopie optique à sonde locale (SNOM) [265] et la réalisation de fonctions logiques pour le traitement tout optique de l'information [62].

Le levier qui déterminera *in fine* les systèmes qui pourront sortir des laboratoires sont les pertes dans les métaux ou métamatériaux de confinement. Ces dernières augmentent à mesure que la fréquence du polariton issu du couplage fort entre mode lumineux et plasmon se rapproche de la fréquence plasma, et peuvent devenir prohibitives. D'où l'intérêt de travailler aux plus grandes longueurs d'onde, où le polariton a une plus grande composante photonique et les pertes sont réduites. De nombreuses réalisations ont déjà été démontrées dans le THz, mais l'infrarouge moyen semble au moins aussi prometteur car plusieurs matériaux [266] y présentent des performances élevées en termes de compromis entre capacité de guidage et pertes.

Dans le domaine de la photodétection infrarouge, l'utilisation de réseaux de diffraction métalliques depuis le début des années 1990 [58] relève *stricto sensu* de la plasmonique, car les modes de Bragg des interfaces métal-diélectrique présentent un comportement formellement similaire à un plasmon [270], d'où la dénomination "spoof plasmon". Des structures concentratrices sub-longueur d'onde ont déjà été réalisées avec des réseaux de diffraction "classiques" [271]. Mais on veut discuter ici l'ingénierie optique dans laquelle les plasmons sont utilisés en tant que tels. Ce qui dans certains cas n'est qu'un changement de terminologie, et dans d'autres un véritable changement de la physique mise en oeuvre. Trois grandes fonctions peuvent être adressées, toutes fondées sur un très fort confinement de la lumière.

- **Structures de couplage et amplification du champ de cavité :** En structurant à une ou deux dimensions la face supérieure d'un guide d'onde double métal (cf Fig.5.21(a)), il est possible d'injecter et d'amplifier très fortement le champ électrique dans des modes confinés sous les plots métalliques [267]. Cet effet apparaît lorsque l'épaisseur du guide d'onde devient comparable et inférieure à la longueur d'onde, la fonction de couplage étant assurée par les angles du métal. On peut ainsi réduire le nombre de période nécessaire dans le QCD et augmenter l'efficacité quantique.
- **Concentration de la lumière :** En concentrant la lumière incidente sur une vaste surface vers une petite zone absorbante au moyen d'antennes (cf Fig.5.21(b)), on réduit fortement le ratio aire électrique / aire optique S_E/S_O , [272]. Ainsi le courant d'obscurité n'est généré que par la faible surface S_E , et le courant optique correspond à l'absorption du flux incident sur la grande surface S_O . Avec un effet bénéfique sur le cross-talk entre pixels dans le cas de l'imagerie.
- **Tri de photons :** Si les aires optiques associées à des antennes résonantes à

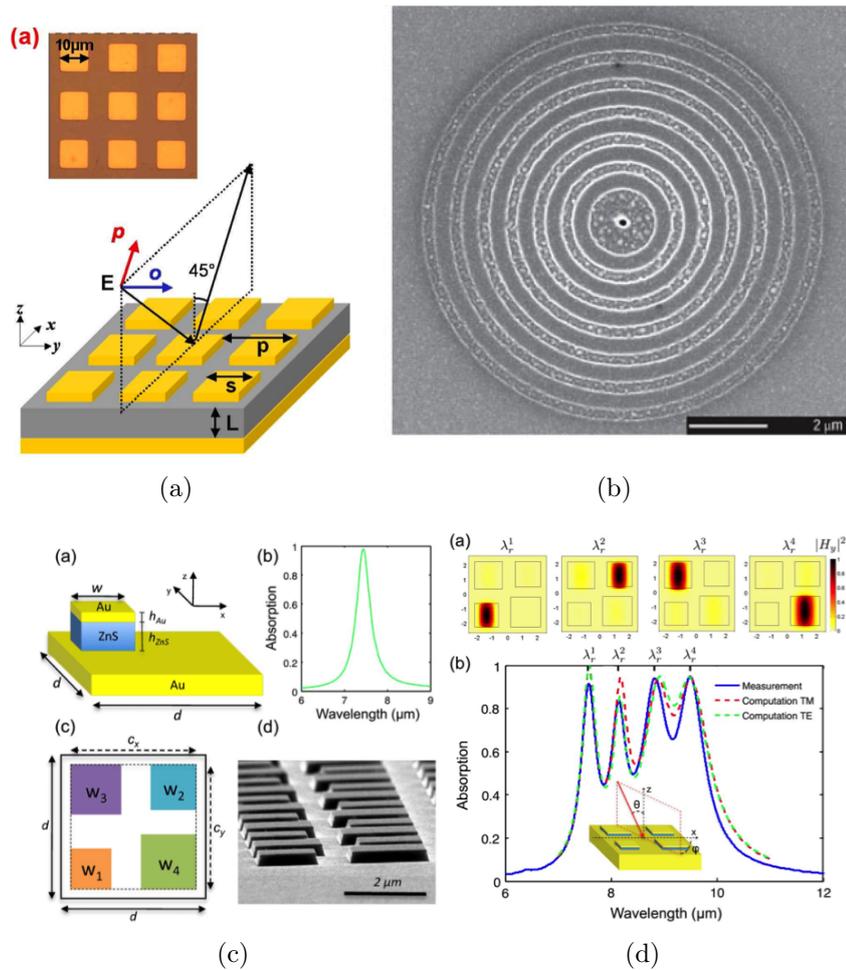


FIGURE 5.21 – (a) : Schéma d’une cavité plasmonique 2D pour le THz. Le champ électrique est fortement confiné sous les plots métalliques. Source Ref. [267]. (b) : Image MEB d’une antenne plasmonique THz circulaire. Le photodétecteur est placé sous le point noir du centre. Source Ref. [268]. (c) : Schéma d’un pixel (de dimension d) fonctionnalisé par quatre plots (w_1 à w_4) résonants à des longueurs d’ondes différentes. (d) : Sur un large spectre de 7 à 10 μm , toute la lumière incidente sur la structure est absorbée sélectivement. Source Ref. [269]

des énergies différentes se recouvrent spatialement, les composantes spectrales de la lumière incidente sur la structure complète sont alors triées et absorbées différenciellement, avec une résolution spatiale qui peut être sub-longueur d'onde (cf Fig. 5.21(c)) [269].

A l'heure où est écrit ce manuscrit, l'état de l'art dans l'infrarouge moyen correspond à la démonstration expérimentale d'absorption totale, large bande et omnidirectionnelle. Mais il reste encore à démontrer clairement une augmentation de la réponse d'un photodétecteur. Le principal verrou technologique est la technique de "wafer-bonding", qui permet d'insérer une très fine couche de matériau entre deux métaux.

Toutes ces nouvelles potentialités sont envisageables grâce à une ingénierie de la cavité optique, ce qui laisse relativement libre le choix de la technologie pour les couches actives. Par rapport à tous ses concurrents, c'est vraisemblablement la technologie QCD qui a le plus à gagner à être insérée dans une cavité plasmonique, car c'est précisément celle qui a la sensibilité la plus faible : l'impact majeur se porte précisément sur son principal (voire unique) défaut, le gain marginal est donc maximum. D'autant plus que les modes confinés ont une polarisation pouvant être absorbée dans les puits quantiques. En renversant le point de vue, le QCD est à mon sens le meilleur candidat pour mettre dans une cavité plasmonique. La raison est double :

- Les structures de couplage et cavités plasmoniques sont par définition résonnantes, comme l'absorption des détecteurs inter-sousbandes. Une couche active interbande perd donc tout le bénéfice de son absorption large bande.
- Pour obtenir un confinement fort, la largeur de la cavité doit être faible. L'épaisseur des détecteurs HgCdTe et super-réseaux n'est pas versatile dans les dessins actuels. La présence de couches n et p de part et d'autre de la zone d'absorption ainsi que les zones de déplétion rendent difficiles la modification de l'épaisseur. Il en va autrement pour le QCD dont l'épaisseur peut être ajustée sans contrainte par le choix du nombre de périodes (jusqu'à un QCD à une seule période qui pourrait présenter une efficacité quantique de 100%). La liberté est moins grande dans les QWIPs car l'hypothèse de champ homogène y est moins vérifiée. Cela rend les performances linéairement dépendantes du nombre de période. D'autre part, les fonctionnalisations plasmoniques demandent souvent des gravures du semiconducteur qui introduisent des courants de fuite dans les technologies p-n et pas dans les QCDs qui sont n-n.

4 Bilan : QCD vs QWIPs

Une dizaine d'année après leurs premières démonstrations [77, 78], les détecteurs à cascade quantique ne sont jamais sortis des laboratoires de physique. Aucune matrice de plan focal n'a été réalisée. Au delà de la conjoncture historique, cet échec apparent est la conséquence d'un constat simple : il est difficile de croire à l'avenir d'un détecteur dont la caractéristique principale est une faible sensibilité. Car psychologiquement, le véritable critère de mérite de la communauté des photodétecteurs infrarouges est plus l'amplitude absolue du signal que le rapport signal à bruit. Là où le QWIP est déjà montré du doigt pour sa faible réponse, proposer une alternative avec une réponse encore plus faible semble conduire à une impasse.

Les travaux menés dans ce chapitre réfutent fortement ce pessimisme. Il faut avoir accepté cette faiblesse avec lucidité, pour se rendre compte qu'elle est transcendée par les autres atouts du QCD. Au delà de ceux liés à la parenté avec les QWIPs, et de la comparaison avec les autres technologies infrarouges discutées au chapitre 1, quatre grands critères positionnent favorablement les QCDs par rapport aux QWIPs eux-mêmes.

Fonctionnement photovoltaïque. Qualitativement, les QWIPs deviennent une alternative valable aux MCT lorsque leur faible réponse ne les pénalise plus, *ie* pour les longs temps d'intégration. L'absence de bruit $1/f$ des technologies III-V devient alors significative et les rend plus compétitives. La structure QCD s'inscrit dans cette dynamique, seulement elle va un cran plus loin : le courant d'obscurité peut être nul en condition de fonctionnement. Si le gain est marginal par rapport aux QWIPs pour les applications à fort taux de rafraîchissement comme l'imagerie embarquée Catherine XP, les QCDs sont pertinents pour les applications d'imagerie hyperspectrale [15, 232]. Ils pourraient l'être encore plus dans des missions comme celle du projet METIS de l'ESA [13], dont le but est de chercher des exoplanètes par coronographie avec des temps d'intégration qui dépassent le millier de secondes.

Possibilité de modèles prédictifs. La nature intégralement bi-dimensionnelle du transport dans les QCDs (et son caractère série) permet de modéliser ces structures dans un cadre formel cohérent. Bien que cela soit satisfaisant du point de vue conceptuel, le plus important ici est la possibilité de prédire les performances des dispositifs avec une précision quantitative à partir de principes microscopiques. L'ingénierie quantique est grandement facilitée. Plus largement, le modèle du QCD idéal illustre les avantages à posséder un outil quantitatif d'aide à la décision. Cerner les potentialités d'une technologie permet de concentrer les efforts sur les pistes les plus prometteuses, et de quantifier la marge de progression. Cela permet aussi de se situer plus facilement (et plus favorablement) par rapport aux autres technologies. Un grand problème politique de la filière QWIP, pour laquelle un tel modèle n'existe pas, est qu'elle doit souvent comparer ses performances réelles aux performances théoriques de ses concurrents.

Versatilité du dessin. Alors que QWIPs et QCLs ont été inventés pratiquement en même temps il y a une vingtaine d'années, ils sont aujourd'hui étudiés et utilisés dans des proportions très différentes. Une des raisons à cela est la versatilité du dessin : pour un couple donné de matériaux barrières et puits, le QWIP ne possède finalement pas un grand nombre de degrés de liberté. De l'autre côté, il suffit de regarder l'ensemble des structures QCL en InGaAs/InP (sans contraintes) pour comprendre l'avantage que confère à la filière QCD le nombre de degrés de liberté du dessin des périodes. Nous l'avons illustré dans ce chapitre en proposant des structures plus performantes grâce au déplacement du dopage et à l'ajustement des puits correspondants, ou bien en démontrant théoriquement la robustesse, la souplesse et les performances de structures large bande.

Rapidité. Le temps de réponse des détecteurs inter-sousbandes est intrinsèquement lié au temps d'émission de phonon LO, généralement inférieur à la picoseconde,

ce qui les rend particulièrement pertinents dans des applications fort flux et haute fréquence. La démonstration de QCL émettant des puissances optiques supérieures au Watt redistribue les cartes pour la partie détecteur de montages spectroscopiques. D'autant plus qu'on peut dans ce cas injecter la lumière par la tranche dans les structures à puits quantiques, configuration dans laquelle l'efficacité quantique peut atteindre l'unité. La communication en espace libre est aussi un domaine prometteur. Dans cette perspective de vitesse, les QCDs sont meilleurs que les QWIPs car le transport s'y déroule en série : la linéarité à fort flux optique est mieux vérifiée et la limitation des temps de réponse par les phénomènes de capture n'existe pas.

En résumé, le QCD possède une double filiation avec le QWIP et le QCL. Il bénéficie donc de la diffusion des savoirs théoriques et savoirs-faire technologiques développés pour ses parents. L'avenir de cette filière ne réside pas à mon avis dans les applications d'imagerie, sauf si des cavités plasmoniques performantes peuvent être fabriquées en plans focaux. La spectroscopie infrarouge intégrée semble beaucoup plus prometteuse. Pour conclure sur une analogie psychanalytique, il est temps pour le détecteur à cascade quantique de quitter le giron protecteur mais réducteur de la mère-QWIP, et de se confronter au père-QCL.

Conclusion

Les travaux effectués au cours de cette thèse portent sur la compréhension et la modélisation du transport électronique dans les détecteurs inter-sousbandes, dans le but d'optimiser les performances de détecteurs à cascade quantique dans la gamme de l'infrarouge. Un effort particulier a été consacré la description de la physique des composants, notamment au travers du prisme de l'articulation entre échelle microscopique des phénomènes quantiques et échelle macroscopique des mesures et des dispositifs.

La diffusion est la clef de voûte des savoirs élaborés ici. Fondamentalement, elle correspond à la vision aux temps longs d'un phénomène de couplage entre états quantiques sous l'effet d'une perturbation. Traiter un phénomène en diffusion implique nécessairement une partition conceptuelle des temps caractéristiques qui régissent le transport. Cette partition est à la fois porteuse de sens et source d'erreur. Porteuse de sens, car dans le continuum qui va de l'infiniment rapide à la seconde, elle singularise une échelle temporelle pertinente pour décrire les phénomènes. Source d'erreur, car les frontières qu'elle trace réduisent le problème et peuvent être traversées par la réalité expérimentale.

Notre compréhension du transport dans les détecteurs à cascade quantique, déployée au sein du formalisme de l'équation de Boltzmann, identifie cette partition au niveau du temps qui régit la dynamique inter-sousbandes. Dans le chapitre 2, l'étude détaillée d'un QCD à $15 \mu m$ a montré que le modèle de hopping Wannier-Stark échoue à prédire courant et réponse car il considère les effets de délocalisation cohérente des électrons comme instantanés par rapport à la localisation induite par la diffusion. En défaisant partiellement la partition des temps tunnel et diffusif, le modèle hybride que nous avons proposés permet d'atteindre une précision quantitative pour le calcul *a priori* du courant d'obscurité dans les QCDs. Si la compréhension des mécanismes de réponse atteint grâce à ce travail une précision qualitative, elle se heurte aujourd'hui à la réduction induite par la diffusion, et justifie le besoin d'un formalisme en matrice densité pour pouvoir optimiser ces structures.

Dans un QWIP, pour les états du continuum au dessus des barrières, la diffusion correspond à une échelle de temps caractéristique bien différente de la diffusion pour les états liés dans les puits. Cette dichotomie explique pourquoi il a été difficile au chapitre 3, et en dépit de nombreux arguments qualitatifs, de justifier par le calcul que l'ionisation par impact inter-sousbandes est à l'origine d'une transition de phase hors équilibre dans des QWIPs THz à très basse température. Une étude approfondie des effets de charges d'espace a néanmoins permis de comprendre en profondeur les changements de régimes de transport.

La vraie réduction n'est peut être pas tant induite par le traitement en diffusion que par le traitement en valeur moyenne du transport électronique. La densité spec-

trale de bruit, exprimée en fonction de la fréquence, permet en effet de traiter le continuum des échelles temporelles caractéristiques du transport. L'étude proposée au chapitre 4 a montré que le bruit dans les détecteurs inter-sousbandes peut être compris et calculé avec une précision quantitative en gérant rigoureusement l'articulation entre les échelles de description. En particulier, bruits shot et Johnson, loin d'être des sources indépendantes, sont la vision court terme et long terme d'un seul phénomène. Ce chapitre change totalement le paradigme de l'optimisation des dispositifs. Là où on travaillait à l'amélioration de la réponse en espérant impacter un minimum le bruit, l'optimisation se fait désormais directement sur le rapport signal à bruit.

A la question transverse de la diffusion dans les QCDs, le dernier chapitre répond en discutant de la diffusion de la technologie QCD. Fruits de l'alliance entre les QWIPs et les QCLs, ces détecteurs III-V transcendent leur faible sensibilité par une versatilité, une rapidité et une intégrabilité majeures. Leur pertinence dans le domaine de l'imagerie, déjà réelle dans les applications à long temps d'intégration, sera renforcée par l'interaction avec des fonctionnalités issues de la plasmonique. Mais c'est plus probablement face à des QCLs au sein de cellules spectroscopiques tout intégrées que leur avenir se jouera.

Bibliographie

- [1] L. ESAKI et R. TSU, « Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors », *IBM Journal of Research and Development*, vol. 14, no. 1, p. 61–65, 1970.
- [2] W. HERSCHEL, « Investigation of the powers of the prismatic colours to heat and illuminate objects », *Philosophical Transactions of the royal Society of London*, vol. 90, p. 255–283, 1800.
- [3] G. KIRCHHOFF, « Ueber das verhältniss zwischen dem emissionsvermögen und dem absorptionsvermögen der körper für wärme und licht », *Annalen der Physik*, vol. 185, no. 2, p. 275–301, 1860.
- [4] M. PLANCK, « Ueber eine verbesserung der wien'schen spectralgleichung », *Verh. Deut. Phys. Ges*, vol. 2, p. 202–204, 1900.
- [5] M. PLANCK, « Entropie und temperatur strahlender wärme », *Annalen der Physik*, vol. 306, no. 4, p. 719–737, 1900.
- [6] M. PLANCK, « Ueber irreversible strahlungsvorgänge », *Annalen der Physik*, vol. 306, no. 1, p. 69–122, 1900.
- [7] J. STEFAN, *Über die Beziehung zwischen der Wärmestrahlung und der Temperatur*. 1879.
- [8] W. WIEN, « Ueber die energievertheilung im emissionsspectrum eines schwarzen körpers », *Annalen der Physik*, vol. 294, no. 8, p. 662–669, 1896.
- [9] K. MIZUNO, J. ISHII, H. KISHIDA, Y. HAYAMIZU, S. YASUDA, D. FUTABA, M. YUMURA et K. HATA, « A black body absorber from vertically aligned single-walled carbon nanotubes », *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 106, no. 15, p. 6044, 2009.
- [10] S. I. LLC, « <http://www.skinfrared.com/> ».
- [11] E. LHUILLIER, *Transport électronique dans les super réseaux : applications aux détecteurs infrarouges à grandes longueur d'onde*. Thèse de doctorat, Ecole Polytechnique, 2010.
- [12] C. FRIDLUND, « The darwin mission », *Advances in Space Research*, vol. 34, no. 3, p. 613–617, 2004.
- [13] B. BRANDL, J. BLOMMAERT, A. GLASSE, R. LENZEN et E. PANTIN, « Me-tis : A mid-infrared e-elt imager and spectrograph », *The Messenger*, vol. 140, p. 30–31, 2010.
- [14] A. NEDELCO, Y. CRETEN, V. GUÉRIAUX, A. BÉRURIER, T. BRIA, N. Brière de L'ISLE et C. VAN HOOFF, « Enhanced broadband (11-15 μm)

- qwip fpas for space applications », in *Proceedings of SPIE, the International Society for Optical Engineering*, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, 2010.
- [15] M. JHABVALA, D. REUTER, K. CHOI, C. JHABVALA et M. SUNDARAM, « Qwip-based thermal infrared sensor for the landsat data continuity mission », *Infrared Physics & Technology*, vol. 52, no. 6, p. 424–429, 2009.
- [16] A. ROGALSKI et K. CHRZANOWSKI, « Infrared devices and techniques », *Optoelectronics Review*, no. 2, p. 111–136, 2002.
- [17] A. ROGALSKI, *Fundamentals of infrared detector technologies*. CRC, 2009.
- [18] P. KLOCEK, *Handbook of infrared optical materials*, vol. 30. CRC, 1991.
- [19] G. BOREMAN, *Modulation transfer function in optical and electro-optical systems*. SPIE Press Bellingham, WA, 2001.
- [20] A. ROSE, *Concepts in photoconductivity and allied problems*. Krieger New York, 1978.
- [21] W. WOLFE et P. KRUSE, *Thermal detectors*, vol. 2 in *Handbook of optics*, chapter 28. McGraw-Hill, third éd., 2001.
- [22] P. KRUSE, *Uncooled thermal imaging : Arrays, systems, and applications*, vol. 51. Society of Photo Optical, 2001.
- [23] P. RICHARDS, « Bolometers for infrared and millimeter waves », *Journal of Applied Physics*, vol. 76, no. 1, p. 1–24, 1994.
- [24] U. of KIEL, « http://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/semitech_en/kap_2/backbone/r2_3_1.html ».
- [25] A. ROGALSKI, J. ANTOSZEWSKI et L. FARAONE, « Third-generation infrared photodetector arrays », *Journal of Applied Physics*, vol. 105, no. 9, p. 091101–091101, 2009.
- [26] M. HENINI et M. RAZEGHI, *Handbook of infrared detection technologies*. Elsevier Science, 2002.
- [27] O. NESHER et P. KLIPSTEIN, « High-performance ir detectors at scd present and future », *Opto-Electronics Review*, vol. 14, no. 1, p. 59–68, 2006.
- [28] A. ROUVIÉ, J. REVERCHON, O. HUET, A. DJEDIDI, J. ROBO, J. TRUFFER, T. BRIA, M. PIRES, J. DECOBERT et E. COSTARD, « Ingaas focal plane array developments at iii-v lab », in *Proceedings of SPIE*, vol. 8353, p. 835308, 2012.
- [29] R. FRAENKEL, D. ARONOV, Y. BENNY, E. BERKOWICZ, L. BYKOV, Z. CALAHORRA, T. FISHMAN, A. GILADI, E. ILAN, P. KLIPSTEIN *et al.*, « Scd's cooled and uncooled photo detectors for nir swir », in *Proceedings of SPIE*, vol. 8353, p. 835305, 2012.
- [30] P. NORTON, « HgCdTe infrared detectors », *Optoelectronics review*, no. 3, p. 159–174, 2002.
- [31] A. ROGALSKI, « HgCdTe infrared detector material : history, status and outlook », *Reports on Progress in Physics*, vol. 68, p. 2267, 2005.
- [32] W. TENNANT, « Rule 07 revisited : Still a good heuristic predictor of p/n hgCdTe photodiode performance? », *Journal of Electronic Materials*, vol. 39, no. 7, p. 1030–1035, 2010.

- [33] M. VUILLERMET, D. BILLON-LANFREY, Y. REIBEL, A. MANISSADJIAN, L. MOLLARD, N. BAIER, O. GRAVRAND et G. DESTÉFANIS, « Status of mct focal plane arrays in france », in *Proceedings of SPIE*, vol. 8353, p. 83532K, 2012.
- [34] P. BRATT, S. JOHNSON, D. RHIGER, T. TUNG, M. KALISHER, W. RADFORD, G. GARWOOD et C. COCKRUM, « Historical perspectives on hgcdte material and device development at raytheon vision systems », in *Proceedings of SPIE*, vol. 7298, p. 72982U, 2009.
- [35] D. SMITH et C. MAILHIOT, « Proposal for strained type ii superlattice infrared detectors », *Journal of applied physics*, vol. 62, no. 6, p. 2545–2548, 1987.
- [36] G. C. DENTE et M. L. TILTON, « Pseudopotential methods for superlattices : Applications to mid-infrared semiconductor lasers », *Journal of Applied Physics*, vol. 86, no. 3, p. 1420–1429, 1999.
- [37] J. RODRIGUEZ, P. CHRISTOL, L. CERUTTI, F. CHEVRIER et A. JOULLIÉ, « Mbe growth and characterization of type-ii inas/gasb superlattices for mid-infrared detection », *Journal of crystal growth*, vol. 274, no. 1, p. 6–13, 2005.
- [38] G. CHEN, B. NGUYEN, A. HOANG, E. HUANG, S. DARVISH et M. RAZEGHI, « Elimination of surface leakage in gate controlled type-ii inas/gasb mid-infrared photodetectors », *Applied Physics Letters*, vol. 99, no. 18, p. 183503–183503, 2011.
- [39] H. KIM, E. PLIS, N. GAUTAM, S. MYERS, Y. SHARMA, L. R. DAWSON et S. KRISHNA, « Reduction of surface leakage current in inas/gasb strained layer long wavelength superlattice detectors using su-8 passivation », *Applied Physics Letters*, vol. 97, no. 14, p. 143512, 2010.
- [40] E. STEENBERGEN, B. CONNELLY, G. METCALFE, H. SHEN, M. WRABACK, D. LUBYSHEV, Y. QIU, J. FASTENAU, A. LIU, S. ELHAMRI *et al.*, « Significantly improved minority carrier lifetime observed in a long-wavelength infrared iii-v type-ii superlattice comprised of inas/inassb », *Applied Physics Letters*, vol. 99, no. 25, p. 251110–251110, 2011.
- [41] A. HADDADI, S. DARVISH, G. CHEN, M. HOANG, B. NGUYEN et M. RAZEGHI, « High operability 1024 x 1024 long wavelength type-ii superlattice focal plane array », *Quantum Electronics, IEEE Journal of*, no. 99, p. 1–1, 2012.
- [42] R. REHM, M. WALTHER, J. FLEISSNER, J. SCHMITZ, J. ZIEGLER, W. CABANSKI et R. BREITER, « Bispectral thermal imaging with quantum-well infrared photodetectors and inas/gasb type-ii superlattices », vol. 6206, p. 62060Y, SPIE, 2006.
- [43] N. GAUTAM, M. NAYDENKOV, S. MYERS, A. V. BARVE, E. PLIS, T. ROTTER, L. R. DAWSON et S. KRISHNA, « Three color infrared detector using inas/gasb superlattices with unipolar barriers », *Applied Physics Letters*, vol. 98, no. 12, p. 121106, 2011.
- [44] H. SCHNEIDER, H. LIU et S. S. en LIGNE), *Quantum well infrared photodetectors : physics and applications*. Springer, 2007.
- [45] S. GUNAPALA, S. BANDARA, J. LIU, J. MUMOLO, D. TING, C. HILL, J. NGUYEN, B. SIMOLON, J. WOOLAWAY, S. WANG *et al.*, « Demonstration

- of megapixel dual-band qwip focal plane array », *Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 46, no. 2, p. 285–293, 2010.
- [46] P. GRANT, R. DUDEK, M. BUCHANAN, L. WOLFSON et H. LIU, « An ultra fast quantum well infrared photodetector », *Infrared physics & technology*, vol. 47, no. 1-2, p. 144–152, 2005.
- [47] J. BELETIC, R. BLANK, D. GULBRANSEN, D. LEE, M. LOOSE, E. PIQUETTE, T. SPRAFKE, W. TENNANT, M. ZANDIAN et J. ZINO, « Teledyne imaging sensors : infrared imaging technologies for astronomy & civil space », in *Proceedings of the SPIE*, vol. 7201, 2008.
- [48] S. POUR, E. HUANG, G. CHEN, A. HADDADI, B. NGUYEN et M. RAZE-GHI, « High operating temperature midwave infrared photodiodes and focal plane arrays based on type-ii inas/gasb superlattices », *Applied Physics Letters*, vol. 98, p. 143501, 2011.
- [49] R. TSU et L. ESAKI, « Tunneling in a finite superlattice », *Applied Physics Letters*, vol. 22, no. 11, p. 562–564, 1973.
- [50] G. BASTARD, « Superlattice band structure in the envelope-function approximation », *Physical Review B*, vol. 24, no. 10, p. 5693, 1981.
- [51] G. BASTARD, *Wave mechanics applied to semiconductors*. Les éditions de Physique (CNRS, Paris, 1988), 1988.
- [52] E. ROSENCHER et B. VINTER, *Optoélectronique : cours et exercices corrigés*. Dunod, 2002.
- [53] E. BENVENISTE, A. VASANELLI, A. DELTEIL, J. DEVENSON, R. TEISSIER, A. BARANOV, A. ANDREWS, G. STRASSER, I. SAGNES et C. SIRTORI, « Influence of the material parameters on quantum cascade devices », *Applied Physics Letters*, vol. 93, no. 13, p. 131108–131108, 2008.
- [54] F. CAROSELLA, C. NDEBEKA-BANDOU, R. FERREIRA, E. DUPONT, K. UNTERRAINER, G. STRASSER, A. WACKER et G. BASTARD, « Free-carrier absorption in quantum cascade structures », *Physical Review B*, vol. 85, no. 8, p. 085310, 2012.
- [55] A. DE ROSSI, E. COSTARD, N. GUERINEAU et S. ROMMELUERE, « Effect of finite pixel size on optical coupling in qwips », *Infrared physics & technology*, vol. 44, no. 5-6, p. 325–330, 2003.
- [56] H. SCHNEIDER, J. FLEISSNER, R. REHM, M. WALTHER, W. PLETSCHEN, P. KOIDL, G. WEIMANN, J. ZIEGLER, R. BREITER et W. CABANSKI, « High-resolution qwip fpas for the 8-12 μm and 3-5 μm regimes », in *Proc. SPIE*, vol. 4820, p. 297–305, 2003.
- [57] J. ANDERSSON, L. LUNDQVIST et Z. PASKA, « Quantum efficiency enhancement of algaas/gaas quantum well infrared detectors using a waveguide with a grating coupler », *Applied physics letters*, vol. 58, no. 20, p. 2264–2266, 1991.
- [58] J. Y. ANDERSSON et L. LUNDQVIST, « Grating-coupled quantum-well infrared detectors : Theory and performance », *Journal of Applied Physics*, vol. 71, no. 7, p. 3600–3610, 1992.
- [59] M. CARRAS et A. DE ROSSI, « Photonic modes of metallodielectric periodic waveguides in the midinfrared spectral range », *Physical Review B*, vol. 74, no. 23, p. 235120, 2006.

- [60] M. CARRAS et A. DE ROSSI, « Field concentration by exciting surface defect modes », *Optics letters*, vol. 31, no. 1, p. 47–49, 2006.
- [61] T. ANTONI, *Structures de couplage optique originales pour les détecteurs infrarouge à puits quantiques*. Thèse de doctorat, Université Paris Diderot, 2009.
- [62] D. GRAMOTNEV et S. BOZHEVOLNYI, « Plasmonics beyond the diffraction limit », *Nature Photonics*, vol. 4, no. 2, p. 83–91, 2010.
- [63] B. LEVINE, K. CHOI, C. BETHEA, J. WALKER et R. MALIK, « New 10 μm infrared detector using intersubband absorption in resonant tunneling gaalas superlattices », *Applied physics letters*, vol. 50, no. 16, p. 1092–1094, 1987.
- [64] B. LEVINE, « Quantum-well infrared photodetectors », *Journal of applied physics*, vol. 74, no. 8, p. R1–R81, 1993.
- [65] H. LIU, A. STEELE, M. BUCHANAN et Z. WASILEWSKI, « Dark current in quantum well infrared photodetectors », *Journal of applied physics*, vol. 73, no. 4, p. 2029–2031, 1993.
- [66] J. BRUM et G. BASTARD, « Resonant carrier capture by semiconductor quantum wells », *Physical Review B*, vol. 33, no. 2, p. 1420, 1986.
- [67] M. ERSHOV, V. RYZHII et C. HAMAGUCHI, « Contact and distributed effects in quantum well infrared photodetectors », *Applied physics letters*, vol. 67, p. 3147, 1995.
- [68] L. THIBAudeau, P. BOIS et J. DUBOZ, « A self-consistent model for quantum well infrared photodetectors », *Journal of applied physics*, vol. 79, no. 1, p. 446–454, 1996.
- [69] V. RYZHII, « Characteristics of quantum well infrared photodetectors », *Journal of applied physics*, vol. 81, no. 9, p. 6442–6448, 1997.
- [70] H. LIU, « Photoconductive gain mechanism of quantum-well intersubband infrared detectors », *Applied physics letters*, vol. 60, no. 12, p. 1507–1509, 1992.
- [71] M. ERSHOV, H. LIU, M. BUCHANAN, Z. WASILEWSKI et V. RYZHII, « Photoconductivity nonlinearity at high excitation power in quantum well infrared photodetectors », *Applied physics letters*, vol. 70, p. 414, 1997.
- [72] M. RYZHII et V. RYZHII, « Monte carlo analysis of ultrafast electron transport in quantum well infrared photodetectors », *Applied physics letters*, vol. 72, p. 842, 1998.
- [73] V. JOVANOVIĆ, P. HARRISON, Z. IKONIC et D. INDJIN, « Physical model of quantum-well infrared photodetectors », *J. of Appl. Phys.*, vol. 96, no. 1, p. 269–272, 2004.
- [74] V. TRINITÉ, E. OUERGHEMMI, V. GUÉRIAUX, M. CARRAS, A. NEDELCO, E. COSTARD et J. NAGLE, « Modelling of electronic transport in quantum well infrared photodetectors », *Infrared Phys. & Tech.*, vol. 54, no. 3, p. 204 – 208, 2011.
- [75] A. BUFFAZ, A. GOMEZ, M. CARRAS, L. DOYENNETTE et V. BERGER, « Role of subband occupancy on electronic transport in quantum cascade detectors », *Phys. Rev. B*, vol. 81, no. 7, p. 075304, 2010.
- [76] J. FAIST, F. CAPASSO, D. SIVCO, C. SIRTORI, A. HUTCHINSON et A. CHO, « Quantum cascade laser », *Science*, vol. 264, no. 5158, p. 553, 1994.

- [77] D. HOFSTETTER, M. BECK et J. FAIST, « Quantum-cascade-laser structures as photodetectors », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 81, p. 2683, 2002.
- [78] L. GENDRON, M. CARRAS, A. HUYNH, V. ORTIZ, C. KOENIGUER et V. BERGER, « Quantum cascade photodetector », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 85, p. 2824, 2004.
- [79] L. GENDRON, C. KOENIGUER, V. BERGER et X. MARCADET, « High resistance narrow band quantum cascade photodetectors », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 86, no. 12, p. 121116–121116, 2005.
- [80] M. GRAF, N. HOYLER, M. GIOVANNINI, J. FAIST et D. HOFSTETTER, « Inp-based quantum cascade detectors in the mid-infrared », *Applied physics letters*, vol. 88, no. 24, p. 241118–241118, 2006.
- [81] D. HOFSTETTER, M. GRAF, T. AELLEN, J. FAIST, L. HVOZDARA et S. BLASER, « 23 ghz operation of a room temperature photovoltaic quantum cascade detector at 5.35 μm », *Applied physics letters*, vol. 89, p. 061119, 2006.
- [82] F. R. GIORGETTA, E. BAUMANN, M. GRAF, L. AJILI, N. HOYLER, M. GIOVANNINI, J. FAIST, D. HOFSTETTER, P. KRÖTZ et G. SONNABEND, « 16.5 μm quantum cascade detector using miniband transport », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 90, p. 231111, 2007.
- [83] F. GIORGETTA, E. BAUMANN, D. HOFSTETTER, C. MANZ, Q. YANG, K. KOHLER et M. GRAF, « Ingaas/alassb quantum cascade detectors operating in the near infrared », *Applied Physics Letters*, vol. 91, no. 11, p. 111115–111115, 2007.
- [84] D. HOFSTETTER, F. GIORGETTA, E. BAUMANN, Q. YANG, C. MANZ et K. KÖHLER, « Midinfrared quantum cascade detector with a spectrally broad response », *Applied Physics Letters*, vol. 93, no. 22, p. 221106, 2008.
- [85] A. BUFFAZ, M. CARRAS, L. DOYENNETTE, A. NEDELUCU, X. MARCADET et V. BERGER, « Quantum cascade detectors for very long wave infrared detection », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 96, no. 17, p. 172101–172101, 2010.
- [86] 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*, vol. 84, p. 475, 2004.
- [87] A. VARDI, G. BAHIR, F. GUILLOT, C. BOUGEROL, E. MONROY, S. SCHACHAM, M. TCHERNYCHEVA et F. JULIEN, « Near infrared quantum cascade detector in gan/algan/aln heterostructures », *Applied Physics Letters*, vol. 92, no. 1, p. 011112–011112, 2008.
- [88] S. SAKR, E. GIRAUD, A. DUSSAIGNE, M. TCHERNYCHEVA, N. GRANDJEAN et F. JULIEN, « Two-color gan/algan quantum cascade detector at short infrared wavelengths of 1 and 1.7 μm », *Applied Physics Letters*, vol. 100, no. 18, p. 181103–181103, 2012.
- [89] C. KOENIGUER, G. DUBOIS, A. GOMEZ et V. BERGER, « Electronic transport in quantum cascade structures at equilibrium », *Physical Review B*, vol. 74, no. 23, p. 235325, 2006.
- [90] A. GOMEZ, N. PÉRÉ-LAPERNE, L. DE VAULCHIER, C. KOENIGUER, A. VASANELLI, A. NEDELUCU, X. MARCADET, Y. GULDNER et V. BERGER, « Dark

- current analysis of quantum cascade detectors by magnetoresistance measurements », *Physical Review B*, vol. 77, no. 8, p. 085307, 2008.
- [91] A. BUFFAZ, M. CARRAS, L. DOYENNETTE, V. TRINITÉ, X. MARCADET et V. BERGER, « Long range resonant tunneling in quantum cascade structures », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 96, p. 162103, 2010.
- [92] F. JASNOT, N. PÉRÉ-LAPERNE, L. DE VAULCHIER, Y. GULDNER, F. CARSELLA, R. FERREIRA, A. BUFFAZ, L. DOYENNETTE, V. BERGER, M. CARRAS *et al.*, « Photocurrent analysis of quantum cascade detectors by magnetotransport », *Physical Review B*, vol. 82, no. 12, p. 125447, 2010.
- [93] V. RYZHII, « The theory of quantum-dot infrared phototransistors », *Semiconductor science and technology*, vol. 11, p. 759, 1996.
- [94] J. PHILLIPS, K. KAMATH et P. BHATTACHARYA, « Far-infrared photoconductivity in self-organized inas quantum dots », *Applied physics letters*, vol. 72, p. 2020, 1998.
- [95] H. LIU, M. GAO, J. MCCAFFREY, Z. WASILEWSKI et S. FAFARD, « Quantum dot infrared photodetectors », *Applied Physics Letters*, vol. 78, p. 79, 2001.
- [96] S. KRISHNA, « Quantum dots-in-a-well infrared photodetectors », *Infrared physics & technology*, vol. 47, no. 1-2, p. 153–163, 2005.
- [97] A. MOHAN, P. GALLO, M. FELICI, B. DWIR, A. RUDRA, J. FAIST et E. KAPON, « Record-low inhomogeneous broadening of site-controlled quantum dots for nanophotonics. », *Small (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)*, vol. 6, no. 12, p. 1268, 2010.
- [98] S. KEULEYAN, E. LHUILLIER, V. BRAJUSKOVIC et P. GUYOT-SIONNEST, « Mid-infrared hgte colloidal quantum dot photodetectors », *Nature Photonics*, vol. 5, no. 8, p. 489–493, 2011.
- [99] E. SCHÖLL, *Theory of transport properties of semiconductor nanostructures*, vol. 4. Chapman-Hall, 1997.
- [100] K. BLUM, *Density matrix theory and applications*. Springer, 2012.
- [101] S. LEE et A. WACKER, « Nonequilibrium green's function theory for transport and gain properties of quantum cascade structures », *Physical Review B*, vol. 66, no. 24, p. 245314, 2002.
- [102] E. CIANCIO, R. IOTTI et F. ROSSI, « Gauge-invariant formulation of high-field transport in semiconductors », *Physical Review B*, vol. 69, no. 16, p. 165319, 2004.
- [103] U. EKENBERG, « Nonparabolicity effects in a quantum well : sublevel shift, parallel mass, and landau levels », *Physical Review B*, vol. 40, no. 11, p. 7714, 1989.
- [104] D. NELSON, R. MILLER et D. KLEINMAN, « Band nonparabolicity effects in semiconductor quantum wells », *Physical Review B*, vol. 35, no. 14, p. 7770, 1987.
- [105] C. SIRTORI, F. CAPASSO, J. FAIST et S. SCANDOLO, « Nonparabolicity and a sum rule associated with bound-to-bound and bound-to-continuum inter-subband transitions in quantum wells », *Physical Review B*, vol. 50, no. 12, p. 8663, 1994.

- [106] T. UNUMA, M. YOSHITA, T. NODA, H. SAKAKI et H. AKIYAMA, « Intersubband absorption linewidth in gas quantum wells due to scattering by interface roughness, phonons, alloy disorder, and impurities », *Journal of applied physics*, vol. 93, no. 3, p. 1586–1597, 2003.
- [107] S. TSUJINO, A. BORAK, E. MÜLLER, M. SCHEINERT, C. FALUB, H. SIGG, D. GRÜTZMACHER, M. GIOVANNINI et J. FAIST, « Interface-roughness-induced broadening of intersubband electroluminescence in p-sige and n-gainas/ alinas quantum-cascade structures », *Applied Physics Letters*, vol. 86, p. 062113, 2005.
- [108] A. WITTMANN, Y. BONETTI, J. FAIST, E. GINI et M. GIOVANNINI, « Intersubband linewidths in quantum cascade laser designs », *Applied Physics Letters*, vol. 93, p. 141103, 2008.
- [109] P. HARRISON, « The nature of the electron distribution functions in quantum cascade lasers », *Applied physics letters*, vol. 75, p. 2800, 1999.
- [110] V. GORFINKEL, S. LURYI et B. GELMONT, « Theory of gain spectra for quantum cascade lasers and temperature dependence of their characteristics at low and moderate carrier concentrations », *Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 32, no. 11, p. 1995–2003, 1996.
- [111] M. VITIELLO, G. SCAMARCIO, V. SPAGNOLO, B. WILLIAMS, S. KUMAR, Q. HU et J. RENO, « Measurement of subband electronic temperatures and population inversion in thz quantum-cascade lasers », *Applied Physics Letters*, vol. 86, p. 111115, 2005.
- [112] A. WACKER et A. P. JAUHO, « Quantum transport : The link between standard approaches in superlattices », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 80, no. 2, p. 369–372, 1998.
- [113] A. WACKER, « Semiconductor superlattices : a model system for nonlinear transport », *Physics Reports*, vol. 357, no. 1, p. 1–111, 2002.
- [114] Y. ANDO et T. ITOH, « Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers », *Journal of applied physics*, vol. 61, no. 4, p. 1497–1502, 1987.
- [115] P. YU et M. CARDONA, *Fundamentals of semiconductors : physics and materials properties*, vol. 50. Springer, 2005.
- [116] P. HARRISON, *Quantum wells, wires and dots*. Wiley Online Library, 2000.
- [117] R. FERREIRA et G. BASTARD, « Evaluation of some scattering times for electrons in unbiased and biased single-and multiple-quantum-well structures », *Physical Review B*, vol. 40, no. 2, p. 1074, 1989.
- [118] B. RIDLEY, *Electrons and phonons in semiconductor multilayers*, vol. 5. Cambridge Univ Pr, 1997.
- [119] A. LEULIET, A. VASANELLI, A. WADE, G. FEDOROV, D. SMIRNOV, G. BASTARD et C. SIRTORI, « Electron scattering spectroscopy by a high magnetic field in quantum cascade lasers », *Physical Review B*, vol. 73, no. 8, p. 085311, 2006.
- [120] J. B. KHURGIN, Y. DIKMELIK, P. Q. LIU, A. J. HOFFMAN, M. D. ESCARRA, K. J. FRANZ et C. F. GMACHL, « Role of interface roughness in the transport

- and lasing characteristics of quantum-cascade lasers », *Applied Physics Letters*, vol. 94, no. 9, p. 091101, 2009.
- [121] J. SMET, C. FONSTAD et Q. HU, « Intrawell and interwell intersubband transitions in multiple quantum wells for far-infrared sources », *Journal of applied physics*, vol. 79, no. 12, p. 9305–9320, 1996.
- [122] P. KINSLER, P. HARRISON et R. KELSALL, « Intersubband electron-electron scattering in asymmetric quantum wells designed for far-infrared emission », *Physical Review B*, vol. 58, no. 8, p. 4771, 1998.
- [123] K. DONOVAN, P. HARRISON et R. KELSALL, « Self-consistent solutions to the intersubband rate equations in quantum cascade lasers : Analysis of a gaas/algaas device », *Journal of Applied Physics*, vol. 89, no. 6, p. 3084–3090, 2001.
- [124] E. LHULLIER, E. ROSENCHER, I. RIBET-MOHAMED, A. NEDELCO, L. DOYENNETTE et V. BERGER, « Quantum scattering engineering of quantum well infrared photodetectors in the tunneling regime », *Journal of Applied Physics*, vol. 108, no. 11, p. 113707–113707, 2010.
- [125] A. BERURIER, *Optimisation des structures de couplage optique pour les photodétecteurs infrarouges à multi-puits quantiques*. Thèse de doctorat, Université Paris Diderot, 2012.
- [126] A. BUFFAZ, *Etude du transport et élaboration de nouveaux détecteurs à cascade quantique pour le lointain infrarouge*. Thèse de doctorat, Université Paris Diderot, 2011.
- [127] L. VOON et M. WILLATZEN, *The kp Method : Electronic Properties of Semiconductors*. Springer, 2009.
- [128] W. KOHN et J. LUTTINGER, « Quantum theory of electrical transport phenomena », *Physical Review*, vol. 108, no. 3, p. 590, 1957.
- [129] R. FERREIRA, « Tunneling in double quantum wells with scatterings : A density matrix approach », *Solid-State Electronics*, vol. 40, no. 1, p. 425–427, 1996.
- [130] C. SIRTORI, F. CAPASSO, J. FAIST, A. HUTCHINSON, D. SIVCO et A. CHO, « Resonant tunneling in quantum cascade lasers », *Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 34, no. 9, p. 1722–1729, 1998.
- [131] R. FERREIRA et G. BASTARD, « Tunnelling and relaxation in semiconductor double quantum wells », *Reports on Progress in Physics*, vol. 60, no. 3, p. 345, 1999.
- [132] R. C. IOTTI, E. CIANCIO et F. ROSSI, « Quantum transport theory for semiconductor nanostructures : A density-matrix formulation », *Phys. Rev. B*, vol. 72, no. 12, p. 125347, 2005.
- [133] R. KAZARINOV et R. SURIS, « Possibility of the amplification of electromagnetic waves in a semiconductor with a superlattice », *Sov. Phys. Semicond.*, vol. 5, no. 4, p. 707–709, 1971.
- [134] H. WILLENBERG, G. DÖHLER et J. FAIST, « Intersubband gain in a bloch oscillator and quantum cascade laser », *Phys. Rev. B*, vol. 67, no. 8, p. 085315, 2003.

- [135] H. CALLEBAUT et Q. HU, « Importance of coherence for electron transport in terahertz quantum cascade lasers », *J. of Appl. Phys.*, vol. 98, p. 104505, 2005.
- [136] R. TERAZZI, *Transport in quantum cascade lasers*. Thèse doctorat, Diss., Eidgenössische Technische Hochschule ETH Zürich, Nr. 20036, 2012, 2012.
- [137] E. SCHÖLL, *Nonlinear spatio-temporal dynamics and chaos in semiconductors*, vol. 10. Cambridge University Press, 2001.
- [138] E. LHUILLIER, V. GUERIAUX, V. TRINITE et M. CARRAS, « Influence of saw-tooth patterns on the detection properties of quantum well infrared photodetectors », *Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 48, no. 5, p. 665–668, 2012.
- [139] C. WEBER, A. WACKER et A. KNORR, « Density-matrix theory of the optical dynamics and transport in quantum cascade structures : The role of coherence », *Physical Review B*, vol. 79, no. 16, p. 165322, 2009.
- [140] E. DUPONT, S. FATHOLOLOUMI et H. LIU, « Simplified density-matrix model applied to three-well terahertz quantum cascade lasers », *Physical Review B*, vol. 81, no. 20, p. 205311, 2010.
- [141] P. SIEGEL, « Terahertz technology », *IEEE Transactions on microwave theory and techniques*, vol. 50, no. 3, p. 910–928, 2002.
- [142] M. TONOUCHI, « Cutting-edge terahertz technology », *Nature photonics*, vol. 1, no. 2, p. 97–105, 2007.
- [143] S. KUMAR, B. WILLIAMS, S. KOHEN, Q. HU et J. RENO, « Continuous-wave operation of terahertz quantum-cascade lasers above liquid-nitrogen temperature », *Applied Physics Letters*, vol. 84, p. 2494, 2004.
- [144] S. DHILLON, C. SIRTORI, S. BARBIERI, A. DE ROSSI, M. CALLIGARO, H. BEERE et D. RITCHIE, « THz sideband generation at telecom wavelengths in a GaAs-based quantum cascade laser », *Applied Physics Letters*, vol. 87, p. 071101, 2005.
- [145] S. BARBIERI, P. GELLIE, G. SANTARELLI, L. DING, W. MAINEULT, C. SIRTORI, R. COLOMBELLI, H. BEERE et D. RITCHIE, « Phase-locking of a 2.7-THz quantum cascade laser to a mode-locked erbium-doped fibre laser », *Nature Photonics*, vol. 4, no. 9, p. 636–640, 2010.
- [146] F. SIZOV et A. ROGALSKI, « Thz detectors », *Progress in Quantum Electronics*, vol. 34, no. 5, p. 278–347, 2010.
- [147] S. KOMIYAMA, O. ASTAFIEV, V. ANTONOV, T. KUTSUWA et H. HIRAI, « A single-photon detector in the far-infrared range », *Nature*, vol. 403, no. 6768, p. 405–407, 2000.
- [148] T. UEDA, Z. AN, K. HIRAKAWA et S. KOMIYAMA, « Charge-sensitive infrared phototransistors : Characterization by an all-cryogenic spectrometer », *Journal of Applied Physics*, vol. 103, p. 093109, 2008.
- [149] D. SANTAVICCA, B. REULET, B. KARASIK, S. PEREVERZEV, D. OLAYA, M. GERSHENSON, L. FRUNZIO et D. PROBER, « Energy resolution of terahertz single-photon-sensitive bolometric detectors », *Applied Physics Letters*, vol. 96, p. 083505, 2010.

- [150] P. RAUTER, T. FROMHERZ, S. WINNERL, M. ZIER, A. KOLITSCH, M. HELM et G. BAUER, « Terahertz Si : B blocked-impurity-band detectors defined by nonepitaxial methods », *Applied Physics Letters*, vol. 93, p. 261104, 2008.
- [151] H. LUO, H. LIU, C. SONG et Z. WASILEWSKI, « Background-limited terahertz quantum-well photodetector », *Applied Physics Letters*, vol. 86, p. 231103, 2005.
- [152] R. REHM, H. SCHNEIDER, M. WALTHER, P. KOIDL et G. WEIMANN, « Avalanche multiplication due to impact ionization in quantum-well infrared photodetectors : A quantitative approach », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 82, p. 2907, 2003.
- [153] J. WEI, D. OLAYA, B. KARASIK, S. PEREVERZEV, A. SERGEEV et M. GERSHENSON, « Ultrasensitive hot-electron nanobolometers for terahertz astrophysics », *Nature Nanotechnology*, vol. 3, no. 8, p. 496–500, 2008.
- [154] A. GOMEZ, V. BERGER, N. PÉRÉ-LAPERNE et L. DE VAULCHIER, « Barrier breakdown in multiple quantum well structure », *Applied Physics Letters*, vol. 92, no. 20, p. 202110–202110, 2008.
- [155] F. CAPASSO, W. TSANG, A. HUTCHINSON et G. WILLIAMS, « Enhancement of electron impact ionization in a superlattice : A new avalanche photodiode with a large ionization rate ratio », *Applied Physics Letters*, vol. 40, p. 38, 1982.
- [156] X. GUO, Z. TAN, J. CAO et H. LIU, « Many-body effects on terahertz quantum well detectors », *Applied Physics Letters*, vol. 94, p. 201101, 2009.
- [157] J. DEMERS et R. MACIEJKO, « Propagation matrix formalism and efficient linear potential solution to Schrodinger equation », *Journal of Applied Physics*, vol. 90, p. 6120, 2001.
- [158] W. PRESS, S. TEUKOLSKY, W. VETTERLING et B. FLANNERY, *Numerical recipes : the art of scientific computing*. Cambridge Univ Pr, 2007.
- [159] A. BISMUTO, R. TERAZZI, B. HINKOV, M. BECK et J. FAIST, « Fully automated quantum cascade laser design by genetic optimization », *Applied Physics Letters*, vol. 101, no. 2, p. 021103–021103, 2012.
- [160] P. HARRISON, *Quantum wells, wires and dots : theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. Wiley-Interscience New York, 2005.
- [161] E. SCHÖLL, *Nonequilibrium phase transitions in semiconductors : self-organization induced by generation and recombination processes*, vol. 35. Springer, 1987.
- [162] J. PEINKE, D. SCHMID, B. RÖHRICHT et J. PARISI, « Positive and negative differential resistance in electrical conductors », *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, vol. 66, no. 1, p. 65–73, 1987.
- [163] A. BRANDL et W. PRETTL, « Chaotic fluctuations and formation of a current filament in *n*-type gas », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 66, p. 3044–3047, Jun 1991.
- [164] K. MAYER, R. GROSS, J. PARISI, J. PEINKE et R. HUEBENER, « Spatially resolved observation of current filament dynamics in semiconductors », *Solid state communications*, vol. 63, no. 1, p. 55–59, 1987.

- [165] A. Van der ZIEL, *Noise in solid state devices and circuits*. Wiley New York, 1986.
- [166] J. JOHNSON, « Thermal agitation of electricity in conductors », *Phys. Rev.*, vol. 32, no. 1, p. 97–109, 1928.
- [167] H. NYQUIST, « Thermal agitation of electric charge in conductors », *Phys. Rev.*, vol. 32, p. 110–113, Jul 1928.
- [168] N. POTTIER, *Physique statistique hors d'équilibre : Processus irréversibles linéaires*. EDP Sciences, 2007.
- [169] M. LAX, « Classical noise iv : Langevin methods », *Reviews of Modern Physics*, vol. 38, no. 3, p. 541, 1966.
- [170] R. KUBO, M. TODA et N. HASHITSUME, « Statistical mechanics of linear response », *Statistical Physics II*, p. 146–202, 1991.
- [171] M. ERSHOV, « Nonequilibrium high-frequency noise and responsivity in multiple quantum well infrared photodetectors », *Journal of Applied Physics*, vol. 89, p. 6253, 2001.
- [172] R. LANDAUER, « Solid-state shot noise », *Phys. Rev. B*, vol. 47, no. 24, p. 16427–16432, 1993.
- [173] R. KUBO, « The fluctuation-dissipation theorem », *Reports on Progress in Physics*, vol. 29, p. 255, 1966.
- [174] W. SCHOTTKY, « Über spontane stromschwankungen in verschiedenen elektrizitätsleitern », *Annalen der Physik*, vol. 362, no. 23, p. 541–567, 1918.
- [175] Y. BLANTER et M. BÜTTIKER, « Shot noise in mesoscopic conductors », *Phys. Rep.*, vol. 336, no. 1-2, p. 1–166, 2000.
- [176] J. H. DAVIES, P. HYLDGAARD, S. HERSHFELD et J. W. WILKINS, « Classical theory for shot noise in resonant tunneling », *Phys. Rev. B*, vol. 46, no. 15, p. 9620, 1992.
- [177] C. BEENAKKER et M. BÜTTIKER, « Suppression of shot noise in metallic diffusive conductors », *Phys. Rev. B*, vol. 46, no. 3, p. 1889–1892, 1992.
- [178] A. KUMAR, L. SAMINADAYAR, D. GLATTLI, Y. JIN et B. ETIENNE, « Experimental test of the quantum shot noise reduction theory », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 76, no. 15, p. 2778–2781, 1996.
- [179] M. HENNY, S. OBERHOLZER, C. STRUNK et C. SCHÖNENBERGER, « 1/3-shot-noise suppression in diffusive nanowires », *Phys. Rev. B*, vol. 59, no. 4, p. 2871–2880, 1999.
- [180] M. REZNIKOV, M. HEIBLUM, H. SHTRIKMAN et D. MAHALU, « Temporal correlation of electrons : suppression of shot noise in a ballistic quantum point contact », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, no. 18, p. 3340–3343, 1995.
- [181] G. GOMILA et L. REGGIANI, « Anomalous crossover between thermal and shot noise in macroscopic diffusive conductors », *Phys. Rev. B*, vol. 62, no. 12, p. 8068–8071, 2000.
- [182] R. MCINTYRE, « Multiplication noise in uniform avalanche diodes », *Electron Devices, IEEE Transactions on*, vol. 13, no. 1, p. 164–168, 1966.

- [183] J. JOHNSON, « The schottky effect in low frequency circuits », *Physical review*, vol. 26, no. 1, p. 71, 1925.
- [184] A. MCWHORTER, « 1/f noise and germanium surface properties », *Semiconductor Surface Physics*, p. 207–228, 1957.
- [185] F. HOOGE, « 1/f noise is no surface effect », *Physics letters A*, vol. 29, no. 3, p. 139–140, 1969.
- [186] F. HOOGE et L. VANDAMME, « Lattice scattering causes 1/f noise », *Physics Letters A*, vol. 66, no. 4, p. 315–316, 1978.
- [187] F. HOOGE, « 1/f noise sources », *IEEE Trans. on Electron Devices*, vol. 41, no. 11, p. 1926–1935, 1994.
- [188] R. JINDAL et A. Van der ZIEL, « Phonon fluctuation model for flicker noise in elemental semiconductors », *Journal of Applied Physics*, vol. 52, no. 4, p. 2884–2888, 1981.
- [189] M. BUCKINGHAM, « Noise in electronic devices and systems. », *John Wiley & Sons, inc., 605 third ave. New York, NY 10158, USA, 1983, 368*, 1983.
- [190] B. GROSS et C. SODINI, « 1/f noise in mosfets with ultrathin gate dielectrics », in *Electron Devices Meeting, 1992. Technical Digest., International*, p. 881–884, IEEE, 1992.
- [191] K. CHOI, S. KENNERLY, J. YAO et D. TSUI, « Characteristics of QWIPs at low background », *Infrared Phys. & Tech.*, vol. 42, no. 3-5, p. 221–235, 2001.
- [192] A. CARBONE, R. INTROZZI et H. LIU, « Electric field redistribution under ir radiation in quantum well infrared photodetectors as deduced from current noise measurements at low temperature and bias », *Infrared physics & technology*, vol. 44, no. 5-6, p. 363–367, 2003.
- [193] A. SIMON, Y. PALTIEL, G. JUNG, V. BERGER et H. SCHNEIDER, « Measurements of non-gaussian noise in quantum wells », *Physical Review B*, vol. 76, no. 23, p. 235308, 2007.
- [194] A. CARBONE, R. INTROZZI et H. C. LIU, « Photocurrent noise in multi-quantum-well infrared photodetectors », *Applied Physics Letters*, vol. 82, no. 24, p. 4292–4294, 2003.
- [195] B. XING, H. C. LIU, P. WILSON, M. BUCHANAN, Z. R. WASILEWSKI et J. G. SIMMONS, « Noise and photoconductive gain in AlGaAs/GaAs quantum well intersubband infrared photodetectors », *J. of Appl. Phys.*, vol. 76, p. 1889, 1994.
- [196] R. REHM, H. SCHNEIDER, C. SCHÖNBEIN et M. WALTHER, « Noise current investigations of g-r noise limited and shot noise limited qwips », *Physica E : Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 7, no. 1, p. 124–129, 2000.
- [197] R. LANDAUER, « Mesoscopic noise : Common sense view », *Physica B : Condensed Matter*, vol. 227, no. 1-4, p. 156–160, 1996.
- [198] H. C. LIU, « Noise gain and operating temperature of quantum well infrared photodetectors », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 61, no. 22, p. 2703–2705, 1992.
- [199] B. LEVINE, A. ZUSSMAN, S. GUNAPALA, M. ASOM, J. KUO et W. HOBSON, « Photoexcited escape probability, optical gain, and noise in quantum well

- infrared photodetectors », *Journal of applied physics*, vol. 72, no. 9, p. 4429–4443, 1992.
- [200] W. BECK, « Photoconductive gain and generation-recombination noise in multiple-quantum-well infrared detectors », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 63, no. 26, p. 3589–3591, 1993.
- [201] C. SCHÖNBEIN, H. SCHNEIDER, R. REHM et M. WALTHER, « Noise gain and detectivity of n-type gaas/ alas/ algaas quantum well infrared photodetectors », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 73, p. 1251, 1998.
- [202] K. CHOI, « Generalized relationship between gain, noise, and capture probability of quantum well infrared photodetectors », *Applied physics letters*, vol. 65, no. 10, p. 1266–1268, 1994.
- [203] H. SCHNEIDER, « Theory of avalanche multiplication and excess noise in quantum-well infrared photodetectors », *Applied physics letters*, vol. 82, p. 4376, 2003.
- [204] A. CARBONE, R. INTROZZI et H. LIU, « Langevin approach to the generation-recombination noise of a multi quantum well infrared photodetector », *Infrared physics & technology*, vol. 47, no. 1-2, p. 9–14, 2005.
- [205] Z. YE, J. CAMPBELL, Z. CHEN, E. KIM et A. MADHUKAR, « Noise and photoconductive gain in inas quantum-dot infrared photodetectors », *Applied physics letters*, vol. 83, p. 1234, 2003.
- [206] J. PHILLIPS, P. BHATTACHARYA, S. KENNERLY, D. BEEKMAN et M. DUTTA, « Self-assembled inas-gaas quantum-dot intersubband detectors », *Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 35, no. 6, p. 936–943, 1999.
- [207] M. ERSHOV, H. LIU *et al.*, « Low-frequency noise gain and photocurrent gain in quantum well infrared photodetectors », *J. Appl. Phys.*, vol. 86, no. 11, p. 6580–6585, 1999.
- [208] E. ROSENCHER, B. VINTER, F. LUC, L. THIBAudeau, P. BOIS et J. NAGLE, « Emission and capture of electrons in multiquantum-well structures », *Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 30, no. 12, p. 2875–2888, 1994.
- [209] R. FÜRTH, « On the theory of electrical fluctuations », *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, vol. 192, no. 1031, p. 593–615, 1948.
- [210] W. SCHOTTKY, « Zusammenhänge zwischen korpuskularen und thermischen schwankungen in elektronenröhren », *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, vol. 104, no. 3, p. 248–274, 1937.
- [211] R. LANDAUER et T. MARTIN, « Equilibrium and shot noise in mesoscopic systems », *Physica B : Condensed Matter*, vol. 175, no. 1-3, p. 167–177, 1991.
- [212] M. LAX, « Fluctuations from the nonequilibrium steady state », *Rev. of Mod. Phys.*, vol. 32, no. 1, p. 25, 1960.
- [213] M. LAX, « Classical noise iii : Nonlinear markoff processes », *Reviews of Modern Physics*, vol. 38, no. 2, p. 359, 1966.
- [214] M. FISCHETTI, « Theory of electron transport in small semiconductor devices using the pauli master equation », *Journal of applied physics*, vol. 83, p. 270, 1998.

- [215] S. HERSHFELD, J. H. DAVIES, P. HYLDGAARD, C. J. STANTON et J. W. WILKINS, « Zero-frequency current noise for the double-tunnel-junction coulomb blockade », *Phys. Rev. B*, vol. 47, p. 1967–1979, 1993.
- [216] G. KIESSLICH, P. SAMUELSSON, A. WACKER et E. SCHÖLL, « Counting statistics and decoherence in coupled quantum dots », *Phys. Rev. B*, vol. 73, no. 3, p. 033312, 2006.
- [217] H. RISKEN, *The Fokker-Planck equation : Methods of solution and applications*. Springer Verlag, 1996.
- [218] L. ONSAGER, « Reciprocal relations in irreversible processes. i. », *Physical Review*, vol. 37, no. 4, p. 405, 1931.
- [219] W. SHOCKLEY, « Currents to conductors induced by a moving point charge », *J. of Appl. Phys.*, vol. 9, p. 635, 1938.
- [220] S. RAMO, « Currents induced by electron motion », *Proc. of the Institute of Radio Engineers*, vol. 27, no. 9, p. 584–585, 1939.
- [221] P. YODER, K. GARTNER et W. FICHTNER, « A generalized ramo-shockley theorem for classical to quantum transport at arbitrary frequencies », *Journal of applied physics*, vol. 79, no. 4, p. 1951–1954, 1996.
- [222] H. SCHNEIDER, C. SCHÖNBEIN, M. WALTHER, K. SCHWARZ, J. FLEISSNER et P. KOIDL, « Photovoltaic quantum well infrared photodetectors : The four-zone scheme », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 71, p. 246, 1997.
- [223] W. BELZIG, « Full counting statistics of super-poissonian shot noise in multi-level quantum dots », *Phys. Rev. B*, vol. 71, p. 161301, Apr 2005.
- [224] T. GONZÁLEZ, D. PARDO, L. REGGIANI et L. VARANI, « Microscopic analysis of electron noise in gaas schottky barrier diodes », *Journal of applied physics*, vol. 82, p. 2349, 1997.
- [225] B. VINTER, « A note on the noise in p-n diodes », *Private Communication*, 2004.
- [226] C. COHEN-TANNOUJJI, J. DUPONT-ROC et G. GRYNBERG, *Photons et atomes : introduction à l'électrodynamique quantique*. L'Éditeur : EDP Sciences, 2001.
- [227] J. DALIBARD, Y. CASTIN et K. MØLMER, « Wave-function approach to dissipative processes in quantum optics », *Physical review letters*, vol. 68, no. 5, p. 580–583, 1992.
- [228] J. PILO, K. HÄRKÖNEN, S. MANISCALCO et K.-A. SUOMINEN, « Open system dynamics with non-markovian quantum jumps », *Phys. Rev. A*, vol. 79, p. 062112, Jun 2009.
- [229] D. HOFSTETTER, F. GIORGETTA, E. BAUMANN, Q. YANG, C. MANZ et K. KÖHLER, « Mid-infrared quantum cascade detectors for applications in spectroscopy and pyrometry », *Applied Physics B : Lasers and Optics*, vol. 100, no. 2, p. 313–320, 2010.
- [230] F. SYSTEMS, « <http://www.flir.com/cvs/cores/view/?id=51978> ».
- [231] F. SYSTEMS, « <http://www.flir.com/cvs/cores/view/?id=51973> ».

- [232] D. REUTER, C. RICHARDSON, J. IRONS, R. ALLEN, M. ANDERSON, J. BUDINOFF, G. CASTO, C. COLTHARP, P. FINNERAN, B. FORSBACKA *et al.*, « The thermal infrared sensor on the landsat data continuity mission », in *Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS), 2010 IEEE International*, p. 754–757, IEEE, 2010.
- [233] F. SYSTEMS, « <http://www.flir.com/cvs/cores/view/?id=51968> ».
- [234] R. STANLEY, « Plasmonics in the mid-infrared », *Nature Photonics*, vol. 6, no. 7, p. 409–411, 2012.
- [235] F. CAPASSO, « High-performance midinfrared quantum cascade lasers », *Optical Engineering*, vol. 49, no. 11, p. 111102–111102, 2010.
- [236] 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*, vol. 295, no. 5553, p. 301–305, 2002.
- [237] Y. YAO, A. HOFFMAN et C. GMACHL, « Mid-infrared quantum cascade lasers », *Nature Photonics*, vol. 6, no. 7, p. 432–439, 2012.
- [238] C. GMACHL, D. SIVCO, R. COLOMBELLI, F. CAPASSO et A. CHO, « Ultra-broadband semiconductor laser », *Nature*, vol. 415, no. 6874, p. 883–887, 2002.
- [239] J. FAIST, M. BECK, T. AELLEN et E. GINI, « Quantum-cascade lasers based on a bound-to-continuum transition », *Applied Physics Letters*, vol. 78, no. 2, p. 147–149, 2001.
- [240] Y. YAO, X. WANG, J. FAN et C. GMACHL, « High performance continuum-to-continuum quantum cascade lasers with a broad gain bandwidth of over 400 cm^{-1} », *Applied Physics Letters*, vol. 97, p. 081115, 2010.
- [241] Y. YAO, W. CHARLES, T. TSAI, J. CHEN, G. WYSOCKI et C. GMACHL, « Broadband quantum cascade laser gain medium based on a continuum-to-bound active region design », *Applied Physics Letters*, vol. 96, no. 21, p. 211106–211106, 2010.
- [242] K. FUJITA, T. EDAMURA, S. FURUTA et M. YAMANISHI, « High-performance, homogeneous broad-gain quantum cascade lasers based on dual-upper-state design », *Applied Physics Letters*, vol. 96, no. 24, p. 241107–241107, 2010.
- [243] A. WITTMANN, A. HUGI, E. GINI, N. HOYLER et J. FAIST, « Heterogeneous high-performance quantum-cascade laser sources for broad-band tuning », *Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 44, no. 11, p. 1083–1088, 2008.
- [244] S. BLASER, D. YAREKHA, L. HVOZDARA, Y. BONETTI, A. MULLER, M. GIOVANNINI et J. FAIST, « Room-temperature, continuous-wave, single-mode quantum-cascade lasers at $\lambda = 5.4\mu m$ », *Applied Physics Letters*, vol. 86, no. 4, p. 041109–041109, 2005.
- [245] N. FINGER, W. SCHRENK et E. GORNIK, « Analysis of tm-polarized dfb laser structures with metal surface gratings », *Quantum Electronics, IEEE Journal of*, vol. 36, no. 7, p. 780–786, 2000.
- [246] M. CARRAS, G. MAISONS, B. SIMOZRAG, M. GARCIA, O. PARILLAUD, J. MASSIES et X. MARCADET, « Room-temperature continuous-wave metal

- grating distributed feedback quantum cascade lasers », *Applied Physics Letters*, vol. 96, no. 16, p. 161105–161105, 2010.
- [247] B. LEE, H. ZHANG, C. PFLUGL, L. DIEHL, M. BELKIN, M. FISCHER, A. WITTMANN, J. FAIST et F. CAPASSO, « Broadband distributed-feedback quantum cascade laser array operating from 8.0 to 9.8 μm », *Photonics Technology Letters, IEEE*, vol. 21, no. 13, p. 914–916, 2009.
- [248] E. MUJAGIC, C. SCHWARZER, Y. YAO, J. CHEN, C. GMACHL et G. STRASSER, « Two-dimensional broadband distributed-feedback quantum cascade laser arrays », *Applied Physics Letters*, vol. 98, no. 14, p. 141101–141101, 2011.
- [249] A. HUGI, R. TERAZZI, Y. BONETTI, A. WITTMANN, M. FISCHER, M. BECK, J. FAIST et E. GINI, « External cavity quantum cascade laser tunable from 7.6 to 11.4 μm », *Applied Physics Letters*, vol. 95, no. 6, p. 061103–061103, 2009.
- [250] Q. LU, Y. BAI, N. BANDYOPADHYAY, S. SLIVKEN et M. RAZEGHI, « 2.4 w room temperature continuous wave operation of distributed feedback quantum cascade lasers », *Applied Physics Letters*, vol. 98, no. 18, p. 181106–181106, 2011.
- [251] R. MAULINI, I. DUNAYEVSKIY, A. LYAKH, A. TSEKOUN, C. PATEL, L. DIEHL, C. PFLUGL et F. CAPASSO, « Widely tunable high-power external cavity quantum cascade laser operating in continuous-wave at room temperature », *Electronics Letters*, vol. 45, no. 2, p. 107–108, 2009.
- [252] B. STUART, *Infrared spectroscopy*. Wiley Online Library, 2005.
- [253] A. KIR, *On Detection Performance Analysis of MID-IR Gas Sensing Systems*. ProQuest, 2008.
- [254] J. LEE, S. LI, M. TIDROW et W. LIU, « Investigation of multi-color, broadband quantum well infrared photodetectors with digital graded superlattice barrier and linear-graded barrier for long wavelength infrared applications », *Infrared physics & technology*, vol. 42, no. 3, p. 123–134, 2001.
- [255] S. BANDARA, S. GUNAPALA, J. LIU, E. LUONG, J. MUMOLO, W. HONG, D. SENGUPTA et M. MCKELVEY, « 10–16 μm broadband quantum well infrared photodetector », *Applied physics letters*, vol. 72, no. 19, p. 2427–2429, 1998.
- [256] A. ELLIS, A. MAJUMDAR, K. CHOI, J. RENO et D. TSUI, « Binary superlattice quantum-well infrared photodetectors for long-wavelength broadband detection », *Applied physics letters*, vol. 84, no. 25, p. 5127–5129, 2004.
- [257] H. LIU, D. GOODCHILD, M. BYLOOS, M. BUCHANAN, Z. WASILEWSKI, J. GUPTA, A. SPRINGTHORPE et G. AERS, « Designs of broadband quantum-well infrared photodetectors and 8–12 μm test device results », *Infrared physics & technology*, vol. 50, no. 2, p. 171–176, 2007.
- [258] S. BANDARA, S. GUNAPALA, J. LIU, S. RAFOL, C. HILL, D. TING, J. MUMOLO, T. TRINH, J. FASTENAU et A. LIU, « Tuning and tailoring of broadband quantum-well infrared photodetector responsivity spectrum », *Applied Physics Letters*, vol. 86, no. 15, p. 151104–151104, 2005.
- [259] V. GUÉRIAUX, A. NEDELCO, A. COULIBALY, L. DUA, N. ISLE, V. TRINITÉ et X. MARCADET, « Design of broadband qwips for operation above blip temperature », *Infrared Physics & Technology*, vol. 54, no. 3, p. 177–181, 2011.

- [260] T. EBBESEN, H. LEZEC, H. GHAEMI, T. THIO et P. WOLFF, « Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays », *Nature*, vol. 391, no. 6668, p. 667–669, 1998.
- [261] W. BARNES, A. DEREUX, T. EBBESEN *et al.*, « Surface plasmon subwavelength optics », *Nature*, vol. 424, no. 6950, p. 824–830, 2003.
- [262] E. OZBAY, « Plasmonics : merging photonics and electronics at nanoscale dimensions », *science*, vol. 311, no. 5758, p. 189–193, 2006.
- [263] H. ATWATER et A. POLMAN, « Plasmonics for improved photovoltaic devices », *Nature materials*, vol. 9, no. 3, p. 205–213, 2010.
- [264] J. ANKER, W. HALL, O. LYANDRES, N. SHAH, J. ZHAO et R. VAN DUYNÉ, « Biosensing with plasmonic nanosensors », *Nature materials*, vol. 7, no. 6, p. 442–453, 2008.
- [265] M. SCHNELL, A. GARCIA-ETXARRI, A. HUBER, K. CROZIER, J. AIZPURUA et R. HILLENBRAND, « Controlling the near-field oscillations of loaded plasmonic nanoantennas », *Nature Photonics*, vol. 3, no. 5, p. 287–291, 2009.
- [266] W. MURRAY et W. BARNES, « Plasmonic materials », *Advanced Materials*, vol. 19, no. 22, p. 3771–3782, 2007.
- [267] Y. TODOROV, L. TOSETTO, J. TEISSIER, A. ANDREWS, P. KLANG, R. COLOMBELLI, I. SAGNES, G. STRASSER et C. SIRTORI, « Optical properties of metal-dielectric-metal microcavities in the thz frequency range », *Optics express*, vol. 18, no. 13, p. 13886–13907, 2010.
- [268] E. LAUX, C. GENET, T. SKAULI et T. EBBESEN, « Plasmonic photon sorters for spectral and polarimetric imaging », *Nature Photonics*, vol. 2, no. 3, p. 161–164, 2008.
- [269] P. BOUCHON, C. KOECHLIN, F. PARDO, R. HAÏDAR et J. PELOUARD, « Widedband omnidirectional infrared absorber with a patchwork of plasmonic nanoantennas », *Optics Letters*, vol. 37, no. 6, p. 1038–1040, 2012.
- [270] J. PENDRY, L. MARTIN-MORENO et F. GARCIA-VIDAL, « Mimicking surface plasmons with structured surfaces », *Science*, vol. 305, no. 5685, p. 847–848, 2004.
- [271] T. ANTONI, M. CARRAS, V. BERGER, P. GUISET et A. DE ROSSI, « A zero-focal-length superlens for qwips and other infrared detectors », in *SPIE Defense, Security, and Sensing*, p. 766023–766023, International Society for Optics and Photonics, 2010.
- [272] K. ISHIHARA, K. OHASHI, T. IKARI, H. MINAMIDE, H. YOKOYAMA, J. ichi SHIKATA et H. ITO, « Terahertz-wave near-field imaging with subwavelength resolution using surface-wave-assisted bow-tie aperture », *Applied Physics Letters*, vol. 89, no. 20, p. 201120, 2006.
- [273] O. GUNNARSSON et B. LUNDQVIST, « Exchange and correlation in atoms, molecules, and solids by the spin-density-functional formalism », *Physical Review B*, vol. 13, no. 10, p. 4274–4298, 1976.

Annexes

A Choix de la statistique électronique

La figure 22 illustre l'erreur induite par l'utilisation du statistique de Maxwell-Boltzmann par rapport à une statistique de Fermi-Dirac sur la population des porteurs chauds dans le niveau fondamental du puits optiquement actif. On considère une sousbande qui se déploie à partir de $E_0 = 0$ meV, et dont le niveau de Fermi vaut $\mu_{FD} = 30$ meV. Cela correspond à un dopage de $8.4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. On a tracé en rouge la distribution de Fermi-Dirac associée à $T = 50K$, et en pointillé la distribution de Maxwell-Boltzmann qui en est la limite à haute énergie. La question est de savoir quelle distribution d'électrons chauds on obtient avec une distribution de Maxwell-Boltzmann qui donne une population totale égale sur la sousbande. Elle est représentée en bleu, et son niveau de Fermi vaut $\mu_{MB} = 8.37$ meV. L'écart entre les courbes de l'insert donne un rapport ϵ constant sur la population prédite des porteurs chauds.

La mise en équation de ϵ en fonction du dopage ρ ne pose aucune difficulté, sous l'hypothèse que le niveau fondamental contient tous les électrons. Pour une sousbande dégénérée dont le bas est à $E_0 = 0$, la densité d'état 2D $D_{2D}(E)$ étant constante, le niveau de Fermi vaut :

$$\mu_{FD} = \frac{\pi \hbar^2}{m^*} \rho \quad (11)$$

Dans le GaAs, cela donne l'équivalence $10^{11} \text{ cm}^{-2} \sim 3.57 \text{ meV}$. La condition de population n égale pour les deux statistiques permet de trouver μ_{MB} :

$$n_{FD} = D_{2D} \int_0^\infty \frac{1}{1 + \exp(\beta(E - \mu_{FD}))} dE \quad (12)$$

$$n_{FD} = D_{2D} k_B T \log [1 + \exp(\beta \mu_{FD})] \quad (13)$$

$$n_{MB} = D_{2D} \int_0^\infty \exp(-\beta(E - \mu_{MB})) dE \quad (14)$$

$$n_{MB} = D_{2D} k_B T \exp(\beta \mu_{MB}) \quad (15)$$

Le rapport (constant en énergie) des populations de porteurs chauds s'écrit donc :

$$\epsilon(\mu) = \frac{\exp(\beta \mu_{FD})}{\exp(\beta \mu_{MB})} = \frac{\exp(\beta \mu_{FD})}{\ln [1 + \exp(\beta \mu_{FD})]} \quad (16)$$

$$\epsilon(\rho) = \frac{\exp\left(\beta \frac{\pi \hbar^2}{m^*} \rho\right)}{\log [1 + \exp(\beta \frac{\pi \hbar^2}{m^*} \rho)]} \quad (17)$$

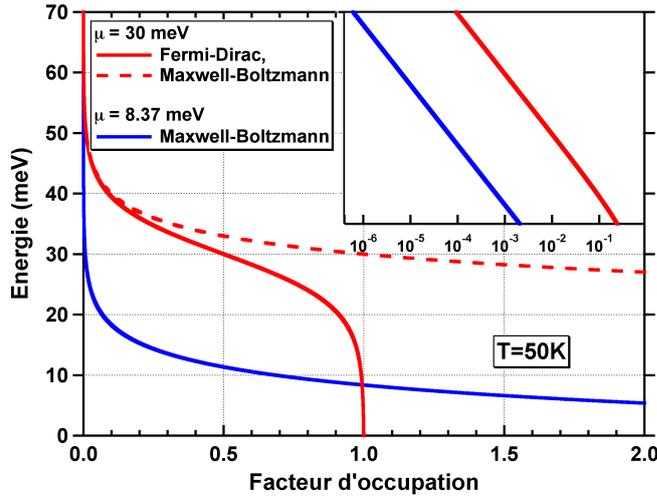


FIGURE 22 – Statistiques possibles pour une sousbande à $T=50\text{K}$. En rouge, les statistiques de Fermi-Dirac (traits pleins) et de Maxwell-Boltzmann (pointillés) pour un niveau de Fermi de 30 meV . En bleu, une statistique de Maxwell-Boltzmann qui donne le même nombre de porteurs sur la sousbande que celle de Fermi-Dirac. En insert, agrandissement en échelle logarithmique de la zone de porteurs chauds.

B Dérivation de la loi $F_0(i)$

Le calcul de la loi $F_0(i)$ du chapitre 3 se fait en deux temps : calcul de la structure de bande qui possède la valeur voulue de F_0 , puis calcul du courant par un modèle WKB de matrice de transfert.

A tension nulle et près des contacts, l'alignement des niveaux de Fermi implique que l'énergie du confinement quantique dans les puits doit être compensée par un effet de charge d'espace. Les électrons migrent depuis les puits extrémaux vers les contacts. On calcule la structure de bande à tension nulle en supposant que cet effet n'est notable que pour le premier puits. Ainsi, on résout le système Schrödinger-Poisson sur la structure contact-premier puits. Une charge totale nulle sur cette zone est prise comme critère de convergence. L'équation de Schrödinger pour la fonction enveloppe φ_l s'écrit :

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right] + V(z) \right\} \varphi_l(z) = \epsilon_l \varphi_l(z) \quad (18)$$

où ϵ_l est l'énergie propre du bas de la sousbande l . Le potentiel est la somme de trois contributions $V(z) = V_{QW}(z) + V_H(z) + V_{XC}(z)$. $V_{QW}(z)$ représente le potentiel de l'hétérostructure, $V_H(z)$ est le potentiel de Hartree qui décrit les interactions coulombiennes entre les électrons et les impuretés donneuses *via* l'équation de Poisson :

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} V_H(z) = \frac{e^2}{\epsilon} (N_d(z) - n(z)) \quad (19)$$

où ϵ est la permittivité diélectrique et $N_d(z)$ la densité de dopants. Le caractère hybride de la dimensionnalité de ce problème est visible dans la manière de calculer la densité. Avant la moitié de la barrière d'injection, on prend une définition 3D

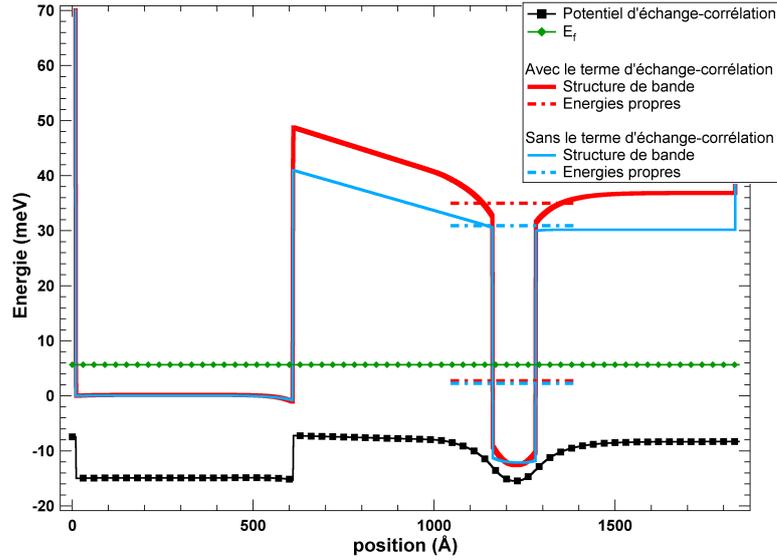


FIGURE 23 – Structure de bande de la zone contact-premier puits pour le QWIP v265, calculée sans et avec correction des effets d'échange-corrélation. Une erreur de 7.6 meV sur la hauteur de la barrière est faite si V_{XC} est ignoré. Pour des raisons de clarté V_{XC} a été décalé de -15 meV.

pour une statistique de Fermi-Dirac :

$$n_{3D}(z) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{-\infty}^{V(z)} \frac{\sqrt{E - V(z)} dE}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \quad (20)$$

En revanche, après la moitié de la première barrière la densité est bi-dimensionnelle :

$$n_{2D}(z) = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \log \left(1 + \exp\left(\frac{E_F - \epsilon_l}{k_B T}\right) \right) |\varphi_l(z)|^2 \quad (21)$$

$V_{XC}(z)$ décrit la nature fermionique des électrons, et prend en compte l'antisymétrie de la fonction d'onde à N corps dans ce traitement en électrons indépendants. Il est calculé dans l'approximation de densité locale (LDA) [273] :

$$V_{XC}(z) = \frac{e^2}{4\pi^2 \epsilon a_B(z) r_s(z)} \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \times \left\{ 1 + 0.0545 r_s(z) \log \left[1 + \frac{11.4}{r_s(z)} \right] \right\} \quad (22)$$

avec $a_B = \epsilon \hbar^2 / e^2 m^*(z)$ le rayon de Bohr effectif et $r_s(z) = \{(3/4\pi)(a_B^3 n(z))^{-1}\}^{1/3}$. La neutralité électrique sur l'ensemble de la zone permet de résoudre le système d'équations (18)-(23) :

$$\int_0^L (N_d(z) - n(z)) dz = 0 \quad (23)$$

Ce système est résolu numériquement par la méthode de tests ("shooting method") [160]. On ne prend pas en compte le confinement triangulaire des électrons à la droite du contact. Cela limite la validité de ce calcul aux faibles champs électriques, ce qui est pertinent dans le THz. La figure 23 illustre l'importance des corrections à N corps dans ce modèle hybride 3D-2D. Ce résultat corrobore des arguments avancés dans un cas purement bi-dimensionnel [156]. Une fois calculée la

structure de bande à tension nulle, on conserve la correction V_{XC} telle quelle, et on relance l'algorithme avec comme critère de convergence la valeur de F_0 . En effet, la stabilité numérique du système est grandement diminuée si on recalcule à chaque fois le terme d'échange-corrélation.

Muni de l'ensemble des structures de bande, on calcule le courant par :

$$I(F_0) = S \frac{em^* k_B T}{2\pi \hbar^3} \int_0^\infty D(E, F_0) \log \left(1 + e^{\frac{E_F - E}{k_B T}} \right) dE \quad (24)$$

avec S la surface du pixel et $D(E, F_0)$ la transparence de la barrière d'injection calculée par une méthode WKB de matrice de transfert [157] :

$$D(E, F_0)^{-1} = \frac{k_{in}}{4k_{out}} \left[\left(T_{11} + \frac{k_{out}}{k_{in}} T_{22} \right)^2 + \left(\frac{k_{out}}{m^*} T_{12} - \frac{m^*}{k_{in}} T_{21} \right)^2 \right] \quad (25)$$

où k_{in} et k_{out} sont les vecteurs d'onde sur chaque côté de la barrière d'injection. Par exemple $T_{11} = \sqrt{\frac{k_{out}}{k_{in}}} \cosh \left(\int_{z_{in}}^{z_{out}} k(z) dz \right)$. Pour traiter le confinement triangulaire, on suppose que seuls contribuent au courant les électrons du contact dont l'énergie est positive et pour lesquels le modèle 3D est justifié. Les électrons d'énergie négative ont une contribution exponentiellement décroissante au courant à cause de la hauteur de la barrière. L'erreur à les négliger est faible. De plus, on néglige le courant qui remonte du puits vers le contact car seules les valeurs élevées de F_0 seront importantes dans la suite.

C Calcul des corrélateurs de l'équation maîtresse

On présente ici le détail des calculs qui mènent de l'équation (4.53) au résultat (4.54). En injectant l'expression (4.53) dans (4.52), et en utilisant les propriétés des distributions marginales de probabilité pour sommer sur les intégrales non pertinentes, il vient :

$$\begin{aligned} h_{ij,kl}(t) &= \frac{\Gamma_{ij}}{\langle n_k \rangle_0} \left[\langle n_i \rangle_0 \sum_{m_k} (m_k + 1) p_0(m_k + 1) \right. \\ &\quad \left. + \sum_s \mathcal{M}_{is}(t) \sum_{\mathbf{m}} (m_s \langle n_s \rangle_0) (m_k + 1) p_0(\mathbf{m} - \mathbf{u}_i + \mathbf{u}_k) \right] \\ &= \frac{\Gamma_{ij}}{\langle n_k \rangle_0} \left[\langle n_i \rangle_0 \langle n_k \rangle_0 - \sum_s \mathcal{M}_{is}(t) \langle n_s \rangle_0 \langle n_k \rangle_0 \right. \\ &\quad \left. + \sum_s \mathcal{M}_{is}(t) \sum_{\mathbf{m}} m_s (m_k + 1) p_0(\mathbf{m} - \mathbf{u}_i + \mathbf{u}_k) \right] \end{aligned} \quad (26)$$

La valeur de $\mathcal{A} = \sum_{\mathbf{m}} m_s (m_k + 1) p_0(\mathbf{m} - \mathbf{u}_i + \mathbf{u}_k)$ varie selon que s vaut k , l , ou

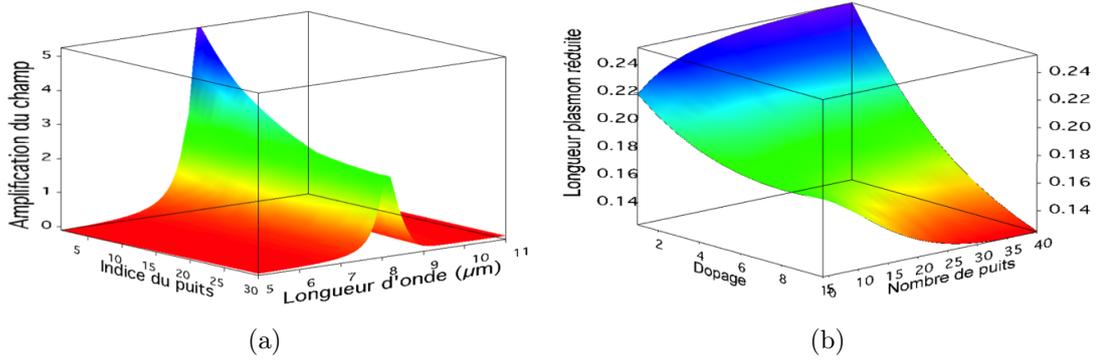


FIGURE 24 – 24(a) : Cartographie de $|E_z|^2/|E_i|^2$ pour un QCD @ $8.3 \mu m$, en fonction du puits considéré et de la longueur d'onde. On a choisi $\rho = 5 \times 10^{11} cm^{-2}$, et 30 périodes. La forme lorentzienne de l'acceptance spectrale de la cavité est bien décrite par l'équation (5.5), et la décroissance du champ le long de la cavité est bien exponentielle. 24(b) : Cartographie (ρ, N_p) de la longueur de décroissance plasmon réduite z_0/λ_0 . On négligera dans la suite la variation visible à faible nombre de périodes.

autre chose.

$$\mathcal{A} = \begin{cases} \sum_{m_k} m_k(m_k + 1)p_0(m_k + 1) = \langle n_k^2 \rangle_0 - \langle n_k \rangle_0 & s = k \\ \sum_{m_k, m_s} m_s(m_k + 1)p_0(m_k + 1, m_s - 1) = \langle n_k n_s \rangle_0 + \langle n_k \rangle_0 & s = l \\ \sum_{m_k, m_s} m_s(m_k + 1)p_0(m_k + 1, m_s) = \langle n_k n_s \rangle_0 & s \neq k \end{cases} \quad (27)$$

Pour Δn_k la variable centrée associée n_k , on a $\langle n_k n_s \rangle_0 = \langle \Delta n_k \Delta n_s \rangle_0 + \langle n_k \rangle_0 \langle n_s \rangle_0$. Par conséquent :

$$\begin{aligned} h_{ij,kl}(t) &= \frac{\Gamma_{ij}}{\langle n_k \rangle_0} \left[\langle n_i \rangle_0 \langle n_k \rangle_0 - \sum_s \mathcal{M}_{is}(t) \langle n_s \rangle_0 \langle n_k \rangle_0 + \sum_s \mathcal{M}_{is}(t) (\langle n_k n_s \rangle_0 + \langle n_k \rangle_0 (\delta_{l,s} - \delta_{k,s})) \right] \\ &= \frac{\Gamma_{ij}}{\langle n_k \rangle_0} \left[\langle n_i \rangle_0 \langle n_k \rangle_0 + \sum_s \mathcal{M}_{is}(t) \langle \Delta n_k \Delta n_s \rangle_0 + \sum_s \mathcal{M}_{is}(t) \langle n_k \rangle_0 (\delta_{l,s} - \delta_{k,s}) \right] \end{aligned} \quad (28)$$

L'expression analytique des seconds moments de l'équation maîtresse en fonction des premiers $\langle \Delta n_i \Delta n_j \rangle_0 = \langle n_i \rangle_0 \delta_{ij} - \langle n_i \rangle_0 \langle n_j \rangle_0 / N$ intervient ici :

$$h_{ij,kl}(t) = \langle n_i \rangle_0 \Gamma_{ij} - \Gamma_{ij} \sum_{s=1}^r \mathcal{M}_{is}(t) \left(\frac{\langle n_s \rangle_0}{N} - \delta_{l,s} \right) \quad (29)$$

Ce qui aboutit directement au résultat voulu.

D QCD idéal : paramètres de couplage optique

Pour calculer les paramètres de couplage optique r, t, β_L, n_{eff} , on utilise la méthode modale pour déterminer la distribution spectrale du champ électrique dans

la cavité (cf Fig. 24(a)). Ces calculs ont été menés par Alexandre Nedelcu sur un programme maison du III-V Lab sur une structure QCD opérant à $8.3 \mu m$. La géométrie est bi-dimensionnelle et semi-infinie, le détecteur modélisé comme un milieu homogène anisotrope au moyen d'un indice effectif. Ces cartographies sont obtenues pour toutes les configurations de dopage allant de 1 à $10 \cdot 10^{11} cm^{-2}$ et de nombre de périodes allant de 4 à 40.

Il est ainsi possible d'obtenir une carte (ρ, N_p) de la longueur de décroissance z_0 des modes SPP, en ajustant exponentiellement la décroissance du champ E_z au pic de réponse à $8.3 \mu m$. Comme illustré sur la figure 24(b), l'approximation de milieu homogène est bien vérifiée pour un nombre suffisant de périodes (au dessus de 20), et la longueur de décroissance devient indépendante de N_p . Dans la mesure où on a supposé que la longueur plasmon était proportionnelle à la longueur d'onde de détection, $z_0 = n_{eff}(\rho)\lambda_0$, on extrait numériquement la dépendance de l'indice effectif avec le dopage $n_{eff}(\rho) = 0.193 \exp\left(\frac{\rho}{5.79}\right) + 0.09$

Deux cartographies similaires (ρ, N_p) sont obtenues en extrayant l'amplitude et la largeur des gabarits spectraux du champ de cavité sur le premier puits de la structure. En vertu de l'équation (5.5), la largeur des lorentziennes pour un dopage nul donne accès au taux de pertes ohmiques β . L'amplitude de la lorentzienne permet de remonter à la transmission T du miroir avant. On trouve respectivement des valeurs moyennes de $\beta = 3.7 \cdot 10^{12} cm^{-2}$ et $T = 0.35$, avec une variation relative de 5% et 10% respectivement sur l'ensemble des configurations (ρ, N_p) explorées, ce qui est relativement robuste au regard de l'ampleur des approximations de ce modèle.

E Liste des publications

E.1 Journaux à comités de lectures

- A. Delga, M. Carras, V. Trinité, V. Guériaux, L. Doyennette, A. Nedelcu, H. Schneider, and V. Berger. *Master equation approach of classical noise in inter-subband detectors*. Physical Review B **85**, 245414 (2012). doi :[10.1103/PhysRevB.85.245414](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.245414)
- A. Delga, M. Carras, L. Doyennette, V. Trinité, A. Nedelcu, and V. Berger. *Predictive circuit model for noise in quantum cascade detectors*. Applied Physics Letters **99**, 252106 (2011). doi :[10.1063/1.3671328](https://doi.org/10.1063/1.3671328)
- A. Delga, L. Doyennette, A. Buffaz, V. Berger, F. R. Jasnot, L. A. de Vaultier, N. Péré-Laperne, and H. C. Liu. *Space charge mediated negative differential resistance in terahertz quantum well detectors*. Journal of Applied Physics **110**, 013714 (2011). doi :[10.1063/1.3605480](https://doi.org/10.1063/1.3605480)
- A. Delga, L. Doyennette, V. Berger, M. Carras, V. Trinité, and A. Nedelcu. *Performances of Quantum Cascade Detectors*. Accepted to Infrared Physics and Technology.
- F.R. Jasnot, A. Delga et al. *Description of transport mechanisms in a very long wave infrared quantum cascade detector under strong magnetic field*. Accepted to Journal of Applied Physics.

E.2 Conférences

- A. Delga, M. Carras, V. Trinité, L. Doyennette, A. Nedelcu and V. Berger. *Johnson and Shot noises in intersubband detectors*. Journées de la Matière Condensée 2012, Oral.
- A. Delga, M. Carras, V. Trinité, L. Doyennette, A. Nedelcu and V. Berger. *Noise in inter-subband detectors*. QSIP 2012, Oral.
- A. Delga, M. Carras, V. Trinité, L. Doyennette, and V. Berger. *Prospects for quantum cascade detectors*. QSIP 2012, Oral.
- A. Delga, L. Doyennette, M. Carras, V. Trinité, A. Nedelcu and V. Berger. *Reduction of noise in very long wave infrared quantum cascade detectors*. Proceedings of SPIE Photonics West **8268**, 826835 (2012).doi :[10.1117/12.914558](https://doi.org/10.1117/12.914558), Oral invité.
- A. Delga, L. Doyennette, M. Carras, V. Trinité, A. Nedelcu and V. Berger. *Noise in inter-subband detectors*. ITQW 2011, Poster.
- A. Delga, A. Buffaz, L. Doyennette, V. Berger, F. R. Jasnot, L. A. de Vaultchier, H. Guo, Z. R. Wasilewski, and H. C. Liu. *Intersubband impact ionization in THz QWIPs : shaping band structure reorganizations to design novel detectors*. Proceedings of SPIE Photonics West **87945**, 79450W (2011).doi :[10.1117/12.870923](https://doi.org/10.1117/12.870923), Oral invité.
- A. Delga, A. Buffaz, L. Doyennette, V. Berger, F. R. Jasnot, L. A. de Vaultchier, H. Guo, Z. R. Wasilewski, and H. C. Liu. *Impact Ionization in THz QWIPs : Investigating the 3D Electron Distribution and Designing New Devices*. QSIP 2010, Oral.
- A. Delga, A. Buffaz, L. Doyennette, E. Lhuillier, V. Berger, F. R. Jasnot, L. A. de Vaultchier, Z. R. Wasilewski, and H. C. Liu. *Impact ionization in THz QWIPs*. IRMMW-THz 2009, Oral.